INAUGURAL - DISSERTATION zur Erlangung der Doktorwürde der Naturwissenschaftlich - Mathematischen Gesamtfakultät der Ruprecht - Karls - Universität Heidelberg

vorgelegt von Dipl.-Phys. Christof Martin Keller aus Villingen im Schwarzwald

Tag der mündl. Prüfung: 21. Juli 2003

Materietransport in Akkretionsscheiben

Gutachter:

Prof. Dr. Hans-Peter Gail Prof. Dr. Max Camenzind

Zusammenfassung Die zeitabhängige Berechnung von Akkretionsscheiben erfordert die Überbrückung von Zeitskalen, die viele Größenordnungen über den Zeitschrittweiten bisher veröffentlichter Scheibencodes liegen, so dass limitierte Rechnerresourcen die theoretische Behandlung dieser Objekte gravierend einschränken. Effizientere Algorithmen sind daher erforderlich. Da sich die physikalischen Rahmenbedingungen in kosmischen Akkretionsscheiben stark voneinander unterscheiden können, müssen numerische Algorithmen an ein bestimmtes Problem angepasst werden. In dieser Arbeit wurden verschiedene Algorithmen implementiert und getestet. Eines der implementierten Splitting-Verfahren konnte zur 1D-Simulation von Überschallströmungen in Scheiben um schwarze Löcher effizient genutzt werden. Zur 2D-Simulation von Unterschallströmungen der in dieser Arbeit näher untersuchten protostellaren Scheiben konnte ein weiteres Splitting-Verfahren und ein für dieses Problem erstmals eingesetztes Druckkorrekturverfahren zumindest in einigen Fällen mit gesteigerter Effizienz eingesetzt werden. So konnten numerische Simulationen von Flussstrukturen in protostellaren Scheiben durchgeführt und durch analytische Näherungen höherer Ordnung ergänzt werden. Für Scheibenmodelle mit einer α -Parametrisierung der Viskosität ergaben sich hierbei meridionale Flussstrukturen, die bereits von anderen Autoren beobachtet wurden und die im Gegensatz zu stationären Einzonenmodellen auch auswärtsgerichtete Strömungen in der Zentralebene von Akkretionsscheiben zulassen. In einer Fallstudie konnte gezeigt werden, dass die meridionalen Flussstrukturen Auswirkung auf die Durchmischung von Materie in protostellaren Scheiben haben können, die sich beispielsweise in der Zusammensetzung von Kometen wiederspiegelt.

Abstract Time-scales that need to be considered in time-dependent computations of accretion discs are many orders of magnitude larger than stable time-step sizes of common numerical codes. Therefore, theoretical investigation of these objects is severely limited by present-day computational resources, unless more efficient algorithms are found. Due to large differences in the underlying physics of cosmic accretion discs, algorithms need to be adjusted to the particular problem. During the course of this thesis, several algorithms have been implemented and tested. One of the implemented splitting-methods could efficiently be employed to 1D-simulations of supersonic accretion flows onto black holes. Another splitting method and a pressure correction scheme were applied to simulate twodimensional protostellar accretion flows, which have been investigated more elaborately in this thesis. With these methods, performance in simulating protostellar discs could be improved in at least some cases. Numerical simulations of flow-structures in protostellar discs could thus be conducted and compared to higher order analytical approximations. Disc models using an α -description of the viscosity produced meridional flow-structures that have already been observed by several authors. Unlike flow-structures resulting from stationary one-zone-approximations, meridional flows exhibit outward directed velocities in the midplane of the disc. Test cases showed, that meridional flows can play an important role in the mixing processes of protostellarer disc material that is reflected in the composition of cometary and meteorite material.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung							
	1.1	Kosmische Akkretionsscheiben	1					
		1.1.1 Die Geburtsstätten der Planetensysteme	1					
		1.1.2 Theoretische Akkretionsscheibenmodelle	1					
		1.1.3 Die numerische Simulation protoplanetarer Scheiben	2					
	1.2	Materialtransport in protostellaren Scheiben	3					
		1.2.1 Hinweise aus der Beobachtung	3					
		1.2.2 Modellierung von Durchmischungsprozessen	4					
	1.3	Gliederung der Arbeit	5					
2	Gru	ndlagen	7					
_	2.1	Scheibengleichungen	, 7					
		2.1.1 Navier-Stokes Gleichungen	7					
		2.1.2 Fliehkraftunterstützte, zweidimensionale Scheiben	2					
		2.1.3 Einzonennäherung für protostellare Scheiben	6					
	2.2	Numerische Methoden	0					
		2.2.1 Stabilität von Differenzenverfahren	0					
		2.2.2 Räumliche Diskretisierung der Gleichungen	5					
3	Algorithmen 29							
	3.1	Zeitintegration	9					
		3.1.1 Das Physical Splitting Verfahren	9					
		3.1.2 Druckkorrekturverfahren	3					
		3.1.3 Modifizierter ZEUS-Algorithmus	8					
	3.2	Löser für lineare Gleichungssysteme	0					
		3.2.1 Krylow-Unterraum-Verfahren	1					
		3.2.2 Test des BiCGSTAB-Verfahrens	-1					
4	Imp	lementierung 4	-7					
-	4.1	Daten und Operationen	.7					
		4.1.1 Datenstrukturen	.7					
		4.1.2 Operationen	.9					
	4.2	Programmmodule	1					

5	Test- und Modellrechnungen								
	5.1	Tests o	der Transport- und Quellterme	53					
		5.1.1	Sod Shock-Tube Test	53					
		5.1.2	Reflexion einer Stoßfront	55					
	5.2	Stabili	itäts- und Effizienztests	56					
		5.2.1	Geschlossener Scheibenring	56					
		5.2.2	Modelle von Scheiben um Schwarze Löcher	59					
		5.2.3	Driven Cavity	59					
		5.2.4	Modellierung eines isothermen Scheibenrings	61					
	5.3	Diskus	ssion der Ergebnisse	65					
6	Mat	erialtra	ansport in protostellaren Scheiben	67					
	6.1	Ström	ungen in isothermen α -Scheiben \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	67					
		6.1.1	Meridionale Strömungen	67					
		6.1.2	Grundgleichungen	69					
		6.1.3	Die Umlaufgeschwindigkeit	70					
		6.1.4	Der radiale Fluss	72					
		6.1.5	Die Vertikalgeschwindigkeit	76					
	6.2	Ein se	mi-analytisches Transportmodell	80					
		6.2.1	Die Modellrechnung	80					
		6.2.2	Ergebnisse	81					
	6.3	Tracer	transport mit Annealing	85					
		6.3.1	Kristallisation von Silikatstaub	85					
		6.3.2	Die Tracergleichungen mit Annealing	86					
		6.3.3	Die Modellrechnung	90					
		6.3.4	Ergebnisse	93					
	6.4	Diskus	ssion der Ergebnisse	97					
7	Aus	blick		99					
A	Forr	Formeln 10							
	A.1	Normi	ierung der Gleichungen	101					
	A.2	ollständigen Navier-Stokes Gleichungen	102						
		A.2.1	Axialsymmetrische Zylinderkoordinaten	102					
		A.2.2	Axialsymmetrische Kugelkoordinaten	104					
	A.3	Fehler	funktion $\Phi(x)$	105					

B	Kurze Code-Dokumentation (<i>englisch</i>)							
	B.1	Data st	tructure	107				
		B.1.1	Setting up the grid	107				
		B.1.2	Type definitions	109				
	B.2	Operat	tors, functions and assignments	113				
		B.2.1	Interface assignments	113				
		B.2.2	Overloaded operators and interface procedures	114				
	B.3	Modul	es	116				
		B.3.1	Modules in group I	116				
		B.3.2	Modules in group II	117				
	B.4	Input I	Files	118				
Literaturverzeichnis								
Danksagung								

INHALTSVERZEICHNIS

Kapitel 1

Einleitung

Diese Arbeit wurde mit Mitteln des Sonderforschungsbereiches 359 "Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport" finanziert. Sie entstandt im Rahmen des Teilprojekts C1 "Materieströmungen in Akkretionsscheiben".

1.1 Kosmische Akkretionsscheiben

1.1.1 Die Geburtsstätten der Planetensysteme

Nach dem gegenwärtigen Stand der Forschung wird davon ausgegangen, dass die Sternentstehung, welche sich in den dichten Kernen kosmischer Molekülwolken vollzieht, häufig mit der Bildung von Planetensystemen einhergeht. Die Idee des Urnebels als Wiege unseres Sonnensystems geht bereits auf Kant (1755) und Laplace (1796) zurück, doch konnte die Existenz von Planeten außerhalb unseres Sonnensystems erst in den letzten Jahren durch die Beobachtung bestätigt und die Planetenentstehung als eine universelle Erscheinung im Kosmos belegt werden (Mayor & Queloz 1995, Marcy et al. 2000).

Durch die rasante Entwicklung elektronischer Rechner und numerischer Methoden in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts konnte Larson (1969) erstmals die hydro- und thermodynamischen Gleichungen, welche die Entstehung von Protosternen mathematisch beschreiben, für den sphärisch symmetrischen Fall lösen. Doch vollzieht sich der Kollaps einer Molekülwolke, der letztlich zur Entstehung eines Sterns führt, vermutlich nie aus einer starren Anfangskonfiguration heraus. Turbulente Strömungen im interstellaren Medium und die differentielle galaktische Rotation erzwingen unweigerlich eine gewisse, wenn auch geringe Rotationsbewegung der Wolke vor und während ihres Kollaps. Die Drehimpulserhaltung hindert die Materie daran, direkt ins Zentrum zu stürzen und zwingt sie auf eine Spiralbahn, die in der Ausbildung einer dünnen, schnell-rotierenden Materiescheibe um einen protostellaren Kern resultiert. Diese Scheiben nennt man protostellare oder protoplanetare Akkretionsscheiben. Sie sind die Geburtsstätten der Planetensysteme.

1.1.2 Theoretische Akkretionsscheibenmodelle

Akkretionsscheiben treten im Kosmos in vielfältiger Weise in Erscheinung. Außer um protostellare Kerne ist dieses Phänomen auch in weit entwickelten Doppelsternsystemen oder in aktiven Galaxienkernen um massereiche Schwarze Löcher zu finden. Oft kann bei diesen Objekten von einer optisch dicken und geometrisch dünnen Scheibe ausgegangen werden. Die grundlegenden physikalischen Prozesse ihrer Entwicklung sind sich dann sehr ähnlich. Durch viskose Reibung der differentiell rotierenden Scheibe wird Drehimpuls nach außen und Masse nach innen verlagert, während die dadurch freigewordene potentielle Energie an der Scheibenoberfläche abgestrahlt wird und z.B. als Infrarotexzess in den Spektren junger Sterne beobachtet werden kann (z.B. Appenzeller & Mundt 1989). Die spektrale Energiedichte der auf dieser Grundvorstellung basierenden theoretischen Modelle kann so mit der Beobachtung verglichen werden. Auch die direkte optische Photographie dichter Staubscheiben um junge Sterne ist in den letzten Jahren in vielen Fällen möglich geworden (z.B. Padgett et al. 1999).

Akkretionsscheiben sind häufig in guter Näherung axialsymmetrische Objekte. Das Einzonenmodell (z.B. Shakura & Sunyaev 1973; Pringle 1981) ermöglicht eine theoretische Beschreibung geometrisch dünner, optisch dicker Akkretionsscheiben, indem die fundamentalen Größen, die ihre Struktur bestimmen, in vertikaler Richtung gemittelt werden. Die Entwicklung der Scheiben wird durch diffusive Prozesse bestimmt. Da eine molekulare Viskosität zur Erklärung der Zeitskalen in Akkretionsscheiben ungenügend ist, wird Turbulenz als Ursache für die Viskosität vermutet. Der Antriebsmechanismus der Diffusion ist aber weitgehend ungeklärt und wird in der Regel durch einen linearen Parameter, z.B. α (z.B. Shakura & Sunyaev 1973) oder β (z.B. Duschl et al. 2000), modelliert.

In den ersten zweidimensionalen Hydrodynamik-Simulationen wurde von Robertson & Frank (1986) eine axialsymmetrische Scheibe um einen Weißen Zwerg berechnet. Weitere 2D-Modelle für Scheiben um kompakte Objekte folgten von Eggum et al. (1987) und Kley & Hensler (1987). Die 2D-Hydrodynamik in protostellaren Scheibenmodellen wurde einige Jahre darauf erstmals von Kley et al. (1993) und Różyczka et al. (1994) untersucht. Durch die stetig wachsende Zahl beobachteter extrasolarer Planeten stieg auch das Interesse an einer Modellierung junger Planeten in protoplanetaren Scheiben. Deshalb wurde in den letzten Jahren verstärkt die Entwicklung von Trabanten in Akkretionsscheiben in 2D- und 3D-Hydrosimulationen modelliert (z.B. Bryden et al. 1999; Kley et al. 2001).

1.1.3 Die numerische Simulation protoplanetarer Scheiben

Die zeitabhängige Simulation einer protoplanetaren Scheibe sollte wesentliche Veränderungen in der Scheibenstruktur nachvollziehen können. Diese finden in der Zeitskala der viskosen Entwicklung der protoplanetaren Scheiben statt. Die Zeitskala kann aus dem Einzonenmodell theoretisch abgeschätzt werden und liegt, abhängig von der Entwicklungsphase beispielsweise einer Scheibe um einen sonnenähnlichen Protostern, bei einem Radius von 1 AE¹ in der Größenordnung von $\tau_{\nu} \sim 10^3 \dots 10^4$ a. Bei 10 AE liegt die Zeitskala bereits bei etwa 10^5 a.

Dagegen wird die Zeitschrittweite der numerischen Codes, mit denen üblicher Weise mehrdimensionale protostellare Scheibenmodelle behandelt werden, bestenfalls von der kürzesten Laufzeit einer Schallwelle durch eine Gitterzelle bestimmt. Diese Codes (z.B. Norman 1980; Różyzcka 1985; Kley & Hensler 1987; Boss & Myhill 1992; Stone & Norman 1992; Hawley et al. 1995) basieren auf Verfahren, in denen das gekoppelte Gleichungssystem, welches die hydrodynamische Entwicklung der Scheibe beschreibt, in einzelne

 $^{^{1}\}mathrm{1~AE}\approx1.50\cdot10^{13}$ cm, der mittlere Abstand der Erde von der Sonne

1.2. MATERIALTRANSPORT IN PROTOSTELLAREN SCHEIBEN

Transport und Quellterme gespalten wird (*Splitting*-Verfahren). Masse- und Impulserhaltung werden somit getrennt behandelt, womit die Stabilität des Verfahrens an Schallwellen geknüpft ist, welche die Erhaltungsgleichungen miteinander koppeln².

Da protostellare Scheiben überwiegend Unterschallströmungen vorweisen, stellt die Schalllaufzeit (neben der Viskosität) ein stringentes Zeitschrittlimit an numerische Hydrodynamikverfahren. Möchte man z.B. eine protostellare Scheibe mit einer Auflösung von $5 \cdot 10^{-3}$ AE im Radius von 1 AE modellieren (das entspricht in etwa einer Zehntel Druckskalenhöhe), so kann, bei typischen Temperaturen von 10^3 K, pro Zeitschritt eine Zeitspanne von maximal $\lesssim 10^{-2}$ a überbrückt werden und man muss größenordnungsmäßig einige 10^6 Zeitschritte berechnen, um relevante Zeitskalen zwischen 1 und 10 AE zu modellieren.

Je nach Komplexität der numerischen Rechnung kann dies selbst mit einer nach dem Mooreschen Gesetz³ stetigen Verbesserung der verfügbaren Rechnerleistungen eine sinnvolle Modellierung der zeitabhängigen Entwicklung protostellarer Scheiben bis in absehbarer Zukunft unmöglich machen.

Aufgabe vorliegender Arbeit war deshalb die Entwicklung eines ausbaufähigen Hydrodynamik-Codes zur Simulation von Akkretionsscheiben, mit dem viskose Zeitskalen in protostellaren Scheiben modelliert werden können, ohne eine Einschränkung der Zeitschrittweiten durch die Schalllaufzeit. Dies wurde durch die Implementierung eines Druckkorrekturverfahrens erreicht, welches die Kopplung der Gleichungen durch Schallwellen berücksichtigt. So konnte die Zeitschrittweite bei der Simulation von Unterschallströmungen gegenüber anderen *Splitting*-Verfahren in einigen Fällen wesentlich erhöht werden.

1.2 Materialtransport in protostellaren Scheiben

Neben der Entwicklung eines Hydrodynamikcodes wurden im Rahmen dieser Arbeit auch die Flussstruktur und damit einhergehende Transportphänomene in protostellaren Scheiben näher untersucht. Eine derartige Studie soll im folgenden Abschnitt motiviert werden.

1.2.1 Hinweise aus der Beobachtung

Staubsignaturen in Infrarotspektren von Kometen (z.B. Hanner et al. 1994; Wooden et al. 1999, 2000) sind ein deutliches Indiz für die Existenz kristallinen Staubmaterials in den kalten, äußeren Bereichen protostellarer Scheiben (Bouwman et al. 2000). Da im interstellaren Medium keine Anzeichen von kristallinem Silikatstaub zu finden sind, muss dieses Material in der Scheibe entstanden sein.

Der Umwandlungsprozess von amorphen Staub in eine kristalline Struktur erfordert Temperaturen von mindestens 800 K, die nur in den warmen, inneren Scheibenregionen vorherrschen, nicht aber in den kalten Regionen jenseits der Jupiterbahn, in denen die Voraussetzung zur Entstehung von Kometen ausschließlich zu erwarten sind (Gail 2001; Wehrstedt & Gail 2002). Dies deutet auf einen radialen Transport prozessierten Materials von

²Auch die hier nicht behandelten Lagrangeschen SPH-Verfahren (Lucy 1977) sind an diese Stabilitätskriterien gebunden.

 $^{^{3}}$ Nach einer Faustregel des ehemaligen Intel[®]-Präsidenten Gordon Moore ist bei handelsüblichen Rechnern bis auf weiteres eine Verdoppelung der Transistordichte im 18-Monatstakt zu erwarten.

den warmen, inneren Scheibenbereichen in äußere, kalte Regionen hin (Nuth 1999; Nuth et al. 2000).

Auch die polyaromatischen Kohlenwasserstoffe, die in den Außenbereichen protostellarer Scheiben beobachtet werden (z.B. Meeus et al. 2001) benötigen zu ihrer Entstehung Temperaturen und Drücke, die nur in inneren Scheibenregionen auftreten (Nuth & Hill 2000). Möglicher Weise wurden somit präbiotische Moleküle von ihrem Entstehungsort in den Scheibeninnenbereichen, in die äußeren Scheibenbereiche, jenseits der Eisgrenze gemischt, wo sie in Kometen integriert werden konnten. Mit den Kometen könnten diese Moleküle dann auf die junge Erde transportiert worden sein, um dort die Voraussetzungen für die Entstehung des Lebens zu schaffen (Hill et al. 2002).

1.2.2 Modellierung von Durchmischungsprozessen

Seit der Einführung des Einzonenmodells haben verschiedene Autoren auf die Existenz großskaliger, meridionaler Flussstrukturen in den Lösungen ihrer α -Scheibenmodelle hingewiesen, die im Gegensatz zu der im Einzonenmodell zugrundegelegten, vertikal gemittelten Radialgeschwindigkeit stehen (Urpin 1984; Siemiginowska 1988; Kley & Lin 1992; Różyczka et al. 1994; Kluźniak & Kita 2000; Regev & Gitelman 2002).



Abbildung 1.2.1: Skizze einer protostellaren Scheibe mit einer Ausschnittsvergrößerung zur Illustration des Strömungsprofils aus dem Einzonenmodell (links) und der meridionalen Strömung (rechts), wie sie in Kapitel 6 hergeleitet wird.

1.3. GLIEDERUNG DER ARBEIT

Die vertikal gemittelte Radialgeschwindigkeit der stationären Einzonenmodelle suggeriert eine Strömung, die über alle Scheibenbereiche hinweg nach innen gerichtet ist (Abbildung 1.2.1, links), während Modelle, die eine meridionale Flussstruktur zulassen, eine Auswärtsdrift in der Zentralebene der Scheibe vorweisen. In höheren, von der Mittelebene weiter entfernten Schichten, dominiert eine Einwärtsdrift den im Nettofluss nach innen gerichteten Gesamtmassetransport (Abbildung 1.2.1, rechts).

Das Phänomen der Auswärtsdrift in der Zentralebene von Akkretionsscheiben tritt in einer Vielzahl von Modellen über weite Parameterbereiche auf, unabhängig von der Wahl der unterschiedlichen analytischen, semi-analytischen und numerischen Lösungsmethoden, die auf dieses Problem angewandt wurden. Die numerischen Simulationen sind dabei zwar durch ihr endliches Rechengebiet limitiert, doch wird die Gültigkeit der Lösungen, unabhängig von künstlichen Ein- und Ausflussrandbedingungen, durch die analytischen Rechnungen bestätigt.

Durchmischungsprozesse in protostellaren Scheiben aufgrund von turbulenter Diffusion sind anhand von numerischen Einzonenmodellrechungen bereits von Gail (2001), Wehrstedt & Gail (2002), sowie von Bockelée-Morvan et al. (2002) untersucht worden. Die Modelle dieser Arbeiten können die beobachteten Mengenverhältnisse kristallinen Staubes in Kometenmaterial erklären und auf radiale Durchmischung prozessierten Materials durch turbulente Diffusion zurückführen.

Neben der turbulenten Diffusion wird auch die Auswärtsdrift meridionaler Flüsse Auswirkungen auf radiale Durchmischungsprozesse in protostellaren Scheiben haben. Diese Auswirkungen sollen anhand von analytischen, semi-analytischen und numerischen Modellen erstmals untersucht werden.

1.3 Gliederung der Arbeit

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: In Kapitel 2 werden die Gleichungen, welche die Hydrodynamik nicht-relativistischer Akkretionsscheiben beschreiben, und grundlegende Begriffe aus den numerischen Methoden zur Lösung dieser Gleichungen vorgestellt. In Kapitel 3 werden Algorithmen, die im Rahmen dieser Arbeit implementiert und getestet wurden, beschrieben. Da auf eine flexible Handhabung der Gleichungen und ihrer Lösungsalgorithmen Wert gelegt wurde, wird in Kapitel 4 kurz auf die Besonderheiten in der Implementierung des vorliegenden Hydrodynamikcodes eingegangen. Dieser wird in Kapitel 5 anhand von Standardtests und Modellrechnungen auf seine Zuverlässigkeit und Effizienz zur Modellierung von Akkretionsscheiben hin geprüft. In Kapitel 6 werden Modellrechnungen zu Durchmischungsprozessen in protostellaren Scheiben beschrieben und Ergebnisse werden präsentiert. In Kapitel 7 werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammenfassend erörtert und ein Ausblick auf zukünftige Aufgaben gegeben.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Scheibengleichungen

2.1.1 Navier-Stokes Gleichungen

Grundgleichungen

Die fundamentalen Beziehungen, die das makroskopische Verhalten viskoser Strömungen und somit kosmischer Akkretionsscheiben beschreiben, heißen Navier-Stokes Gleichungen. Sie können axiomatisch aus den Prinzipien zur Erhaltung der Masse, des Impulses und der Energie, unter Einbeziehung externer Kräfte und energetischer Quellen und Senken, hergeleitet werden. Relativistische Effekte, die hierbei vernachlässigt werden, spielen bei der Entwicklung protostellarer Scheiben keine unmittelbare Rolle.

Die Herleitung der Gleichungen, die erstmals von Claude-Louis Navier (1823) und George Stokes (1845) durchgeführt wurde, soll hier nicht wiederholt werden (siehe z.B. Landau & Lifshitz 1959). Stattdessen sollen sie als gegeben betrachtet und in ihrer differentiellen Schreibweise vorgestellt werden, unter der Annahme, dass die Ableitungen der abhängigen Variablen überall sinnvoll definiert sind, d.h. dass das Fluid als Kontinuum beschreibbar ist und die darin auftretenden Längenskalen viel größer sind als der mittlere Abstand der Fluidteilchen. Diese Annahme ist z.B. in Stoßfronten verletzt, die durchaus in Akkretionsscheiben auftreten können. Allerdings werden die Gleichungen letztlich in ihrer integralen Form numerisch durch ein Finites Volumen Verfahren gelöst (Abschnitt 2.2.2), welches selbst bei Anwesenheit starker Gradienten sinnvolle Ergebnisse erzielt und die globale Erhaltung der fundamentalen Größen gewährleisten kann.

Erhaltungsgleichungen Die Erhaltung der Masse wird durch die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho \, \boldsymbol{v} = 0 \tag{2.1.1}$$

beschrieben, wobei ρ die Massendichte ist. Der Geschwindigkeitsvektor v bestimmt den Transport $\nabla \cdot q v$ einer fundamentalen, skalaren Größe q. Die partielle Ableitung nach der Zeit t wird hier und im folgenden durch die Schreibweise $\frac{\partial}{\partial t} \equiv \partial_t$ abgekürzt, räumliche Ableitungen werden mit Hilfe des Nablaoperators ∇ dargestellt.

Die Impulserhaltungsgleichung schreibt sich in ihrer differentiellen Form als

$$\partial_t \rho \boldsymbol{v} + \nabla \cdot \rho \boldsymbol{v} \, \boldsymbol{v} = -\nabla P - \rho \nabla \Phi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \;.$$
 (2.1.2)

Der Transport des Impulsvektors ρv ist durch die Divergenz des Tensors $\rho v v$ gegeben. Auf der rechten Seite stehen die Terme für die Kraft durch den Gradienten des thermodynamischen Druckes P, des Gradienten des Gravitationspotenzials Φ und der Divergenz des viskosen Spannungstensors τ .

Obwohl die Betrachtung der Gesamtenergie $E = e + \frac{v^2}{2}$ als Erhaltungsgröße zunächst physikalisch ansprechend erscheint, birgt die Lösung ihrer Gleichung numerische Schwierigkeiten, die zu unphysikalischen Ergebnissen, insbesondere negativen Temperaturen führen kann. Diese Problematik umgeht man, indem stattdessen die innere Energie *e* als fundamentale Größe untersucht wird. Die Gleichung der inneren Energie ohne Strahlungsterme

$$\partial_t e + \nabla \cdot e \, \boldsymbol{v} = -P \nabla \cdot \boldsymbol{v} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \boldsymbol{v} \tag{2.1.3}$$

erhält man durch Einsetzen der Impulserhaltung (2.1.2) in die hier nicht aufgeführte Gesamtenergiegleichung. Die Dissipation $\tau : \nabla v$ mit dem dyadischen Produkt $a : b = a^{ij}b_{ij}$ beschreibt die irreversible Umwandlung mechanischer in innere Energie aufgrund der Deformation eines Fluidelementes und ist nach dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik immer größer als Null; $-P\nabla \cdot v$ ist die reversible Arbeit pro Zeiteinheit, die der Druck P bei Volumenänderungen an einem Fluidelement verrichtet.

Zustandsgleichung Für ideale Gase lautet die Zustandsgleichung für den Druck

$$P = (\gamma - 1)e$$
, (2.1.4)

wobei $\gamma = C_P/C_V$ als Quotient der spezifischen Wärmen C_P und C_V definiert ist und sich mit $\gamma = (f+2)/f$ aus den Freiheitsgraden f der Gasmoleküle errechnen lässt. Können Φ und τ ebenfalls als bekannt vorausgesetzt werden, schließt (2.1.4) das Gleichungssystem (2.1.1) - (2.1.3).

Im isothermen Fall gilt die Zustandsgleichung

$$P = c_{\rm s}^2 \rho \tag{2.1.5}$$

zusammen mit der Definition der isothermen Schallgeschwindigkeit

$$c_{\rm s}^2 = \frac{kT}{\mu_{\rm m}m_{\rm H}}$$
, (2.1.6)

und Gleichung (2.1.3) erübrigt sich. In Gleichung (2.1.6) ist k die Boltzmannkonstante, $\mu_{\rm m}$ das mittlere Molekulargewicht, $m_{\rm H}$ die Protonmasse und T die Gastemperatur.

Gravitationspotential Zur Bestimmung des Gravitationspotenzials Φ muss im Allgemeinen die Poissongleichung

$$\Delta \Phi = \rho$$

gelöst werden. Sie beschreibt die Gravitation, die eine Massenverteilung auf sich und ihre Umgebung ausübt. Das Potenzial eines Einzelsterns der Masse M_{\star} ist in einer Entfernung R durch die Gleichung

$$\Phi = -\frac{GM_{\star}}{R} \tag{2.1.7}$$

2.1. SCHEIBENGLEICHUNGEN

gegeben; G ist hier die Gravitationskonstante. Bei selbstgravitierenden Scheiben überlagert sich das Gravitationspotenzial eines oder mehrerer Zentralkörper bzw. Trabanten mit dem des Scheibenmaterials.

Im Laufe ihrer Entwicklung verlieren protostellare Akkretionsscheiben Masse an den Zentralstern und ihre Umgebung. Die Eigengravitation spielt eine immer geringer werdende Rolle, bis sie nur noch in vertikaler Richtung wirkt, während die von den radialen Kräften abhängige Rotation bereits ausschließlich durch das Zentralpotenzial und damit durch die Keplergesetze bestimmt wird. Solche Scheiben heißen deshalb Kepler-selbstgravitierende Scheiben. In der Spätphase ihrer Entwicklung haben die Scheiben soviel Masse verloren, dass die Eigengravitation vollständig vernachlässigbar wird und das Zentralpotenzial (2.1.7) die Gravitation bestimmt.

Spannungstensor Der Spannungstensor ist definiert als $\tau' = -Pe + \tau$. Der viskose Spannungstensor oder Reibungstensor schreibt sich als Linearkombination

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu (\nabla \boldsymbol{v})^{\mathrm{S}} + \lambda (\nabla \cdot \boldsymbol{v}) \boldsymbol{e}$$

zusammengesetzt aus dem symmetrisierten Geschwindigkeitsgradienten $(\nabla v)^{S}$ und der Geschwindigkeitsdivergenz $\nabla \cdot v$, multipliziert mit dem Einheitstensor *e*. Für isotrope Fluide sind die Koeffizienten λ und μ Skalare. Isotrope Fluide nennt man auch Newtonsche Fluide. Der symmetrisierte Geschwindigkeitsgradient lautet in der Tensornotation

$$(\nabla \boldsymbol{v})^{\mathrm{S}} = [v_{i;j} + v_{j;i}]/2 .$$
 (2.1.8)

Hier bezeichnen die Semikola die kovariante Ableitung, die in Abschnitt (2.1.1) formal eingeführt wird.

Die Stokessche Hypothese besagt, dass die Diagonalelemente des Spannungstensors τ'_{ii} im Mittel mit dem thermodynamischen Druck P identisch sind. Die hierbei vernachlässigte Volumen- oder Kompressionsviskosität spielt nur bei stark kompressiblen Strömungen eine Rolle. Für Unterschallströmungen, die in protostellaren Scheiben vorherrschen, muss sie nicht berücksichtigt werden.

Aus der Stokesschen Hypothese folgt für die Koeffizienten des Reibungstensors die Bedingung $\lambda + \frac{2}{3}\mu = 0$ und für den Reibungstensor selbst

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu[(\nabla \boldsymbol{v})^{\mathrm{S}} - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \boldsymbol{v})\boldsymbol{e}]$$
(2.1.9)

mit dem noch unbekannten Koeffizienten μ . Da die Viskosität maßgeblich für die Entwicklung protostellarer Scheiben verantwortlich ist, ist die Bestimmung des Viskositätskoeffizienten eines der zentralen, aber weitgehend ungelösten Probleme in der Physik der Akkretionsscheiben (siehe Abschnitt 2.1.3).

Sind Randbedingungen, Viskosität und Zustandsgleichung einmal festgelegt, formuliert das in diesem Abschnitt vorgestellte Gleichungssystem ein wohldefiniertes, wenn auch diffiziles mathematisches Problem, welches besonders bei der Betrachtung mehrerer Raumdimensionen nur näherungsweise gelöst werden kann. Insbesondere die konsistente Modellierung turbulenter Strömungen hoher Reynoldszahlen wird durch die hohen Anforderungen an räumliche und zeitliche Auflösung bis auf weiteres alle verfügbare Rechnerresourcen überfordern (z.B. Gad-el-Hak 1998). In den nächsten Abschnitten soll die Navier-Stokes Gleichung (2.1.2) in den verschiedenen Koordinatensystemen formuliert werden, die für die vorliegende Arbeit relevant sind. Dabei helfen einfache Symmetrieannahmen und die Tensornotation die Gleichungen erheblich zu vereinfachen. Eine Einführung in die Tensoralgebra und Hydrodynamik kann z.B. bei Aris (1962) nachgelesen werden.

Diagonale Metrik

Es werden im Folgenden euklidische Koordinatensysteme mit den Koordinaten $x = (x^1, x^2, x^3)$ und einem diagonalen metrischen Tensor $g_{ii} \equiv (h_i)^2$, $g_{ij} = 0$ für $i \neq j$ (orthogonale Metrik) mit der Determinante g betrachtet. Euklidische Koordinatensysteme definieren sich durch die Eigenschaft, dass sie in kartesische Systeme überführt werden können, woraus sich ihr metrischer Tensor ableiten lässt.

Physikalische, d.h. normierte Komponenten eines Vektors u, werden, falls nicht anders vermerkt, mit eingeklammerten Indizes versehen, die von 1 bis 3 laufen. Diese Komponenten ergeben sich dann aus den entsprechenden kovarianten Kompontenten u_i bzw. den kontravarianten u^i durch die Normierungen

$$u_{(i)} = \frac{u_i}{h_i} = h_i u^i . (2.1.10)$$

Entsprechendes gilt für Tensoren höherer Stufe. Im Folgenden wird, falls nicht anders vermerkt, von der Einsteinschen Summenkonvention Gebrauch gemacht, bei der über doppelt auftretende Indizes von 1 bis 3 summiert wird.

Die Christoffelsymbole $\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2}g^{kl}(g_{il,j} + g_{jl,i} - g_{ij,l})$ reduzieren sich in einer orthogonalen Metrik auf die Terme

$$\Gamma_{jj}^{i} = -\frac{h_{j}}{h_{i}^{2}} \frac{\partial h_{j}}{\partial x^{i}} ,$$

$$\Gamma_{ij}^{i} = \Gamma_{ji}^{i} = \frac{1}{h_{i}} \frac{\partial h_{i}}{\partial x^{j}}$$
(2.1.11)

(ohne Summation).

Partielle Ableitungen werden mit Hilfe eines Kommas dargestellt, z.B. $f_{,i} \equiv \frac{\partial f}{\partial x^i} \equiv \partial_{x^i} f$, kovariante Ableitungen mit einem Semikolon, z.B. $u_{;j}^j \equiv \operatorname{div} \boldsymbol{u} \equiv \nabla \cdot \boldsymbol{u} = \frac{1}{\sqrt{g}} (\sqrt{g} u^j)_{,j}$.

Zweidimensionale Koordinatensysteme

Die Impulsgleichung (2.1.2) ergibt sich in der kovarianten Schreibweise mit i = (1, 2, 3) zu

$$\partial_t \rho v_i + \operatorname{div} \left(\rho \boldsymbol{v} \boldsymbol{v} \right)_i = -P_{,i} - \rho \Phi_{,i} + \operatorname{div} \left(\boldsymbol{\tau} \right)_i \,. \tag{2.1.12}$$

Der zweite Term der linken Seite bewirkt den Impulstransport, den man auch als

$$\operatorname{div}(\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v})_i = \operatorname{div}(\rho v_i \boldsymbol{v}) - \Gamma_{ij}^k \rho v_k v^j .$$

schreiben kann. Er teilt sich in einen advektiven Term, der nur die skalare, kovariante Impulskomponente ρv_i transportiert und in einen Trägheitsterm auf, dessen gemischte Terme sich bei Anwendung der Gleichungen (2.1.10) und (2.1.11) aufheben und der in

2.1. SCHEIBENGLEICHUNGEN

kartesischen Koordinaten ganz verschwindet. Ähnlich kann man für den letzten, diffusiven Term der Gl. (2.1.12) zeigen, dass

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\tau})_{i} = \operatorname{div}(h_{i}\boldsymbol{\tau}_{(i)}) - \Gamma_{ij}^{k}\frac{h_{k}}{h_{j}}\boldsymbol{\tau}_{(kj)}$$

gilt. Hier wurde der normierte Reibungstensor $\tau_{(ij)}$ und die Definition des Zeilenvektors $\boldsymbol{\tau}_{(i)} := (\tau_{(i1)}, \tau_{(i2)}, \tau_{(i3)})$ eingesetzt. Wieder fallen beim zweiten Term der rechten Seite die gemischten Terme weg.

Geht man nun von kartesischen, zylindrischen oder sphärischen Koordinatensystemen aus, kann o.B.d.A. $h_1 = \text{const.}$ angenommen werden. Außerdem werden im Folgenden insbesondere zweidimensionale Koordinatensysteme betrachtet und das System so gewählt, dass aus Symmetriegründen $\partial_{x^3} = 0$ gilt. Die Gleichung (2.1.12) schreibt sich dann für i = (1, 2) als

$$\partial_{t}\rho v_{i} + \operatorname{div}\left(\rho v_{i}\boldsymbol{u}\right) = \rho\left(\frac{1}{h_{2}^{3}}\frac{\partial h_{2}}{\partial x^{i}}(v_{2})^{2} + \frac{1}{h_{3}^{3}}\frac{\partial h_{3}}{\partial x^{i}}(v_{3})^{2}\right) - P_{,i} - \rho\Phi_{,i}$$

$$+ \operatorname{div}\left(h_{i}\boldsymbol{\tau}_{(i)}\right) - \frac{1}{h_{2}}\frac{\partial h_{2}}{\partial x^{i}}\boldsymbol{\tau}_{(22)} - \frac{1}{h_{3}}\frac{\partial h_{3}}{\partial x^{i}}\boldsymbol{\tau}_{(33)}$$

$$(2.1.13)$$

und für die dritte Impulskomponente als

$$\partial_t \rho v_3 + \operatorname{div} \left(\rho v_3 \boldsymbol{u} \right) = \operatorname{div} \left(h_3 \boldsymbol{\tau}_{(3)} \right). \tag{2.1.14}$$

Die advektiven Terme enthalten nunmehr den Geschwindigkeitsvektor $u := (v_{(1)}, v_{(2)}, 0)$, dessen dritte Komponente verschwindet.

Kartesische Koordinaten Mit der Wahl des Koordinatensystems

$$(x^1, x^2, x^3) = (x, y, z), \quad (h_1, h_2, h_3) = (1, 1, 1)$$

sind die physikalischen Vektor- und Tensorkomponenten mit den ko- und kontravarianten Komponenten identisch und man kann schreiben

$$v^1 = v_1 = v_x$$
, $v^2 = v_2 = v_y$, $v^3 = v_3 = v_z$.

Die Gleichungen für die drei Impulskomponenten lauten jetzt in zwei Raumdimensionen

$$\partial_t \rho v_x + \operatorname{div} \left(\rho v_x \boldsymbol{u} \right) = -\partial_x P - \rho \partial_x \Phi + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_x , \qquad (2.1.15)$$

$$\partial_t \rho v_y + \operatorname{div} \left(\rho v_y u \right) = -\partial_y P - \rho \partial_y \Phi + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_y , \qquad (2.1.16)$$

$$\partial_t \rho v_z + \operatorname{div} \left(\rho v_z \boldsymbol{u} \right) = \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_z , \qquad (2.1.17)$$

wobei $u = (v_x, v_y, 0)$ ist, und der Reibungstensor (2.1.9) die Gestalt

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\partial_x v_x - \frac{1}{3}\partial_y v_y & \frac{1}{2}(\partial_x v_y + \partial_y v_x) & \frac{1}{2}\partial_x v_z \\ \frac{1}{2}(\partial_y v_x + \partial_x v_y) & \frac{2}{3}\partial_y v_y - \frac{1}{3}\partial_x v_x & \frac{1}{2}\partial_y v_z \\ \frac{1}{2}\partial_x v_z & \frac{1}{2}\partial_y v_z & -\frac{1}{3}(\partial_x v_x + \partial_y v_y) \end{pmatrix}$$

annimmt.

2.1.2 Fliehkraftunterstützte, zweidimensionale Scheiben

Die Annahme der azimuthalen Symmetrie

Ist die Zeitskala, in der sich die Scheibenstruktur in poloidaler Richtung entwickelt, kleiner als die Umlaufperiode $P_{\rm rot}$, so kann bei nicht-selbstgravitierenden Scheiben oft von einer axialsymmetrischen Struktur ausgegangen werden. Bei Instabilitäten in der Akkretion, durch welche die Zeitskala, in der sich die Akkretionsrate ändert, kürzer wird als die Umlaufperiode, oder bei starken, konvektiven Strömungen, insbesondere auf Längenskalen, die deutlich kleiner sind als die radiale Komponente des Ortsvektors, kann diese Symmetrie aufgehoben werden und eine dreidimensionale Behandlung des Problems wird notwendig (z.B. Klahr et al. 1999). Auch durch die Entstehung von Protoplaneten oder die Existenz stellarer Begleiter in binären Systemen wird die Behandlung der azimuthalen Dimension unausweichlich (z.B. Bryden et al. 1999; Günther & Kley 2002). Selbstgravitierende Systeme können durch gravitative Instabilitäten und Dichtewellen ebenfalls nichtaxialsymmetrische Strukturen aufweisen (z.B. Laughlin & Różyczka 1996). Da sich diese Arbeit mit großskaligen Transportprozessen in nicht-selbstgravitierenden Scheiben um einen protostellaren Kern befassen soll, werden im folgenden ausschließlich azimuthalsymmetrische, zweidimensionale Systeme betrachtet, für welche die entsprechende räumliche Ableitung verschwindet.

Differentiell rotierendes Bezugssystem

Protostellare Scheiben sind weitgehend fliehkraftunterstützt, was bedeutet, dass die Trägheitskräfte, die durch die Drehimpulskomponente der Rotation in der Scheibenebene dominiert werden, die radiale Anziehungskraft eines Zentralpotenzials nahezu exakt ausgleichen. Dies kann bei einer numerischen Simulation zu Schwierigkeiten führen, da man in der Gleichung für den Radialanteil des Impulses zur Berechnung der radialen Nettokraft

$$\frac{1}{h_3^3} \frac{\partial h_3}{\partial x^i} (v_3)^2 - \Phi_{,i}$$
(2.1.18)

bei Vernachlässigung des Druckgradienten und der viskosen Kräfte zwei sehr große Zahlen voneinander subtrahieren muss. Man kann deshalb für $\partial_{x^i} h_3 \neq 0$ sinnvoller Weise einen Drehimpulsanteil k durch die Gleichung

$$k^{2} := \left(\frac{1}{h_{3}^{3}} \frac{\partial h_{3}}{\partial x^{i}}\right)^{-1} \Phi_{,i}$$
(2.1.19)

definieren. Offensichtlich gibt es für k zwei Lösungen, die den beiden Rotationsrichtungen entsprechen.

Die dritte kovariante Impulskomponente $h := v_3$, die den spezifischen Drehimpuls senkrecht zur Scheibenebene repräsentiert, kann nun aufgeteilt werden in den fliehkraftunterstützenden Anteil k und eine kleine Abweichung l, also h = k + l. Damit lässt sich die Nettokraft umformulieren zu

$$\frac{1}{h_3^3} \frac{\partial h_3}{\partial x^i} (h^2 - k^2) = \frac{1}{h_3^3} \frac{\partial h_3}{\partial x^i} l(2k+l) , \qquad (2.1.20)$$

2.1. SCHEIBENGLEICHUNGEN

was die numerisch problematische Schreibweise der Gleichung (2.1.18) umgeht (siehe Schmit & Tscharnuter 1999).

Die dritte Impulsgleichung wird dann nicht in h gelöst, sondern in der Abweichung l. Man kann dazu Gleichung (2.1.14) identisch zu

$$\partial_t \rho l + \operatorname{div}(\rho l \boldsymbol{u}) + \partial_t \rho k + \operatorname{div}(\rho k \boldsymbol{u}) = \operatorname{div}(h_3 \boldsymbol{\tau}_{(3)})$$

umformen. Wird ein zeitlich konstantes Gravitationspotenzial vorausgesetzt, muss im dritten Term $\partial_t \rho k$ nur die Zeitabhängigkeit der Dichte ρ behandelt werden. Unter Anwendung der Kontinuitätsgleichung (2.1.1) und der Produktregel ergibt sich dann

$$\partial_t \rho k = -\operatorname{div}\left(\rho k \boldsymbol{u}\right) + \rho \boldsymbol{u}^j \boldsymbol{k}_{,j} \tag{2.1.21}$$

und somit

$$\partial_t \rho \, l + \operatorname{div}\left(\rho \, l \boldsymbol{u}\right) = -\rho u^j k_{,j} + \operatorname{div}\left(h_3 \boldsymbol{\tau}_{(3)}\right) \,. \tag{2.1.22}$$

Der Drehimpulsgleichung im mitrotierenden System wird also durch die darin auftretende Corioliskraft ein expliziter Quellterm hinzugefügt. Mit Hilfe direkter Vergleichsrechnungen einer protostellaren Scheibe, die mit einem Planeten wechselwirkt, und einer lokalen Analyse der diskretisierten Gleichung, zeigt Kley (1998) die schlechte Erhaltungseigenschaft der so formulierten Drehimpulsgleichung auf. Danach kann das Problem umgangen werden, wenn statt Gleichung (2.1.22) weiterhin Gleichung (2.1.14) gelöst wird. Zur Bestimmung der Nettokraft auf der rechten Seite der Gleichung (2.1.20) muss dann nur noch der lineare Term l = h - k berechnet werden.

Zweidimensionale Impulsgleichungen

Impulsgleichungen in Zylinderkoordinaten In diesem Abschnitt sollen die Impulsgleichungen für den axialsymmetrischen Fall in Zylinderkoordinaten formuliert werden. Dazu werden die Koordinaten so gewählt, dass

$$(x^1, x^2, x^3) = (z, r, \phi), \quad (h_1, h_2, h_3) = (1, 1, r)$$

und für die nicht-verschwindenden Christoffelsymbole

$$\Gamma_{33}^2 = -r$$
, $\Gamma_{23}^3 = \Gamma_{32}^3 = \frac{1}{r}$

gilt.

Mit Hilfe der Gleichung (2.1.10) kann man nun die physikalischen Geschwindigkeitskomponenten $(v_{(1)}, v_{(2)}, v_{(3)}) =: (v_z, v_r, v_{\phi})$ berechnen bzw. mit

$$\begin{array}{l} v_1 = v^1 = v_z \; , \\ v_2 = v^2 = v_r \; , \\ v_3 = rv_\phi =: h \; , \qquad v^3 = \frac{v_\phi}{r} =: \Omega \end{array}$$

den ko- und kontravarianten Komponenten eine eigene physikalische Bedeutung zuordnen. So hat die dritte kontravariante Geschwindigkeitskomponente Ω die Bedeutung der Umlauffrequenz um die z-Achse, wohingegen die kovariante Komponente h die Rolle des

spezifischen Drehimpulses erhält. In der kovarianten Formulierung wird die dritte Impulsgleichung in Zylinderkoordinaten deshalb als Drehimpulsgleichung gelöst. Die Impulsgleichungen lauten mit $u = (v_z, v_r, 0)$ also

$$\partial_t \rho v_z + \operatorname{div} \left(\rho v_z \boldsymbol{u} \right) = -\rho \partial_z \Phi - \partial_z P + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_z , \qquad (2.1.23)$$

$$\partial_t \rho v_r + \operatorname{div}\left(\rho v_r \boldsymbol{u}\right) = \frac{\rho}{r^3} h^2 - \rho \partial_r \Phi - \partial_r P + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_r - \frac{\tau_{\phi\phi}}{r} , \qquad (2.1.24)$$

$$\partial_t \rho h + \operatorname{div}\left(\rho h \, \boldsymbol{u}\right) = \operatorname{div}\left(r \, \boldsymbol{\tau}_\phi\right) \tag{2.1.25}$$

bzw. mit den Gleichungen (2.1.20) und (2.1.22)

$$\partial_t \rho v_r + \operatorname{div}\left(\rho v_r \boldsymbol{u}\right) = \frac{\rho}{r^3} l(2k+l) - \partial_r P + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_r - \frac{\tau_{\phi\phi}}{r}, \qquad (2.1.26)$$

$$\partial_t \rho \, l + \operatorname{div} \left(\rho \, l \, \boldsymbol{u} \right) = -\rho \boldsymbol{u} \cdot \operatorname{grad} k + \operatorname{div} \left(r \, \boldsymbol{\tau}_\phi \right) \,. \tag{2.1.27}$$

Mit Gleichung (2.1.19) gilt außerdem $k^2 = r^3 \partial_r \Phi$, wobei h = k + l.

Ein zeitlich konstantes Gravitationspotenzial Φ wurde bereits in Gleichung (2.1.21) vorausgesetzt, aber nicht näher bestimmt. Das Gravitationspotenzial eines Zentralsternes der Masse M_{\star} im Abstand $R = (z^2 + r^2)^{\frac{1}{2}}$ ist durch Gleichung (2.1.7) gegeben. In diesem Fall ergibt sich

$$\partial_r \Phi = \frac{GM_\star}{R^3} r , \quad \partial_z \Phi = \frac{GM_\star}{R^3} z \tag{2.1.28}$$

und aus Gleichung (2.1.19)

$$k = r^2 \sqrt{\frac{GM_\star}{R^3}} \; .$$

Zuletzt können noch die normierten Komponenten des Reibungstensors au mit den Gleichungen (2.1.8) - (2.1.9) berechnet und mit

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_{zz} &= 2\mu \partial_z v_z - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \boldsymbol{u} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{zr} &= \boldsymbol{\tau}_{rz} = \mu (\partial_z v_r + \partial_r v_z) \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{z\phi} &= \boldsymbol{\tau}_{\phi z} = \mu \partial_z v_{\phi} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{rr} &= 2\mu \partial_r v_r - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \boldsymbol{u} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{r\phi} &= \boldsymbol{\tau}_{\phi r} = \mu r \partial_r \frac{v_{\phi}}{r} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{\phi \phi} &= 2\mu \frac{v_r}{r} - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \boldsymbol{u} \end{aligned}$$

explizit angegeben werden.

Im Anhang A.2.1 sind die Impulsgleichungen für axialsymmetrische Zylinderkoordinaten mit allen, vollständig ausgeschriebenen Termen aufgeführt.

Impulsgleichungen in Kugelkoordinaten In Kugelkoordinaten kann das System so gewählt werden, dass

$$(x^1, x^2, x^3) = (r, \theta, \phi), \quad (h_1, h_2, h_3) = (1, r, r \sin \theta)$$

mit den Christoffelsymbolen

$$\begin{split} \Gamma_{22}^1 &= -r \;, \quad \Gamma_{33}^1 = -r \sin^2 \theta \;, \quad \Gamma_{33}^2 = -\sin \theta \cos \theta \;, \\ \Gamma_{12}^2 &= \Gamma_{21}^2 = \frac{1}{r} \;, \quad \Gamma_{13}^3 = \Gamma_{31}^3 = \frac{1}{r} \;, \quad \Gamma_{32}^3 = \Gamma_{23}^3 = \cot \theta \;. \end{split}$$

Es können nun wieder die physikalischen Geschwindigkeitskomponenten $(v_{(1)}, v_{(2)}, v_{(3)}) =: (v_r, v_{\theta}, v_{\phi})$ berechnet werden, und es gilt

$$\begin{aligned} v_1 &= v^1 = v_r ,\\ v_2 &= r v_\theta &=: g, \qquad v^2 = \frac{v_\theta}{r},\\ v_3 &= r \sin \theta v_\phi =: h , \qquad v^3 = \frac{r_{v_\phi}}{r \sin \theta} =: \Omega \end{aligned}$$

Aus Gleichung (2.1.19) ergibt sich jetzt $k^2 = r^3 \sin^2 \theta \partial_r \Phi$.

Das Gravitationspotenzial eines Zentralsternes der Masse M_{\star} wird durch die Gleichung

$$\Phi = -\frac{GM_{\star}}{r}$$

bestimmt, wobei der Abstand nun durch die x^1 -Koordinate r gegeben ist. Mit der Definition der Keplerfrequenz $\Omega_{\rm K} := \sqrt{\frac{GM_{\star}}{r^3}}$ gilt $\partial_r \Phi = r \Omega_{\rm K}^2$ und $k = \Omega_{\rm K} r^2 \sin \theta$. Da das Potenzial kugelsymmetrisch ist, verschwinden die Ableitungen $\partial_{\theta} \Phi = \partial_{\phi} \Phi = 0$. Daraus folgt $\partial_r k = \frac{1}{2} \Omega_{\rm K} r \sin \theta$ und $\partial_{\theta} k = \Omega_{\rm K} r^2 \cos \theta$, und die Impulsgleichungen in Kugelkoordinaten lauten dann mit $u = (v_r, v_{\theta}, 0)$

$$\partial_t \rho v_r + \operatorname{div}\left(\rho v_r \boldsymbol{u}\right) = \frac{\rho}{r^3} \left(g^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} l(2k+l)\right) - \partial_r P + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_r + \frac{\tau_{rr}}{r}, \qquad (2.1.29)$$

$$\partial_t \rho g + \operatorname{div}\left(\rho g \boldsymbol{u}\right) = \rho \cot \theta v_{\phi}^2 - \partial_{\theta} P + \operatorname{div}\left(r \boldsymbol{\tau}_{\theta}\right) - \cot \theta \tau_{\phi\phi} , \qquad (2.1.30)$$

$$\partial_t \rho h + \operatorname{div}(\rho h \, \boldsymbol{u}) = \operatorname{div}(r \sin \theta \boldsymbol{\tau}_{\phi}).$$
 (2.1.31)

oder nach Gleichung (2.1.22)

$$\partial_t \rho \, l + \operatorname{div}\left(\rho \, l \, \boldsymbol{u}\right) = -\frac{1}{2} \rho v_r \Omega_{\mathrm{K}} r - \rho g \Omega_{\mathrm{K}} \cos \theta + \operatorname{div}\left(r \sin \theta \boldsymbol{\tau}_{\phi}\right) \,. \tag{2.1.32}$$

In Gleichung (2.1.29) wurde zudem die Spurfreiheit des Reibungstensors au ausgenutzt, dessen Komponenten in Kugelkoordinaten die Gestalt

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_{rr} &= 2\mu \left(\partial_r v_r - \frac{1}{3} \mathrm{div} \, \boldsymbol{u} \right) \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{r\theta} &= \boldsymbol{\tau}_{\theta r} = \frac{\mu}{r} \partial_{\theta} v_r + \mu r \partial_r \frac{v_{\theta}}{r} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{r\phi} &= \boldsymbol{\tau}_{\phi r} = \mu r \partial_r \frac{v_{\phi}}{r} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{\theta \theta} &= 2\mu \left(\frac{1}{r} \partial_{\theta} v_{\theta} + \frac{v_r}{r} - \frac{1}{3} \mathrm{div} \, \boldsymbol{u} \right) \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{\theta \phi} &= \mu \frac{\sin \theta}{r} \partial_{\theta} \frac{v_{\phi}}{\sin \theta} \;, \\ \boldsymbol{\tau}_{\phi \phi} &= 2\mu \left(\frac{v_r}{r} + \frac{v_{\theta}}{r} \cot \theta - \frac{1}{3} \mathrm{div} \, \boldsymbol{u} \right) \end{aligned}$$

annehmen.

Im Anhang A.2.2 sind die Impulsgleichungen für axialsymmetrische Kugelkoordinaten mit all ihren Termen nochmals aufgeführt.

2.1.3 Einzonennäherung für protostellare Scheiben

In Abschnitt (2.1.2) wurde bereits die Annahme axialer Symmetrie von Akkretionsscheiben erläutert. Damit wird die Berechnung der Scheibengleichungen zum zweidimensionalen Problem. Die Betrachtung dünner Akkretionsscheiben, deren vertikale Ausdehnung erheblich kleiner ist als der radiale Ortsvektor, wird häufig weiter vereinfacht, in dem man die vertikale und radiale Struktur voneinander getrennt behandelt. In einbzw. (1+1)-dimensionalen Scheibenmodellen wird demnach die radiale Struktur in Abhängigkeit vertikal gemittelter Größen bestimmt. Die vertikale Struktur wird dann unter der Annahme einer hydrostatischen Schichtung und einer rein radialen Abhängigkeit der Umlauffrequenz $\Omega = \Omega(r)$ untersucht.

Durch die getrennte Behandlung der vertikalen und radialen Struktur von Akkretionsscheiben in ein- und (1+1)-dimensionalen Modellen, geht allerdings Information über die Verläufe der fundamentalen Größen verloren. Die vertikal gemittelten Größen können in Absolutwert und Vorzeichen bedeutend von den lokalen Werten abweichen, die man durch eine Analyse höherer Ordnung erhält. Insbesondere die detailierte Flussstruktur kann aber von großer Bedeutung für die Durchmischungsvorgänge in Akkretionsscheiben sein.

In diesem Abschnitt soll eine kurze Einführung in die Theorie eindimensionaler Modelle isotherm geschichteter, dünner Akkretionsscheiben gegeben werden (siehe z.B. Pringle 1981; Frank et al. 1992). In Kapitel 6 werden die Mittelungen aufgehoben und die Gleichungen in höherer Ordnung analysiert.

Näherung für eindimensionale Keplerscheiben

Es werden erste Näherungen der Navier-Stokes Gleichungen in Zylinderkoordinaten betrachtet und die fundamentalen Größen über die Vertikale z gemittelt.

Keplerrotation Die Scheibenmasse M_d wird gegenüber der zentralen Sternmasse M_* als vernachlässigbar klein angenommen, eine Annahme, die, wie bereits in Abschnitt (2.1.1) dargelegt, in Spätstadien protoplanetarer Scheiben gerechtfertigt ist. In diesem Fall ist das Gravitationspotential Φ durch das einer zentralen Punktmasse M_* gegeben. Die Komponenten der Schwerebeschleunigung nach Gleichung (2.1.28) reduzieren sich in 1. Näherung auf

$$\partial_z \Phi = \frac{GM_\star}{r^3} z, \quad \partial_r \Phi = \frac{GM_\star}{r^2} , \qquad (2.1.33)$$

und die Terme 1. Ordnung der Radialimpulsgleichung (2.1.24) lauten damit

$$\frac{h^2}{r^3} = \frac{GM_\star}{r^2}$$

Wegen $h = v_{\phi}r$ ergibt sich hieraus die Umlaufgeschwindigkeit $v_{\phi}^2 = \frac{GM_{\star}}{r}$ für Keplerscheiben, $v_{\rm K} = v_{\phi}$ ist dann die Keplergeschwindigkeit bzw. $\Omega_{\rm K} = v_{\rm K}/r$ die Keplerfrequenz.

Hydrostatische Schichtung Mit der Definition der Keplerfrequenz Ω_K lässt sich in dieser Näherung die Gleichung für den Vertikalimpuls (2.1.23) zu

$$\partial_z P = -\Omega_{\rm K}^2 z \rho$$

vereinfachen. Sie beschreibt eine hydrostatische, vertikale Schichtung der Scheibe. Unter der Annahme eines isothermen Scheibengases mit der Zustandsgleichung $P = c_s^2 \rho$ und einer in *z* konstanten Temperaturschichtung, lässt sich die Gleichung integrieren, und man erhält die vertikale Druckschichtung, die durch den Dichteverlauf

$$\rho(z,r) = \rho_{\rm c} \, e^{-\frac{z^2}{2H_{\rm s}^2}} \tag{2.1.34}$$

beschrieben wird. Es sind hierbe
i $\rho_{\rm c}(r) := \rho(z,r)|_{z=0}$ die Gasdichte in der Scheibenebene und
 $H_{\rm s}$ die Skalenhöhe $H_{\rm s} = c_{\rm s}/\Omega_{\rm K}$ der Scheibe. Damit ist für genügend kühle Scheiben
 wegen $\frac{H_{\rm s}}{r} = \frac{c_{\rm s}}{v_{\rm K}} \ll 1$ auch die Annahme einer dünnen Scheibe gerechtfertigt. Die Flächendichte Σ ist durch das Integral

$$\Sigma(r,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \rho(r,z,t)$$

definiert und man erhält mit Gleichung (2.1.34)

$$\Sigma(r) = \sqrt{2\pi}\rho_{\rm c}(r)H_{\rm s} . \qquad (2.1.35)$$

Die Scheibendicke h_0 kann durch $2h_0\rho_c = \Sigma$ definiert werden und es gilt damit

$$h_0 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{c_{\rm s}}{\Omega_{\rm K}} \; .$$

Wird der Scheibe keine weitere Materie von außen zugefügt und gilt die Annahme $v_z \approx 0$ für hydrostatische Scheiben, ergibt sich im hydrostatischen Gleichgewicht aus der Kontinuitätsgleichung (2.1.1) die Erhaltungsgleichung für die Flächendichte

$$\partial_t \Sigma + \frac{1}{r} \partial_r (r \Sigma v_r) = 0 . \qquad (2.1.36)$$

Modellierung der Viskosität Für nicht-selbstgravitierende Scheiben kann der sogenannte α -Ansatz

$$\nu = \alpha h_0 c_{\rm s} \tag{2.1.37}$$

von Shakura & Sunyaev (1973) für die Viskosität ν übernommen werden, wobei

$$u = \frac{\mu}{\rho} \, .$$

In Anlehnung an die molekulare Viskosität wird sie als turbulente Viskosität $\nu_t = v_t l_t$ mit der Längenskala $l_t \lesssim h_0$, und der turbulenten Geschwindigkeit $v_t \lesssim c_s$ durch die unbestimmte skalare Größe $\alpha < 1$ parametrisiert und als isotrop vorausgesetzt. Scheibenmodelle, die mit einer solchen Viskosität berechnet werden, nennt man α -Scheiben. Der Vergleich theoretischer Scheibenmodelle mit den aus der Beobachtung abgeleiteten Zeitskalen protoplanetarer Scheiben ergibt eine Größenordnung von $\alpha \lesssim 10^{-2}$ (Ruden & Pollack 1991; Drouart et al. 1999; Calvet et al. 2000).

We gen der ohnehin schon großen Unsicherheit des Parameters α , wird oft $h_0 \approx H_{\rm s}$ gesetzt. Für isotherm geschichtete Scheiben gilt damit

$$\nu = \alpha \frac{c_{\rm s}^2}{\Omega_{\rm K}} . \tag{2.1.38}$$

Das α -Modell angewandt auf selbstgravitierende Scheiben führt zu einer für alle Radien konstanten Temperaturverteilung und wird damit inkonsistent. Eine allgemeinere Beschreibung der turbulenten Viskosität wurde deshalb von Duschl et al. (2000) vorgeschlagen. Die Reynoldszahl für Strömungen in Akkretionsscheiben ist mit

$$\Re = \frac{rv_{\phi}}{\nu}$$

groß genug, dass die Voraussetzung zur Entstehung von Turbulenzen erfüllt sein sollte (z.B. Lynden-Bell & Pringle 1974). Turbulenzen steigern die effektive Viskosität, so dass sie gleichzeitig gedämpft werden bis \Re wieder auf einen kritischen Werte $\Re_{\rm krit}$ zurückfällt. Laborexperimente ergeben typischer Weise Werte von $\Re_{\rm krit} \sim 10^2 \dots 10^3$. Dies entspricht einer Reynolds-Viskosität von

$$\nu = \beta r v_{\phi} \tag{2.1.39}$$

mit

$$\beta \lesssim \frac{1}{\Re_{\mathrm{krit}}} \sim 10^{-3} \dots 10^{-2}$$
.

Die β -Viskosität (2.1.39) erzielt auch für selbstgravitierende Scheiben konsistente Resultate und man kann zeigen, dass der α -Ansatz im Grenzfall für nicht-selbstgravitierende Scheiben mit der β -Viskosität äquivalent ist.

In der vorliegenden Arbeit wird das α -Modell (2.1.38) zur Beschreibung der Viskosität in der Scheibe übernommen. Eine Erweiterung der hier durchgeführten Rechnungen auf das β -Modell wird in Zukunft angestrebt.

Die Diffusionsgleichung für Keplerscheiben Da für die hier diskutierten, eindimensionalen Scheibenmodelle die Umlaufgeschwindigkeit v_{ϕ} als unabhängig von z vorausgesetzt wird, reduziert sich die über z integrierte Drehimpulsgleichung (2.1.25) zu

$$\partial_t r^2 \Sigma \Omega + \frac{1}{r} \partial_r (r^3 \Sigma \Omega v_r) = \frac{1}{r} \partial_r \left(\nu \Sigma r^3 \partial_r \Omega \right) .$$
 (2.1.40)

Ist allerdings $\partial_z v_{\phi} \neq 0$, so ist im Allgemeinen der Viskositätsterm $\partial_z (\mu \partial_z h)$ auch in 1. Näherung nicht mehr vernachlässigbar (siehe dazu Abschnitt 6.1.4).

Nach Anwendung der Kontinuitätsgleichung (2.1.36) kann die Drehimpulsgleichung auf die Gestalt

$$\dot{M}_r := -2\pi r \Sigma v_r = \underbrace{-2\pi \frac{1}{\partial_r r^2 \Omega} \partial_r \nu \Sigma r^3 \partial_r \Omega}_{=:\dot{M}_{\text{visk}}} + \underbrace{2\pi \frac{r^3 \Sigma \partial_t \Omega}{\partial_r r^2 \Omega}}_{=:\dot{M}_{\text{coll}}}$$

gebracht werden, wobe
i $\Omega(r) = v_{\phi}(r)/r$ die zunächst noch unbestimmte Umlauffrequenz der Scheibenmaterie beschreibt. Bei Vernachlässigung vertikalen Materie
einfalls auf die Scheibe wird damit die Gesamtakkretionsrate in radialer Richtung \dot{M}_r für eindimensionale Akkretionsscheiben definiert. Dabei wird der erste Term $\dot{M}_{\rm visk}$ als Akkretion durch viskose

Kräfte ausgelegt, der zweite $\dot{M}_{\rm coll}$ als Akkretion, die durch das Anwachsen der Sternmasse zustande kommt. Durch nochmaliges Anwenden der Kontinuitätsgleichung (2.1.36) ergibt sich

$$\partial_t \Sigma = -\frac{1}{r} \partial_r (r \Sigma v_r) = -\frac{1}{r} \partial_r \left(\frac{1}{\partial_r r^2 \Omega} \partial_r \left(\nu \Sigma r^3 \partial_r \Omega \right) \right) - \frac{1}{r} \partial_r \frac{r^3 \Sigma \partial_t \Omega}{\partial_r r^2 \Omega} .$$
(2.1.41)

Da $M_{\rm d} \ll M_{\star}$ vorausgesetzt wurde, kann der Massenzuwachs des Zentralsterns durch Akkretion vernachlässigt werden. Es verschwindet der zweite Term $\dot{M}_{\rm coll}$ und man erhält speziell für Keplerscheiben die Diffusionsgleichung für die Flächendichte

$$\partial_t \Sigma = \frac{3}{r} \partial_r r^{\frac{1}{2}} \partial_r \nu \Sigma r^{\frac{1}{2}} \,,$$

welche die zeitliche Entwicklung der Scheiben beschreibt. Für die Radialgeschwindigkeit ergibt sich daraus die Beziehung

$$\langle v_r \rangle = -\frac{3}{\Sigma r^{\frac{1}{2}}} \partial_r \nu \Sigma r^{\frac{1}{2}} \; .$$

Die damit erhaltene Radialgeschwindigkeit muss als eine in z gemittelte Größe verstanden werden und wird deshalb mit Klammern versehen. Die letzten beiden Gleichungen ermöglichen mit

$$\tau_{\nu} \sim \frac{r^2}{\nu} \tag{2.1.42}$$

eine Abschätzung der viskosen Zeitskala τ_{ν} , in der sich Akkretionsscheiben entwickeln.

Stationäre Lösung Im stationären Fall können Zeitableitungsterme fallengelassen werden ($\partial_t = 0$). Nach Integration der Drehimpulsgleichung (2.1.40) erhält man dann

$$r^{3}\Sigma\Omega v_{r} - \nu\Sigma r^{3}\partial_{r}\Omega = C , \qquad (2.1.43)$$

mit der Integrationskonstanten C. Beobachtungen von T Tau Sternen zeigen, dass die Rotationsgeschwindigkeit junger Sterne mit $10 - 30 \text{ km s}^{-1}$ weit unter der Keplerrotation liegen (z.B. Bertout, 1989). Es muss also im Randbereich zwischen Scheibe und Stern einen Radius r_0 geben, an dem die Rotationsgeschwindigkeit ein Maximum annimmt und deswegen $\partial_r \Omega|_{r_0} = 0$ erfüllt ist. Daraus ergibt sich für die Integrationskonstante

$$C = r_0^3 \Sigma(r_0) \Omega(r_0) v_r(r_0).$$

Zusammen mit der Akkretionsrate $\dot{M}_r = -2\pi r \Sigma v_r$ und $\Omega_0 = \Omega(r_0)$ ergibt sich für stationäre Keplerscheiben der Flächendichteverlauf

$$\Sigma = -\frac{M_r}{2\pi\nu} \frac{\Omega}{r\partial_r \Omega} \left(1 - \frac{r_0^2 \Omega_0}{r^2 \Omega} \right)$$

Mit der Kontinuitätsgleichung erhält man die mittlere Radialgeschwindigkeit

$$\langle v_r \rangle = \frac{\nu \partial_r \Omega}{\Omega} \frac{1}{1 - \frac{r_0^2 \Omega_0}{r^2 \Omega}} \,. \tag{2.1.44}$$

Gibt es ein scharfes Maximum im Rotationsverlauf, und kann angenommen werden, dass die Scheibe bis zum Rand r_0 nahezu mit Keplergeschwindigkeit rotiert, dann gilt

$$\Sigma = \frac{\dot{M}_r}{3\pi\nu} \left(1 - \frac{r_0^2 \Omega_0}{r^2 \Omega_{\rm K}} \right)$$

Ist der Randbereich zudem sehr dünn und nahe am Sternradius R_{\star} gelegen, also $r_0 \approx R_{\star}$, so kann überdies $\Omega_0 \approx \Omega_{\rm K}(R_{\star})$ gesetzt werden und es folgt weiter

$$\Sigma = \frac{\dot{M}_r}{3\pi\nu} \left(1 - \sqrt{\frac{R_\star}{r}} \right) , \qquad (2.1.45)$$

bzw. für den radialen Verlauf der Zentraldichte

$$\rho_{\rm c} = \frac{\dot{M}_r}{\alpha\sqrt{18\pi^3}} \frac{\Omega_{\rm K}^2}{c_{\rm s}^3} \left(1 - \sqrt{\frac{R_\star}{r}}\right) . \tag{2.1.46}$$

Die Radialgeschwindigkeit

$$\langle v_r \rangle = -\frac{3}{2} \frac{\nu}{r} \frac{1}{1 - \sqrt{\frac{R_{\star}}{r}}},$$
 (2.1.47)

ist mit einem negativen Vorzeichen versehen, was einer Einwärtsdrift der Materie entspricht. Der Ausdruck wird bei $r = R_{\star}$ scheinbar singulär, wobei in der vorausgehenden Gleichung (2.1.44) für $r \to R_{\star}$ Zähler und Nenner gemeinsam gegen Null streben. Allerdings wird deutlich, dass die gewonnenen Gleichungen nur für Radien $r \gg R_{\star}$ sinnvoll anwendbar sind.

2.2 Numerische Methoden

Bevor in Abschnitt 3.1 die im Rahmen dieser Arbeit implementierten Algorithmen zur Lösung der Scheibengleichungen aus Abschnitt 2.1 beschrieben werden, sollen zunächst einige grundlegende Begriffe zu numerischen Verfahren vorgestellt werden. Dabei werden in Abschnitt 2.2.1 verschiedene Stabilitätskriterien besprochen, die von großer Relevanz bei der Suche nach einem geeigneten Zeitintegrationsverfahren zur Simulation von protostellaren Scheiben sind. Beweise für die dabei verwendeten Aussagen werden nicht gegeben und können in Lehrbüchern nachgelesen werden (z.B. Hairer et al. 1993, 1996). In Abschnitt 2.2.2 wird anschließend die räumliche Diskretisierung der Gleichungen besprochen.

2.2.1 Stabilität von Differenzenverfahren

Anfangswertaufgaben

Wir betrachten Differentialgleichungen erster Ordnung der Form

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{q}(t)) \ . \tag{2.2.48}$$

Hierbei ist die Vektorfunktion $q(t) \in \mathbb{R}^d$ die in dem Zeitintervall $I = [t_0, t_0 + T]$ gesuchte Lösung und $f(t, q(t)) \in \mathbb{R}^d$ eine von q und t abhängige, stetige Funktion. Die Lösung zu einem Anfangspunkt (t_0, q_0) mit $q(t_0) = q_0$ ist durch das Integral

$$\boldsymbol{q}(t) = \boldsymbol{q}_0 + \int_{t_0}^t \boldsymbol{f}(s, \boldsymbol{q}(s)) ds, \quad t \in I$$

gegeben. Die Problemstellung, ausgehend von einem Anfangspunkt die Lösung q in einem Zeitintervall I zu finden, nennt man Anfangswertaufgabe. Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung, sowie exponentielle Stabilität der Anfangswertaufgabe werden im Folgenden als gegeben vorausgesetzt¹.

Ein- und Mehrschrittverfahren

Zur Approximation der Anfangswertaufgabe werden zunächst diskrete Zeitpunkte

 $t_0 < t_1 < \ldots < t_n < \ldots < t_N = t_0 + T$

eingeführt. Die Zeitintervalle sind dann durch $\delta t_n := t_n - t_{n-1}$ gegeben und die exakte Lösung $q(t_n)$ wird durch eine Näherungslösung u^n approximiert.

Differenzenformeln für die Näherungslösung \boldsymbol{u}^n der Anfangswertaufgabe in der allgemeinen Form

$$\boldsymbol{u}^{n} = \boldsymbol{u}^{n-1} + \delta t_{n} \boldsymbol{F}(\delta t_{n}; t_{n-1}, \boldsymbol{u}^{n}, \boldsymbol{u}^{n-1})$$
(2.2.49)

heißen implizite Einschrittverfahren. Hängt die Verfahrensfunktion F nur von der vorausgehenden Näherungslösung u^{n-1} ab, so handelt es sich um ein explizites Einschrittverfahren, zu dessen Lösung zu jedem Zeitschritt lediglich die Berechnung der Funktion $F(\delta t_n; t_{n-1}, u^{n-1})$ nötig ist, während implizite Verfahren die Lösung eines in vielen Fällen linearen, im Allgemeinen aber nicht-linearen Gleichungssystems erfordern. Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme werden in Abschnitt 3.2 behandelt.

Das Einschrittverfahren

$$u^{n} = u^{n-1} + \delta t_{n} \left[\theta f^{n} + (1-\theta) f^{n-1} \right]$$
(2.2.50)

entspricht für $\theta = 0$ der Polygonzugmethode bzw. dem expliziten Euler-Verfahren, für $\theta = 1$ dem impliziten Euler-Verfahren und für $\theta = 0.5$ der Trapezregel bzw. dem Crank-Nicolson-Verfahren. Gleichung (2.2.50) wird auch verallgemeinertes Crank-Nicolson-Verfahren genannt.

Diese Einschrittverfahren können als Spezialfälle von Mehrschrittmethoden betrachtet werden, zu denen die Adams-Bashforth- und die Adams-Moulton-Formeln gehören. Das explizite Euler-Verfahren kann somit als Adams-Bashforth-Formel 0. Grades verstanden werden, das implizite Euler-Verfahren und die Trapezregel sind Adams-Moulton-Formeln 0. und 1. Grades. Die Adams-Bashforth-Formel 1. Grades

$$\boldsymbol{u}^{n} = \boldsymbol{u}^{n-1} + \delta t \left(\frac{3}{2}f^{n-1} - \frac{1}{2}f^{n-2}\right)$$
(2.2.51)

sei als Beispiel für eine Mehrschrittmethode angegeben. Sie findet in dieser Arbeit im Rahmen einer Zeitschrittsteuerung Verwendung.

¹D.h. die rechte Seite f genügt der Wachstums-, Lipschitz- und Monotoniebedingung.

Den Abschneidefehler oder lokalen Diskretisierungsfehler $\tau_f(t_n)$ zum Zeitpunkt t_n erhält man durch Einsetzen der exakten Lösung q in die Differenzengleichung:

$$\boldsymbol{\tau}_{f}(t_{n}) := \frac{\boldsymbol{q}(t_{n}) - \boldsymbol{q}(t_{n-1})}{\delta t} - \boldsymbol{F}(\delta t_{n}; t_{n-1}, \boldsymbol{q}(t_{n}), \boldsymbol{q}(t_{n-1})) .$$
(2.2.52)

Eine Mehrschrittmethode heißt dann konsistent mit der Anfangswertaufgabe und von der Ordnung p, wenn für hinreichend glatte Lösungen q gilt

$$\|\boldsymbol{\tau}_f(t_n)\| \sim O(\delta t^p) \quad : \quad \delta t \to 0 , \qquad (2.2.53)$$

wobei $\|\cdot\|$ die euklidische Norm bezeichnet. Es kann gezeigt werden, dass die Eulerverfahren 1. Ordnung sind. Die Trapezregel ist konsistent von der Ordnung 2.

Der globale Diskretisierungsfehler ist durch die Gleichung

$$\boldsymbol{e}(t_n) := \boldsymbol{q}(t_n) - \boldsymbol{u}^n \tag{2.2.54}$$

gegeben. Der Defekt einer diskreten Lösung zu einem Diskretisierungsverfahren ist durch die Gleichung

$$\boldsymbol{d}(t_n) := \frac{\boldsymbol{u}(t_n) - \boldsymbol{u}(t_{n-1})}{\delta t} - \boldsymbol{F}(\delta t_n; t_{n-1}, \boldsymbol{u}(t_n), \boldsymbol{u}(t_{n-1})) .$$
(2.2.55)

definiert.

Stabilitätskriterien und steife Probleme

Ein Verfahren heißt *numerisch stabil*, wenn bei beschränkter exakter Lösung eines Problems die Näherungslösung ebenfalls beschränkt bleibt. Die Definition der absoluten Stabilität ist durch die Analyse eines Modellproblems gegeben. Man betrachtet dazu die skalare Testgleichung

$$\frac{\mathrm{d}q(t)}{\mathrm{d}t} = \lambda q(t); \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

mit der Lösung

$$q(t) = q(t_0)e^{\lambda t}; \quad \lim_{t \to \infty} |q(t)| = \lim_{t \to \infty} |q_0|e^{\operatorname{Re}\lambda t} \begin{cases} \to 0 & : \quad \operatorname{Re}\lambda < 0 \\ \equiv |q_0| & : \quad \operatorname{Re}\lambda = 0 \\ \to \infty & : \quad \operatorname{Re}\lambda > 0 \end{cases}$$

Eine Einschrittmethode heißt *absolut stabil*, wenn sie, angewandt auf das skalare Testproblem, für Re $\lambda \leq 0$ beschränkte Näherungslösungen erzeugt.

Beispielsweise ergibt das explizite Euler-Verfahren, angewandt auf das skalare Testproblem,

$$u^{n} = \underbrace{(1 + \delta t\lambda)}_{:= \omega(\lambda \delta t)} u^{n-1} = \dots = (1 + \delta t\lambda)^{n} u_{0}$$

mit dem Verstärkungsfaktor $\omega(\lambda \delta t)$. Für $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda < 0$ und für $\delta t_n > \frac{2}{|\lambda|}$ wächst die diskrete Lösung exponentiell an, das Verfahren ist instabil, für $\delta t_n \leq \frac{2}{|\lambda|}$ bleibt sie beschränkt und das Verfahren ist absolut stabil.

Das Stabilitätsgebiet SG einer Einschrittformel wird mit Hilfe des Verstärkungsfaktors $\omega(\lambda \delta t)$ im imaginären Raum durch die Forderung

$$SG = \{ z = \lambda \delta t \in \mathbb{C} : |\omega(z)| \le 1 \}$$

definiert. Eine Hypothese schließt nun von der absoluten Stabilität eines Verfahrens auf dessen numerische Stabilität für eine allgemeine Anfangswertaufgabe, wenn die Schrittweiten δt_n so gewählt werden, dass für die Eigenwerte $\lambda_i(t)$ der Jacobimatrix $\partial_{x^k} f_l(t, x_j)$ gilt:

$$\delta t_n \lambda_i(t_n) \in SG , \quad n \ge 0 , \quad i, j, k, l = 1, \dots d .$$
 (2.2.56)

Diese Hypothese ist im Allgemeinen nicht beweisbar und kann insbesondere für Anfangswertaufgaben, deren Jacobimatrizen nicht diagonalisierbar sind, unzutreffend werden. Anfangswertaufgaben heißen steif, wenn für die Eigenwerte $\lambda_i(t)$ gilt:

$$\kappa(t) := \frac{\max_{\operatorname{Re}\lambda_i(t) < 0} |\operatorname{Re}\lambda_i(t)|}{\min_{\operatorname{Re}\lambda_i(t) < 0} |\operatorname{Re}\lambda_i(t)|} \gg 1 \; .$$

Hierbei wird $\kappa(t)$ Steifigkeitsrate genannt. Mit einem steifen Problem hat man es z.B. dann zu tun, wenn eine physikalische Problemstellung von stark unterschiedlichen Zeitskalen bestimmt wird. Dies ist bei der Simulation astrophysikalischer Modelle häufig der Fall. Steife Gleichungssysteme erfordern Lösungsverfahren mit möglichst guten numerischen Stabilitätseigenschaften.

A-stabile Verfahren besitzen diese Eigenschaften. Eine Differenzenformel heißt dabei *A-stabil*, wenn ihr Stabilitätsgebiet die gesamte linke komplexe Halbebene enthält. Für ein solches Verfahren gibt es, zumindest angewandt auf das skalare Testproblem, keine Stabilitätsgrenze für die Zeitschrittweite δt . Explizite Verfahren sind niemals A-stabil. Das implizite Eulerverfahren hingegen ist A-stabil und erzeugt beschränkte, allerdings oszillierende Lösungen, selbst wenn die exakte Lösung exponentiell anwächst. Die Trapezformel ist das A-stabile Verfahren mit der kleinsten Fehlerkonstante, die ein Maß für den Abschneidefehler ist. Die formale Stabilitätseigenschaft der Trapezformel kann praktisch noch verbessert werden, indem in Gleichung (2.2.50) $\theta \gtrsim 0.5$ statt $\theta = 0.5$ gewählt wird, wodurch die Lösung gedämpft wird und dennoch eine Konsistenzordnung von besser als 1 gegeben ist.

Implizite Verfahren in der astrophysikalischen Anwendung Da die Lösung höherdimensionaler, nicht-linearer Gleichungssysteme durch implizite Verfahren zu hohe Rechenleistungen erfordern, sind implizite Verfahren nur für sehr steife und niederdimensionale Probleme sinnvoll. So kommt das implizite Euler-Verfahren beispielsweise zur Lösung der Tracergleichung in den Abschnitten 6.2 und 6.3 zur Anwendung.

Semi-implizite Verfahren basieren oft auf der Aufteilung großer Gleichungssysteme in kleinere Unterprobleme, wodurch die Dimension des Problems und die Zahl der Einträge in den Matrizen verringert und die nicht-linearen Anteile der Gleichungssysteme nötigenfalls linearisiert werden. Eine Auswahl semi-impliziter Verfahren wird in Abschnitt 3.1 auf ihre Anwendbarkeit zur numerischen Berechnung von Akkretionsscheibenmodellen untersucht.

Eine Stabilitätsanalyse, welche die Bestimmung des Stabilitätsgebietes eines Verfahrens und der Eigenwerte der Jacobimatrix der entsprechenden Anfangswertaufgabe beinhalten würde, ist für die für diese Arbeit relevanten Problemstellungen nicht möglich. Man ist stattdessen auf numerische Experimente und Erfahrungswerte angewiesen. Die Ausführung und Diskussion solcher Experimente zur Optimierung aufwendiger astrophysikalischer Hydrosimulationen wird in Kapitel 5 behandelt.

Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingungen Stabilitätskriterien, die für die Zeitschrittweiten expliziter Verfahren angewandt auf die hydrodynamischen Gleichungen (Abschnitt 2.1.1) gültig sind, heißen Courant-Friedrichs-Lewy- oder CFL-Bedingungen (Courant et al. 1928).

Das Prinzip dieser Kriterien beruht darauf, dass für stabile, explizite Verfahren die Distanz, über die sich eine Störung innerhalb einer Zeitschrittweite δt ausbreitet, nicht größer sein darf, als der Gitterabstand der räumlichen Diskretisierung δx . Die maximale, nach diesem Kriterium erlaubte Zeitschrittweite $\delta t_{\rm C}$ heißt Courantzeitschritt. Das Verhältnis der gewählten Zeitschrittweite δt zum Courantzeitschritt ist die Courantzahl

$$C = \frac{\delta t}{\delta t_{\rm C}} \,. \tag{2.2.57}$$

Sie muss per definitionem für stabile, explizite Verfahren ≤ 1 sein. Als Stabilitätsmaß eines Verfahrens kann die maximale Courantzahl $0 < C < \infty$, bei der das Verfahren noch stabil bleibt, untersucht werden.

Im Folgenden bezeichnet $||q_i||_{\infty}$ die Maximumsnorm über alle Komponenten des Vektors q_i . Der Courantzeitschritt und die Courantzahl für Störungen, die sich durch den advektiven Fluss der Geschwindigkeit v ausbreiten, sind

$$\delta t_v = \left\| \frac{\delta x_i}{v_i} \right\|_{\infty} \quad \text{und} \quad C_v = \left\| \frac{v_i \delta t}{\delta x_i} \right\|_{\infty} .$$
 (2.2.58)

Störungen, die sich durch Schallwellen der Geschwindigkeit $c_{\rm s}$ in einem Medium ausbreiten, ergeben einen Courantzeitschritt und eine Courantzahl von

$$\delta t_c = \left\| \frac{\delta x_i}{c_{\mathrm{s}i}} \right\|_{\infty} \quad \text{und} \quad C_c = \left\| \frac{c_{\mathrm{s}i} \delta t}{\delta x_i} \right\|_{\infty} .$$
 (2.2.59)

Das Stabilitätskriterium für die Viskosität kann nur näherungsweise bestimmt werden. Für die Viskosität wird die Abschätzung $\tilde{C}_{\nu} \approx \frac{4\nu\delta t}{\delta x^2}$ (z.B. Stone & Norman 1992) übernommen, so dass im Folgenden die Definitionen

$$\delta t_{\nu} := \left\| \frac{\delta x_i^2}{4\nu_i} \right\|_{\infty} \quad \text{und} \quad C_{\nu} := \left\| \frac{4\nu_i \delta t}{\delta x_i^2} \right\|_{\infty} \tag{2.2.60}$$

verwendet werden. Da $\delta t_{\nu} \propto \delta x^2$ ist, stellt die Viskosität bei hinreichend hoher Auflösung durch ein räumliches Gitter das stringenteste Limit an die Zeitschrittweite.

Schrittweitensteuerung

Das Prinzip der Schrittweitensteuerung mittels eines *a posteriori* Fehlerschätzers wie sie, Hujeirat & Rannacher (1998) folgend, in dem in vorliegender Arbeit implementierten Code Verwendung findet, wird anhand des Crank-Nicolson-Verfahrens und der Adams-Bashforth-Formel (2.2.51) beschrieben. Wird ein Crank-Nicolson-Verfahren zur Lösung einer Anfangswertaufgabe verwendet, kann mit geringem zusätzlichem Speicher- und Rechenaufwand noch ein Adams-Bashforth-Schritt 1. Grades (2.2.51) durchgeführt werden. Für die Fehler $u^n - q(t_n)$ der Verfahren lässt sich (unter der Annahme exakter Startwerte) zeigen, dass die Gleichung

$$\boldsymbol{u}_{AB}^{n} - \boldsymbol{q}(t_{n}) = C_{AB}\boldsymbol{q}''\delta t^{2} + O(\delta t^{3})$$
(2.2.61)

mit der Fehlerkonstanten $C_{AB} = 5/12$ für das Adams-Bashforth-Verfahren und

$$\boldsymbol{u}_{\mathrm{CN}}^{n} - \boldsymbol{q}(t_{n}) = C_{\mathrm{CN}} \boldsymbol{q}^{\prime\prime} \delta t^{2} + O(\delta t^{3})$$
(2.2.62)

mit $C_{\text{CN}} = -1/12$ für das Crank-Nicolson-Verfahren gelten, wobei mit $u(t_n)$ die jeweilige Näherungslösung, mit $q(t_n)$ die exakte Lösung und mit q'' die 2. Zeitableitung der exakten Lösung bezeichnet wurde. Durch Umformung und Subtraktion der beiden Gleichungen kann q'' abgeschätzt werden und somit auch der relative Fehler des Crank-Nicolson-Verfahrens

$$\frac{u_{\rm CN}^n - q(t_n)}{u_{\rm CN}^n} = \frac{C_{\rm CN}}{C_{\rm AB} - C_{\rm CN}} \frac{u_{\rm AB}^n - u_{\rm CN}^n}{u_{\rm CN}^n} \frac{1}{\delta t^2} \,.$$
(2.2.63)

Mit der Kenntnis dieser Größe kann eine Schrittweitensteuerung implementiert werden, durch die der Zeitschritt an eine frei wählbare Fehlertoleranzschwelle geknüpft wird. Durch die enge Verknüpfung des Fehlers an die Zeitableitung der Lösung ist auch ein Maß für die Stationarität des Problems gegeben.

Für Verfahren 2. Ordnung, deren Fehlerkonstante nicht bekannt ist, kann zumindest eine Fehlerentwicklung im Laufe einer Simulation durch die Abschätzung

$$\frac{\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{q}(t_n)}{\boldsymbol{u}^n} \propto \frac{\boldsymbol{u}_{AB}^n - \boldsymbol{u}^n}{\boldsymbol{u}^n} \frac{1}{\delta t^2} \,. \tag{2.2.64}$$

gegeben werden. Ist das Verfahren stabil, so bleibt der Fehler beschränkt, wird es instabil wächst er über alle Grenzen hinaus. Im stationären Limit konvergiert der Fehler gegen Null.

2.2.2 Räumliche Diskretisierung der Gleichungen

Im letzten Abschnitt wurde die zeitliche Diskretisierung gewöhnlicher Differentialgleichungen besprochen. Aussagen zur Stabilität dieser Verfahren lassen sich auf partielle Differentialgleichungen, insbesondere den hydrodynamischen Erhaltungsgleichungen, übertragen. Die Verfahrensfunktion F eines Mehrschrittverfahrens enthält hierbei die räumlich diskretisierten Quell- und Transportterme der zu lösenden Gleichungen.

Die räumliche Diskretisierung kann durch unterschiedliche Verfahren realisiert werden. In der astrophysikalischen Anwendung hat sich zur Diskretisierung der hydrodynamischen Gleichungen das Finite Volumen Verfahren etabliert, da dieses exakte globale Erhaltungseigenschaften vorweisen kann. Eine detailierte Beschreibung einer Implementierung dieses Verfahrens in beliebigen orthogonalen Koordinatensystemen findet sich bei Stone & Norman (1992). Eine allgemeine, praxisorientierte Einführung in Differenzenverfahren ist z.B. durch Hirsch (1988) und (1990) gegeben.

In den vorliegenden Code wurde die Diskretisierung aus Stone & Norman (1992) für die Spezialfälle kartesischer, sphärischer und zylindrischer Koordinatensysteme übernommen und wird im Folgenden deswegen nur in groben Zügen beschrieben. Da in vorliegender Arbeit nur Modellprobleme für Radien $r \gg 0$ betrachtet werden, müssen Singularitäten, die in krummlinigen Koordinaten für $r \rightarrow 0$ auftreten können, nicht betrachtet werden.

Finite Volumen Diskretisierung

Zur Herleitung der diskretisierten hydrodynamischen Grundgleichungen in der Finite Volumen Schreibweise werden die Gleichungen für die skalaren Größen ρ und e über ein Volumenelement V_i , der Impulsvektor über V'_i integriert. Die Größen werden über das Volumenelement gemittelt, so dass beispielsweise die gemittelte Größe q_i einer skalaren Variable q durch die Definition

$$q_i := \frac{1}{V_i} \int_{V_i} q \mathrm{d}V \tag{2.2.65}$$

gegeben ist. Nach Anwendung des Gaußschen Satzes auf die Transportterme und Division durch das Volumenelement V_i bzw. V'_i ergibt sich für die Gleichungen (2.1.1) - (2.1.3) in ihrer gemittelten Form

$$\begin{aligned} (\partial_t \,\rho)_i &+ \frac{1}{V_i} \left(\int_S \rho \, \boldsymbol{v} \cdot \mathrm{d} \boldsymbol{S} \right)_i &= 0 , \\ (\partial_t \, \boldsymbol{p})_i &+ \frac{1}{V_i'} \left(\int_S \boldsymbol{p} \, \boldsymbol{v} \cdot \mathrm{d} \boldsymbol{S} \right)_i &+ (\nabla P)_i - (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau})_i = 0 , \\ (\partial_t \, e)_i &+ \frac{1}{V_i} \left(\int_S e \, \boldsymbol{v} \cdot \mathrm{d} \boldsymbol{S} \right)_i &+ (P \nabla \cdot \boldsymbol{v})_i - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \boldsymbol{v})_i = 0 , \end{aligned}$$

$$(2.2.66)$$

wobei $(\int_S \boldsymbol{q} \cdot d\boldsymbol{S})_i$ das Oberflächenintegal über einen Vektor \boldsymbol{q} an der Oberfläche des Volumens V_i bezeichnet, mit dem Normalenvektor des Oberflächenelements d \boldsymbol{S} ; $\boldsymbol{p} := (\rho \boldsymbol{v})$ ist der Impulsvektor. Die Zeitableitung einer Größe q in V_i wird symbolisch durch $(\partial_t q)_i$ geschrieben, die räumlichen Ableitungen sind in Gleichung (2.2.66) ebenfalls in einer zunächst noch symbolischen, nicht-diskretisierten Form gegeben.

Der Fluss einer Größe in ein oder aus einem Kontrollvolumen ist an der Oberfläche des Volumenelements definiert. Daraus ergibt sich im diskretisierten Falle finiter Volumenelemente das Prinzip des gestaffelten Gitters, bei dem über ein Kontrollvolumen V_i gemittelte, skalare Größen q_i in der Zellmitte x_i und der Transport an der Zelloberfläche definiert sind. Das Kontrollvolumen V'_i der Impulse ist bei konstanter Zellbreite δx um $\delta x/2$ versetzt. Dieser Sachverhalt wird in Abbildung 2.2.1 für den eindimensionalen Fall veranschaulicht.

In dieser Arbeit werden ausschließlich Tensorproduktgitter betrachtet. Das bedeutet in zwei Raumdimensionen, dass für die Komponenten des diskretisierten Ortsvektors $\boldsymbol{x}_{ij} = ((x^1)_{ij}, (x^2)_{ij})^T$ die Gleichungen $(x^1)_{ij} \equiv (x^1)_j \forall i$ und $(x^2)_{ij} \equiv (x^2)_i \forall j$ gelten. Vergleiche dazu auch Abbildung 4.1.1 in Kapitel 4.

Finite Differenzen Terme

Durch das gestaffelte Gitter können räumliche Ableitungen standardmäßig durch zentrale Differenzen in 2. Ordnung Genauigkeit ermittelt werden. So ist beispielsweise der Druckgradient in eindimensionalen, kartesischen Koordinaten und bei äquidistanten Gitterstützpunkten am Zellrand in 2. Ordnung durch

$$(\nabla P)_i = \frac{1}{\delta x'_i} (P_i - P_{i-1})$$

mit $\delta x'_i = x_i - x_{i-1}$ gegeben. Bei stark nicht-äquidistanten Gittern muss für am Zellrand definierte Ableitungen gegebenfalls noch ein Korrekturterm hinzugefügt werden, damit der Differenzenquotient die partielle Ableitung weiterhin in 2. Ordnung nähert. Gleiches gilt für arithmetisch gemittelte, skalare Größen $\tilde{q} = (q_{i-1} + q_i)/2$.


Abbildung 2.2.1: Prinzip des gestaffelten Gitters in einer Raumdimension. Skalare Größen q_i sind an den Positionen x_i , vektorielle Größen v_i an x'_i definiert. Das Kontrollvolumen V_i wird dabei durch die Oberflächen mit den Vektorkomponenten S'_i und S'_{i+1} eingeschlossen. Der Fluss der Größe q_i durch eine Oberfläche wird durch einen interpolierten Wert q_i^* ermittelt.

Transportterme

Upwind-Verfahren Im vorliegenden Code wurde die Diskretisierung der Transportterme durch das 1. Ordnung *Upwind*-Verfahren nach Godunov (1959) und in 2. Ordnung durch das van Leer-Verfahren (van Leer 1977) umgesetzt. Diese Verfahren ermöglichen auch in 2. Ordnung eine stabile Advektion, die mit dem van Leer-Verfahren durch die Einhaltung der Monotoniebedingung gegeben ist. Danach behalten monoton steigende oder fallende Größen diese Eigenschaft nach ihrer Advektion bei. So entstehen keine lokalen Extrema durch den Transportprozess, was eine notwendige Voraussetzung für ein stabiles Verfahren ist.

Der Transport der Dichte ρ_i durch die physikalische Geschwindigkeitskomponente u_i (vgl. Gleichung 2.1.14) wird in einer Raumdimension durch die Gleichung

$$\frac{1}{V_i} \left(\int_{S_i} \rho \, \boldsymbol{u} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \right)_i \approx \frac{1}{V_i} (-S'_i \rho_i^* u_i + S_{i+1} \rho_{i+1}^* u_{i+1})$$
(2.2.67)

diskretisiert (siehe Abbildung 2.2.1). Dazu wird ρ_i "flussaufwärts" oder *Upwind* an die Zellränder extrapoliert. Für den extrapolierten Wert ρ_i^* gilt deswegen in 1. Ordnung

$$\rho_i^{\star} = \begin{cases} \rho_{i-1}, & \text{falls} \quad v_i > 0\\ \rho_i, & \text{falls} \quad v_i < 0 \end{cases}$$
(2.2.68)

In 2. Ordnung wird der extrapolierte Wert nach van Leer (1977) durch Gleichung

$$\rho_{i}^{\star} = \begin{cases} \rho_{i-1} + \frac{1}{2} \left(\delta x_{i-1}' - u_{i} \delta t \right) d\rho_{i-1}, & \text{falls} \quad v_{i} > 0 \\ \rho_{i} - \frac{1}{2} \left(\delta x_{i}' + u_{i} \delta t \right) d\rho_{i}, & \text{falls} \quad v_{i} < 0 \end{cases}$$
(2.2.69)

ermittelt, wobei mit der Monotoniebedingung $d\rho_i$ durch die Fallunterscheidung

$$d\rho_{i} = \begin{cases} \frac{2(\delta\rho_{i}\delta\rho_{i+1})}{(\delta\rho_{i}+\delta\rho_{i+1})}, & \text{falls} \quad \delta\rho_{i}\delta\rho_{i+1} > 0\\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
(2.2.70)

gegeben ist.

Konsistenter Transport Der Transport der übrigen fundamentalen Variablen verläuft nach einem ähnlichen Schema. Allerdings muss für eine optimale, lokale Erhaltung der Größe q die Advektion nach dem Prinzip des *konsistenten Transports* (Norman et al. 1980) vollzogen werden, indem die Advektion ihres spezifischen Werts q/ρ an den Massefluss

$$\dot{m}_i = \rho_i^\star u_i \tag{2.2.71}$$

geknüpft wird. Für die Energie ist der spezifische Wert durch e_i/ρ_i gegeben. Die kovarianten, spezifischen Impulskomponenten $(s_k)_i$ sind durch den Quotienten $(\rho v_k)_i/\tilde{\rho}_i$ gegeben, mit dem arithmetischen Mittel der Dichte $\tilde{\rho}_i$ und k = 1, 2, 3. Ihre extrapolierten Werte $(s_k)_i^*$ werden mit dem gemittelten Massefluss \tilde{m}_i transportiert. Die Übertragung des eindimensionalen Massefluss \dot{m}_i in zwei Raumdimensionen ist problemlos.

Kapitel 3

Algorithmen

3.1 Zeitintegration

Im Folgenden werden verschiedene Verfahren zur Lösung zeitabhängiger Gleichungen vorgestellt, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf ihre Anwendbarkeit zur Simulation protostellarer Scheiben implementiert und getestet wurden.

Alle Verfahren wurden für ein gestaffeltes 2D-Tensorproduktgitter mit einer Finite Volumen Diskretisierung in kartesischen und axialsymmetrischen Zylinder- und Kugelkoordinaten implementiert. Die Transportterme werden wahlweise mit dem 1. Ordnung *Upwind*-Verfahren oder dem 2. Ordnung van Leer-Verfahren berechnet (Abschnitt 2.2.2). Die Navier-Stokes Gleichungen werden in einer normierten Form gelöst (Anhang A.1). In Anhang A.2 sind sie zudem in ihrer vollständig ausgeschriebenen, nicht-normierten Form aufgeführt.

3.1.1 Das *Physical Splitting* **Verfahren**

Hujeirat & Rannacher berechneten 1998 die zeitabhängigen Gleichungen für den Randbereich einer Akkretionsscheibe um einen Weißen Zwerg in axialsymmetrischen Zylinderkoordinaten. Sie führten dazu Hydrodynamik-Modellrechnungen in der Strahlungsdiffusionsnäherung und mit einem α -Modell zur Beschreibung der Viskosität durch. Zudem wurde eine künstliche Viskosität zur Glättung von Kontaktdiskontinuitäten implementiert.

In ihren Simulationsrechnungen ergaben sich Strömungsgeschwindigkeiten mit Machzahlen von $M \lesssim 100$. Die normierte viskose Zeitskala belief sich auf $\tau_{\nu} \sim 10^4$ während die dynamische Zeitskala in der Größenordnung von $\tau_{\rm dyn} \sim 10^{-2}$ lag. Da die Autoren damit ein sehr steifes, hochdimensionales Problem zu behandeln hatten, wurde die Implementierung eines stabilen und effizienten Verfahrens notwendig (vgl. Abschnitt 2.2.1).

Zur Integration ihrer Gleichungen entwickelten sie dazu einen Algorithmus, in dem die Erhaltungsgleichungen, die zusammen das gekoppelte Gleichungssystem für den Strahlungstransport und die Hydrodynamik bilden, in Anlehnung an das Gauß-Seidel-Verfahren nacheinander behandelt und alle Größen sukzessive aktualisiert werden. Die Stabilität des Verfahrens ist deswegen eng an die Reihenfolge, in der die Gleichungen gelöst werden, geknüpft. Diese wird durch die physikalischen Rahmenbedingungen der Problemstellung festgelegt. Die Autoren nennen dieses Verfahren daher *Physical Splitting*. Die zwei Raumdimensionen ihres Scheibenmodells werden mit einem Dimensionssplitting behandelt. Dazu wurde eine *Approximate Factorization Method* nach Beam & Warming (1978) implementiert, wobei die Reihenfolge, in der die Richtungen behandelt werden, ebenfalls durch die Physik der Problemstellung bestimmt wird.

Die Gleichungen werden, nachdem sie nacheinander entkoppelt gelöst wurden, zusätzlich global iteriert. Je nach Zeitabhängigkeit bzw. Stationarität der Lösung berichten Hujeirat & Rannacher (1998) von 1 bis 5 globalen Iterationsschritten, die für ein stabiles Verfahren notwendig waren, während die Zeitschrittweiten viele Größenordnungen über dem eines expliziten Algorithmus lagen.

Im Folgenden wird der *Physical Splitting*-Algorithmus nach Hujeirat & Rannacher (1998), wie er im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementiert wurde, erläutert.

Implementierung des Physical Splitting-Verfahrens

Die globale Iterationsschleife Die hydrodynamischen Erhaltungsgleichungen wurden, wie von Hujeirat & Rannacher (1998) beschrieben, entkoppelt implementiert und so die Zeitschritte in einzelne, *lokale* Unterschritte aufgeteilt, deren Lösungen für den jeweils folgenden Schritt verwendet werden. So reduziert sich das vollgekoppelte, *globale* Problem auf die Invertierung vereinzelter, schwachbesetzter Matrizen, die in Kombination mit einem Dimensionssplitting lediglich in der Diagonalen und den zwei Nebendiagonalen besetzt sind (Tridiagonalmatrizen). Die Energiegleichung in der Strahlungsdiffusionsnäherung wurde in eine 1D-Version des vorliegenden Codes von Gracia (2002) nachträglich integriert (vgl. Abschnitt 5.2.2).

Die entkoppelten Gleichungen wurden in eine globale Defektkorrektur eingebettet, indem am Ende einer jeden globalen Iterationsschleife der Defekt (2.2.55) aller zu lösenden Gleichungen in ihrer diskretisierten Form berechnet wird und somit die globale Konvergenz des Verfahrens überprüft werden kann (vgl. Abbildung 3.1.2).

Die Reihenfolge, in der die Gleichungen gelöst werden, wird festgelegt, indem die Kopplung der fundamentalen Größen näherungsweise in eine lineare Abfolge gebracht wird. So argumentieren Hujeirat & Rannacher (1998), dass die viskos bedingte Entwicklung der Umlauffrequenz in der Scheibe eine Änderung der meridionalen Impulskomponenten nach sich zieht, die wiederum die Dichtestruktur beeinflussen. All diese Größen bestimmen dann letztlich die thermische Entwicklung der Scheibe. Daraus ergibt sich die Abfolge der Erhaltungsgleichungen für die Simulation von Akkretionsscheiben wie sie in Abbildung 3.1.1 skizziert ist.

Ähnlich wie beim *Physical Splitting* wählen Hujeirat & Rannacher (1998) auch bei der *Approximate Factorization Method* für das Dimensionssplitting die Reihenfolge der Richtungen, in der die Gleichungen gelöst werden, in Abhängigkeit von der physikalischen Problemstellung. In Akkretionsscheiben findet Materialtransport vornehmlich in radialer Richtung statt, wohingegen die Energie überwiegend in der vertikalen Richtung transportiert wird. Dementsprechend werden Kontinuitätsgleichung und Drehimpulserhaltung zuerst in radialer, dann in vertikaler Richtung und die Energiegleichung zuerst in vertikaler Richtung gelöst.

Zeitdiskretisierung und Zeitschrittkontrolle Das oben beschriebene *Physical Splitting*-Verfahren erfordert die Integration der entkoppelten, hydrodynamischen Erhaltungsgleichungen. Diese werden durch das verallgemeinerte Crank-Nicolson-Verfahren (2.2.50) (I) Drehimpulsgleichung
 ↓

 (II) Radialimpulsgleichung
 ↓

 (III) Vertikalimpulsgleichung
 ↓

 (IV) Kontinuitätsgleichung
 ↓

 (V) Energie-/Zustandsgleichung

Abbildung 3.1.1: Reihenfolge der Gleichungen wie sie mit dem *Physical Splitting*-Verfahren für Scheibensimulationen implementiert wurde.

zeitlich diskretisiert. Dabei wird der Parameter $1 \ge \theta \ge 0.5$ gewählt, so dass die Trapezformel je nach Größe von θ gedämpft und stabilisiert wird und gleichzeitig mindestens in 1. Ordnung konsistent ist.

Mit Hilfe der Adams-Bashforth-Formel 1. Grades (2.2.51) wurde ohne nennenswerten Zusatzaufwand an Speicher und Rechenzeit eine Schrittweitensteuerung mit *a posteriori* Fehlerschätzer implementiert (siehe Abschnitt 2.2.1). Zudem werden Konvergenz der lokalen als auch globalen Iteration überprüft. Wird innerhalb einer vorgegebenen Anzahl an Iterationsschritten (\sim 5) eine Defekttoleranzschranke nicht unterschritten oder liegt der durch Gleichung (2.2.63) berechnete Fehler über einen vorgegebenen Wert wird der aktuelle Zeitschritt mit einer kleineren Schrittweite erneut berechnet. Bei schneller Konvergenz oder geringen Fehlern wird die Schrittweite für den nächsten Zeitschritt erhöht.

Die lokale Iteration Die Lösung der diskretisierten Gleichungen in den Teilschritten des Dimensions- und *Physical Splitting* wird durch ein Newton-Raphson-Verfahren erreicht. Die tridiagonalen Jacobimatrizen werden analytisch bestimmt und mit einem geeigneten Verfahren für Tridiagonalmatrizen aus den öffentlich zugänglichen Routinen des *Linear Algebra Package*¹ invertiert. Die Matrixeinträge für die Transportterme werden dabei in 1. Ordnung behandelt, während die Defektkorrektur wahlweise 1. Ordnung oder 2. Ordnung berechnet wird. Der nicht-lineare Impulsadvektionsterm wird in der konsistenten Transport Formulierung (Abschnitt 2.2.2) linearisiert, indem der in der Jacobimatrix benötigte Fluss aus dem letzten globalen Iterationsschritt genommen wird.

Die Simulation von Akkretionsscheiben mit dem Physical Splitting

Eine 1D-Version des Codes mit einem implementierten *Physical Splitting*-Verfahren wurde zur Simulation von transsonischen Strömungen in Akkretionsscheiben um schwarze Löcher von Gracia (2002) und Gracia et al. (2003) erweitert und erfolgreich angewendet (Abschnitt 5.2.2).

Bei der Modellierung protostellarer Scheiben werden im quasistationären Zustand Strömungen mit Machzahlen in der Größenordnung von $M \sim 10^{-3}$ erwartet. Für Probleme derartig niedriger Machzahlen zeigen bereits 1D-Tests, dass Schallwellen, die in der Akkretionsströmung angeregt werden, den Zeitschritt eines *Physical Splitting-*Verfahrens

¹z.B. http://www.netlib.org/lapack



Abbildung 3.1.2: Das Prinzip des *Physical Splitting*-Algorithmus nach Hujeirat & Rannacher (1998) wie er im Rahmen dieser Arbeit implementiert wurde: Nach Festlegung der Anfangsbedingung werden die Erhaltungsgleichungen des Gleichungssystems in Teilschritten gelöst und die entsprechenden Variabeln schrittweise aktualisiert. Die Reihenfolge der Gleichungen wird an das Problem angepasst (vgl. Abbildung 3.1.1). Am Ende eines globalen Iterationsschrittes wird der Defekt aller Gleichungen überprüft und gegebenenfalls auf ein Neues iteriert. Anschließend überprüft eine Zeitschrittsteuerung (ZSS) die Kriterien zur Beibehaltung oder Erhöhung der Zeitschrittweite δt bzw. zur ihrer Erniedrigung und der Neuberechnung des aktuellen Zeitschrittes. Sind alle Konvergenz- und Fehlerkriterien erfüllt, wird nach Zwischenspeicherung benötigter Größen mit der Berechnungen des neuen Zeitschrittes begonnen.

3.1. ZEITINTEGRATION

erheblich einschränken. So konnte im 1D-Fall für Courantzahlen größer als 1 keine Konvergenz erzielt werden (siehe Abschnitt 5.2.1). In ersten 2D-Simulationen protostellarer Scheibenmodelle mit dem *Physical Splitting*-Verfahren lagen die erreichten Courantzahlen mit $C \sim 0.1$ sogar noch deutlich unter denen eines rein expliziten Verfahrens (z.B. Stone & Norman 1992; siehe Abschnitt 3.1.3). Im Vergleich mit einem rein expliziten Verfahren erfordert das *Physical Splitting* durch die verschachtelten lokalen und globalen Iterationen zudem einen erheblichen Zusatz an Rechenaufwand.

Um diese Probleme zu umgehen, wurde ausgehend von inkompressiblen Methoden ein Druckkorrekturverfahren zur Behandlung kompressibler Strömungen niedriger Machzahlen entwickelt, welches im folgenden Abschnitt erläutert wird.

3.1.2 Druckkorrekturverfahren

Für die Modellierung protostellarer Akkretionsscheiben ist das *Physical Splitting* Verfahren aufgrund von Störungen durch Schallwellen bei Strömungen kleiner Machzahlen nicht geeignet. Treten in einem Rechengebiet Regionen mit Strömungen sehr kleiner Machzahlen auf, werden derartige Verfahren in der Regel ineffizient und konvergieren auch für kleine Zeitschritte häufig nicht mehr.

Bleibt die Machzahl einer Strömung im gesamten Rechengebiet kleiner als etwa 0.2 und die Dichte im Rechengebiet nahezu konstant, können inkompressible Verfahren zur Lösung des Problems herangezogen werden (z.B. Harlow & Welch 1965, Bijl & Wesseling 1998). Protostellare Scheiben sind in vertikaler Richtung druckunterstützt und die Dichte fällt mit der Höhe exponentiell ab. Trotz der niedrigen Machzahlen die sich für die Strömung in protostellaren Scheiben aus den stationären Modellen ergeben, können in einer zeitabhängigen Simulation, insbesondere während der Relaxationsphase, auch moderate Machzahlen von $M \gtrsim 0.2$ auftreten. Es wird daher ein Verfahren erforderlich, welches gleichermaßen für inkompressible Strömungen mit $M \rightarrow 0$ als auch für kompressible Strömungen mit $M \sim 10^0$ geeignet ist. Zu diesem Zweck können inkompressible Verfahren für die Anwendung auf schwachkompressible Strömungen erweitert werden (z.B. Harlow & Amsden 1968, Bijl & Wesseling 1998).

Im nächsten Abschnitt werden die Gleichungen eines Verfahrens für schwachkompressible Strömungen nach Bijl & Wesseling (1998) für den isothermen Grenzfall hergeleitet, bevor anschließend ein daraus abgeleiteter Algorithmus für isotherm geschichtete Akkretionsscheiben vorgestellt wird, wie er im Rahmen dieser Arbeit in den vorliegenden Finite Volumen Code implementiert und getestet wurde.

Die Helmholtzgleichung für das Druckkorrekturverfahren

Zur Herleitung der Gleichungen des im Code verwendeten Druckkorrekturverfahrens wird für die zeitlich diskretisierte Impulsgleichung (2.1.2) ein verallgemeinertes Crank-Nicolson-Verfahren (2.2.50) angesetzt, woraus sich die Gleichung

$$(\rho \boldsymbol{v})^{n} - (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} + \delta t \theta_{2} \nabla P^{n} + \delta t \theta_{1} \quad [\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}) \boldsymbol{v}^{n} - (\rho \boldsymbol{g})^{n} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{n}] + \delta t (1 - \theta_{2}) \nabla P^{n-1} + \delta t (1 - \theta_{1}) \quad [\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} \boldsymbol{v}^{n-1} - (\rho \boldsymbol{g})^{n-1} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{n-1}] = 0$$

$$(3.1.1)$$

ergibt. Hierbei sind $0.5 \le \theta_{1,2} \le 1$ zunächst frei wählbare Parameter. Im inkompressiblen Fall muss $\theta_2 = 1$ gesetzt werden, um die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes in diesem Limit zu gewährleisten (Bijl & Wesseling 1998). Van Kan (1986) konnte zeigen, dass im inkompressiblen Limit das Verfahren für $\theta_1 = 1/2$ und $\theta_2 = 1$ von 2. Ordnung ist. Im kompressiblen Fall ist zumindest eine Konsistenz 1. Ordnung gewährleistet. Alle Terme verstehen sich hier und im Folgenden als in ihrer räumlich diskretisierten Form gegeben. Für den Prognosewert des Impulses (ρv)[†] wird mit Gleichung

$$(\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} - (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} + \delta t \theta_2 \nabla P^{\star} + \delta t \theta_1 \quad [\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\star} \boldsymbol{v}^{\dagger} - (\rho \boldsymbol{g})^{\star} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{\dagger}] + \delta t (1 - \theta_2) \nabla P^{n-1} + \delta t (1 - \theta_1) \quad [\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} \boldsymbol{v}^{n-1} - (\rho \boldsymbol{g})^{n-1} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{n-1}] = 0$$
(3.1.2)

ein semi-impliziter Ansatz gemacht. Die Gleichungen für die drei Impulskomponenten werden entkoppelt gelöst, so dass im viskosen Tensor die gemischten Terme explizit behandelt werden. Für die im Zeitschritt n noch unbekannte gravitative Kraft $(\rho g)^*$, den Druckgradienten ∇P^* und den Massefluss $(\rho v)^*$ im linarisierten Advektionsterm $\nabla \cdot (\rho v)^* v^{\dagger}$ wird der aktuellste verfügbare Wert eingesetzt; der hochgestellte Index * kennzeichnet also Werte aus dem bereits gelösten Zeitschritt n-1, beziehungsweise solche, die aus der letzten Iteration des aktuellen Zeitschritts erhalten wurden.

Subtrahiert man nun Gleichung (3.1.2) von (3.1.1), erhält man

$$(\rho \boldsymbol{v})^{n} - (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} + \delta t \theta_{2} \nabla (P^{n} - P^{\star})$$

$$+ \delta t \theta_{1} (\nabla \cdot [(\rho \boldsymbol{v}) \boldsymbol{v}^{n} - (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} \boldsymbol{v}^{\star}] - \nabla [\boldsymbol{\tau}^{n} - \boldsymbol{\tau}^{\dagger}]) = 0.$$

$$(3.1.3)$$

Die Terme in der 2. Zeile werden im Druckkorrekturverfahren vernachlässigt. Diese Näherung kann für zeitabhängige Strömungen nicht verschwindender Machzahlen inkonsistent werden, und somit vermutlich einen negativen Einfluss auf die Stabilität des Verfahrens haben.

Es ergibt sich die Gleichung für die Impulskorrektur

$$(\rho \boldsymbol{v})^n \approx (\rho \boldsymbol{v})^\dagger - \delta t \theta_2 \nabla \delta P$$
 (3.1.4)

mit $\delta P := P^n - P^*$. Unter Anwendung der Divergenz $\nabla \cdot$ auf Gleichung (3.1.4) erhält man

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^n \approx \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} - \delta t \theta_2 \Delta \delta P.$$
(3.1.5)

Die Zeitableitung der Dichte eines isothermen Gases läßt sich schreiben als

$$\partial_t \rho = \frac{\partial \rho}{\partial P} \partial_t P = \frac{1}{c^2} \partial_t P$$
 (3.1.6)

Wird sie in die nach der Trapezregel (2.2.50) diskretisierte Kontinuitätsgleichung eingesetzt, folgt die diskretisierte Gleichung für die zeitliche Entwicklung des Druckes

$$\frac{1}{c^2} \frac{P^n - P^{n-1}}{\delta t} + \theta_2 \nabla \cdot (\rho v)^n + (1 - \theta_2) \nabla \cdot (\rho v)^{n-1} = 0.$$
 (3.1.7)

Zusammen mit Gleichung (3.1.5) erhält man damit die Helmholtzgleichung für den Druck P^n

$$P^n - P^{n-1} - \delta t^2 \theta_2^2 c^2 \Delta (P^n - P^\star) + \delta t \theta_2 c^2 \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} + \delta t (1 - \theta_2) c^2 \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} = 0$$

oder äquivalent dazu für die Druckkorrektur $\delta P = P^n - P^{\star}$

$$\Delta\delta P - \frac{1}{\delta t^2 \theta_2^2 c^2} \delta P = \frac{1}{\delta t^2 \theta_2^2 c^2} (P^* - P^{n-1}) + \frac{1}{\delta t \theta_2} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} + \frac{1 - \theta_2}{\delta t \theta_2^2} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} .$$
(3.1.9)

Implementierung des Druckkorrekturverfahrens

Aus den im letzten Abschnitt abgeleiteten Gleichungen wurde ein Algorithmus implementiert, wie er in Abbildung 3.1.3 für den Fall $\theta_{1,2} = 1$ skizziert ist. Im Folgenden werden die einzelnen Schritte des implementierten Druckkorrekturverfahrens näher erläutert, und dabei die Gleichungen in der Reihenfolge, in der sie gelöst werden, nochmals aufgeführt.

Prädiktorschritt Im Prädiktorschritt wird die Gleichung

$$(\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} - (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} + \delta t \theta_2 \nabla P^{\star} + \delta t \theta_1 \quad [\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\star} \boldsymbol{v}^{(\dagger)} - (\rho \boldsymbol{g})^{\star} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{\dagger}] \\ + \delta t (1 - \theta_2) \nabla P^{n-1} + \delta t (1 - \theta_1) \quad [\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n-1} \boldsymbol{v}^{n-1} - (\rho \boldsymbol{g})^{n-1} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{n-1}] = 0$$

für die drei entkoppelten Impulskomponenten gelöst. Für axialsymmetrische Scheibenmodelle wird als erstes die druckunabhängige Drehimpulsgleichung entweder in der Form (2.1.14) oder (2.1.22) gelöst. Es folgen die Gleichungen für den Radial- und Vertikalimpuls.

Die Viskosität wird in den linearen Termen implizit, der Transport wahlweise semi-implizit (1. Ordnung) oder explizit (1. oder 2. Ordnung) behandelt, was durch das eingeklammerte †-Symbol angedeutet wird. Die Advektionsterme werden in der konsistenten Transport-Formulierung (Abschnitt 2.2.2) berechnet, d.h. die spezifischen Impulse werden vom Massefluss im *Upwind*- oder van Leer-Verfahren transportiert. Der Advektionsterm im Prädiktorschritt ist auch im semi-impliziten Fall bereits in einer linearisierten Form gegeben, so dass die Matrix leicht invertiert werden kann.

Der Massefluss wird bei der Defektberechnung der diskreten Kontinuitätsgleichung mitberechnet, die Matrixelemente des diskretisierten Reibungstensors, sowie Druckgradienten, Gravitation und Fliehkräfte bei der Defektberechnung der Impulsgleichungen. Diese Größen werden dann im Prädiktorschritt des folgenden Zeit- bzw. Iterationsschrittes übernommen.

Die Berechnung des Driven Cavity Problems (Abschnitt 5.2.3) mit Advektion in 1. Ordnung zeigte keine Verbesserung der Stabilität bei einer semi-impliziten Behandlung der Transportterme. So konnten auch mit einer expliziten Behandlung des Transports ohne globale Iteration der Gleichungen Courantzahlen von $C_v \sim 9 \cdot 10^3$ erreicht werden.

(3.1.8)



Abbildung 3.1.3: Flussdiagramm des implementierten Druckkorrekturverfahrens ($\theta_{1,2} = 1$): Es bezeichnen Variablen mit hochgestelltem Index n - 1 Größen zum Zeitpunkt des vorausgegangenen Zeitschrittes t_{n-1} . Für Variablen ohne Index werden die aktuellsten verfügbaren Werte eingesetzt, insofern sie nicht implizit behandelt werden (siehe Text). Das Verfahren wird mit einer Zeitschrittsteuerung (ZSS) kombiniert.

Korrektorschritt Nach dem Impulsprädiktor wird die Druckkorrekturgleichung

$$\Delta \delta P - \frac{1}{\delta t^2 \theta_2^2 c^2} \delta P = \frac{1}{\delta t^2 \theta_2^2 c^2} (P^* - P^{n-1}) + \frac{1}{\delta t \theta_2} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} + \frac{1 - \theta_2}{\delta t \theta_2^2} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n-1}$$

gelöst. Im ersten Iterationsschritt ist $P^* \equiv P^{n-1}$ und der erste Term auf der rechten Seite entfällt. Auch hier werden die Transportterme $\nabla \cdot (\rho v)$ nach dem 1. Ordnung Upwind bzw. 2. Ordnung Van-Leer Verfahren berechnet.

Der Druck und die meridionalen Impulskomponenten können anschließend mit der Lösung für die Druckkorrektur δP durch die einfachen algebraischen Gleichungen

$$P = P + \delta P$$

und

$$(\rho \boldsymbol{v})^n = (\rho \boldsymbol{v})^\dagger - \delta t \theta_2 \nabla \delta F$$

aktualisiert werden. Der druckunabhängige Drehimpuls wird nicht korrigiert.

Lösungsverfahren Bei den semi-impliziten Gleichungen für den Prädiktorschritt und die Druckkorrekturgleichung handelt es sich um lineare Gleichungssysteme. Die entsprechenden Matrizen können deshalb mit dem vorkonditionierten BiCGSTAB-Verfahren (Abschnitt 3.2) invertiert werden. Die Reihenfolge der so entkoppelt gelösten Gleichungen ist in Abbildung 3.1.4 nochmals dargestellt.



Abbildung 3.1.4: Reihenfolge der Gleichungen wie sie mit dem Druckkorrekturverfahren für Scheibensimulationen gelöst werden.

Globaler Defekt und Zeitschrittsteuerung Nachdem alle Größen aktualisiert sind, wird am Ende eines Iterationsschrittes der Defekt (2.2.55) für die Erhaltungsgleichungen (2.1.1) und (2.1.2) in ihrer diskretisierten Form berechnet. Fällt die Maximumsnorm aller Defekte $||d||_{\infty}$ unter eine Toleranzschwelle TOL kann die globale Iteration abgebrochen und der nächste Zeitschritt berechnet werden. Ist $||d||_{\infty} >$ TOL werden die Gleichungen gegebenenfalls erneut iteriert.

Die globale Defektkorrektur wird mit einer Zeitschrittsteuerung verknüpft, die bei schneller Konvergenz des globalen Defektes den Zeitschritt erhöht, bzw. bei schlechter Konvergenz die Schrittweite verkleinert und den aktuellen Zeitschritt erneut berechnet. Eine globale Iteration der Gleichungen ist im Druckkorrekturverfahren nach Bijl & Wesseling (1998) an sich nicht vorgesehen und konnte die Effizienz des Verfahrens durch einen etwaigen Stabilitätsgewinn in der Regel nicht steigern. Die Gleichungen werden daher in den meisten Fällen nur einmal gelöst. Die Zeitschrittweite kann so gewählt werden, dass $||d||_{\infty} < \text{TOL}$ dennoch gewährleistet ist.

Erhaltungseigenschaft des Druckkorrekturverfahrens

Im Druckkorrekturverfahren wird die Erhaltung der Masse nur indirekt durch die Lösung der Helmholtzgleichung berücksichtigt. Die Kontinuitätsgleichung (2.1.1) wird also nicht exakt sondern nur näherungsweise gelöst, weswegen auch die Masse im Allgemeinen nicht exakt erhalten ist. 2-D Tests für ein relaxiertes Modell eines geschlossenen Scheibenrings ergaben eine Variation der Gesamtmasse $M_{\rm tot}$ von $\Delta M_{\rm tot}/M_{\rm tot} < 10^{-5}$ in 100 a.

Die Simulation von Akkretionsscheiben mit dem Druckkorrekturverfahren

Obwohl das Druckkorrekturverfahren äußerst effizient und stabil ist, wenn die stationäre oder quasi-stationäre Lösung einer Modellrechnung nahe an den Anfangsbedingungen liegt (siehe Abschnitte 5.2.3 und 5.2.4), müssen die Zeitschritte für instationäre Simulationen oder Modellrechnungen in der Relaxationsphase aus Stabilitätsgründen dennoch klein gehalten werden, und das Verfahren wird ineffizient. Um auch instationäre Phasen in Akkretionsscheiben modellieren und Relaxationsphasen für quasi-stationäre Scheibenmodelle überbrücken zu können, wurde als zusätzliches Verfahren eine modifizierte Version des ZEUS-Algorithmus nach Stone & Norman (1992) implementiert, die im nächsten Abschnitt besprochen wird.

3.1.3 Modifizierter ZEUS-Algorithmus

ZEUS-2D wurde als vielseitiger Strahlungs-Magnetohydrodynamikcode zur Lösung von unterschiedlichen astrophysikalischen Problemen auf einem Finite Volumen-Gitter entwickelt und geht in seinen Anfängen auf eine Doktorarbeit von Michael Norman über den Kollaps rotierender Gaswolken zurück (Norman 1980). Die Entkopplung der Gleichungen wird in diesem Verfahren nicht wie beim *Physical Splitting* durch die getrennte Behandlung der jeweiligen Erhaltungsgleichungen erreicht, sondern indem Quell- und Transportterme nacheinander bestimmt und schrittweise den Gleichungen hinzugefügt werden.

Der hier implementierte, hydrodynamische Teil des Codes wird ausführlich in Stone & Norman (1992) beschrieben. Er wird in dieser Arbeit deshalb nur in groben Zügen skizziert. Durchgeführte Modifikationen werden dabei erläutert.

Implementierung des modifizierten ZEUS-Algorithmus

Azimuthale Viskosität Zu Beginn eines jeden Zeitschrittes werden die Quellterme der Gleichungen bestimmt. Stone & Norman (1992) bestimmen hierfür zunächst Druckgradienten, gravitative Kräfte, Flieh- und Corioliskräfte.

Da Akkretionsscheiben fliehkraftunterstützt sind und ihre Entwicklung durch Viskosität bestimmt ist, werden in dem vorliegenden Code zur Berechnung von Scheibenproblemen als erstes die viskosen Terme der Drehimpulsgleichung (2.1.14) mit

$$(\rho v)_3^k = (\rho v)_3^{n-1} + \delta t \operatorname{div}(h_3 \tau_{(3)}^k)$$
(3.1.10)

gelöst bzw. mit Gleichung (2.1.22) im mitrotierenden System

$$(\rho l)^k = (\rho l)^{n-1} + \delta t \operatorname{div} (h_3 \tau_{(3)}).$$
(3.1.11)

Wie schon im letzten Abschnitt sind auch hier wieder alle Terme in ihrer räumlich diskretisierten Form zu verstehen. Der hochgestellte Index k bezeichnet nun die Anzahl der berechneten Unterschritte zu Beginn des Zeitschrittes n.

Die viskosen Terme der Drehimpulsgleichung sind in axialsymmetrische Koordinatensystemen von den meridionalen Impulskomponenten entkoppelt. Sie werden im vorliegenden Code optional implizit oder explizit gelöst. Stone & Norman (1992) behandeln diese Terme ausschließlich explizit.

Druckgradienten, Gravitation und Fliehkräfte Nachdem die viskose Entwicklung des Drehimpulses berücksichtigt wurde, können die Kraftterme für die meridionalen Impulskomponenten mit

$$(\rho v)_{2}^{k+1} = (\rho v)_{2}^{n-1} + \delta t \left[\rho^{n-1} \frac{1}{h_{3}^{3}} \frac{\partial h_{3}}{\partial x^{2}} (v_{3}^{k})^{2} - P_{,2}^{n-1} - \rho \Phi_{,2}^{n-1} \right]$$
(3.1.12)

für die x_2 -Komponente und

$$(\rho v)_{1}^{k+2} = (\rho v)_{1}^{n-1} + \delta t \left[\rho^{n-1} \left(\frac{1}{h_{2}^{3}} \frac{\partial h_{2}}{\partial x^{1}} (v_{2}^{k+1})^{2} + \frac{1}{h_{3}^{3}} \frac{\partial h_{3}}{\partial x^{1}} (v_{3}^{k})^{2} \right) - P_{,1}^{n-1} - \rho \Phi_{,1}^{n-1} \right]$$
(3.1.13)

für die x_1 -Komponente berechnet und addiert werden (siehe Gleichung 2.1.13). Der Term $\partial_{x^2}h_2$ verschwindet in den hier betrachteten Koordinatensystemen.

Meridionale Viskosität Die viskosen Spannungen für die meridionalen Impulskomponenten werden semi-implizit behandelt. Das bedeutet, dass nur die linearen Terme im Spannungstensors implizit behandelt werden. Während Stone & Norman (1992) auch diese Terme explizit behandeln, berechnen andere Autoren selbst die nicht-linearen Anteile des viskosen Tensors implizit (z.B. Kley 1989). Dies ist aber mit höherem Rechenaufwand verbunden und hat sich in den in Kapitel 5 durchgeführten Testrechnungen als nicht unbedingt notwendig erwiesen. In der zu lösenden Matrix sind somit nur die Diagonale und zwei Nebendiagonale besetzt (Fünfpunktmatrix). Die Indizes für die Unterschritte werden auf der rechten Seite daher symbolisch eingeklammert, und es ergeben sich die Gleichungen

$$(\rho v)_1^{k+3} = (\rho v)_1^{k+2} + \delta t f_d \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau})_1^{(k+3)}$$
(3.1.14)

und

$$(\rho v)_2^{k+4} = (\rho v)_2^{k+1} + \delta t f_d \operatorname{div}(\boldsymbol{\tau})_2^{(k+4)}$$
(3.1.15)

für die meridionalen Impulskomponenten. Hierbei wurde durch den Faktor f_d eine künstliche Dämpfung eingeführt. Für $f_d > 1$ kann eine beschleunigte Relaxation der Scheibenmodelle in der Anfangsphase erzwungen werden (vgl. Abschnitt 5.2.4). Rechnungen mit $f_d = 1$ werden ohne künstliche Dämpfung durchgeführt.

Wird die Drehimpulsgleichung im mitrotierenden System gelöst, so wird an dieser Stelle dem Drehimpuls der Kompensationsterm für die Zeitableitung der Dichte $-\rho u^j k_{,j}$ in Gleichung (2.1.22) hinzugefügt, so dass

$$(\rho l)^{k+5} = (\rho l)^k - \delta t \left[(\rho v)_1^{k+3} k_{,1} + (\rho v)_2^{k+4} k_{,2} \right] .$$
(3.1.16)

Für nicht isotherme Probleme wird noch die viskose Heizung

$$e^{k+6} = e^{n-1} + \delta t(\boldsymbol{\tau} : \nabla \boldsymbol{v})^{k+5}$$
 (3.1.17)

mitberücksichtigt und an dieser Stelle berechnet.

Advektion Nun werden die advektiven Terme der Gleichungen nach dem Prinzip des konsistenten Transports (Abschnitt 2.2.2) behandelt. Zunächst wird die Kontinuitätsgleichung mit

$$\rho^{k+7} = \rho^{n-1} - \delta t \nabla \cdot \dot{\boldsymbol{m}}^{k+4} \tag{3.1.18}$$

berechnet. Mit dieser Gleichung wird auch der Massefluss $\dot{m}^{k+4} = f(\rho^{n-1}, u^{k+4})$, wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben, bestimmt, und es werden die verbleibenden Größen in ihrer spezifischen Form durch die Gleichungen

$$(\rho v)_1^{k+8} = (\rho v)_1^{k+3} - \delta t \operatorname{div} \left[\frac{(\rho v)_1^{k+3}}{\rho^{k+7}} \dot{\boldsymbol{m}}^{k+4} \right] , \qquad (3.1.19)$$

$$(\rho v)_2^{k+9} = (\rho v)_2^{k+4} - \delta t \operatorname{div} \left[\frac{(\rho v)_2^{k+4}}{\rho^{k+7}} \dot{m}^{k+4} \right] , \qquad (3.1.20)$$

$$(\rho v)_{3}^{k+10} = (\rho v)_{3}^{k} - \delta t \operatorname{div} \left[\frac{(\rho v)_{3}^{k}}{\rho^{k+7}} \dot{m}^{k+4} \right]$$
(3.1.21)

bzw.

$$(\rho l)^{k+10} = (\rho l)_3^{k+5} - \delta t \operatorname{div} \left[\frac{(\rho l)^{k+5}}{\rho^{k+7}} \dot{m}^{k+4} \right]$$
(3.1.22)

und

$$e^{k+11} = e^{k+6} - \delta t \operatorname{div} \left[\frac{e^{k+5}}{\rho^{k+7}} \dot{\boldsymbol{m}}^{k+4} \right]$$
 (3.1.23)

transportiert. Die Advektion wird nach Gleichungen (3.1.19) - (3.1.23) wie auch bei Stone & Norman (1992) explizit behandelt. Der vorliegende Code erlaubt auch die problemlose implizite Behandlung dieser Terme, zumindest in ihrer entkoppelten Form. Da dies aber die zusätzliche iterative Lösung nicht-linearer Gleichungen erfordern würde und für Strömungen niedriger Machzahlen dadurch praktisch kein Stabilitätsgewinn zu erwarten ist, wird auf eine implizite Durchführung der Advektion verzichtet. Zuletzt wird der Druck durch die Zustandsgleichung bestimmt. In Abbildung 3.1.5 wird nochmal die Abfolge der Terme, wie sie im modifizierten ZEUS-Algorithmus behandelt werden, kurz skizziert.

(I) Azimuthale Viskosität ↓ (II) Kraftterme ↓ (III) Meridionale Viskosität ↓ (IV) Advektion ↓ (V) Zustandsgleichung

Abbildung 3.1.5: Reihenfolge der Terme, wie sie mit dem modifizierten ZEUS-Verfahren für Scheibensimulationen behandelt werden.

3.2 Löser für lineare Gleichungssysteme

Die in Abschnitt 3.1 vorgestellten Verfahren erfordern in einigen ihrer Teilschritte die Lösung eines linearen Gleichungssystems der Form

$$Aq = f \tag{3.2.24}$$

mit einer regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$, dem gesuchten Lösungsvektor $q \in \mathbb{R}^d$ und einer rechten Seite $f \in \mathbb{R}^d$. Die Dimension d des Gleichungssystems ist durch die Auflösung des Gitters gegeben², auf dem die Gleichungen in ihrer diskretisierten Form (Abschnitt 2.2.2) gelöst werden. Eine Einführung in moderne Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme ist z.B. durch Meister (1999) gegeben.

3.2.1 Krylow-Unterraum-Verfahren

Da sich direkte Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme aufgrund ihres hohen Anspruches an Rechnerresourcen verbieten, werden für praxisrelevante Problemstellungen vorwiegend iterative Verfahren verwendet. Dabei haben sich die zu den Projektionsmethoden gehörenden Krylow-Unterraum-Verfahren als robuste und schnelle Algorithmen erwiesen.

Eine äquivalente Umformung des Gleichungssystems kann die Stabilität und Konvergenzgeschwindigkeit eines iterativen Verfahrens zudem erheblich verbessern. Eine derartige Umformung wird Vorkonditionierung genannt.

In einem Benchmark, in dem die Konvektions-Diffusionsgleichung zu verschiedenen Problemstellungen aus der Strömungsmechanik (reibungsfrei und reibungsbehaftet) gelöst wird, können unterschiedlich vorkonditionierte Projektionsmethoden miteinander verglichen werden. In einer Gegenüberstellung der häufig verwendeten Projektionsmethoden CGS, BiCGSTAB, TFQMR, QMRCGSTAB und GMRES erweist sich das BiCGSTAB-Verfahren mit einer rechtsseitigen, unvollständigen LU-Zerlegung zur Vorkonditionierung (ILU(R) BiCGSTAB) als besonders effizient (Meister 1998, 1999 und dort aufgeführte Referenzen).

²Beispielsweise für ein zweidimensionales Gitter mit $n_1 \times n_2$ Gitterzellen ist $d = n_1 n_2$.

3.2.2 Test des BiCGSTAB-Verfahrens

Da sich das ILU(R) BiCGSTAB-Verfahren bei Problemstellungen aus der Strömungsmechanik bewährt hat und zudem verhältnismäßig leicht zu implementieren ist, wurde auf aufwendige Benchmarks verzichtet, und dieses Verfahren direkt für die im Rahmen dieser Arbeit auftretenden Zwecke eingesetzt.

Einfache Testprobleme

Um die korrekte Implementierung des BiCGSTAB-Lösers sicherzustellen, wurden zwei einfache Testprobleme untersucht, deren analytische Lösung bei gegebenen Randbedingungen bekannt ist. Das Konvergenzverhalten des BiCGSTAB-Verfahrens mit und ohne ILU(R) Vorkonditionierung wurde untersucht.

Es werden die Poissongleichung

$$-\Delta q = f \tag{3.2.25}$$

mit der rechten Seite

$$f = k^2 \sin kx \sin ly + l^2 \sin kx \sin ly \tag{3.2.26}$$

und die Helmholtzgleichung

$$-xy\Delta q + xyq = f \tag{3.2.27}$$

mit der rechten Seite

$$f = xy(k^2 \sin kx \sin ly + (l^2 + 1) \sin kx \sin ly)$$
(3.2.28)

auf einem Gebiet $\Omega([0,2],[0,1])$ gelöst. Die analytische Lösung zu homogenen Dirichlet-Randbedingungen lautet mit den Koeffizienten $k = 0.5\pi, l = \pi$ für beide Gleichungen

$$q = \sin kx \sin ky . \tag{3.2.29}$$

Sie ist in Abbildung 3.2.6 dargestellt.

In einer Finiten Differenzen-Diskretisierung 2. Ordnung sind die resultierenden Fünfpunktmatrizen nur im diagonalen Band und in zwei Nebendiagonalen besetzt. Der Verlauf des globalen Diskretisierungsfehlers (2.2.54) ist exemplarisch für die Helmholtzgleichung in Abbildung 3.2.7 gezeigt, wobei der Vektor q durch die Komponenten $q_{ij} := q(x_i, y_j)$ mit der analytischen Lösung q definiert ist und u der numerisch berechnete Lösungsvektor ist. Bei Änderung des Zellenabstandes δx verlief der Diskretisierungsfehler in den durchgeführten Testrechnungen erwartungsgemäß wie $||e||_{\infty} \propto \delta x^2$ ($||\cdot||_{\infty}$ bezeichnet die Maximumsnorm).

Die bereits von Meister (1998) beobachtete, bedeutende Effizienzsteigerung des BiCGSTAB-Verfahren durch die ILU(R) Vorkonditionierung wird durch die vorliegenden Testrechnungen bestätigt. Die Konvergenzverläufe, gegeben durch die Maximumsnorm des normierten Residuenvektors

$$r = \|Aq - f\|_{\infty} , \qquad (3.2.30)$$

sind für verschiedene Rechnungen in den Abbildungen 3.2.8 - 3.2.11 dargestellt. Die in den Abbildungen aufgeführten CPU-Zeiten sind auf einem Pentium IV

42



Abbildung 3.2.6: Lösungsverlauf der Poisson- und Helmholtzgleichung.



Abbildung 3.2.7: Diskretisierungsfehler für das Helmholtzproblem.

(1.5 GHz) Prozessor gemessen worden. Besonders bei der Berechnung des Helmholtzproblems wird die Effizienzsteigerung durch Vorkonditionierung deutlich. Trotz des leicht erhöhten Rechenaufwandes pro Iterationsschritt ist in dem in Abbildung 3.2.10 dargestellten Beispiel ein Zeitgewinn von über einem Faktor 20 zu vermerken.



Abbildung 3.2.8: Benchmark für das Poissonproblem. Der Verlauf des normierte Residuenvektor ist für das BiCGSTAB-Verfahren mit (durchgezogene Linie) und ohne Vorkonditionierung (gestrichelte Linie) dargestellt.



Poisson-Gleichung (200x150) Gitterpunkte

Abbildung 3.2.9: Benchmarks für das Poissonproblem.



Abbildung 3.2.10: Benchmarks für das Helmholtzproblem. Man beachte die logarithmische Skala in der Achse für die Iterationsschritte.





Abbildung 3.2.11: Benchmarks für das Helmholtzproblem mit verschiedenen Gitterauflösungen gelöst mit dem vorkonditionierten BiCGSTAB-Verfahren.

Kapitel 4

Implementierung

Ziel der Arbeit war die Implementierung eines flexiblen Softwarecodes zur Simulation astrophysikalischer Akkretionsscheiben, in dem bestehende Algorithmen problemlos ausgetauscht, verändert und getestet und zu lösende Gleichungssysteme um Terme und Gleichungen mit möglichst geringem Aufwand erweitert werden können. Vorliegender Code wurde in FORTRAN 90/95 entwickelt, was einen modularen Programmaufbau mit definierbaren Datenstrukturen bzw. Typen und Operationen ermöglicht, ohne dass auf die Effizienz der FORTRAN-Sprachenfamilie verzichtet werden muss. In diesem Kapitel soll der Aufbau des im Rahmen dieser Arbeit implementierten Codes knapp erläutert werden. Eine detaillierte Beschreibung der Daten- und Modulstrukturen würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen, doch werden im Folgenden anhand von Beispielen einige Merkmale dieses Codes skizziert. Dabei wird von der FORTRAN 90-Syntax gebrauch gemacht. Beispielsweise wird im folgenden Text der Zugriff auf eine Komponente z der Struktur q durch die FORTRAN 90-übliche Schreibweise q%z symbolisiert. Eine Einführung in die FORTRAN 90/95 Programmiersprachen ist z.B. durch Metcalf & Reid (1996) gegeben. Eine Kurzdokumentation des Codes in englischer Sprache ist dem Anhang B beigefügt.

4.1 Daten und Operationen

4.1.1 Datenstrukturen

Gitterdaten

Abbildung 4.1.1 zeigt den Aufbau des gestaffelten 2D-Tensorproduktgitters (Abschnitt 2.2.2), welches sich in einen aktiven Bereich, in dem die Gleichungen gelöst werden, in vier Ränder (b1 - b4) und in einen optionalen Bereich sogenannter Geisterzellen gliedert, die zur Implementierung bestimmter Randbedingungen von Nutzen sein können (siehe Stone & Norman 1992). Sie übernehmen aber, außer bei der Berechnung einer schrägen Stoßfront in Abschnitt 5.1.2, in den Modellrechnungen dieser Arbeit keine Funktion.

Eine Gitterzelle ist aufgebaut aus vier Knoten- oder Eckpunkten, dargestellt durch Kreuze, vier Seitenflächen (Striche) und der Zellmitte (Punkte), in der die über das Zellvolumen gemittelten skalaren Größen, z.B. die Dichte, definiert sind (Gleichung 2.2.65). Daten



Abbildung 4.1.1: Aufbau des Finite Volumen Gitters wie er in dieser Arbeit implementiert wurde. Das Gitter besteht im aktiven Bereich aus n1×n2 Gitterzellen und aus einer beliebigen Anzahl Geisterzellen g11 bis g22 ≥ 0 . Über die Komponenten der Strukturen g_cc, g_s1, g_s2 und g_kn kann auf Informationen zum gestaffelten Gitter zugegriffen werden (siehe Text für Details).

in diesen vier verschiedenen Gitterpositionen sind in ihrer diskretisierten Form von unterschiedlicher Dimension und können nicht direkt durch Operationen miteinander verknüpft werden.

Die zu jeweils einer Gitterposition definierte Struktur type(GRD), beinhaltet Zeigerkomponenten, die zum Teil wiederum Strukturen sind und über die auf Informationen zur Gittergeometrie zurückgegriffen werden kann. Entsprechend ihrer Position im Gitter werden die Variablen der Struktur type(GRD) mit g_cc (*centre*), g_s1 (*surface 1*), g_s2 (*surface 2*) und g_kn (*knot*) bezeichnet. So kann beispielsweise auf die Strukturkomponente, die die physikalischen Informationen zum Kontrollvolumen der in der Zellmitte definierten Dichte beinhaltet, durch die Schreibweise g_cc%v zugegriffen werden. Hierbei zeigt g_cc%v auf die Struktur v_cc vom type(VAR), deren Komponente v_cc%z das zweidimensionale Realzahlen-Array mit den eigentlichen physikalischen Werten zu den Gittervolumina ist. Die Strukturen selbst sind eindimensional, während ihre Vektorkomponenten bzw. Subkomponenten die Dimension des Gitters, auf dem sie definiert sind, besitzen. Die Schreibweise g_cc(i,j) in Abbildung 4.1.1 steht symbolisch für die vektorielle Natur ihrer Subkomponenten, z.B. g_cc%v%z(i,j).

Physikalische Größen

Die Struktur type(VAR) für eine physikalische Grösse q besitzt neben der Vektorkomponente q/z(:,:), des Datenarrays der diskretisierten Größe, weitere Zeigerkomponenten vom type(GRD) über die wiederum auf Informationen zu dem Gitter, auf dem die Größe definiert ist oder auf die eines Nachbargitters zugegriffen werden kann. Beispielsweise kann auf das Datenarray des Kontrollvolumen der Dichtevariable den über den%g%v%z zugegriffen werden. Hierbei zeigt den%g auf die type(GRD) Komponente g_cc und g_cc%v auf das physikalische Volumen vom type(VAR) definiert im Zellzentrum v_cc. Somit ist die Schreibweise den%g%v%z äquivalent zu g_cc%v%z und v_cc%z.

Aber auch kompliziertere Datenstrukturen, beispielsweise Matrizen, können erreicht werden. So ist die Matrix zur partiellen Ableitung einer Größe p entlang x1 durch die Schreibweise p%g%D1 gegeben. Diese Implementierung erleichtert die Verallgemeinerung von Funktionen, Operationen und Routinen, da sie, ohne Kenntnis über die Gitterposition an der die Argumente und Operanden definiert sind, formuliert werden können.

4.1.2 Operationen

Durch die Möglichkeit *Overloaded Operators* in FORTRAN 90 zu definieren, können verschiedene Datentypen durch Operatoren, die vorher entsprechend implementiert wurden, miteinander verknüpft werden. Dabei muss besonders auf die Speicherverwaltung geachtet werden, da in FORTRAN 90 Zwischenergebnissen manuell Speicherplatz zu Verfügung gestellt und nach ihrer Übergabe ebenso manuell wieder freigegeben werden muss. Zwischenergebnisse müssen deshalb mit einem Flag als solche gekennzeichnet werden, so dass am Ende einer Operation oder Zuordnung temporäre Operanden oder rechte Seiten zerstört werden können und Speicherlecks vermieden werden, ohne dass versehentlich globale Variablen gelöscht werden.

Zur Veranschaulichung der Implementierung von Operationen seien eine Matrixstruktur A, die physikalischen Variablen r, p und q vom type(VAR) und eine Realzahl a der Dimension 1 gegeben. So kann nach entprechender Definition des Operators .dot., beispielsweise ein Skalarprodukt durch die Schreibweise

$$a = p.dot.q$$
 (4.1.1)

und eine Matrixvektormultiplikation durch

$$p = A.dot.q \qquad (4.1.2)$$

formuliert werden. In vorliegender Implementierung ist der Operator * hingegen derart definiert, dass durch die Formulierung

$$r=p*q$$
 (4.1.3)

jede Komponente p%z(i,j) mit q%z(i,j) multipliziert wird, vorausgesetzt, die Größen sind an der gleichen Gitterposition definiert, d.h. von derselben Dimension. In diesem Fall können beliebig viele Operationen miteinander verknüpft werden, so dass z.B. die Gleichung

$$r = \frac{p + Aq}{p}$$

mit den physikalischen Grössen r, p und q (z.B. Dichte oder Impulskomponenten) und einen Operator A in einer Implementierung durch

$$r = (p + A.dot.q)/p$$



Abbildung 4.2.2: Aufbau der Programmmodule wie er in dieser Arbeit implementiert wurde. In Gruppe I werden Gitteraufbau, Datenstrukturen und ihre Operationen organisiert, während in den Modulen in Gruppe II die Physik und Numerik formuliert ist. Bei Programmablauf eingelesene Parameterfiles sind mit gestrichelten Kästchen dargestellt.

4.2. PROGRAMMMODULE

ihre Entsprechung fände.

In die Operator- und Zuordnungsfunktionen ist eine Überprüfung der Kompatibilität von Operanden bzw. linken und rechten Seiten implementiert, was das Debuggen eines Programms erleichtert.

In vielen Fällen kann auf *Overloaded Operators* verzichtet werden. Die in ihrem Endergebnis zu Gleichung (4.1.3) äquivalente Schreibweise r%z= p%z*q%z ist effizienter, da bei der Multiplikation zweier Arrays die Speicherverwaltung vom Compiler übernommen wird. Sie ist aber auch fehleranfälliger. Oft ist eine Kombination aus Array-Operanden, z.B. p%z, und Strukturen, z.B. q, sinnvoll.

4.2 Programmodule

In Abbildung 4.2.2 ist die hierarchische Gliederung der Programmmodule schematisch dargestellt. Die Module sind in die Gruppen I und II unterteilt. In den Modulen in Gruppe I werden, neben dem Aufbau der Gitterstruktur, die im letzten Abschnitt exemplarisch dargelegten Strukturen und Operationen verwaltet, so dass in den Modulen in Gruppe II darauf aufbauend die eigentliche numerische Physik formuliert werden kann. In dieser Ebene kann nahezu gänzlich auf die Betrachtung von Indizes verzichtet werden, was eine Implementierung unterschiedlicher Algorithmen und Gleichungen, die auf einem gestaffelten Tensorproduktgitter formuliert werden können, sehr vereinfacht.

Die Module MUSCL und Loeser in Gruppe II beinhalten Routinen zum *Upwind-* und van Leer-Verfahren (Abschnitt 2.2.2) bzw. dem implementierten ILU(R)-BiCGSTAB Verfahren (Abschnitt 3.2) zur Invertierung der Jacobimatrizen. In den Modulen Pressure, Momentum1, Momentum2 und Momentum3 werden die für die zu lösenden Gleichungen benötigten Terme und Matrizen aufgestellt, die weitgehend unabhängig von der Wahl des Zeitintegrationsalgorithmus berechnet werden müssen. Auf sie kann vom derzeit implementierten Druckkorrekturverfahren (Modul Druck) oder dem modifizierten ZEUS-Verfahren (Modul modZEUS) zurückgegriffen werden. Die Zeitschleife und der Aufbau der Rand- und Anfangsbedingungen wird von den Modulen Initial und Control gesteuert.

Kapitel 5

Test- und Modellrechnungen

In diesem Kapitel wird die Durchführung ausführlicher Test- und Modellrechnungen beschrieben. In Abschnitt 5.1 wird zunächst die korrekte Implementierung der Matrizen-, Transport- und Quelltermberechnung anhand von Standardtests überprüft. Diese Tests behandeln Stoßfronten in Überschallströmungen, zu deren Modellierung das modifizierte ZEUS-Verfahren gut geeignet ist. Die implementierten Zeitintegrationsalgorithmen greifen alle auf die selben Module zurück, in denen die notwendigen Terme berechnet werden, daher sind die durchgeführten Tests gleichermaßen aussagekräftig für alle in dem vorliegenden Code implementierten Algorithmen zur Zeitintegration.

Die in Abschnitt 3.1 vorgestellten Zeitintegrationsverfahren werden anschließend in Abschnitt 5.2 auf ihre Anwendbarkeit zur Simulation astrophysikalischer Akkretionsscheiben getestet. Dazu werden Stabilität und Effizienz der implementierten Algorithmen bei der Berechnung von Testproblemen und Scheibenmodellen untersucht und diskutiert.

5.1 Tests der Transport- und Quellterme

5.1.1 Sod Shock-Tube Test

Die Ausbreitung einer eindimensionalen Stoßfront in einer Röhre (*Shock Tube*), wie sie als Problemstellung zum ersten Mal von Sod (1978) vorgeschlagen wurde, hat sich als Standardtest für kompressible Hydrodynamikalgorithmen etabliert. Im sogenannten *Sod Shock-Tube Test* wird als Anfangsbedingung (t = 0) ein diskontinuierlicher Zustand modelliert mit einem heißen, dichten Gas auf der linken Seite und einer kühlen, dünnen Gasverteilung auf der rechten Seite der Diskontinuität. Das Gas befindet sich anfänglich auf beiden Seiten in Ruhe. Im Laufe der Simulation für t > 0 breitet sich das heiße Gas aufgrund des Druckgradienten in einer Stoßwelle in die rechte Hälfte aus, während in der linken Hälfte eine Verdünnungswelle entsteht.

Im Vergleich mit der analytischen Lösung kann so untersucht werden, ob der Verlauf der Stoßwelle von einem Hydrodynamikcode korrekt wiedergegeben werden kann. Dieser Test wurde mit dem modifizierten ZEUS-Algorithmus (Abschnitt 3.1.3) in kartesischen Koordinaten und in vier Raumrichtungen durchgeführt.

In der Anfangsbedingung werden auf der linken Seite der Kontaktdiskontinuität Dichte $\rho_{\rm L}$ und Druck $P_{\rm L}$ des Gases gleich 1.0 gesetzt ($\gamma = 1.4$). Auf der rechten Seite ist die

	R	1	2	L
ρ	0.125	0.266	0.426	1.0
P	0.1	0.303	0.303	1.0
ε	2.0	2.85	1.78	2.5
v	0	0.928	0.928	0

Tabelle 5.1.1: Analytische Ergebnisse für die Bereiche konstanter Werte des Sod Shock-Tube Test.

Dichte $\rho_{\rm R} = 0.125$ und der Druck $P_{\rm R} = 0.1$. Das Rechengebiet verläuft von x = [0, 1], die Kontaktdiskontinuität liegt zu Beginn der Rechnung bei x = 0.5.

Die analytische Lösung zu diesem Problem wird z.B. von Hirsch (1990) beschrieben. Danach bilden sich im Verlauf der Rechnung fünf Bereiche aus, wie siehe in Abbildung 5.1.1 links oben markiert sind und im Folgenden von rechts nach links beschrieben werden: Im äußersten rechten Bereich R ist das dünne Gas noch ungestört. Es wird durch eine Stoßfront vom Bereich 1 getrennt, in dem sich das von der Stoßwelle gestörte dünne Gas befindet. Die sich nach rechts fortbewegende Kontaktdiskontinuität trennt Bereich 1 vom Bereich 2, in dem sich dichtes Gas befindet, welches wiederum von der Verdünnungswelle in Bereich 3 gestört wurde. Die Größen im Bereich 3 haben einen monotonen Verlauf, in den übrigen Bereichen sind sie konstant. Im äußersten linken Bereich L ist das dichte Gas im noch ungestörten Zustand. Die analytischen Ergebnisse für die konstanten Bereiche sind in Tabelle 5.1.1 aufgelistet.



Abbildung 5.1.1: Mit dem modifizierten ZEUS Algorithmus berechnete Ergebnisse des *Sod Shock-Tube Test* auf einem Gitter mit 100 Zellen nach t = 0.245: Dichte ρ (links oben), Druck P (rechts oben), Geschwindigkeit v (links unten) und spezifische innere Energie ε (rechts unten).



Abbildung 5.1.2: Skizze zum schrägen Stoßproblem zum Zeitpunkt t = 0. Das Rechengebiet ist 30° gegenüber der Horizontalen angewinkelt. Die Längenverhältnisse der Kantenlängen sind nicht maßstabsgerecht.

In Abbildung 5.1.1 werden die numerischen Ergebnisse einer Simulation, die mit dem konsistenten van Leer-Transportverfahren und künstlicher Viskosität durchgeführt wurden, zum Zeitpunkt t = 0.245 den analytisch berechneten Verläufen gegenübergestellt. Da die hier verwendete künstliche Viskosität standardmäßig und nur für Testzwecke implementiert wurde und sie bei der Simulationen von Strömungen niedriger Machzahlen keine Rolle spielt, wird hier auf eine nähere Beschreibung verzichtet und stattdessen auf die Literatur verwiesen (z.B. Stone & Norman 1992).

Die mit vorliegendem Code berechneten Daten unterscheiden sich in keiner sichtbaren Weise von den von Stone & Norman (1992) mit dem ZEUS-Code erzielten Ergebnissen. Die Diskontinuitäten werden, entsprechend dem Parameter für die künstliche Viskosität, über etwa vier Gitterzellen ausgedehnt. Hinter der Stoßfront ist die spezifische innere Energie $\varepsilon = e/\rho$ durch die numerische Rechnung nicht exakt wiedergegeben. Stone & Norman (1992) vermuten dahinter eine Eigenheit der konsistenten Formulierung des Transports, in der nicht der Druck, sondern die spezifische innere Energie als fundamentale Größe wirkt.¹

5.1.2 Reflexion einer Stoßfront

In Abschnitt 5.1.1 wurde bereits die korrekte Implementierung der Transport- und Quellterme anhand einer eindimensionalen Stoßwelle erfolgreich getestet. Ein komplexeres Problem ist in zwei Dimensionen durch die schräge Reflexion einer Mach 10 Stoßfront gegeben, wie sie als Testproblem von Woodward & Colella (1984) zuerst vorgeschlagen wurde und auch von Stone & Norman (1992) beschrieben wird. Dabei wird eine senkrecht verlaufende Stoßfront an einer Ebene mit 30° Steigung reflektiert. Vor der Stoßfront ist das homogene Gas mit einer Dichte $\rho_1 = 1.4$ und mit dem Druck $P_1 = 1.0$ ($\gamma = 1.4$) in Ruhe. Das Gas hinter der von links kommenden Stoßfront hat die vertikal zur Stoßfront

¹Siehe neben Stone & Norman (1992) auch Hawley et al. (1984) für ausführliche *Sod Shock-Tube Tests* in der Astrophysik gebräuchlicher Algorithmen.



Abbildung 5.1.3: Dichtekonturlinien zum schrägen Stoßproblem mit einer räumlichen Auflösung von 240×60 Gitterzellen zum Zeitpunkt t = 0.2. Die in einigen Linien auftretenden Wellen können vermutlich auf die Interpolationsroutinen des Plotprogramms zurückgeführt werden.

gerichtete Geschwindigkeit von 8.25 und damit, den Rankine-Hugoniotschen Sprungbedingungen entsprechend (z.B. Hirsch 1990), eine Dichte von $\rho_2 = 8$ und einen Druck von $P_2 = 116.5$. Das Rechengebiet ist 3 Einheiten breit und eine Einheit hoch und ist 30° gegenüber der Horizontalen angewinkelt, so dass die Stoßfront am Unterrand des Rechengebietes reflektiert werden kann (vgl. Abbildung 5.1.2).

Über das Gebiet wird ein Gitter von 240×60 Zellen gespannt. Als Anfangsbedingung wird in einem Winkel von 60° eine Kontaktdiskontinuität durch das Rechengebiet gelegt, die sich ausgehend vom Unterrand bei x = 1/6 in einer geraden Linie zum Oberrand erstreckt. Am linken Rand und am unteren Rand von x = 0 bis 1/6 werden alle Größen konstant auf die analytische Lösung hinter der Stoßfront gesetzt. Von x = 1/6 bis 3 herrschen am Unterrand reflektierende Bedingungen und am rechten Rand wird Ausfluss ermöglicht. Am Oberrand wird die analytische Lösung zeitabhängig vorgegeben (siehe Stone & Norman 1992 für Details zur Implementierung der Randbedingungen).

Dieses Testproblem wurde mit dem modifizierten ZEUS-Algorithmus behandelt. Abbildung 5.1.3 zeigt die aus der numerischen Simulation mit dem van Leer Transportverfahren erhaltenen Dichtekonturlinien zum Zeitpunkt t = 0.2. Alle wesentlichen Features des komplexen Netzes von Stoßwellen sind deutlich aufgelöst und das Ergebnis stimmt mit den von Stone & Norman (1992) durchgeführten Rechnungen überein.

5.2 Stabilitäts- und Effizienztests

5.2.1 Geschlossener Scheibenring

Um die Stabilitätseigenschaften des *Physical Splitting-* mit denen des Druckkorrekturverfahrens in Anwendung auf Strömungen niedriger Machzahlen in Akkretionsscheiben zu vergleichen, wurde ein geschlossener Ring eines eindimensionalen, isothermen Scheibenmodells untersucht. Dazu wurden die Gleichungen für die Flächendichte

$$\partial_t \Sigma + \frac{1}{r} \partial_r (r \Sigma v_r) = 0 \; ,$$

für den in z integrierten Radialimpuls

$$\partial_t \Sigma v_r + \frac{1}{r} \partial_r (r \Sigma v_r^2) - \Sigma r \omega \left(2\Omega_k + \omega \right) + \partial_r P - \frac{2}{3} \partial_r \frac{\mu}{r} \partial_r (r v_r) + \frac{v_r}{r} \partial_r \mu = 0$$

5.2. STABILITÄTS- UND EFFIZIENZTESTS

und den Drehimpuls im mitrotierenden System mit $\omega = \Omega - \Omega_K$

$$\partial_t (\Sigma \omega r^2) + \frac{1}{r} \partial_r (r(\Sigma \omega r^2) v_r) + \frac{1}{2} \rho v_r r \Omega_{\rm K} - \frac{1}{r} \partial_r \left(\nu \Sigma r^3 \partial_r \omega \right) - \frac{1}{r} \partial_r \left(\nu \Sigma r^3 \partial_r \Omega_K \right) = 0,$$

berechnet (vgl. Abschnitt 2.1). Der Druck ist durch die Zustandsgleichung

$$P(\Sigma) = \frac{\Sigma kT}{\mu_{\rm m} m_{\rm H}}$$

mit der Temperatur $T = {\rm const.}$ und dem mittleren Molekulargewicht $\mu_{\rm m} = 2$ gegeben. Die Viskosität wird durch das α -Modell (2.1.38) beschrieben.

Als Anfangsbedingung wird ein Gas mit homogener Dichte über einen Radius von $1 \dots 1.2$ AE verteilt. Das Rechengebiet wird mit 250 Gitterzellen diskretisiert. Die Randbedingungen sind so gewählt, dass weder Masse noch Drehimpuls aus dem Rechengebiet hinaus getragen wird, d.h. es wirkt keine Viskosität an den Rändern und die Radialgeschwindigkeit ist dort konstant gleich Null gesetzt.



Abbildung 5.2.4: Verlauf der logarithmischen Flächendichte Σ (links) und der Umlauffrequenz Ω (rechts) zu den Zeiten (1) t=0 (Anfangsbedingung), (2) $t \approx 1000$ a und (3) $t \approx 5000$ a. Den Randbedingungen entsprechend bilden sich jeweils am Innen- und Außenrand hydrostatische Atmosphären aus.

Das Modell wurde sowohl mit dem *Physical Splitting* als auch mit dem Druckkorrekturverfahren berechnet. In Abbildung 5.2.4 ist die zeitliche Entwicklung der Simulationsergebnisse anhand der Flächendichte und der Umlauffrequenz zu drei verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Nach Beginn der Simulation bewirkt die Viskosität ein Absinken der Umlauffrequenz am Innen- bzw. deren Zunahme am Außenrand. Dies hebt das Kräftegleichgewicht der ursprünglich fliehkraftunterstützten Scheibe auf. Materie driftet daraufhin von den zentralen Radien des Ringes an die Innen- und Außenränder und bildet dort jeweils Atmosphären aus.

In der Flächendichte und der Umlaufsfrequenz waren keine wesentlichen Unterschiede in den Ergebnissen der beiden Verfahren zu bemerken. So ergab sich beim Vergleich nach $t \approx 1.6 \cdot 10^4$ a eine Abweichung in der Flächendichte Σ von ca. 0.1%. Der Gesamtdrehimpuls L ist beim *Physical Splitting* Verfahren exakt erhalten, beim Druckkorrekturverfahren liegt die Änderung nach $t = 10^4$ a bei etwa $\Delta L/L \sim 10^{-5}$.

Die Radialgeschwindigkeit variiert hingegen sichtlich in Abhängigkeit von der Wahl eines Verfahrens. Der Verlauf der Machzahl $M = v_r/c_s$ wird in Abbildung 5.2.6 gezeigt. Offensichtlich bilden sich bei Anwendung des *Physical Splitting* Verfahrens Störungen aus, die



Abbildung 5.2.5: Zeitschrittentwicklung: (1) *Physical Splitting*-Verfahren, (2) Druckverfahren mit expliziter bzw. (3) mit impliziter Berechnung des Drehimpulses. Der Zeitschritt wird durch die Konvergenz des Verfahrens limitiert.

auf numerisch erzeugte Schallwellen zurückzuführen sind, während der Verlauf, der sich mit dem Druckkorrekturverfahren ergibt, vollkommen glatt ist.

Diese Schallwellen sind vermutlich auch für die vergleichsweise schlechte Stabilität des *Physical Splitting* Verfahrens verantwortlich. In Abbildung 5.2.5 sind die Zeitschrittentwicklungen dreier Verfahren gezeigt, wie sie sich bei Anwendung einer Zeitschrittweitensteuerung ergibt. Hierbei wurden nur die globalen Defekte der numerischen Lösungen, nicht deren Fehler berücksichtigt. Die Courantzahl C ist hier als das Maximum über die Courantzahlen C_c , C_v und C_v zu verstehen. Die Schrittweiten des *Physical Splitting* Verfahrens (1) gehen über eine Courantzahl von 1 nicht hinaus, während mit dem Druckkorrekturverfahren bei expliziter Behandlung der Drehimpulsgleichung (2) Courantzahlen von ca. 15 und bei impliziter Drehimpulsberechnung (3) Courantzahlen von ca. 43 erreicht werden.



Abbildung 5.2.6: Radialer und zeitlicher Verlauf der Machzahl $M = v_r/c_s$ mit dem *Physical Splitting* Verfahren (links) und dem Druckkorrekturverfahren (rechts) in Zeiteinheiten von $t_0 = 0.16$ a. Die durch das *Physical Splitting* Verfahren generierten Schallwellen werden hier sichtbar, während die mit dem Druckkorrekturverfahren berechnete Machzahl vollkommen glatt verläuft.

Eine Verbesserung der Stabilitätseigenschaften des *Physical Splitting* Verfahrens bei einer Erweiterung auf 2D-Probleme trat erwartungsgemäß nicht ein. Dabei wurden unterschiedliche Randbedingungen implementiert, so dass auch quasi-stationäre Akkretionsflüsse untersucht werden konnten. Trotz mehrfacher globaler Iterationen der Gleichungen konnten für derartige Modelle keine Schrittweiten mit Courantzahlen größer als 1 erreicht werden, häufig lagen sie über eine Größenordnung darunter.

5.2.2 Modelle von Scheiben um Schwarze Löcher

Im Rahmen seiner Doktorarbeit erweiterte Gracia (2002) eine 1D Version des vorliegenden Hydrodynamik-Codes mit implementierten *Physical Splitting* Verfahren um die Strahlungstransportgleichung in der Diffusionsnäherung. Mit dem Code wurde ein Modell für den Akkretionsfluss von Scheiben um schwarze Löcher berechnet (Gracia et al. 2003).

Die in Aktiven Galaktischen Kernen und Röntgenbinärsystemen beobachteten Spektren weisen neben der Schwarzkörperkomponente, die sich durch das Standardscheibenmodell nach Shakura & Sunyaev (1973) erklären läßt (vgl. Abschnitt 2.1.3), eine weitere harte Röntgenkomponente auf, die auf ein heißes, optisch dünnes Plasma im inneren Scheibenbereich zurückgeführt wird. Derartige Bedingungen treten in advektionsdominierten Akkretionsflüssen auf (ADAF, siehe Narayan et al. 1998).

In der Modellrechnung von Gracia et al. (2003) zur Simulation einer solchen bimodalen Scheibe wird das Scheibenmodell radial in zwei Bereiche aufgeteilt. Der äußere Bereich der Scheibe entspricht einer optisch dicken Standardscheibe mit einer effizienten Kühlung durch Strahlung, während der innere, optisch dünne Bereich der Scheibe durch radiale Advektion und turbulente Konvektion gekühlt wird. Aus der zeitabhängigen Simulation des Scheibenmodells ergab sich, dass die radiale Position des Grenzbereiches äußerst variabel ist und Oszillationen in der Keplerzeitskala auftreten, die sich in der Gesamthelligkeit der Scheibe widerspiegeln und möglicher Weise einen Mechanismus für quasi-periodische Oszillationen (QPO, siehe Nowak & Lehr 1998) in Röntgenbinärsystemen darstellen.

Die instationären, bimodalen Akkretionsflüsse, in denen Machzahlen von $M \lesssim 10$ auftraten, konnten ohne Berücksichtigung der Strahlungsdiffusion mit Courantzahlen von etwa $C \sim 10$ berechnet werden, wobei $C^2 := C_c^2 + C_v^2 + C_v^2$. Mit einer semi-impliziten Berechnung der Strahlungsdiffusionsgleichung lagen die Courantzahlen bei $C \sim 1$ (Gracia, persönliche Mitteilung). Neben der Simulation bimodaler Akkretionsscheiben wurden mit dem vorliegenden Code ausführliche Tests anhand von Problemstellungen zur Bondi-Akkretion und ADAF-Scheiben in 1D-Zylinderkoordinaten erfolgreich durchgeführt (Gracia 2002). Bei der alleinigen Behandlung von ADAF-Scheiben ohne Übergang in ein Standardscheibenmodell konnten im Rahmen dieser Testläufe Courantzahlen von $C \sim 10^3$ erreicht werden.

5.2.3 Driven Cavity

Als Test für die Stabilität des Druckkorrekturverfahrens in der Anwendung auf Strömungen niedriger Machzahlen, wurde ein abgeschlossener Kasten in kartesischen Koordinaten, in dem ein stationärer Fluss angeregt wird, untersucht. Dieses Problem wird *Driven Cavity* genannt.

Als Anfangsbedingung wird Gas der Dichte $\rho=1$ homogen und in Ruhe in einem Kasten verteilt. Die Temperatur ist mitT=100K ebenfalls konstant. Die Viskosität wurde $\nu=10^{-2}$ gesetzt. Die Bewegung des Gases wird durch die Randbedingung des unteren Randes angetrieben, an dem die Dirichletbedingung $v_x^{\rm R}=10^{-4}c_{\rm s}$ gewählt wurde. Diese Bewegung pflanzt sich durch die viskosen Kräfte in die inneren Bereiche des Kastens fort.

Weiter gelten homogene Dirichletbedingungen für die jeweils vertikal zum Rand stehenden Geschwindigkeitskomponenten v_{\perp} und homogene von Neumann Bedingungen für



Abbildung 5.2.7: Driven Cavity mit einer Auflösung von 80×80 nicht äquidistanten Gitterzellen nach t = 2.2 und ca. $6.2 \cdot 10^4$ Zeitschritten.

die parallele Komponente v_{\parallel} , mit der bereits erwähnten Ausnahme für $v_x^{\rm R}$ am Unterrand. Für die Druckkorrekturgleichung wurde für den geschlossenen Rand homogene von Neumann Randbedingungen gewählt (siehe z.B. Hirsch 1990). Das Problem wurde mit einer isothermen Zustandsgleichung behandelt. Für die Tests wurde eine globale Defekttoleranzschwelle von 10^{-4} gewählt.

In Abbildung 5.2.7 ist das Geschwindigkeitsprofil einer *Driven Cavity* mit einer Auflösung von 80×80 nicht äquidistanten Gitterzellrändern nach t = 2.2 und ca. $6.2 \cdot 10^4$ Zeitschritten dargestellt. Die Viskosität und die 1. Ordnung *Upwind* Advektionsterme wurden, wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben, implizit bzw. semi-implizit behandelt. Zur Zeitdiskretisierung wurden $\theta_1 = 0.5$ und $\theta_2 = 1$ gewählt. Zum Zeitpunkt des Programmabbruchs war die Schrittweite durch die automatische Zeitschrittsteuerung noch steigend und die Courantzahlen lagen bei $C_v \approx 0.06$, $C_c \approx 8 \cdot 10^2$ und $C_{\nu} \approx 8 \cdot 10^3$.

Mit geringerer Auflösung von 20×20 Gitterzellen wurde die Rechnung solange fortgesetzt, bis sich eine Sättigung der Zeitschrittweite einstellte. Dabei wurden unabhängig davon, ob der Transport explizit oder semi-implizit behandelt wurden, mit einer Defekttoleranz von 10^{-4} Courantzahlen von $C_v \approx 9 \cdot 10^3$, $C_c \approx 1.4 \cdot 10^8$ und $C_\nu \approx 1.8 \cdot 10^8$ erreicht. Mit einer explizit behandelten van Leer-Advektion 2. Ordnung lagen die maximalen Courantzahlen bei etwa $C_v \approx 1.5$, $C_c \approx 2.5 \cdot 10^4$ und $C_\nu \approx 3.2 \cdot 10^4$.

5.2.4 Modellierung eines isothermen Scheibenrings

Rechnungen mit dem Druckkorrekturverfahren

Beschreibung der Modellrechnung In diesem Abschnitt wird ein zweidimensionaler Ausschnitt eines isothermen Scheibenmodells mit dem Druckkorrekturverfahren berechnet. Die Simulation wird auf einem gestaffeltem Finite Volumen Gitter in Kugelkoordinaten durchgeführt. Die Drehimpulsgleichung wird dabei im mitrotierenden System formuliert (siehe Gleichung 2.1.22). Testrechnungen mit der Druckkorrekturgleichung im raumfesten System waren weniger stabil und konnten deswegen nur mit erhöhtem Zeitaufwand berechnet werden.

Das Gebiet der Testrechnung verläuft von r = 1 bis 2 AE und $\theta = 82$ bis 90°, was einer Höhe von z = 0.15 AE am Innenrand und 0.3 AE am Außenrand entspricht ($\theta = 90^{\circ} = z = 0$). Das Gebiet wurde mit 80×60 Gitterzellen aufgelöst. Für das verallgemeinerte Crank-Nicolson-Verfahren (2.2.50) wurden $\theta_1 = 0.5$ und $\theta_2 = 1$ verwendet, womit das Verfahren mindestens 1. Ordnung in der Zeit ist. Der Transport wird mit dem van Leer-Verfahren 2. Ordnung berechnet.

 Tabelle 5.2.2: Parameter zur Berechnung des isothermen Scheibenmodells.

α	M_{\star}	\dot{M}_r	$T_{1\mathrm{AU}}$	λ	$\mu_{ m m}$	γ
0.01	$1 {\rm ~M}_{\odot}$	$10^{-6} \frac{M_{\odot}}{a}$	10^3 K	1	$\frac{7}{3}$	1.4

Vorliegendes Beispiel wurde mit den Parametern aus Tabelle 5.2.2 gerechnet, wobei λ und T_{1AE} den radialen Temperaturgradienten

$$T(r) = T_{1AE} \left(\frac{r}{1AE}\right)^{-\lambda}$$

festlegen. Die übrigen Größen wurden bereits in Abschnitt 2.1.3 eingeführt.

Mit den Parametern aus Tabelle 5.2.2 wurden Anfangs- und Randbedingungen aus der stationären Einzonennäherung abgeleitet. Der Drehimpuls wurde für die Anfangs- und Randbedingungen aus Gleichung (2.1.20) und (2.1.29) näherungsweise mit

$$\frac{1}{\sin^2\theta}(h^2 - k^2) - \partial_r P = 0$$
 (5.2.1)

bestimmt. Für die Radialgeschwindigkeit gelten innen, außen und oben ($\theta = 82^{\circ}$) Dirichlet und in der Scheibenebene von Neumann Randbedingungen. Für die Vertikalgeschwindigkeit gelten oben und in der Scheibenebene homogene Dirichlet und innen und außen homogene von Neumann Randbedingungen. Für den Druck und die Umlaufsgeschwindigkeit wurden in der Scheibenebene homogene von Neumann, ansonsten Dirichlet Randbedingungen gewählt.

Die Rechnung konnte nach einer Relaxationsphase bei einer Defekttoleranz von 10^{-3} mit Courantzahlen von $C_v \sim 0.14$, $C_c \sim 25$ und $C_\nu \sim 60$ durchgeführt werden.

Vergleich mit der analytischen Näherungslösung Das Ergebnis der numerischen Rechnung nach Erreichen eines quasistationären Zustandes kann mit einer analytischen Näherungslösung verglichen werden, die in Kapitel 6 hergeleitet wird. Terme $\sim \sqrt{R_{\star}/r}$ werden



Abbildung 5.2.8: Verlauf der radialen Geschwindigkeitskomponente v_r (cgs): In der Simulation (hier nach der Relaxationsphase zum Zeitpunkt $t \approx 10^3$ a) stellt sich der Verlauf unabhängig von Rand- oder Anfangsbedingungen in guter Übereinstimmung mit der analytischen Näherung ein. Abweichungen können auf die inkonsistenten Randbedingungen, sowie auf Schwingungen der nicht gänzlich relaxierten zeitabhängigen Simulation zurückgeführt werden.



Abbildung 5.2.9: Verlauf der analytischen Lösung für den Radialimpuls p_r (cgs) im Vergleich mit der numerischen Simulation. Die Dirichlet Randbedingungen entsprechen einer in z konstanten Einflussgeschwindigkeit.
hier vernachlässigt, was formal einem verschwindenden Sternradius R_{\star} entspricht und für Testzwecke keine gravierende Einschränkung darstellt.

Sei *s* der Radius und ζ die Höhe des Ortsvektors in Einheiten von AE. Aus Gleichung (6.1.19) ergibt sich damit als analytischer Wert für die Radialgeschwindigkeit

$$v_r \left[\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}}\right]^{-1} \approx 59.4 \, s^{-\frac{1}{2}} - 5.96 \cdot 10^4 \zeta^2 s^{-\frac{5}{2}}$$
 (5.2.2)

bzw. für den lokalen, radialen Massenfluss, der dem Radialimpuls $p_r(z,r) \equiv \rho v_r$ entspricht,

$$p_r \left[\frac{g}{cm^2 s}\right]^{-1} \approx \left\{9.44 \cdot 10^{-8} s^{-2} - 9.42 \cdot 10^{-5} \zeta^2 s^{-4}\right\} \cdot \exp(-125 \zeta^2 s^{-2}) .$$
 (5.2.3)

In den Abbildungen 5.2.8 und 5.2.9 sind die numerischen Ergebnisse nach der Relaxationsphase zusammen mit den stationären, analytischen Näherungslösungen (5.2.2) und (5.2.3) dargestellt. Abgesehen von einer dünnen Randschicht von etwa 5 bis 10 Gitterzellen entlang der Ränder stimmen die analytische Näherung und die numerische Rechnung der vollständigen Gleichungen gut miteinander überein. Dies bestätigt die richtige Implementierung der numerischen Gleichungen in Kugelkoordinaten.

Globale Erhaltungseigenschaften In der Modellrechung wurden, ausgehend von einem weitgehend relaxierten Modell, die Randbedingungen für den Massefluss so gewählt, dass sich Einwärts- und Auswärtsdrift exakt kompensieren. Durch die numerische Näherung der Druckkorrekturgleichung varriiert die Gesamtmasse in diesem Modell nach Beginn der Rechnung um einen Faktor ~ $2 \cdot 10^{-5}$ und geht nach Erreichen einer quasi-stationären Lösung auf $\Delta M/M \sim 10^{-10}$ zurück.

Rechnungen mit dem modifizierten ZEUS-Algorithmus

Die im letzten Abschnitt beschriebene Rechnung wurde mit dem modifizierten ZEUS-Algorithmus und semi-impliziter Behandlung der Viskosität im raumfesten System über einen limitierten Zeitabschnitt wiederholt. Dabei blieb das Verfahren für Courantzahlen von $C_c = 1$ und $C_{\nu} \approx 24$ stabil. Durch den geringeren Rechenaufwand im Vergleich mit dem des Druckkorrekturverfahrens ist das modifizierte ZEUS-Verfahren bei der Berechnung eines Scheibenmodells bei vergleichbaren Zeitschrittweiten um bis zu etwa einen Faktor 5 schneller.

Durch einen Dämpfungsfaktor f_d , der zum Viskositätskoeffizienten μ in den Gleichungen für die meridionalen Impulskomponenten hinzumultipliziert wird (Gleichungen 3.1.14 und 3.1.15), kann das System schneller einen quasi-stationären Zustand erreichen. Außerdem stabilisiert eine solche Dämpfung das modifizierte ZEUS-Verfahren zumindest in einigen Fällen erheblich. Mit $f_d = 10$ konnten in Abhängigkeit von der Gebietsauflösung Courantzahlen von bis zu $C_c = 10$ und $C_{\nu} \approx 200$ erreicht werden, wohingegen das Druckkorrekturverfahren durch den Dämpfungsfaktor nicht stabilisiert werden konnte. Feste Dirichlet Randbedingungen für den Fluss an den Innen- und Außenrändern scheinen für die Stabilität des modifizierten ZEUS-Verfahrens am verträglichsten zu sein.

Die implizite Behandlung der viskosen Terme im modifizierten ZEUS-Verfahren bedarf eines Zusatzes an CPU-Zeit von etwa 10 - 20 % pro Zeitschritt. Es hat sich herausgestellt,

dass selbst bei expliziter Behandlung der viskosen Terme $C_{\nu} \leq 1$ nach Definition (2.2.60) keine scharfe Grenze für die Stabilität des modifizierten ZEUS-Verfahrens ist. So blieb der Code für Schrittweiten mit $C_{\nu} \sim 2$ stabil. Daher können Probleme mit kleinen Viskositätskoeffizienten oder grober Auflösung effizienter mit einer expliziten Viskosität berechnet werden. In Fällen mit $\delta t_{\nu} \ll \delta t_{c}$ ist die semi-implizite Behandlung der Viskosität die schnellere Methode.



Abbildung 5.2.10: Zeitliche Entwicklung der Massenakkretionsrate mit inneren Randbedingungen entsprechend Gleichung (5.2.5) berechnet mir dem modifizierten ZEUS-Algorithmus. Nach 7000 a ist die Abweichung von der analytische Lösung $\Delta \dot{M}_r / \dot{M}_r \sim 10^{-8}$.

Stationäre Randbedingungen Alternativ zur festen Vorgabe des Materieein- und ausflusses an den Innen- und Außenrändern wurde eine Randbedingung getestet, die sich aus der Forderung der Stationarität der Drehimpulsgleichung ergibt. Gleichung (2.1.14) kann dazu im stationären Limit und unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung (2.1.1) zu

$$\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla v_3 = \operatorname{div}\left(h_3 \boldsymbol{\tau}_{(3)}\right) \tag{5.2.4}$$

umformuliert werden. Daraus wird die innere Randbedingung

$$p_r^{\rm R} = \frac{1}{\partial_r h} \operatorname{div}\left(r\sin\theta\boldsymbol{\tau}_{\phi}\right) - \frac{\partial_{\theta} h}{\partial_r h} \frac{p_{\theta}}{r}$$
(5.2.5)

für den Radialimpuls p_r in Kugelkoordinaten abgeleitet. Bei Anwendung homogener Dirichlet Randbedingungen $p_{\theta}^{\rm R} := (\rho v_{\theta})^{\rm R} = 0$ für die poloidale Impulskomponente p_{θ} entfällt der zweite Term auf der rechten Seite in Gleichung (5.2.5). Am Außenrand wurde gemäß der stationären Lösung aus Abschnitt 2.1.3 eine konstante Einwärtsdrift von Materie vorgegeben. Für die Drehimpulskomponente im nicht-mitrotierenden System $H := \rho h$ und für die Dichte ρ wurden inhomogene Dirichlet Randbedingungen angewandt. In der Scheibenmittelebene wurde, wie bereits im vorigen Abschnitt, $p_{\theta} = 0$ gesetzt, für die übrigen Größen wurden dort homogene von Neumann Randbedingungen gewählt. Eine Rechnung wurde mit 80×60 äquidistanten Gitterpunkten über ein Gebiet von r = 1 bis 2 AE und $\theta = 74.2$ bis 90° und dem modifizierten ZEUS-Verfahren durchgeführt. Die übrigen Parameter können aus Tabelle 5.2.2 entnommen werden.

Mit einem Dämpfungsfaktor von $f_d = 10$ konnten mit diesen Randbedingungen Courantzahlen von $C_c \sim 4$ ($C_{\nu} \sim 50$) erreicht werden, ohne Dämpfung ($f_d = 1$) wurde die Rechnung mit $C_c \sim 1$ durchgeführt. Der Algorithmus scheint mit einer Randbedingung nach Gleichung (5.2.5) etwas weniger stabil zu sein als mit zeitlich konstanten Dirichlet Randbedingungen für die Masseein- bzw. auswärtsdrift. Trotz des glatten Verlaufes der in vertikaler Richtung gemittelten, radialen Massenflussenrate bilden sich am Innenrand lokal starke Gradienten in der radialen Geschwindigkeit $v_r(z)$.

In Abbildung 5.2.10 wird der zeitliche und radiale Verlauf der numerisch berechneten radialen Massenakkretionsrate \dot{M}_r gezeigt. Nach 7000 a ist die Abweichung von der analytische Lösung $\Delta \dot{M}_r / \dot{M}_r \sim 10^{-8}$. Nach 9000 a bleibt der Fehler mit $\Delta \dot{M}_r / \dot{M}_r \sim 10^{-11}$ konstant, entsprechend der gewählten Toleranzschwelle für den Defekt zur Berechnung der viskosen Terme, TOL = 10^{-11} .

5.3 Diskussion der Ergebnisse

In den Abschnitten 5.1.1, 5.1.2 und 5.2.4 wurde gezeigt, dass mit den in dieser Arbeit implementierten Modulen zur Berechnung der räumlich diskretisierten Matrixeinträge und Terme, auf die innerhalb des vorliegenden 2D-Hydrocodes von verschiedenen Zeitintegrationsalgorithmen zurückgegriffen werden kann, bekannte Lösungen korrekt wiedergegeben werden. Damit wurde eine vielseitige Basis für eine Vielzahl von Algorithmen zur Zeitintegration von partiellen Differentialgleichungen auf zweidimensionalen Tensorproduktgittern geschaffen.

Wie Test- und Modellrechnungen von Hujeirat & Rannacher (1998), gezeigt haben, ist mit dem *Physical Splitting* ein geeignetes Verfahren zur Lösung der hydrodynamischen Gleichungen mit Strahlungsdiffusion für Akkretionsscheiben um kompakte Objekte gegeben, wenn in den Modellen Strömungen hoher Machzahlen mit $M \sim 10^1 \dots 10^2$ dominieren. Dieses Ergebnis wurde mit einer um die Strahlungsdiffusionsgleichung erweiterten Version des vorliegenden Codes von Gracia (2002) und Gracia et al. (2003) bestätigt (Abschnitt 5.2.2).

Strömungen in protostellaren Scheiben mit Machzahlen von $M \ll 1$, konnten mit dem *Physical Splitting* Verfahren hingegen nicht effizient berechnet werden. Wie aus der Numerik inkompressibler Strömungen bekannt ist (z.B. Bijl & Wesseling 1998), kann es durch solche Verfahren zur Erzeugung von Schallwellen kommen, und eine stabile Integration der hydrodynamischen Gleichungen für Schrittweiten mit $C_c > 1$ ist selbst mit hohem Rechenaufwand nicht möglich (Abschnitt 5.2.1).

Mit dem aus inkompressiblen Verfahren abgeleiteten Druckkorrekturverfahren konnten für ein einfaches Testproblem zu einer gegebenen Defekttoleranzschwelle Zeitschrittweiten von $C_c \sim 10^8$ erreicht werden. Relaxierte Modelle protostellarer Scheiben konnten im mitrotierenden System stabil mit Zeitschrittweiten, die der advektiven Zeitskala δt_v entsprechen, gerechnet werden ($C_v \sim 0.14$, $C_c \sim 25$ und $C_\nu \sim 60$). Im quasi-stationären Zustand sind Gesamtmasse auf einen Faktor $\sim 10^{-10}$ genau erhalten, bei nicht-relaxierten Modellen können die Erhaltungsgrößen um einen Faktor $\lesssim 10^{-3}$ variieren.

Auch das modifizierte ZEUS-Verfahren, wie in Abschnitt 3.1.3 beschrieben, hat sich, insbesondere bei der Verwendung einer Dämpfung für die meridionalen Impulskomponenten $(f_{\rm d}>1)$, als außerordentlich stabil und effizient erwiesen. Bis zum Erreichen einer relaxierten, quasi-stationären Lösung könnte in zukünftigen Modellrechnungen so das modifizierte ZEUS-Verfahren mit seinen exakten Erhaltungseigenschaften verwendet werden und die Rechnung anschließend mit dem Druckkorrekturverfahren fortgeführt werden.

Kapitel 6

Materialtransport in protostellaren Scheiben

Flussstrukturen in α -Scheiben können erheblich von den gemittelten Radialgeschwindigkeiten aus dem Standard-Einzonenmodell abweichen (Urpin 1984). Dies kann von großer Relevanz für die Stoffdurchmischung in protostellaren Scheiben sein.

In Abschnitt 6.1 werden Teilergebnisse von Urpin (1984) noch einmal hergeleitet und die Rechnungen für geometrisch dünne, optisch dicke protostellare Scheiben weitergeführt. Es werden dazu isotherm geschichtete α -Scheiben mit einem einfachen radialen Temperaturverlauf betrachtet. Die Übereinstimmung der analytischen Näherung mit einer zeitabhängigen, numerischen Lösung der vollständigen hydrodynamischen Gleichungen wurde bereits in Abschnitt 5.2.4 gezeigt.

In Abschnitt 6.2 wird mit der analytisch hergeleiteten Flussstruktur die Konsequenzen für den Stofftransport in α -Scheiben im Vergleich mit dem Einzonenmodell semi-analytisch untersucht (Keller & Gail 2003), bevor schließlich in Abschnitt 6.3 eine numerische Modellrechnung präsentiert wird.

6.1 Strömungen in isothermen α -Scheiben

6.1.1 Meridionale Strömungen

Um aus einer analytischen Näherung die meridionale Flussstruktur zu bestimmen, erweiterte Urpin (1984) die eindimensionalen Scheibengleichungen der Einzonennäherung um Terme 2. Ordnung und wandte diese auf Scheiben um schwarze Löcher nach Modellen von Shakura & Sunyaev (1973) an. Dabei ergab sich, dass sich Materie im Bereich der Scheibenebene vom Zentralobjekt weg bewegt, die positive, radiale Geschwindigkeitskomponente in z quadratisch abfällt und in einer bestimmten Höhe das Vorzeichen wechselt, so dass von dort an Materie nach innen fließt. Die deutlich geringere Vertikalgeschwindigkeit wechselt in der selben Höhe die Richtung und bewegt sich in Äquatornähe von der Scheibenebene weg und in den hohen Schichten zur Scheibenebene hin (vgl. Abbildung 1.2.1). Im Mittel übertrifft im Urpinschen Modell die einfließende Masse die auswärtsdriftende um das 4...5-fache. Die Nettodrift entspricht der Massenakkretionsrate aus den eindimensionalen Modellen. Kley & Lin (1992) lösten numerisch die zweidimensionalen, hydrodynamischen Gleichungen mit Strahlungstransport für Scheiben in kataklysmischen Veränderlichen während der Ausbruchphase. Sie beobachteten in ihren Modellen eine großskalige Zirkulation mit Auswärtsdrift in der Scheibenebene unabhängig von den von ihnen implementierten Randbedingungen, allerdings nur für hinreichend kleine Viskositätsparameter α . Ausgehend von einem radiativen Gleichgewicht schlossen sie ihren numerischen Rechnungen eine analytische Näherung an, in der in einem Separationsansatz die Lösungen der stationären Scheibengleichung in einen radialen und einen vertikalen Anteil entwickelt wurden. Daraus berechneten sie einen kritischen Wert als Obergrenze für α von $\alpha_c \approx 0.06$, ab dem weitere Terme in den Impulsgleichungen wichtig werden und die von Urpin verwendeten Näherungen nicht mehr zutreffen. Die Flussrichtung ist dann für alle z nach innen gerichtet. Der Wert für α_c sowie der analytisch berechnete Verlauf der meridionalen Flussstruktur ist in guter Übereinstimmung mit den Resultaten ihrer numerischen Modelle, in denen ein Ausschnitt einer Scheibe um einen Weißen Zwerg für Radien $< 30R_{\star}$ berechnet wurde.

Der qualitative Verlauf der Flussstruktur, wie von Urpin (1984) beschrieben, wurde auch von Różyczka et al. (1994) in einer Arbeit über protostellare Scheiben bestätigt. In ihrer qualitativen Analyse vernachlässigen sie allerdings vertikale Gradienten der Umlaufgeschwindigkeit im Reibungstensor, wodurch ihre Näherung inkonsistent wird. Die Analyse der genäherten Gleichungen wird durch eine zweidimensionale, numerische Simulation protostellarer Scheiben in der Strahlungsdiffusionsnäherung ergänzt. Sie berücksichtigen dabei Staub- und Molekülopazitäten bei Temperaturen unter 3000 K.

Auch sie beobachten eine Auswärtsdrift in der Scheibenmittelebene. Obwohl sich die mittleren, radialen Massenakkretionsraten von den Ergebnissen der Einzonenmodellen nicht unterscheiden, verläuft die Radialgeschwindigkeit in der zweidimensionalen Rechnung von $v_r(z)|_{z=0} \sim 0.01$ km s⁻¹ in der Scheibenmittelebene bis ~ -0.1 km s⁻¹ in höheren Schichten, während die eindimensionalen Modelle bei entsprechenden Parametern eine in z gemittelte Radialgeschwindigkeit von $\langle v_r \rangle \sim -0.03$ km s⁻¹ vorhersagen (negatives Vorzeichen bedeutet Einwärtsdrift).

Die meridionalen Ströme treten für den untersuchten Wertebereich von $0.05 < \alpha < 0.25$ auf, werden aber in den wärmeren, inneren Bereichen (r < 0.5 AE) durch die dort dominierenden, thermischen Konvektionsströmungen abgelöst. Die Autoren wendeten die Parameter ihres protostellaren Scheibenmodells auf die analytische Abschätzung für $\alpha_{\rm c}$ nach Kley & Lin (1992) an und erhielten ein $\alpha_{\rm c} \approx 0.12$. Dennoch beobachten sie in ihren numerischen Simulationen auch bei $\alpha = 0.25$ keine Flussumkehr der Auswärtsdrift in der Scheibenmittelebene.

Niedrige Werte von α hingegen können nach Różyczka et al. (1994) unter Berücksichtigung von Strahlungstransport zu einer die Flussstruktur dominierenden Konvektion führen. Dies ergibt sich aus dem Stabilitätskriterium, Gleichung (13) in ihrer Arbeit, welches ursprünglich von Kley et al. (1993) abgeleitet wurde. Kley et al. (1993) beobachten Instabilität in ihrem Scheibenmodell für Werte von $\alpha = 10^{-3}$, nicht aber für $\alpha = 10^{-2}$, in Übereinstimmung mit den Modellen von Różyczka et al. (1994). Nach den Modellrechnungen von Różyczka et al. (1994) dominiert in Scheibenregionen innerhalb 0.5 AE die Konvektionsströmung die Flussstruktur selbst für sehr große Werte von α .

In einer aktuelleren Arbeit berechnen Regev & Gitelman (2002) mit einem semianalytischen Modell inklusive Strahlungstransport in Eddington-Näherung und Opazitäten für Elektronenstreuung bzw. Kramers Opazität einen Stagnationsradius r_{stag} als Funktion von α . Dabei wurden konvektive Instabilitäten nicht berücksichtigt. Der Stagnationsradius unterteilt die Scheibe in einen inneren Bereich, in dem die Radialgeschwindigkeit für alle z nach innen gerichtet ist, und einen Bereich außerhalb von $r_{\rm stag}$, in dem die meridionale Flussstruktur mit Auswärtsdrift in der Scheibenmittelebene auftritt. Sie definieren ihr kritisches $\alpha_{\rm c}$ dadurch, dass $r_{\rm stag} \rightarrow \infty$ für $\alpha \rightarrow \alpha_{\rm c}$ und erhalten $\alpha_{\rm c} \gtrsim 0.7$. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit der analytischen Lösung, die Kluźniak & Kita (2000) für ein polytropes Scheibenmodell erhalten. Derartig hohe α -Werte werden für protostellare Scheiben nicht erwartet, so dass für diese Objekte $\alpha \ll \alpha_{\rm c}$ angenommen werden kann.

Regev & Gitelman (2002) folgern, dass es sich bei der meridionalen Flussstruktur nicht um ein thermisches Phänomen handelt, sondern um ein rein dynamisches. Diese Vermutung wird sowohl durch ihre Beobachtung bestätigt, dass die Scheibenstruktur zwar abhängig von der Wahl der Opazität ist, nicht aber die Flussstruktur oder der Stagnationsradius, als auch von der im folgenden Abschnitt durchgeführten Näherung, die trotz der Annahme einer isothermen Schichtung in einer Lösung mit meridionaler Strömung resultiert.

Da meridionale Strömungen Lösung einer Vielzahl unterschiedlicher Modelle sind, kann vermutet werden, dass es sich bei dem Phänomen gleichzeitiger Ein- und Auswärtsdrift in Akkretionsscheiben um eine reale und universelle Erscheinung handelt.

6.1.2 Grundgleichungen

Die Gleichungen des folgenden, analytischen Scheibenmodells werden wie im Einzonenmodell (Abschnitt 2.1.3) in axialsymmetrischen Zylinderkoordinaten hergeleitet. In diesem Koordinatensystem lautet die Kontinuitätsgleichung (2.1.1)

$$\partial_t \rho + \partial_z \rho v_z + \frac{1}{r} \partial_r r \rho v_r = 0 .$$
(6.1.1)

Die Kontinuitätsgleichung eingesetzt in die Impulsgleichungen (2.1.23) - (2.1.25), liefert Ausdrücke für die Geschwindigkeitskomponenten. Mit ihrem vollständig ausgeschriebenen Viskositätstensor lautet dann die Gleichung für Vertikalkomponente der Geschwindigkeit

$$\partial_t v_z + v_z \partial_z v_z + v_r \partial_r v_z = -\frac{1}{\rho} \partial_z P - \partial_z \Phi + \frac{1}{\rho} \left(\frac{4}{3} \partial_z (\mu \partial_z v_z) + \frac{1}{r} \partial_r (\mu r \partial_r v_z) - \frac{2}{3r} \partial_z (\mu \partial_r (rv_r)) + \frac{1}{r} \partial_r (\mu r \partial_z v_r) \right).$$

$$(6.1.2)$$

Die Gleichung für die Radialgeschwindigkeit lautet

$$\partial_t v_r + v_z \partial_z v_r + v_r \partial_r v_r = \frac{v_{\phi}^2}{r} - \frac{1}{\rho} \partial_r P - \partial_r \Phi + \frac{1}{\rho} \left(\partial_z (\mu \partial_z v_r) + \frac{4}{3r} \partial_r (\mu r \partial_r v_r) - \frac{2}{3r} \partial_r (\mu v_r) + \frac{2\mu}{3r^2} \partial_r (rv_r) - \frac{\mu}{r^2} v_r + \partial_z (\mu \partial_r v_z) - \frac{2}{3r} \partial_r (\mu r \partial_z v_z) + \frac{2\mu}{3r} \partial_z v_z \right)$$
(6.1.3)

und die Gleichung für den spezifischen Drehimpuls wird zu

$$\partial_t v_{\phi} r + v_z \partial_z v_{\phi} r + v_r \partial_r v_{\phi} r = \frac{r}{\rho} \partial_z \mu \partial_z v_{\phi} + \frac{1}{\rho r} \partial_r r^3 \mu \partial_r \frac{v_{\phi}}{r} .$$
 (6.1.4)

Das Gleichungssystem wird durch die ideale Gasgleichung (2.1.5) und das α -Modell für die Viskosität (2.1.38) geschlossen. Die isotherme Schallgeschwindigkeit c_s ist durch Gleichung (2.1.6) definiert.

Es wird von der Gültigkeit der dünnen Scheibennäherungen $\frac{c}{v_{\rm K}} \sim \frac{H_{\rm s}}{r} \sim \epsilon$ mit $\epsilon \ll 1$ (typischer Weise $\epsilon \approx 0.05 \dots 0.1$) ausgegangen (z.B. Pringle 1981). Außerdem wird $\frac{v_r}{c_{\rm s}} \sim \alpha \epsilon$ und $\frac{v_z}{c_{\rm s}} \sim \alpha \epsilon^2$ vorausgesetzt, was in den Abschnitten 6.1.4 bzw. 6.1.5 *a posteriori* begründet wird. In Abschnitt 6.1 werden ausschließlich stationäre Lösungen gesucht, daher werden Zeitableitungsterme nicht berücksichtigt. Im Folgenden werden für v_{ϕ} Näherungslösungen in 2. Ordnung Genauigkeit und für v_r und v_z Näherungen in 1. Ordnung hergeleitet.

6.1.3 Die Umlaufgeschwindigkeit

Die Radialimpulsgleichung 2. Ordnung

Werden Terme der Ordnung ϵ^3 und höher vernachlässigt, reduziert sich die stationäre Gleichung für die Radialgeschwindigkeit (6.1.3) zu

$$0 = \frac{v_{\phi}^2}{r} - \frac{1}{\rho} \partial_r P - \partial_r \Phi + \frac{1}{\rho} \partial_z (\mu \partial_z v_r).$$
(6.1.5)

Der aus dem viskosen Spannungstensors herrührende Term $\partial_z(\mu\partial_z v_r)$ ist von der Größenordnung $\alpha^2 \epsilon^2$ und daher in dieser Näherung nur für Werte von $\alpha^2 \lesssim \epsilon$ zu vernachlässigen. Da in protostellaren Scheiben von $\alpha \lesssim 10^{-2}$ ausgegangen wird (Abschnitt 2.1.3), kann der Term hier unberücksichtigt bleiben. Übersteigt α allerdings einen kritischen Schwellenwert α_c , so kann dieser Term zu einer deutlichen Änderung der Flussstruktur führen (Kley & Lin 1992; Regev & Gitelman 2002; siehe Abschnitt 6.1.1).

Die gravitative Kraft die ein Stern der Masse M_{\star} auf seine Umgebung ausübt ist durch den Gradienten des Potenzials (2.1.7) gegeben. Die radiale Komponente lautet in 2. Ordnung Genauigkeit

$$\partial_r \Phi = \frac{GM_{\star}}{r^2} - \frac{3}{2} \frac{GM_{\star}}{r^2} \left(\frac{z}{r}\right)^2 \,. \tag{6.1.6}$$

Nach zweimaliger Taylorentwicklung und mit $v_{\rm K} = \sqrt{\frac{GM_{\star}}{r}}$ wird Gleichung (6.1.5) dann zu

$$v_{\phi} = v_{\rm K} \left(1 - \frac{3}{4} \left(\frac{z}{r} \right)^2 + \frac{r^2}{2GM_{\star}\rho} \partial_r P \right) , \qquad (6.1.7)$$

in Übereinstimmung mit Urpin (1984). Unter Anwendung der Zustandsgleichung (2.1.5) ergibt sich

$$v_{\phi} = v_{\mathrm{K}} \left(1 - \frac{3}{4} \left(\frac{z}{r} \right)^2 + \left(\frac{1}{2} r \partial_r \ln \rho + r \partial_r \ln c_{\mathrm{s}} \right) \frac{H_{\mathrm{s}}^2}{r^2} \right) \,. \tag{6.1.8}$$

Um Ausdruck (6.1.8) in 2. Ordnung Genauigkeit zu berechnen, werden daher Modelle für die radiale Temperatur- und Dichteverteilung in 0. Ordnung Genauigkeit benötigt.

Das radiale Temperaturmodell

Mit dem Potenzgesetz $T \propto c_{\rm s}^2 \propto r^{-\lambda}$ kann der Ansatz

$$T(r) = T_{1AE} \left(\frac{r}{1AE}\right)^{-\lambda} , \qquad (6.1.9)$$

für den radialen Temperaturverlauf gemacht werden, wobei der Exponent λ und T_{1AE} , die Temperatur bei 1 AE, frei wählbare Parameter sind.

In isothermen Scheibenmodellen ist $\lambda = 0.75$ (z.B. Frank et al. 1992). Komplexere Modelle, die Strahlungsprozesse in Diffusionsnäherung und für protostellare Scheiben angemessene Staubopazitäten berücksichtigen, ergeben Zentraltemperaturverläufe entsprechend $\lambda \approx 1$ in Regionen, in denen mit Eis beschichtete Staubkörner die Opazität bestimmen und $\lambda \approx 0.62$ in Regionen, in denen die Opazität durch unbeschichtete Staubkörner dominiert wird. Die Zentraltemperaturen in protostellaren Scheiben bei 1 AE liegen in der Größenordnung von $T_{1AE} \sim 10^3$ K (z.B. Gail 2001).

Sei s der Radius und ζ die Höhe des Ortsvektors in Einheiten von AE. Die relative Scheibendicke $H_{\rm s}/r$ ist dann durch die Gleichung

$$\frac{H_{\rm s}}{r} = \frac{c_{\rm s}}{v_{\rm K}} = \left(\frac{r}{GM_{\star}}\frac{kT}{\mu_{\rm m}m_{\rm H}}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx 6.315 \cdot 10^{-2}s^{\frac{1}{2}(1-\lambda)} \left(\frac{T_{\rm 1AE}}{10^{3}K}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{\star}}{M_{\odot}}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu_{\rm m}}{7/3}\right)^{-\frac{1}{2}}$$
(6.1.10)

gegeben. Offensichtlich ist sie für $\lambda = 1$ konstant im Radius s.

Die Azimuthalgeschwindigkeit in 2. Ordnung

Um in Gleichung (6.1.8) die radiale Ableitung der logarithmierten Dichte zu bestimmen, kann auf die Ergebnisse des stationären Einzonenmodells aus Abschnitt 2.1.3 zurückgegriffen werden. Mit Gleichung (2.1.34) ergibt sich in 1. Näherung

$$r\partial_r \ln \rho = r\partial_r \ln \rho_c + \left(\frac{3}{2} + r\partial_r \ln c_s\right) \frac{z^2}{H_s^2} .$$
(6.1.11)

Eingesetzt in (6.1.8) hebt sich der 2. Term direkt mit dem Gravitationsterm 2. Ordnung auf, und es bleibt

$$v_{\phi} = v_{\rm K} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{H_{\rm s}^2}{r^2} r \partial_r \ln \rho_{\rm c} + \left(\frac{1}{2} \frac{z^2}{r^2} + \frac{H_{\rm s}^2}{r^2} \right) r \partial_r \ln c_{\rm s} \right) .$$
(6.1.12)

Zur Berechnung der radialen Ableitung der Zentraldichte $r\partial_r \ln \rho_c$ kann nun die stationäre Lösung (2.1.46) aus dem Einzonenmodell herangezogen werden. In 1. Ordnung folgt für die Ableitung der Zentraldichte

$$r\partial_r \ln \rho_{\rm c} = -3(1+r\partial_r \ln c_{\rm s}) + \frac{1}{2}f(r) ,$$

wobei f(r) durch die Gleichung

$$f(r) := \left(\sqrt{\frac{r}{R_{\star}}} - 1\right)^{-1}$$
(6.1.13)

definiert ist.

Unter Verwendung des Temperatur
modells (6.1.9) ergibt sich für die Schallgeschwindigkei
t $c_{\rm s}$

$$r\partial_r \ln c_{\rm s} = -\frac{1}{2}\lambda , \qquad (6.1.14)$$

so kann nun der radiale Verlauf der Dichte aus Gleichung (6.1.11) mit

$$r\partial_r \ln \rho = -3\left(1 - \frac{1}{2}\lambda\right) + \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\lambda\right)\frac{z^2}{H_s^2} + \frac{1}{2}f(r)$$
(6.1.15)

berechnet werden.

Unter der Annahme, dass nur ausreichend vom Zentralstern entfernte Radien r betrachtet werden, so dass $R_{\star}/r \sim \epsilon$ gilt, ergibt sich mit dem Temperaturmodell (6.1.9) die Gleichung für die Azimuthalgeschwindigkeit in 2. Ordnung

$$v_{\phi} = v_{\rm K} \left(1 - \lambda_r \frac{c_{\rm s}^2}{v_{\rm K}^2} - \frac{1}{4} \lambda \frac{z^2}{r^2} \right) , \qquad (6.1.16)$$

wobei

$$\lambda_r := \frac{1}{4} \left(6 - \lambda - \sqrt{\frac{R_\star}{r}} \right)$$

Für die z-Ableitungen der Umlaufgeschwindigkeit ergibt sich damit

$$\partial_z v_\phi = -\frac{1}{2} \lambda v_{\rm K} \frac{z}{r^2} ,$$

$$\partial_z^2 v_\phi = -\frac{1}{2} \frac{\lambda v_{\rm K}}{r^2} .$$
(6.1.17)

Die Azimuthalgeschwindigkeit ist also niemals konstant in der Vertikalen, solange es in radialer Richtung einen Temperaturgradienten ($\lambda \neq 0$) gibt.

6.1.4 Der radiale Fluss

Die Radialgeschwindigkeit

Durch die Gleichungen (6.1.17) kann die Größenordnung der vertikalen v_{ϕ} -Ableitungen in der Drehimpulsgleichung (6.1.4) abgeschätzt werden. Die stationäre Drehimpulsgleichung, aufgelöst nach der Radialgeschwindigkeit, lautet damit in 1. Ordnung Genauigkeit

$$v_r = \frac{2}{v_{\rm K}} \left(\frac{r}{\rho} \partial_z \mu \partial_z v_\phi + \frac{1}{\rho r} \partial_r r^3 \mu \partial_r \frac{v_\phi}{r} \right)$$

in Übereinstimmung mit Urpin (1984). Siemiginowska (1988) und Różyczka et al. (1994) hingegen vernachlässigen in ihrer Analyse den 1. Term auf der rechten Seite.

72

Unter Anwendung des Temperaturmodells (6.1.9) und den Ergebnissen aus Abschnitt 6.1.3 kann die Radialgeschwindigkeit in 1.Ordnung berechnet werden, und man erhält

$$v_r = \alpha \left[3 - \frac{5}{2}\lambda - \frac{3}{2}f(r) - \frac{1}{2}(9 - 5\lambda) \left(\frac{z}{H_s}\right)^2 \right] \left(\frac{H_s}{r}\right) c_s , \qquad (6.1.18)$$

wobe
if(r)bereits durch Gleichung (6.1.13) definiert wurde. Man beachte, dass alle in Gleichung (6.1.18) aufgeführten Terme von derselben Ordnung in
 ϵ sind. Offensichtlich ist wie in den vorangegangenen Abschätzungen vorausgesetz
t v_r von der Größenordnung $\sim \alpha \epsilon c_{\rm s}$.

Mit den in AE normierten Ortsvektorkomponenten (s, ζ) lautet die Gleichung für die Radialgeschwindigkeit in cgs-Einheiten

$$v_r \left[\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}}\right]^{-1} \approx 3.564 \cdot 10^2 \cdot \left(1 - \frac{5}{6}\lambda\right) \cdot s^{\frac{1}{2} - \lambda} \cdot \left(\frac{\alpha}{10^{-2}}\right) \left(\frac{T_{1\mathrm{AE}}}{10^3 K}\right) \left(\frac{M_\star}{M_\odot}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu_{\mathrm{m}}}{7/3}\right)^{-1}$$
$$-1.341 \cdot 10^5 \cdot \left(1 - \frac{5}{9}\lambda\right) \cdot \frac{\zeta^2}{s^{\frac{5}{2}}} \cdot \left(\frac{\alpha}{10^{-2}}\right) \left(\frac{M_\star}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{6.1.19}$$

bzw. für die Machzahl $M_r = v_r/c_{\rm s}$ der radialen Geschwindigkeitskomponente

$$M_{r} \approx 1.91 \cdot 10^{-3} \left(1 - \frac{5}{6}\lambda\right) s^{\frac{1}{2}(1-\lambda)} \cdot \left(\frac{\alpha}{10^{-2}}\right) \left(\frac{T_{1AE}}{10^{3}K}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{\star}}{M_{\odot}}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu_{m}}{7/3}\right)^{-\frac{1}{2}} -0.714 \left(1 - \frac{5}{9}\lambda\right) s^{\frac{1}{2}(\lambda-5)} \zeta^{2} \cdot \left(\frac{\alpha}{10^{-2}}\right) \left(\frac{T_{1AE}}{10^{3}K}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{\star}}{M_{\odot}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu_{m}}{7/3}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(6.1.20)

In der Scheibenmittelebene (z = 0) hat die Lösung (6.1.18) für $v_r(r, z)$ folgende Eigenschaften: Für $r \to R_{\star}$ wird der Term $-\frac{3}{2}f(r)$ groß und negativ. Daher gilt in den Scheibeninnenregionen $v_r(r, 0) < 0$, d.h. es stellt sich eine *Einwärtsdrift* der Materie in der Mittelebene der Scheibe ein. Für $r \gg R_{\star}$ geht der Term $-\frac{3}{2}f(r)$ gegen Null und es ist $v_r(r, 0) > 0$, vorausgesetzt $\lambda < \frac{6}{5}$. Deswegen ist in den äußeren Scheibenbereichen $v_r(r, 0) > 0$, d.h. es gibt eine *Auswärtsdrift* in der Scheibenmittelebene.

Es muss also ein Stagnations radius existieren, an dem $v_r(r_{\text{stag}}, 0) = 0$. Aus Gleichung (6.1.18) findet man

$$\frac{r_{\text{stag}}}{R_{\star}} = \left(\frac{9-5\lambda}{6-5\lambda}\right)^2 \,. \tag{6.1.21}$$

In Scheibenregionen innerhalb des Stagnationsradius, ist die Radialgeschwindigkeit für alle z nach innen gerichtet. In Scheibenregionen, die außerhalb des Stagnationsradius liegen, fällt die nach außen gerichtete, positive Radialgeschwindigkeit in z quadratisch ab, bis sie in der Höhe

$$z_0 = z_\lambda H_{\rm s}$$
 : $z_\lambda := \sqrt{\frac{6 - 5\lambda - 3f(r)}{9 - 5\lambda}}$ (6.1.22)

verschwindet und darüber hinaus negativ wird. Es gilt also für $r > r_{stag}$

$$v_r(z) \begin{cases} > 0 & \text{für} \quad |z| < z_0 \\ = 0 & \text{für} \quad |z| = z_0 \\ < 0 & \text{für} \quad |z| > z_0 \end{cases}$$
(6.1.23)

Die Auswärtsdrift in der Umgebung der Scheibenmittelebene wird damit durch eine Einwärtsdrift in höheren Schichten abgelöst. In Abbildung 6.1.4 ist ein typisches Beispiel für eine derartige Flussstruktur dargestellt.



Abbildung 6.1.1: Der logarithmische Stagnationsradius r_{stag} in Einheiten von Sternradien R_{\star} und in Abhängigkeit vom Exponenten λ des radialen Temperaturverlaufs $T \propto r^{-\lambda}$. Für $\lambda \to 1.2$ divergiert r_{stag} . Eine Auswärtsdrift ist nur für Werte $\lambda < 1.2$ zu erwarten.

Im Unterschied zu Regev & Gitelman (2002) ist der Stagnationsradius (6.1.21) unabhängig von α , da in der vorliegenden Näherung nur kleine $\alpha^2 < \epsilon$ betrachtet werden (vgl. Abschnitt 6.1.3). Für $\lambda \to \frac{6}{5}$ geht $r_{\text{stag}} \to \infty$, und die Auswärtsdrift verschwindet für $\lambda \geq \frac{6}{5}$ in der gesamten Scheibe. Der Verlauf von r_{stag} in Abhängigkeit von λ ist in Abbildung 6.1.1 dargestellt. Für $\lambda = 1$ bzw. $\lambda = 0.75$ ergeben sich beispielsweise Stagnationsradien von $r_{\text{stag}} = 16$ bzw. $5.4 R_{\star}$. Die Stagnationsradien liegen also innerhalb der Regionen, in denen in protostellaren Scheiben Silikate bereits verdampfen und in denen die dünne Scheibennäherung ungültig wird. Daraus lässt sich schließen, dass Material aus den heissen Scheibeninnenbereichen, in denen Staub kristallisieren kann, in kalte Außenregionen transportiert wird, in denen Kristallisation nicht möglich ist.

In Tabelle 6.1.1 sind zur Orientierung einige Radien mittlerer Planetenbahnen im Sonnensystem und für protoplanetare Scheiben charakteristische Verdampfungsradien aufgeführt. Nach den Modellen aus Abschnitt 6.3 findet die Kristallisation von Olivin vornehmlich bei einem Radius von etwa ≤ 0.8 AE statt.

Der Quotient aus den Gleichungen (6.1.18) und (2.1.47) ergibt das Verhältnis der Radialgeschwindigkeiten aus der Näherung höherer Ordnung (Abbildung 6.1.4) mit der gemit-

Tabelle 6.1.1: Verdampfungsradien in einer protoplanetaren Scheibe mit den Modellparametern $\dot{M} = 10^{-7} \,\mathrm{M_{\odot}/a}$, $\alpha = 3 \cdot 10^{-3}$, $R_{\star} = 3.69 \,R_{\odot}$ für Korund (Al₂O₃), Olivin ((Fe, Mg)₂[SiO₄]) und Eis (H₂O) nach Gail (2003) und die mittleren Planetenbahnen im Sonnensystem von Merkur , Venus , Erde , Mars , Jupiter + und Saturn h.

	Verdampfungsradien				Planetenbahnen					
	Korund	Olivin	Eis	Ϋ́	Ŷ	đ	o^	4	ħ	
AE	$9.93\cdot 10^{-2}$	0.57	5.47	0.39	0.72	1.00	1.52	5.20	9.55	
R_{\star}	5.80	33.3	319							

telten Geschwindigkeit der Einzonennäherung (Abbildung 6.1.5) z.B. für $\lambda = 1$

$$\frac{v_r}{\langle v_r \rangle} = -\frac{1}{3} + f(r) + \frac{4}{3} \left(\frac{z}{H_s}\right)^2 \,. \tag{6.1.24}$$

Für Radien mit $\sqrt{\frac{R_{\star}}{r}} \rightarrow 0$ gilt in der Scheibenebene $v_r = -\frac{1}{3} \langle v_r \rangle$ in Übereinstimmung mit den numerischen Ergebnissen von Różyczka et al. (1994), vgl. Abschnitt 6.1.1.

Massetransportraten

Der nach außen gerichtete Massenfluss \dot{M}_r^- in der Zentralregion der Scheibe im Bereich $|z| < z_0$ berechnet sich unter Ausnutzung der Symmetrie um die Scheibenebene aus

$$\begin{split} \dot{M}_{r}^{-} &:= -2\pi r \int_{-z_{0}}^{+z_{0}} \rho v_{r} \, \mathrm{d}z \\ &= \dot{M}_{r} \left(1 - \sqrt{\frac{R_{\star}}{r}} \right) \left[(1 + f(r)) \, \Phi\left(\frac{z_{\lambda}}{\sqrt{2}}\right) - \frac{2}{\sqrt{18\pi}} (9 - 5\lambda) \, z_{\lambda} \, e^{-\frac{z_{\lambda}^{2}}{2}} \right] \,, \end{split}$$

wobei die Fehlerfunktion $\Phi(z)$ im Anhang (A.3) erklärt ist, und die Gleichungen (A.3.39)-(A.3.40) zur Darstellung der Integrale verwendet wurden; z_{λ} ist durch Gleichung (6.1.22) definiert. Daraus folgt erwartungsgemäß für den nach innen gerichteten Massetransport der höheren Schichten $|z| > z_0$

$$\dot{M}_r^+ := -2\pi r \cdot 2 \int_{z_0}^\infty \rho v_r \, \mathrm{d}z = \dot{M}_r - \dot{M}_r^- ,$$

was bedeutet, dass die Gesamtmassenakkretionsrate M_r mit der des Einzonenmodells identisch ist.

Durch die Reihenentwicklung (A.3.35) der Fehlerfunktion Φ kann eine Massenausflussrate für große Radien $r \gg R_{\star}$ als Funktion von λ durch die Gleichung

$$\dot{M}_{r}^{-}(\lambda) = \dot{M}_{r} z_{\lambda} \quad \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{z_{\lambda}}{\sqrt{2}} \right)^{2} + \frac{1}{10} \left(\frac{z_{\lambda}}{\sqrt{2}} \right)^{4} - \frac{1}{42} \left(\frac{z_{\lambda}}{\sqrt{2}} \right)^{6} - \frac{1}{3} (9 - 5\lambda) e^{-z_{\lambda}^{2}/2} \right]$$
(6.1.25)



Abbildung 6.1.2: Ein- und Ausflussraten \dot{M}_r^- und \dot{M}_r^+ aus der Näherung höherer Ordnung für große Radien $r \gg R_{\star}$, in Einheiten der Gesamtmassenakkretionsrate \dot{M}_r , die aus dem Einzonenmodell resultiert. Die Netto-Akkretionsrate ist $\dot{M}_r^- + \dot{M}_r^+ = \dot{M}_r$.

angegeben werden. Die Funktion für den Massenausfluss (6.1.25) ist zusammen mit der entsprechenden Masseneinflussrate $\dot{M}_r^+(\lambda)$ in Abbildung 6.1.2 in Abhängigkeit von λ dargestellt. Die Zahlenwerte die sich aus dieser Gleichung ergeben, sind für typische Werte von λ in Tabelle 6.1.2 aufgeführt: Für $\lambda = 1$, werden etwa 9 % des Nettoflusses nach außen getragen, 25 % für $\lambda = 0.75$ und 34 % für $\lambda = 0.62$.

Tabelle 6.1.2: Ein- und Ausflussraten in großen Radien $r \gg R_{\star}$ für typische Werte von λ .

λ	1	0.75	0.62	
\dot{M}_r^-/\dot{M}_r	-0.087	-0.250	-0.344	
\dot{M}_r^+/\dot{M}_r	1.087	1.250	1.344	

6.1.5 Die Vertikalgeschwindigkeit

Die Kontinuitätsgleichung (6.1.1) lautet im stationären Limit und in Zylinderkoordinaten

$$\partial_z \rho v_z + \frac{1}{r} \partial_r r \rho v_r = 0. \qquad (6.1.26)$$

Dies kann als gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}p_z}{\mathrm{d}z} = R(z) \tag{6.1.27}$$

für den Vertikalimpuls $p_z := \rho v_z$ und einer bekannten rechten Seite

$$R(z) := -\frac{1}{r}\partial_r r\rho v_r$$

angesehen werden. Mit der Symmetriebedingung $p_z(z) \vert_{z=0} = 0$ hat Gleichung (6.1.27) die Lösung

$$p_z(z) = \int_0^z R(z') \, \mathrm{d}z' \,. \tag{6.1.28}$$

Damit dieses Integral gelöst werden kann, wird zunächst der Term

$$\frac{R(z)}{\rho} = -v_r \left(\frac{1}{r} + \partial_r \ln \rho\right) - \partial_r v_r$$
(6.1.29)

mit Hilfe des Temperaturmodells (6.1.9) ausgewertet. Mit Gleichung (6.1.18) kann die radiale Ableitung der Radialgeschwindigkeit v_r zu

$$\partial_r v_r = \frac{\alpha}{r} \left[\left(3 - \frac{5}{2}\lambda \right) \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) + \frac{3}{4} \left(\sqrt{\frac{r}{R_\star}} f(r) - (1 - 2\lambda) \right) f(r) - \frac{5}{4} \left(9 - 5\lambda \right) \frac{z^2}{H_s^2} \right] \frac{c_s^2}{v_K} .$$
(6.1.30)

berechnet werden, die Ableitung der logarithmischen Dichte ist durch Gleichung (6.1.15) gegeben. Damit läßt sich Gleichung (6.1.29) als Polynom

$$\frac{R(z)}{\rho} = \frac{1}{H_{\rm s}} \left[a + b \left(\frac{z}{H_{\rm s}} \right)^2 + c \left(\frac{z}{H_{\rm s}} \right)^4 \right] c_{\rm s}$$
(6.1.31)

mit den Koeffizienten

$$a := \frac{\alpha}{4} \left(\frac{H_{\rm s}}{r}\right)^2 \left[(3-\lambda)(6-5\lambda) - (15-8\lambda)f(r) - 3f(r)^3 \right] ,$$

$$b := -\frac{\alpha}{4} \left(\frac{H_{\rm s}}{r}\right)^2 \left[(3-\lambda)(33-20\lambda) - 2(9-4\lambda)f(r) \right] ,$$

$$c := \frac{\alpha}{4} \left(\frac{H_{\rm s}}{r}\right)^2 (3-\lambda)(9-5\lambda)$$
(6.1.32)

auffassen. Mit den Größen $\alpha = 10^{-2}$, $M_{\star} = M_{\odot}$, $\mu_{\rm m} = 7/3$, $T_{\rm 1AE} = 10^3$ K, $\lambda = 1$ ergibt sich für die Koeffizienten a, b und c für sehr große Radien ($f(r) \rightarrow 0$) beispielsweise

$$a = 1.994 \cdot 10^{-3}$$
, $b = -2.5922 \cdot 10^{-4}$, $c = 7.975 \cdot 10^{-3}$.

Die Differentialgleichung (6.1.27) lautet nun

$$\frac{\mathrm{d}p_z}{\mathrm{d}z} = \frac{\rho_{\rm c}c_{\rm s}}{H_{\rm s}} \left[a \, e^{-\frac{z^2}{2H_{\rm s}^2}} + b \, \left(\frac{z}{H_{\rm s}}\right)^2 e^{-\frac{z^2}{2H_{\rm s}^2}} + c \, \left(\frac{z}{H_{\rm s}}\right)^4 e^{-\frac{z^2}{2H_{\rm s}^2}} \right] \,. \tag{6.1.33}$$

Mit der Fehlerfunktion Φ und den Gleichungen (A.3.39)-(A.3.41) ergibt sich für die Lösung der Integralgleichung (6.1.28) zum Radius r

$$p_{z}(z) = a\sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}H_{s}}\right) \rho_{c}c_{s} + b\left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}H_{s}}\right) - \frac{z}{H_{s}}e^{-\frac{z^{2}}{2H_{s}^{2}}}\right) \rho_{c}c_{s} + c\left(3\sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}H_{s}}\right) - \left(3\frac{z}{H_{s}} + \left(\frac{z}{H_{s}}\right)^{3}\right)e^{-\frac{z^{2}}{2H_{s}^{2}}}\right) \rho_{c}c_{s} = (a + b + 3c)\rho_{c}c_{s}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}H_{s}}\right) - \left[b + c\left(3 + \left(\frac{z}{H_{s}}\right)^{2}\right)\right]\frac{z}{H_{s}}c_{s}\rho_{c}e^{-\frac{z^{2}}{2H_{s}^{2}}}.$$
(6.1.34)

Für die Vertikalgeschwindigkeit gilt dann wegen Gleichung (A.3.38) und in 1. Ordnung Genauigkeit

$$v_{z}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}(a+b+3c)c_{s}e^{\frac{z^{2}}{2H_{s}^{2}}} - \sqrt{\frac{\pi}{2}}(a+b+3c)(a_{1}t+a_{2}t^{2}+a_{3}t^{3})c_{s} - \left[(b+3c)\frac{z}{H_{s}} + c\left(\frac{z}{H_{s}}\right)^{3}\right]c_{s}.$$
(6.1.35)

Also gilt auch wie vorausgesetzt $v_z \sim \alpha \epsilon^2 c_s$.



Abbildung 6.1.3: Vertikaler Verlauf der Machzahl $M_z = v_z/c_s$ (durchgezogene Linie) und des mit der Zentraldichte und Schallgeschwindigkeit zum Radius r normierten Impulses $p_z/\rho_c c_s$ (gestrichelte Linie) für $\lambda = 1$ und sehr große Radien $r \gg R_*(f(r) \rightarrow 0)$. Der vertikale Fluss wird als Randbedingung in der Äquatorialebene (z = 0) gleich Null gesetzt. In der stationären Lösung ergibt sich nahe dem Äquator ein Fluss von der Scheibenebene weg, der gemeinsam mit dem radialen Fluss bei z_λ das Vorzeichen wechselt und von dort an zur Mittelebene gerichtet ist.



Abbildung 6.1.4: Analytischer Geschwindigkeitsverlauf in einem Scheibenausschnitt für die Parameter $\lambda = 0.75, \alpha = 0.01, R_{\star} = 1 R_{\odot}, M_{\star} = 1 M_{\odot}, T(1 AU) = 1000 K, \dot{M}_r = 1 \cdot 10^{-7} M_{\odot}/a.$



Abbildung 6.1.5: Die vertikal gemittelte Flussstruktur der Einzonennäherung (vgl. Abbildung 6.1.4).

Die Machzahl $M_z \equiv v_z/c_s$ zur Vertikalgeschwindigkeit v_z ist zusammen mit dem durch $\rho_c c_s$ skalierten Vertikalimpuls p_z in Abbildung 6.1.3 dargestellt. Eine typische Flussstruktur, die sich für die beiden Geschwindigkeitskomponenten v_r und v_z ergeben kann, ist in Abbildung 6.1.4 zu sehen. Sie kann mit der Strömung der Einzonennäherung, dargestellt in Abbildung 6.1.5, verglichen werden.

6.2 Ein semi-analytisches Transportmodell

In Abschnitt 6.1 wurde gezeigt, dass Akkretionsflüsse in Scheiben nicht notwendiger Weise ausschließlich nach innen gerichtet sind. Unter Bedingungen, die in protostellaren Scheiben wahrscheinlich sind ($\lambda \lesssim 1$), setzt sich die Netto Massenakkretionsrate aus einem Anteil, der nach außen driftet, und einem die Gesamtakkretionsraten dominierenden, nach innen gerichteten Anteil zusammen.

Die in der Scheibenmittelebene nach außen gerichtete, radiale Massenadvektion kann Material aus den warmen, inneren Scheibenregionen in die äußeren, kalten Bereiche tragen. Dies hat Auswirkungen auf die Zusammensetzung der Körper, die in den äußeren Bereichen gebildet werden, da diese Material enthalten können, welches aus den inneren Regionen stammt.

In Akkretionsscheiben werden Turbulenzen für viskose Prozesse verantwortlich gemacht. Dabei kann die advektive Auswärtsdrift durch diffusiven Transport überlagert werden. Dieser Prozess kann ebenso wie die Advektion dazu führen, dass Materie aus den inneren Regionen in die kalten Außenbereiche gemischt wird (z.B. Morfill 1983; Gail 2001; Wehrstedt & Gail 2002, und dort aufgeführte Referenzen).



Abbildung 6.2.6: Skizze der Durchmischungsprozesse in einem Scheibenausschnitt.

Hinzu kommt noch eine vertikale Durchmischung durch Diffusion, und in sehr viel geringerem Maße durch Advektion, die Material aus der nach außen gerichteten Strömung der Scheibenmittelebene in die entgegengesetzte Einwärtsströmung höherer Schichten mischt (Abbildung 6.2.6). Der vertikale Durchmischungsprozess glättet lokale Gradienten in der Stoffkonzentration eines Tracers, die sich bei ausschließlicher Betrachtung radialer Durchmischung bilden würden. Daher muss die gekoppelte Wirkung turbulenter Diffusion und meridionaler Strömung in zwei Raumrichtungen untersucht werden.

6.2.1 Die Modellrechnung

Die Tracergleichung

Um den diffusiven als auch advektiven Transport eines Tracers in einer meridional durchfluteten Scheibe zu simulieren, wird die zeitabhängige Tracertransportgleichung

$$\partial_t nc + \nabla \cdot nc \, \boldsymbol{v} = \nabla \cdot \frac{n\nu}{S_{\rm dg}} \nabla c$$
 (6.2.36)

in axialsymmetrischen Kugelkoordinaten numerisch gelöst. Hierbei bedeutet n die gesamte Teilchendichte, c die Tracerkonzentration und S_{dg} die Schmidtzahl eines Staubtracers niedriger Dichte, eingebettet in einem Trägergas. Die Schmidtzahl wird durch

$$S_{\rm dg} = 1$$

approximiert (siehe Gail 2001; Wehrstedt & Gail 2002). Der zweite Term auf der linken Seite der Tracergleichung (6.2.36) beschreibt die Advektion, die mit dem diffusiven Term auf der rechten Seite konkurriert.

Schmidtzahlen $S_{\rm dg} < 1$ werden den diffusiven Anteil des Transports stärker betonen, und die meridionale Strömung verliert an Bedeutung. Ist $S_{\rm dg} > 1$, wird der Transport weniger diffusiv, und die Advektion übernimmt die Oberhand.

Im Idealfall muss Gleichung (6.2.36) mit zusätzlichen, hier nicht berücksichtigten Gewinnund Verlustraten für eine bestimmte Menge unterschiedlicher Staubsorten jeweils gelöst werden. Das daraus resultierende Gleichungssystem muss dann mit den Gleichungen der Strahlungshydrodynamik gekoppelt werden. Derartig aufwendige Modellrechungen werden in Zukunft angestrebt.

Um einen Einblick in die Bedeutung meridionaler Flussstrukturen für den Transport von Tracern zu erhalten, soll nun die Tracergleichung (6.2.36) kombiniert mit den analytischen Lösungen des Strömungsfeldes v(r, z), die in den Advektionsterm eingesetzt wird, gelöst werden. So können die qualititativen Ergebnisse, die aus der Flussstruktur des Standard-Einzonenmodells (SEZ), Gleichung (2.1.47), mit denen verglichen werden, die aus der Näherung höherer Ordnung (NHO) resultieren, Gleichungen (6.1.18) und (6.1.35).

Das Rechengebiet

Gleichung (6.2.36) wird auf einem gestaffelten, in radialer Richtung logarithmisch äquidistanten Gitter mit 100× 80 Zellen mit einem vollimpliziten Rückwärts-Eulerverfahren gelöst. Das Rechengebiet umfasst einen Radius von 0.1 bis 100 AE und einen Winkel von $\theta = 72$ bis 90°.

Um die zeitlich konstante Produktion eines Tracers an einem bestimmten Radius $r_{\rm src}$ in der Scheibenmittelebene zu simulieren, wurde an der Gitterzelle dieser Position eine Dirichlet Randbedingung als Punktquelle für die fundamentale Größe (nc) implementiert. Die Randbedingung wurde so gewählt, dass bei einer konstanten Teilchendichte n die Tracerkonzentration konstant bei c = 0.01 liegt. An den Rändern der übrigen Randzellen der Scheibenebene herrschen von Neumann Randbedingungen (Abbildung 6.2.7).

6.2.2 Ergebnisse

Tracertransport bei konstantem Temperaturprofil

Mittelt man die Tracerkonzentration c in vertikaler Richtung, so erhält man die Flächenkonzentration

$$C = \frac{2}{\int_{-\infty}^{\infty} n \mathrm{d}z} \int_{0}^{\infty} nc \,\mathrm{d}z \,. \tag{6.2.37}$$



Abbildung 6.2.7: Skizze der implementierten Randbedingung, die eine konstante Tracerproduktion in der Scheibenmittelebene bei $r_{\rm src} = 1$ AE simuliert.

Die Flächenkonzentrationen, die sich zu einem bestimmten Satz Parametern (Tabelle 6.2.3) aus den numerischen Modellrechnungen ergeben, sind in den Abbildungen 6.2.8 - 6.2.11 dargestellt. Die unterschiedlichen, aus den Modellen SEZ und NHO resultierenden Tracerkonzentrationen, können so zu verschiedenen Zeitpunkten für die Parameter $\lambda = 0.62, 0.75$ und $\lambda = 1$ miteinander verglichen werden (siehe Gleichung 6.1.9).

 Tabelle 6.2.3:
 Feste Parameter der Tracertransportsimulationen.

α	R_{\star}	M_{\star}	T_{1AE}	\dot{M}_r	$S_{\rm dg}$	$r_{\rm src}$
0.01	$3.5~{\rm R}_\odot$	$1 \; \rm M_{\odot}$	$10^3 {\rm K}$	$10^{-7} \frac{M_{\odot}}{a}$	1	1 AE

In Abbildung 6.2.8 werden die Ergebnisse für $\lambda = 1$ aufgeführt. Weder zum Zeitpunkt $t = 10^5$ a noch zu $t = 10^6$ a sind signifikante Unterschiede in den Tracerkonzentrationen zu erkennen. Offenbar dominiert die Diffusion den Tracertransport dermaßen, dass die Unterschiede in den advektiven Flüssen der Modelle SEZ und NHO keine Rolle spielen.

In den Abbildungen 6.2.9 und 6.2.10 sind die Ergebnisse für $\lambda=0.75$ jeweils zu den Zeitpunkten $t=10^5$ a und $t=10^6$ a dargestellt. Jetzt werden die Auswirkungen der unterschiedlichen Strömungsmodelle auf den Tracertransport im zunehmenden Maße deutlich. Nach $t=10^5$ a übertrifft die Tracerkonzentration C, die bei 100 AE aus dem NHO-Modell resultiert, die des SEZ-Modells um einen Faktor 14. Nach $t=10^6$ a ist die NHO-Konzentration bei 100 AE mit $C\approx 1.6\cdot 10^{-4}$ etwa um einen Faktor 20 größer als der Wert $C\approx 7.4\cdot 10^{-6}$ des SEZ-Modells.

Am deutlichsten werden die Unterschiede der Modelle für $\lambda = 0.62$. Die jeweiligen Ergebnisse nach $t = 10^6$ a sind in Abbildung 6.2.11 dargestellt. Bei 100 AE übertrifft C, berechnet mit dem NHO-Modell, das Ergebnis des SEZ-Modells etwa um einen Faktor 63. Dementsprechend vergehen in dem NHO-Modell für $\lambda = 0.75$ etwa $t \approx 5.3 \cdot 10^4$ a, um bei 20 AE eine Konzentration von $C = 10^{-4}$ zu erlangen. Dies ist nur etwas mehr als ein Viertel der Zeit von $2 \cdot 10^5$ a, die zum Erreichen derselben Konzentration bei 20 AE mit dem



Abbildung 6.2.8: Tracerkonzentrationen C für $\lambda = 1$ zu den Zeitpunkten $t = 10^5$ a und $t = 10^6$ a. Die Ergebnisse aus dem Strömungsmodell höherer Ordnung (NHO) unterscheiden sich kaum von denen einer vertikal gemittelten Strömung der Einzonennäherung (SEZ).



Abbildung 6.2.9: Tracerkonzentration C für $\lambda = 0.75$ zum Zeitpunkt $t = 10^5$ a. Die Konzentration C bei 100 AE die mit dem NHO-Modell berechnet wurden, übertrifft die des SEZ-Modells um etwa einen Faktor 14.



Abbildung 6.2.10: Tracerkonzentration C für $\lambda = 0.75$ zum Zeitpunkt $t = 10^6$ a. Die Konzentration C bei 100 AE die mit dem NHO-Modell berechnet wurden, übertrifft die des SEZ-Modells um etwa einen Faktor 20.



Abbildung 6.2.11: Tracerkonzentration C für $\lambda = 0.62$ zum Zeitpunkt $t = 10^6$ a. Die Konzentration C bei 100 AE die mit dem NHO-Modell berechnet wurden, übertrifft die des SEZ-Modells um etwa einen Faktor 63.

SEZ-Modell benötigt werden. Mit $\lambda = 0.62$ werden im NHO-Modell nur noch ca. $2.7 \cdot 10^4$ a benötigt, also ein Faktor 0.22 weniger als im SEZ-Modell bei dem $1.2 \cdot 10^5$ a vergehen, bevor eine Konzentration von $C = 10^{-4}$ bei 20 AE erreicht wird.

Der Viskositätsparameter α Die Abhängigkeit der meridionalen Flussstruktur von der Wahl des Parameters α wurde bereits ausführlich in Abschnitt 6.1.1 diskutiert. Zumindest formal behält für alle genügend kleine α das Geschwindigkeitsfeld aber seine qualitative Struktur bei. Dabei sind die Geschwindigkeitskomponenten v_r und v_z jeweils proportional zu α . Somit sind für beide Modelle, SOZ und NHO, die hier untersucht werden sowohl der Advektions- als auch der Diffusionsterm in den Gleichungen (6.2.36) und (6.3.42) proportional zu α , und letztlich auch die jeweiligen Zeitskalen die sich für die Durchmischungsprozesse in den Scheiben aus den Modellen ergeben. Die Unterschiede in der Tracerkonzentration, die sich beim Vergleich der beiden Modelle zu einem bestimmten Konzentrationsverlauf ergeben, sind hingegen unabhängig von α .

Kritische α -Werte, bei denen sich die Auswärtsdrift in der Scheibenmittelebene nach innen umkehrt, liegen mit $\alpha_c \gtrsim 0.7$ (Regev & Gitelman 2002) weit über dem, was für protostellare Scheiben erwartet wird. Auch Konvektionsströmungen, die die Flussstruktur der Innenbereiche protostellarer Scheiben bestimmen (Różyczka et al. 1994) mindern vermutlich nicht die Bedeutung, die meridionale Strömungen für den Tracertransport haben können. Tracer, die in den warmen Innenregionen der Scheibe entstehen, diffundieren in kühlere, weiter außen gelegene Regionen. Dort können wieder großskalige Flussstrukturen das Strömungsfeld bestimmen, und möglicher Weise auch den Transport von Tracern auf ihrem Weg in die Eiszonen der Scheibenaußenbereiche.

6.3 Tracertransport mit Annealing

6.3.1 Kristallisation von Silikatstaub

Interstellarer Silikatstaub liegt vorwiegend als Orthosilikat Mg_xFe_{2-x}SiO₄ und im amorphen Zustand vor (Mathis et al. 1977). Letzteres bedeutet, dass die Moleküle im Staubkorn nicht in einem Gitter, sondern ungeordnet positioniert sind. Steigt die Umgebungstemperatur über einen Grenzwert - in protostellaren Scheiben $T \gtrsim 800$ K (Duschl et al. 1996) beginnen sich die molekularen SiO₄-Grundeinheiten im Staubkorn neu zu arrangieren und in einer Gitterstruktur anzuordnen. Dieser Kristallisierungsprozess wird *Annealing* genannt.

Auch im amorphen Staub treten vereinzelt kleine Bereiche kristalliner Struktur auf, die als Kristallisationskeime wirken können, an die sich angeregte SiO_4 -Nachbarmoleküle nach Überwinden einer Potentialbarriere in einer energetisch günstigeren Gitterstruktur anlagern. Bleibt das Staubkorn lange genug einer ausreichend hohen Temperatur ausgesetzt, wird es schließlich vollständig kristallisiert (Gail 1998).

Der Zuwachs des Volumens $V_{\rm c}$ einer kristallisierten Region in einem Silikatstaubkorn ist näherungsweise durch

$$\frac{\mathrm{d}V_{\rm c}}{\mathrm{d}t} = 6V_0^{\frac{1}{3}} V_{\rm c}^{\frac{2}{3}} \nu_{\rm vib} e^{-E_{\rm a}/kT}$$
(6.3.38)

gegeben (Gail 1998). Hierbei ist V_0 das Volumen eines Grundbausteins in einem Silikatkristall, $\nu_{\rm vib}$ ist die charakteristische Frequenz der Gittervibration, $E_{\rm a}$ ist die Aktivierungsenergie für den Umordnungsprozess, der zur Einbindung der Silikatmoleküle in das Kristallgitter führt, k die Boltzmannkonstante und T die Umgebungstemperatur des Gases.

In einer umfassenden Studie verschiedener Beobachtungsdaten und theoretischer Modelle, untersuchten Pollack et al. (1994) die Zusammensetzung des Staubes in Molekülwolken und protostellaren Scheiben. Forsterit (Mg_2SiO_4) ist demnach die am häufigsten auftretende Staubkomponente und wird im folgenden näher untersucht.

Die Anregungstemperatur für Forsterit $T_0 := E_a/k$ wurde von Fabian et al. (2000) zu $T_0 = 39100 \pm 400$ K experimentell bestimmt. Für die charakteristische Frequenz $\nu_{\rm vib}$ wird von der durchschnittlichen Vibrationsfrequenz $\nu_{\rm vib} = 2 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ von SiO₄-Tetraedern ausgegangen (z.B. Duschl et al. 1996).

Sei $V_{\rm Korn}$ das Volumen des Staubkorns. Die Anzahl der Kristallisationskeime in einem unveränderten, amorphen Korn ist dann $n_{\rm k} = \zeta_{\rm c} V_{\rm Korn}/V_0$, wobei $\zeta_{\rm c}$ die Anzahl kristalliner Keime pro Grundbaustein (Mg₂SiO₄) ist. Die Zeitskala $\tau_{\rm c}$, in der das ursprünglich amorphe Staubkorn vollständig kristallisiert wird, ist durch das Kriterium

$$V_{\rm c}(\tau_{\rm c}) = \frac{V_{\rm Korn}}{n_{\rm k}} = \frac{V_0}{\zeta_{\rm c}}$$
 (6.3.39)

gegeben. Diese Zeitskala kann mit Hilfe der Gleichung (6.3.38) durch die Exponentialfunktion

$$\tau_{\rm c} = \tau_1 e^{T_0/T} \quad \text{mit} \quad \tau_1 := \frac{1}{6\zeta_{\rm c}\nu_{\rm vib}}$$
 (6.3.40)

abgeschätzt werden. Mit der Annahme, dass ein Kristallisationskeim unter 10^5 Si-Atomen¹ zu finden ist (Gail 1998) ergibt sich mit der charakteristischen Frequenz für SiO₄ der Faktor $\tau_1 \approx 8 \cdot 10^{-10}$ s. Beispielsweise bei einer Temperatur von 800 K ist damit die Kristallisationszeitskala in der Größenordnung von

$$\tau_{\rm c} \approx 4.4 \cdot 10^4 {\rm a}$$
 (6.3.41)

6.3.2 Die Tracergleichungen mit Annealing

In der folgenden Modellrechnung wird der Kristallisationsprozess und Transport von Forsterit untersucht. Dazu wird der Tracergleichung (6.2.36) ein weiterer Term hinzugefügt, durch den die Kristallisierung des Tracers berücksichtigt wird. Die Gleichung für Transport und Annealing des kristallinen Anteils eines Staubtracers der Konzentration c_c lautet (Gail 1998)

$$\partial_t nc_{\rm c} + \nabla \cdot nc_{\rm c} \, \boldsymbol{v} = \nabla \cdot \frac{n\nu}{S_{\rm dg}} \nabla c_{\rm c} + \frac{nc_{\rm a}}{\tau_{\rm c}} \,,$$
(6.3.42)

wobei der Annealingterm auf der rechten Seite proportional zur Konzentration des amorphen Staubanteils c_a ist. Für τ_c kann die temperaturabhängige Funktion (6.3.40) eingesetzt werden. Mit der Annahme, dass die Gesamtkonzentration c_{tot} des Staubtracers konstant bleibt ist

$$c_{\rm a} = c_{\rm tot} - c_{\rm c} , \qquad (6.3.43)$$

¹Ein Silikatkorn der Größe 1 μ m enthält in etwa 10¹⁰ Si-Atome.



Abbildung 6.3.12: Radialer Temperaturverlauf in der Scheibe nach Gail (2003). Der Verlauf wurde durch diskrete Zonen unterschiedlicher Potenzgesetze genähert (Modell), siehe Gleichung (6.1.9) und Tabelle 6.3.5.



Abbildung 6.3.13: Radialer Verlauf der Kristallisationszeitskala für Forsterit mit einem Temperaturverlauf nach Gail (2003).

 Tabelle 6.3.4:
 Modellparameter.

α	R_{\star}	M_{\star}	\dot{M}_r	$S_{\rm dg}$
0.003	$5~{ m R}_{\odot}$	$1 {\rm ~M}_{\odot}$	$10^{-7} \frac{M_{\odot}}{a}$	1

und Gleichung (6.3.42) kann durch ein numerisches Verfahren gelöst werden.

Es werden im Folgenden nur die Verhältnisse c_c/c_{tot} betrachtet, daher ist der genaue Wert der Gesamttracerkonzentration c_{tot} für die hier betrachteten Modelle ohne Bedeutung. Unterschiedliche Kristallisationsgrade des Staubkorns werden in diesem einfachen Modell nicht berücksichtigt, da nahezu alle Staubkörner in protostellaren Scheiben entweder im vollständig kristallinem oder vollständig amorphen Zustand vorliegen (Gail 2001).

6.3.3 Die Modellrechnung

Das Rechengebiet

Es wird ein in vertikaler Richtung isothermes Scheibenmodell in sphärischen Koordinaten mit der radialen Ausdehnung von r = 0.6...100 AE über einen Winkel von $\theta = 80...90^{\circ}$ untersucht. Das Rechengebiet wird mit einem in θ äquidistanten und in r nicht-äquidistanten² Gitter von 200×50 Zellen aufgelöst.

Temperaturmodell und Kristallisationszeitskala

Der radiale Temperaturverlauf wird aus der 1D-Modellrechnung einer α -Scheibe von Gail (2003) mit den Parametern aus Tabelle 6.3.4 übernommen. Die Verlaufskurve wird in acht diskrete Zonen eingeteilt, in denen der Temperaturverlauf durch das Potenzgesetz (6.1.9) unterschiedlicher Exponenten λ und Faktoren T_{1AE} genähert wird. Die Näherung ist zusammen mit den Ergebnissen von Gail (2003) in Abbildung 6.3.12 dargestellt. Tabelle 6.3.5 gibt eine Übersicht über die in der Näherung verwendeten Parameter zu den jeweiligen radialen Scheibenbereichen.

Der Temperaturverlauf nach dem Modell von Gail (2003) kann in Gleichung (6.3.40) eingesetzt werden, und man erhält die Kristallisationszeitskala für Forsterit in Abhängigkeit vom Scheibenradius r. Abbildung 6.3.13 zeigt den logarithmischen Verlauf der Zeitskala im Bereich r = 0.5...1 AE. Bei r = 0.77 AE steigt die Zeitskala auf über 10^6 a und liegt bereits in der Größenordnung der Lebensdauer einer protostellaren Scheibe. Bei r = 0.6 AE beträgt die Zeitskala nur noch 1 a.

Das Tracermodell

Da bei r = 0.6 AE, am Innenrand des Scheibenmodells, die Kristallisationszeitskala $\tau_c \lesssim 1$ a (vgl. Abbildung 6.3.13), kann dort auch $\tau_c \ll \tau_{\nu}$ angenommen werden. Es wird also davon ausgegangen, dass der Forsterittracer am Innenrand im vollständig kristallisierten Zustand vorliegt, womit $c_a = 0$ und $c_c = c_{tot}$. Da das Verhältnis c_c/c_{tot} untersucht wird, spielen hier Verdampfungsprozesse, die bei viel kleineren Radien beginnen, also jenseits des Innenrandes, keine Rolle.

²Die Gitterzellenbreiten wachsen von innen nach außen um jeweils 3%.



Abbildung 6.3.14: Profil der Machzahl $M_r = v_r/c_s$ nach dem analytischen NHO-Modell und einem radialen Temperaturverlauf, wie er in Abbildung 6.3.12 dargestellt ist. Die acht Zonen unterschiedlicher Temperaturverläufe (Tabelle 6.3.5) sind hier skizziert. Dieses Profil dient als Strömungsverlauf zur Berechnung des Transports und der Kristallisation von Forsterit in Modell A. In den Zonen 1 und 5 ist die Strömung auch in der Scheibenmittelebene nach innen gerichtet.



Abbildung 6.3.15: Profil der Machzahl $M_r = v_r/c_s$ nach dem SEZ-Modell und einem radialen Temperaturverlauf wie in Abbildung 6.3.12 gezeigt. Dieses Profil dient als Strömungsverlauf zur Berechnung des Transports und der Kristallisation von Forsterit in Modell B und als Anfangs- und Randbedingung zur numerischen Berechnung des Strömungsprofils für das Modell C. Die Strömung ist in der gesamten Scheibe nach innen gerichtet.



Abbildung 6.3.16: Profil der numerisch berechneten Machzahl $M_r = v_r/c_s$ mit einem Dämpfungsfaktor von $f_d = 10$, zum Zeitpunkt $t \sim 3700$ a nach Anfangsbedingungen (Abbildung 6.3.15). Der Verlauf ist über weite Bereiche in guter Übereinstimmung mit dem NHO-Modell (vgl. Abbildung 6.3.14). Der Oberrand ($\theta = 80...81^\circ$) ist nicht dargestellt. Aufgrund der homogenen von Neumann Randbedingungen für die radiale Impulskomonente fällt dort die Machzahl über einen Bereich von etwa vier Gitterzellen im Vergleich mit dem analytischen Modell zu stark ab.



Abbildung 6.3.17: Profil der numerisch berechneten Machzahl $M_r = v_r/c_s$ ohne Dämpfung ($f_d = 1$), zum Zeitpunkt t = 5900 a nach Anfangsbedingungen. Die numerischen Schwingungen an den Randbereichen haben sich erwartungsgemäß verstärkt. Die wesentlichen Merkmale des Strömungsverlaufs aus dem NHO-Modell können über weite Scheibenbereiche quantitativ reproduziert werden. Dieses Profil dient als Strömungsverlauf zur Berechnung des Transports und der Kristallisation von Forsterit in Modell C.

Tabelle 6.3.5: Parameter zur Näherung des Temperaturverlaufs nach Gail (2003) durch das Potenzgesetz (6.1.9). Die zweite Zeile gibt den Radius R_{max} des Außenrandes einer Zone an, in der der Temperaturverlauf durch die Parameter λ und $T_{1\text{AE}}$ der gleichen Spalte bestimmt wird. Die Werte in der ersten Spalte gelten vom Innenradius des Scheibenmodells bei R = 0.6 AE bis R_{max} , die der zweiten Spalte gelten von R_{max} der Zone 1 bis R_{max} der Zone 2, usw.

Zone	1	2	3	4	5	6	7	8
$R_{\rm max}$ [AE]	0.75	0.99	5.3	8.6	20	35	50	100
λ	1.4	0.9	0.78	0.2	1.5	1.0	0.3	0.02
T_{1AE} [K]	520	590	590	220	3600	800	66	22

Kristallines Material kann in die Außenbereiche der Scheibe wandern. Daher gilt die Randbedingung $c_c = 0$ und $c_a = c_{tot}$ am Scheibenaußenrand nur näherungsweise und es werden auschließlich Ergebnisse, die genügend weit vom Außenrand entfernt sind, betrachtet. In der Anfangsbedingung wird der kristalline Anteil des Staubtracers im gesamten Rechengebiet $c_c = 0$ gesetzt.

Das Strömungsfeld

Die Dichteverteilung und das Geschwindigkeitsfeld zum gegebenen Temperaturverlauf (Abbildung 6.3.12) wird in Modell A aus der Näherung höherer Ordnung (NHO) nach Abschnitt 6.1.1 bestimmt, in Modell B anhand des analytischen Standard-Einzonenmodells (SEZ) nach Abschnitt 2.1.3 und in Modell C numerisch berechnet. Da ein konstanter Massefluss als Randbedingung vorgegeben ist, stellt sich auch im zeitabhängigen, numerischen Modell eine stationäre Strömung ein.

Die Modelle A, B und C wirken als stationäre Strömungsfelder zur Berechnung des Transports eines im Scheibeninnenbereich kristallisierten Silikattracers (vgl. Abschnitt 6.2).

Strömungsfelder der analytischen Näherung In Abbildung 6.3.14 ist das aus dem NHO-Modell resultierende Profil der Machzahl $M_r = v_r/c_s$ in der Meridionalebene (r, θ) dargestellt. In den Zonen 1 und 5, in denen $\lambda > 1.2$, ist die Strömung für alle z nach innen gerichtet (vgl. Tabelle 6.3.5). In allen anderen Zonen ist die Strömung in der Scheibenmittelebene nach außen gerichtet. Dieses Strömungsprofil wird in Modell A verwendet.

Abbildung 6.3.15 zeigt das Profil der Machzahl M_r aus der SEZ-Näherung. Die Strömung ist in diesem Modell konstant in vertikaler Richtung und in der gesamten Scheibe nach innen gerichtet. Dieses Strömungsprofil wird in Modell B verwendet und als Anfangs- und Randbedingung zur numerischen Berechnung der Strömung in Modell C.

Numerische Berechnung des Strömungsfeldes Anfangs- und Randbedingungen zur numerischen Bestimmung des Strömungsfeldes und der Dichtestruktur wurden aus dem SEZ-Modell hergeleitet (Abbildung 6.3.15), mit Ausnahme des Drehimpulses, der in höherer Ordnung entsprechend Gleichung (5.2.1) festgelegt wurde.

Randbedingungen wurden wie folgt festgelegt: Für den Radialimpuls gelten innen und außen inhomogene Dirichlet und oben ($\theta = 80^{\circ}$) und in der Scheibenebene homogene von Neumann Randbedingungen. Für die Vertikalgeschwindigkeit gelten oben und in der Scheibenmittelebene homogene Dirichlet und innen und außen homogene von Neumann



Abbildung 6.3.18: Numerisch berechnetes Strömungsfeld eines Ausschnitts des Scheibenmodells, dargestellt durch Impulsvektorpfeile. Eine Zirkulationszelle, die sich in Zone 4 von 5.3 bis 8.6 AE (vgl. Tabelle 6.3.5) ausbildet, ist deutlich zu erkennen. Bei $\theta \sim 80^{\circ}$ werden aufgrund der künstlichen Randbedingungen die vertikale Impulskompononente vermutlich unter- und die radiale Komponente überschätzt. In der bei ca. 9 AE angrenzenden Zone 5 ist der Impuls in allen Höhen nach innen gerichtet.



Abbildung 6.3.19: Numerisch berechnetes Strömungsfeld des Scheibenaußenbereichs, dargestellt durch Impulsvektorpfeile. Man beachte, dass die durchschnittlichen Impulsbeträge knapp zwei Größenordnungen unter denen in Abbildung 6.3.18 liegen. Auch in Zone 6 (ca. 20...35 AE) und Zone 7 (ca. 35...50 AE) sind Zirkulationszellen auszumachen. Im Außenbereich $r \gtrsim 50$ AE ist das Modell noch nicht vollständig relaxiert und es treten dort leichte Schwingungen auf.

6.3. TRACERTRANSPORT MIT ANNEALING

Randbedingungen. Für den Druck und die Umlaufsgeschwindigkeit wurden in der Scheibenebene homogene von Neumann, ansonsten Dirichlet Randbedingungen gewählt.

6.3.4 Ergebnisse

Meridionale Strömungszellen

Die hydrodynamischen Gleichungen wurden mit dem modifizierten ZEUS-Verfahren im mitrotierenden System bis zum Erreichen eines quasi-stationären Zustandes gelöst. Dabei wurde zu Beginn der Rechnung ein Dämpfungsfaktor für den Meridionalimpuls von $f_d = 10$ gewählt (siehe Gleichungen 3.1.14 und 3.1.15). Abbildung 6.3.16 zeigt den numerisch berechneten Verlauf der Machzahl M_r nach ca. t = 3700 a, der, abgesehen von den Randbereichen über etwa 4 Gitterzellen, in guter Übereinstimmung mit der analytischen Lösung (Abbildung 6.3.14) ist.

Anschließend wurde der Dämpfungsparameter auf $f_{\rm d} = 1$ heruntergesetzt. Abbildung 6.3.17 zeigt den numerisch berechneten Verlauf der Machzahl M_r zum Zeitpunkt t = 5900 a nach Simulationsstart. Die numerischen Schwingungen im Strömungsverlauf am Innenrand haben sich verstärkt. Im Inneren des Rechengebietes kann die analytische Lösung größtenteils zufriedenstellend reproduziert werden. Außerhalb 50 AE ist die Scheibe noch nicht vollständig relaxiert und die Schwingungen in der numerischen Lösung des Strömungsprofils führen zu Abweichungen vom NHO-Modell in der Größenordnung von ~ 10%.



Abbildung 6.3.20: Vergleich des Kristallisationsanteils C_c/C_{tot} mit und ohne diffusiven und advektiven Transport. Durch die Transportphänomene wird der enge Grenzbereich zum Radius $r \sim 0.8$ AE, innerhalb dessen die Kristallisation von Silikaten möglich wird, stark geglättet.



Abbildung 6.3.21: Verlauf des kristallinen Traceranteils nach $t = 10^5$ a, berechnet aus den Modellen A - C. Die Ergebnisse aus den drei Modellen unterscheiden sich nur unbedeutend voneinander. Der kristalline Anteil des Forsterittracers beträgt bei 10 AE und zu diesem Zeitpunkt in etwa $C_c/C_{tot} \approx 2 \cdot 10^{-3}$.



Abbildung 6.3.22: Verlauf des kristallinen Traceranteils nach $t = 10^6$ a, berechnet aus den Modellen A - C. Zu diesem Zeitpunkt beträgt der kristalline Anteil des Forsterittracers bei 10 AE in etwa $C_c/C_{tot} \approx 1 \cdot 10^{-2}$.



Abbildung 6.3.23: Vergleich der Tracerkonzentrationen: ohne Transport und unter alleiniger Berücksichtigung der Advektion aus den SEZ- und dem NHO-Modellen.



Abbildung 6.3.24: Vergleich der Tracerkonzentrationen: ohne Transport, unter alleiniger Berücksichtigung der Diffusion bzw. Advektion und unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Diffusion und Advektion.



Abbildung 6.3.25: Radialgeschwindigkeiten aus dem stationären Modell A und aus den zeitabhängigen Modellen nach Wehrstedt & Gail (2002) zu den Zeiten $t = 10^5$ a und $t = 10^6$ a (Modelle WG02). Die Geschwindigkeitsprofile der zeitabhängigen Modelle gehen mit r deutlich schneller gegen 0 und wechseln bei $r \gtrsim 10$ AE sogar dass Vorzeichen, so dass in diesen Scheibenbereichen eine Netto-Auswärtsdrift vorherrscht. (Die Datenfiles aus den Modellen WG02) wurden freundlicher Weise von Herrn Wehrstedt zur Verfügung gestellt.)

In den Abbildungen 6.3.18 und 6.3.19 ist der Verlauf der numerisch berechneten Strömung für ausgewählte Scheibenbereiche durch Impulsvektorpfeile dargestellt. In vereinzelten Bereichen sind Zirkulationszellen zu erkennen, die durch die verschiedenen Temperaturverläufe der im letzten Abschnitt eingeführten Zonen Zustande kommen. Bei $\theta \lesssim 81^{\circ}$ stimmt der Radialimpulsverlauf eng mit der des NHO-Modells überein, so dass sich die Strömung dort unabhängig von den numerischen Randbedingungen bei $\theta = 80^{\circ}$ einstellt. Da über einen weiten Scheibenbereich $r \sim 9...20$ AE (Zone 5) keine Auswärtsdrift auftritt, muss über diesen Abschnitt der auswärtsgerichtete Tracertransport allein durch diffusive Prozesse vonstatten gehen.

Tracertransport und Annealing bei nicht-konstantem Temperaturprofil

Abbildung 6.3.20 zeigt die Auswirkung des diffusiven sowie advektiven Transports auf die Tracerverteilung. Aufgetragen ist das Verhältnis der Flächenkonzentrationen (Gleichung 6.2.37) kristallinen Forsterits $C_{\rm c}$ zum Gesamtanteil $C_{\rm tot}$. Der scharfe Grenzbereich zum Radius $r \sim 0.8$ AE, innerhalb dessen die Kristallisation von Silikaten stattfindet, wird durch die Transportphänomene stark geglättet.

Die Ergebnisse zur Kristallisation und zum Transport von Forsterit aus den Modellen A - C sind in den Abbildungen 6.3.21 und 6.3.22 dargestellt. Die Unterschiede in den Modellen sind vernachlässigbar. Da auch in den Modellen A und C die Strömung über weite Bereiche einwärtsgerichtet ist, bestimmt, wie auch im Modell B, die Diffusion den Auswärtstransport des Staubtracers.

In den Abbildungen 6.3.23 und 6.3.24 sind noch einmal die Auswirkungen verschiedener Transportprozesse verdeutlicht. Der Unterschied zwischen dem SEZ- und dem NHO-Modell wird nur im logarithmischen Maßstab ohne Diffusion erkennbar (Abbildung 6.3.23). Ein geringer Anteil des Tracers wird mit dem NHO-Modell bis an den Innenrand von Zone 5 transportiert, in der kein Auswärtstransport durch Advektion mehr möglich ist. Dafür macht sich die Einwärtsdrift beider Modelle im Innenbereich der Scheibe um so deutlicher bemerkbar. Bei ausschließlicher Betrachtung der Advektion verschwindet im Bereich zwischen $r \sim 0.7$ AE und 0.8 AE der Anteil kristallinen Materials fast vollständig, da dort offensichtlich die Zeitskala für den Transport kürzer ist als die für die Kristallisation eines Tracers.

In Abbildung 6.3.24 wird die Bedeutung des advektiven und diffusiven Transports verdeutlicht. Der Anteil kristallinen Materials bei 10 AE nach 10^6 a fällt unter Berücksichtigung der Advektion, die der Diffusion entgegenwirkt, auf über eine Größenordnung ab. Die Nettoflussrate der Strömung ist daher von entscheidender Bedeutung für die zeitabhängige Simulation von Durchmischungsprozessen. Eine Halbierung des Nettoflusses kann eine Erhöhung der Tracerkonzentration, beispielsweise bei 10 AE, um einen Faktor 6 bewirken. Dieses Ergebnis zeigt eine mögliche Schwäche des hier behandelten semi-stationären Modells auf. Die dem Transport zugrundegelegte Flussstruktur setzt eine über alle Scheibenbereiche konstante, nach innen gerichtete Massenakkretionsrate voraus, während zeitabhängige 1D-Modelle eine nach außen gerichtete Netto-Akkretionsrate für die Scheibenaußenbereiche bei $r \gtrsim 10$ AE vorhersagen (Ruden & Lin 1986). Diese durch diffusiven Transport bedingte Auswärtsdrift ergibt sich auch in dem zeitabhängigen Modell von Wehrstedt & Gail (2002) und wird in den dort behandelten Durchmischungsprozessen mitberücksichtigt. Abbildung 6.3.25 zeigt die Geschwindigkeitsprofile der Modelle im Vergleich. Aufgrund ihrer insgesamt geringeren Einwärtsdrift erhalten Wehrstedt & Gail (2002) eine erheblich effizientere diffusive Durchmischung des kristallinen Materials in der Scheibe in Übereinstimmung mit den kristallinen Silikatanteilen in Kometen und Meteoritenmaterial.

6.4 Diskussion der Ergebnisse

Meridionale Strömungen

Aus einer Näherung höherer Ordnung und der Annahme eines hinreichend kleinen turbulenten Diffusionsparameter $\alpha \lesssim 10^{-1}$ wurde in Abschnitt 6.1 für eine isotherm geschichtete Scheibe Strömungsprofile (Gleichungen 6.1.18 und 6.1.35) ermittelt, die über weite Scheibenbereiche hinweg eine Auswärtsdrift in der Mittelebene vorweisen (NHO-Modell, Abbildung 6.1.4).

Die Struktur meridionaler Strömungen ist abhängig vom radialen Temperaturverlauf, gegeben durch einen Parameter λ , so dass in Modellen mit nicht-konstantem λ in verschiedenen Scheibenbereichen unterschiedliche Flussstrukturen vorherrschen und großskalige Zirkulationszellen entstehen können (Abbildungen 6.3.18 und 6.3.19).

Tracertransport in Scheiben

Um den Transport von Tracern in protostellaren Scheiben zu berechnen, wurde in den bisher untersuchten Modellen (Gail 2001; Wehrstedt & Gail 2002; Bockelée-Morvan et al.

2002) eine aus dem Standard-Einzonenmodell hergeleitete, in der Vertikalen gemittelte Radialgeschwindigkeit zugrundegelegt (SEZ-Modell, Abbildung 6.1.5). In den Abschnitten 6.2 und 6.3 wurden die Auswirkungen der Strömungsprofile aus den unterschiedlichen Modellen auf den Transport von Tracern untersucht.

Dazu wurden in Abschnitt 6.2 zunächst einmal Temperaturmodelle mit konstantem λ vorausgesetzt. Eine Temperaturverteilung mit $\lambda = 1$ entspricht beispielsweise einer zentralen Temperaturverteilung bei Opazitäten für vereiste Staubkörner, die in großen Bereichen der Scheibe zu erwarten sind (Gail 2003). Wird für alle Radien eines Scheibenmodells eine derartige Temperaturverteilung vorausgesetzt, so ergeben sich im Vergleich der SEZ- und NHO-Modelle keine nennenswerten Unterschiede in der Durchmischung eines Tracers in der Scheibe. Mit dem NHO-Modell ist bei der Modellierung der Tracerdurchmischung in diesem Fall deswegen keine Verbesserung gegenüber der SEZ-Näherung zu erwarten.

Andererseits sind mit $\lambda = 0.62$, welches einem Temperaturprofil zu Opazitäten bei reinem Staub ohne Eiskruste entsprechen würde, die Ergebnisse aus den SEZ- und NHO-Modellen deutlich voneinander verschieden. Demnach muss die meridionale Flussstruktur in Modellrechnungen mitberücksichtigt werden, bevor zuverlässige Aussagen über die Stoffdurchmischung in protostellaren Scheiben gemacht werden können.

In Abschnitt 6.3 wurde abschließend die Kristallisation und der Transport eines Staubtracers in einem Scheibenmodell berechnet, welches aus einer umfangreichen 1D-Simulation mit Staubentwicklung und Strahlungstransport von Gail (2003) übernommen wurde. Dieses Modell wurde durch eine radiale Abhängigkeit des Parameters λ genähert. Obwohl das numerische Modell und das NHO-Modell eine starke Auswärtsdrift in weiten Teilen der Scheibe vorweisen, unterscheiden sich die Ergebnisse aus diesem Modellen kaum von denen aus dem SEZ-Modell. Der Bereich von ca. 10 bis 20 AE (Zone 5) weist einen steilen Temperaturgradienten auf, weswegen sich dort keine Auswärtsdrift ausbilden kann. Diese Zone wirkt wie eine Mauer für den advektiven Transport, durch die der Tracer nur durch Diffusion gelangen kann.

Die vergleichsweise geringe Effizienz der Durchmischung des Staubtracers kann auf eine, im Vergleich mit voll-zeitabhängigen Simulationen, zu hohe Netto-Einwärtsdrift zurückgeführt werden. Um realistischere Ergebnisse zum zeitabhängigen Transport eines Tracers zu erlangen, muss die zeitliche Entwicklung der Strömung, beispielsweise ohne weiteren Massezustrom von außen, zusammen mit der des Tracertransports berechnet werden.
Kapitel 7

Ausblick

In Abschnitt 6.3 wurde deutlich, dass für eine zeitabhängige Simulation von Durchmischungsprozessen in Akkretionsscheiben eine möglichst genaue Kenntnis des radialen und zeitlichen Verlaufs der Nettoeinwärtsdrift notwendig wird. Dies kann nur durch die zeitabhängige Behandlung der Scheibenstruktur erreicht werden, die gleichzeitig mit den sich in ihr vollziehenden Transportphänomenen durchgeführt werden muss. Die in dieser Arbeit implementierten Algorithmen sollten derartige Modellrechnungen in naher Zukunft ermöglichen.

Obwohl es sich, wie schon von Regev & Gitelman (2002) bemerkt, bei meridionalen Strömungen in Akkretionsscheiben um kein thermisches Phänomen handelt, wurde in den Ergebnissen aus Kapitel 6 die enge Verknüpfung der Strömungsstruktur an die Viskosität und damit an den radialen Temperaturverlauf in der Scheibe deutlich.

Dies macht die Wahl eines realistischen Modells für die Viskosität um so bedeutsamer. Da bis auf weiteres eine konsistente Modellierung der Viskosität nicht möglich sein wird, muss auf Parametrisierungen zurückgegriffen werden. Eine Untersuchung meridionaler Strömungen in β -Scheiben (Duschl et al. 2000) wird deshalb angestrebt.

Wie in Abschnitt 6.2 und von Keller & Gail (2003) gezeigt wurde, kann die zweidimensionale Strömungsstruktur zumindest in bestimmten Fällen einen maßgeblichen Einfluss auf Durchmischungsprozesse in protostellaren Scheiben haben. Da in diesen Arbeiten auf die Behandlung des Strahlungstransports verzichtet wurde, koppeln die Tracergleichungen nicht mit denen der Hydrodynamik in der Scheibe und die Probleme können getrennt behandelt werden.

Allerdings hat die Durchmischung verschiedener Staubsorten einen erheblichen Einfluss auf den Strahlungshaushalt der protostellaren Scheibe. Beispielsweise bewirkt der Transport von Silikatkristallen aus den Scheibeninnenregionen in ihre Außenbereiche eine Verringerung der Opazität, weil kristallines Material schlechter absorbiert als amorphes, und damit ein Absenken der Temperatur in den durchmischten Zonen (Gail 2001). Somit steuern Durchmischungsprozesse die Temperaturverteilung und damit auch den Strömungsverlauf. Diese Kopplung muss berücksichtigt und deshalb der Strahlungstransport in den Scheibenmodellen in Zukunft mitberücksichtigt werden. Dabei müssen Produktion, Zerstörung und Durchmischung der Staubtracer untersucht werden, die einen maßgeblichen Einfluss auf die Opazitäten in der Scheibe, und damit auf ihre Struktur und den in ihr stattfindenden Materietransport haben. Zur effizienten Berechnung zeitabhängiger Scheibenmodelle über lange Zeiträume und weite Scheibenbereiche kann die Erweiterung des Druckkorrekturverfahrens um die entsprechenden Gleichungen eine wichtige Bedeutung erlangen.

Anhang A

Formeln

A.1 Normierung der Gleichungen

Zur Minimierung von Rundungsfehlern bei der numerischen Behandlung der hydrodynamischen Grundgleichungen wird eine fundamentale Variable q mit einem Faktor q_0 normiert, so dass die Gleichungen für die Variablen in ihrer normierten Form $\hat{q} = q/q_0$ behandelt werden, wobei q_0 so gewählt wird, dass \hat{q} in etwa in der Größenordnung von 1 liegt.

Die fundamentalen Normierungsfaktoren sind gegeben durch die Zeiteinheit t_0 , der Längenskala l_0 , der repräsentativen Flussgeschwindigkeit v_0 , Umlaufgeschwindigkeit w_0 und Schallgeschwindikeit c_0 sowie der typischen Dichte ρ_0 . Der Wert dieser konstanten Faktoren ist durch die Problemstellung vorgegeben. Damit ergibt sich für die normierten Größen und i = (1, 2)

$$\hat{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \hat{x}_{(i)} = \frac{x_{(i)}}{l_0}, \quad \hat{v}_{(i)} = \frac{v_{(i)}}{v_0}, \quad \hat{v}_{\phi} = \frac{v_{\phi}}{w_0}, \quad \hat{c}_{\rm s} = \frac{c_{\rm s}}{c_0} \quad \text{und} \quad \hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}.$$
(A.1.1)

Mit der α -Viskosität (2.1.38) ergibt sich die Normierung $\hat{\nu} = \frac{\nu}{\nu_0}$ mit $\nu_0 = l_0 c_0$ und es gelten die Definitionen

Strouhal-Zahl:
$$Sr = \frac{v_0 t_0}{l_0}$$
,
Machzahl: $M = \frac{v_0}{c_0}$, (A.1.2)
Reynoldszahl: $Re = \frac{v_0 l_0}{\nu_0} = \frac{v_0}{c_0} = M$.

Zur besseren Lesbarkeit werden im Folgenden für die normierten Größen die Dächer fallen gelassen und es ergibt sich in der normierten Schreibweise für die Kontinuitätsgleichung (2.1.1)

$$\partial_t \rho + \operatorname{Sr}\operatorname{div}(\rho \boldsymbol{u}) = 0$$
. (A.1.3)

In Zylinderkoordinaten ergibt sich aus den Gleichungen (2.1.23) bis (2.1.27) für die normierten Impulsgleichungen

$$\partial_t \rho v_z + \operatorname{Sr} \operatorname{div} \left(\rho v_z \boldsymbol{u} \right) = -\frac{t_0}{l_0^2 v_0} \rho \partial_z \Phi - \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}^2} \partial_z P + \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_z , \qquad (A.1.4)$$

$$\partial_t \rho v_r + \operatorname{Sr}\operatorname{div}\left(\rho v_r \boldsymbol{u}\right) = \frac{w_0^2}{v_0^2} \operatorname{Sr}\frac{\rho}{r^3} l(2k+l) - \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}^2} \partial_r P + \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}}(\operatorname{div}\boldsymbol{\tau}_r - \frac{\tau_{\phi\phi}}{r})$$
(A.1.5)

und

$$\partial_t \rho l + \operatorname{Sr} \operatorname{div}(\rho l \boldsymbol{u}) + \operatorname{Sr} \rho \boldsymbol{u} \cdot \operatorname{grad} k = \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}} \operatorname{div}(r \, \boldsymbol{\tau}_\phi) .$$
 (A.1.6)

Aus den Gleichungen (2.1.29) bis (2.1.32) ergibt sich in Kugelkoordinaten für die normierten Impulsgleichungen

$$\partial_t \rho v_r + \operatorname{Sr} \operatorname{div} \left(\rho v_r \boldsymbol{u} \right) = \operatorname{Sr} \frac{\rho}{r^3} \left(g^2 + \frac{w_0^2}{v_0^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} l(2k+l) \right)$$

$$- \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}^2} \partial_r P + \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}} (\operatorname{div} \boldsymbol{\tau}_r + \frac{\tau_{rr}}{r}) ,$$
(A.1.7)

$$\partial_t \rho g + \operatorname{Sr}\operatorname{div}\left(\rho g \boldsymbol{u}\right) = \frac{w_0^2}{v_0^2} \operatorname{Sr}\rho \cot\theta v_{\phi}^2 - \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}^2} \partial_{\theta} P + \frac{\operatorname{Sr}}{\operatorname{M}}(\operatorname{div}\left(r\boldsymbol{\tau}_{\theta}\right) - \cot\theta\boldsymbol{\tau}_{\phi\phi})$$
(A.1.8)

und

$$\partial_t \rho \, l + \operatorname{Sr} \operatorname{div} \left(\rho \, l \boldsymbol{u} \right) + \operatorname{Sr} \left(\frac{1}{2} \rho v_r \Omega_{\mathrm{K}} r + \rho g \Omega_{\mathrm{K}} \cos \theta \right) = \frac{\operatorname{Sr}}{\mathrm{M}} \operatorname{div} \left(r \sin \theta \boldsymbol{\tau}_{\phi} \right) \,. \tag{A.1.9}$$

Die Druckkorrekturgleichung (3.1.9) wird in ihrer normierten Form

$$\Delta\delta P - \left(\frac{M}{Sr}\right)^{2} \frac{1}{\delta t^{2}\theta_{1}\theta_{2}c^{2}} \delta P = \left(\frac{M}{Sr}\right)^{2} \frac{1}{\delta t^{2}\theta_{1}\theta_{2}c^{2}} (P^{\star} - P^{n}) + \frac{M^{2}}{Sr} \frac{1}{\delta t\theta_{2}} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{\dagger} + \frac{M^{2}}{Sr} \frac{1 - \theta_{1}}{\delta t\theta_{1}\theta_{2}} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v})^{n}$$
(A.1.10)

gelöst.

A.2 Die vollständigen Navier-Stokes Gleichungen

Die in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten und in krummlinigen Koordinaten formulierten Navier-Stokes Gleichungen sind hier vollständig in ihrer nicht normierten Form aufgeführt.

A.2.1 Axialsymmetrische Zylinderkoordinaten

Die vollständigen Navier-Stokes Gleichungen der Form (2.1.23), (2.1.25) und (2.1.26) werden in axialsymmetrischen Zylinderkoordinaten aufgeführt. Hierbei sind die fundamentalen Größen die Komponenten des kovarianten Impulsvektors

$$p_{1} = \rho v_{z} \equiv p_{z} ,$$

$$p_{2} = \rho v_{r} \equiv p_{r} ,$$

$$p_{3} = \rho v_{\phi} r \equiv \rho h \equiv H .$$
(A.2.11)

102

Die Gleichung für den Vertikal
impuls $p_{\boldsymbol{z}}$ lautet dann

$$\underbrace{\frac{\partial_t p_z + \partial_z (p_z v_z) + \frac{1}{r} \partial_r (r p_z v_r) + \rho z \Omega_K^2 + \partial_z P}_{=:f_{visc}^z}}_{=:M_z^z p_z} \underbrace{\frac{\partial_t p_z + \partial_z (p_z v_z) + \frac{1}{r} \partial_r (p_z v_z)}_{=:M_z^z p_z}}_{=:M_r^z p_z} \underbrace{\frac{\partial_t p_z + \partial_z (p_z v_z) + \frac{1}{r} \partial_r (p_z v_z)}_{=:M_r^z p_z}}_{=:M_r^z p_z} = 0$$
(A.2.12)

Die Operatoren, die aufgrund der Viskosität auf den Vertikalimpuls wirken, lauten

$$M_z^z \rho = -\frac{4}{3} (\mu \partial_z^2 + (\partial_z \mu) \cdot \partial_z) , \qquad (A.2.13)$$

$$M_r^z \rho = -\frac{1}{r} (\mu r \partial_r^2 + (\partial_r \mu r) \cdot \partial_r)$$
(A.2.14)

und die gemischten Terme

$$f_{visc}^{z} = +\frac{2}{3r}\partial_{z}(\mu\partial_{r}(rv_{r})) - \frac{1}{r}\partial_{r}(\mu r\partial_{z}v_{r}).$$
(A.2.15)

Die Gleichung für den Radialimpuls p_r lautet mit $\omega\equiv\Omega-\Omega_{\rm K}$

$$\partial_t p_r + \partial_z (p_r v_z) + \frac{1}{r} \partial_r (r p_r v_r) - \rho r \omega (2\Omega_K + \omega) + \partial_r P - \frac{-\partial_z (\mu \partial_r v_z) + \frac{2}{3r} \partial_r (\mu r \partial_z v_z) - \frac{2\mu}{3r} \partial_z v_z}{=:f_{visc}^r} + \frac{2}{3r} \partial_r (\mu r \partial_z v_z) + \frac{2}{3r} \partial_r (\mu r \partial_z v_z) - \frac{2\mu}{3r} \partial_z v_z}$$
(A.2.16)

$$\underbrace{-\partial_z(\mu\partial_z v_r)}_{=:M_z^r p_r} \underbrace{+2\frac{v_r}{r}\partial_r\mu - \frac{4}{3}\partial_r\frac{\mu}{r}\partial_r(rv_r)}_{=:M_r^r p_r} = 0.$$

Die viskosen Operatoren und gemischten Terme sind

$$M_z^r \rho = -(\mu \partial_z^2 + (\partial_z \mu) \cdot \partial_z) , \qquad (A.2.17)$$

$$M_r^r \rho = -\frac{4}{3} (\mu \partial_r^2 + ((\partial_r \mu) + \frac{\mu}{r}) \partial_r) + \frac{2}{3r} ((\partial_r \mu) + \frac{2\mu}{r}) , \qquad (A.2.18)$$

$$f_{visc}^r = -\frac{1}{2}\partial_z(\mu\partial_r v_z) + \frac{1}{3r}\partial_r(\mu r\partial_z v_z) - \frac{\mu}{3r}\partial_z v_z .$$
 (A.2.19)

Und die Gleichung für den Drehimpuls H lautet

$$\partial_t H + \partial_z (Hv_z) + \frac{1}{r} \partial_r (rHv_r) - \underbrace{\frac{1}{2} \partial_z (\mu \partial_z h)}_{=:M_z^{\phi} H} \underbrace{-\frac{1}{2r} \partial_r \left(\mu r^3 \partial_r \frac{h}{r^2}\right)}_{=:M_r^{\phi} H} = 0$$
(A.2.20)

mit

$$M_z^{\phi}\rho = -\frac{1}{2}\mu\partial_z^2 - \frac{1}{2}(\partial_z\mu) \cdot \partial_z \tag{A.2.21}$$

und

$$M_{r}^{\phi}\rho = -\frac{1}{2}\mu\partial_{r}^{2} + (\frac{\mu}{r} - \frac{1}{2r}(\partial_{r}\mu r))\partial_{r} + \frac{(\partial_{r}\mu)}{r}.$$
 (A.2.22)

A.2.2 Axialsymmetrische Kugelkoordinaten

Die vollständigen Navier-Stokes Gleichungen der Form (2.1.29) - (2.1.31) werden in axialsymmetrischen Kugelkoordinaten aufgeführt. Hierbei sind die fundamentalen Größen die Komponenten des kovarianten Impulsvektors

$$p_{1} = \rho v_{r} \equiv p_{r} ,$$

$$p_{2} = \rho v_{\theta} r \equiv \rho g \equiv G ,$$

$$p_{3} = \rho v_{\phi} r \sin \theta \equiv \rho h \equiv H .$$
(A.2.23)

Die Gleichung für den Radialimpuls p_r lautet dann

$$\partial_t p_r + \frac{1}{r^2} \partial_r \left(r^2 p_r v_r \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta p_r v_\theta) - \rho \frac{v_\theta^2}{r} - \rho r \omega (2\Omega_K + \omega) + \partial_r P + \\ + \frac{2}{3r^2 \sin \theta} \partial_r \left(\mu r \partial_\theta \left(\sin \theta v_\theta \right) \right) + \frac{2\mu}{3r^2} \left(\partial_\theta v_\theta + v_\theta \cot \theta \right) - \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \left(\mu \sin \theta \partial_r \frac{v_\theta}{r} \right) - \\ =: f_{visc}^r \\ - \frac{4}{3r^2} \partial_r \left(\mu r^3 \partial_r \frac{v_r}{r} \right) - \frac{4}{3} \mu \partial_r \frac{v_r}{r} - \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta \left(\mu \sin \theta \partial_\theta v_r \right) = 0 \\ =: M_r^r p_r = : M_\theta^r p_r$$

(A.2.24)

$$M_{r}^{r}\rho = -\frac{4}{3}(\mu \partial_{r}^{2} + ((\partial_{r}\mu) + 2\frac{\mu}{r}) \cdot \partial_{r} - (\frac{\partial_{r}\mu}{r} + 2\frac{\mu}{r^{2}})), \qquad (A.2.25)$$

$$M_{\theta}^{r}\rho = -\frac{1}{r^{2}}(\mu\partial_{\theta}^{2} + \frac{(\partial_{\theta}\mu\sin\theta)}{\sin\theta} \cdot \partial_{\theta})$$
(A.2.26)

und

und es gilt

$$f_{visc}^{r} = \frac{2}{3r^{2}\sin\theta} (\partial_{r}\mu r\partial_{\theta}\sin\theta v_{\theta} + \mu\partial_{\theta}\sin\theta v_{\theta}) - \frac{1}{\sin\theta} \partial_{\theta} \left(\mu\sin\theta\partial_{r}\frac{v_{\theta}}{r}\right) .$$
(A.2.27)

Die Gleichung für den poloidalen Impuls lautet in kovarianter Form

$$\partial_t G + \frac{1}{r^2} \partial_r \left(r^2 G v_r \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \, G v_\theta) - \cot \theta v_\phi^2 + \partial_\theta P$$

$$\underbrace{-\frac{1}{r^2} \partial_r \left(\mu r^4 \partial_r \frac{g}{r^2} \right)}_{=:M_r^\theta G} \underbrace{-\frac{4}{3r^2 \sin \theta} \partial_\theta \left(\mu \sin \theta \partial_\theta g \right) - \frac{2}{3r^2} (\mu - \cot \theta \partial_\theta \mu - 2\mu \cot^2 \theta) g}_{=:M_\theta^\theta G} - \underbrace{-\frac{2\mu \cot \theta r}{3} \partial_r \frac{v_r}{r} + \frac{2r}{3 \sin \theta} \partial_\theta \left(\mu \sin \theta \partial_r \frac{v_r}{r} \right) - \frac{1}{r} \partial_r \left(\mu r \partial_\theta v_r \right)}_{=:f_{visc}^\theta} = 0$$

(A.2.28)

mit

$$M_r^{\theta}\rho = -\mu\partial_r^2 - (\partial_r\mu)\partial_r + \frac{2}{r}((\partial_r\mu) + \frac{\mu}{r}), \qquad (A.2.29)$$

$$M^{\theta}_{\theta}\rho = -\frac{2}{3r^2}(2\mu\partial_{\theta}^2 + 2((\partial_{\theta}\mu) + 2\cot\theta)\partial_{\theta} + (\mu - \cot\theta\partial_{\theta}\mu - 2\mu\cot^2\theta)), \quad (A.2.30)$$

$$f_{visc}^{\theta} = -\frac{2\mu\cot\theta r}{3}\partial_r \frac{v_r}{r} + \frac{2r}{3\sin\theta}\partial_\theta \left(\mu\sin\theta\partial_r \frac{v_r}{r}\right) - \frac{1}{r}\partial_r \left(\mu r\partial_\theta v_r\right) .$$
(A.2.31)

Die Drehimpulsgleichung lautet

$$\partial_t H + \frac{1}{r^2} \partial_r \left(r^2 H v_r \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta H v_\theta)$$

$$\underbrace{-\frac{1}{r \sin \theta} \partial_\theta \left(\mu \sin^3 \theta \partial_\theta \frac{h}{r \sin^2 \theta} \right)}_{=:M_\theta^\phi H} \underbrace{-\frac{1}{r^2} \partial_r \left(\mu r^4 \partial_r \frac{h}{r^2} \right)}_{=:M_r^\phi H} = 0$$
(A.2.32)

mit

$$M^{\phi}_{\theta}\rho = -\frac{\mu}{r^2}\partial_{\theta}^2 - \frac{1}{r^2}\sin\theta(\partial_{\theta}\frac{\mu}{\sin\theta})\partial_{\theta} + \frac{2(\partial_{\theta}\mu\cos\theta)}{r^2\sin\theta}$$
(A.2.33)

und

$$M_r^{\phi}\rho = -\mu \partial_r^2 - (\partial_r \mu)\partial_r + \frac{2}{r^2}(\partial_r \mu r) . \qquad (A.2.34)$$

A.3 Fehlerfunktion $\Phi(x)$

Die Fehlerfunktion $\Phi(z)$ ist definiert durch das Integral über die Normalverteilung

$$\Phi(z) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} \, \mathrm{d}t \; .$$

Für kleinex < 1kann sie durch die Reihenentwicklung

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{10}x^5 - \frac{1}{42}x^7 + \dots \right)$$
(A.3.35)

be rechnet werden, für große $x>1\ {\rm gilt}$

$$\Phi(x) = 1 - \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \left(x^{-1} - \frac{1}{2}x^{-3} + \frac{3}{4}x^{-5} - \dots \right) .$$
 (A.3.36)

Damit ergibt sich

$$\Phi(0) = 0$$
, $\lim_{x \to \infty} \Phi(x) = 1$. (A.3.37)

Über den gesamten Bereich ($0 \le \frac{z}{H} < \infty$, H = const.) kann die Fehlerfunktion $\Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2H}}\right)$ durch die rationale Funktion

$$\Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2H}}\right) = 1 - (a_1t + a_2t^2 + a_3t^3)e^{-\frac{z^2}{2H^2}} + \epsilon , \quad t = \frac{1}{1 + p\frac{z}{H}},$$

$$p = 0.33267 , \quad a_1 = 0.3480242 , \quad a_2 = -0.0958798 , \quad a_3 = 0.7478556$$
(A.3.38)

zu einer Genauigkeit von $|\,\epsilon\,|\leq 2.5\cdot 10^{-5}$ genähert werden (z.B. Abramowitz & Stegun 1964). Mit der Definition der Fehlerfunktion können die Integrale

$$\int e^{-\frac{z^2}{2H^2}} dz = H \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2H}}\right) , \qquad (A.3.39)$$

$$\int z^2 e^{-\frac{z^2}{2H^2}} dz = H^3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}H}\right) - H^2 z e^{-\frac{z^2}{2H^2}}$$
(A.3.40)

und

$$\int z^4 e^{-\frac{z^2}{2H^2}} dz = 3H^5 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2H}}\right) - (3H^4 z + H^2 z^3) e^{-\frac{z^2}{2H^2}}$$
(A.3.41)

dargestellt und näherungsweise berechnet werden.

Anhang B

Kurze Code-Dokumentation (englisch)

This chapter will give a brief introduction to the hydrodynamics code at hand. The code utilizes a finite volume discretization scheme on a 2D-tensor-product grid in cartesian, cylindrical and spherical coordinates, leaving the choice of an appropriate time-integration scheme up to the user. Time-integration schemes currently implemented are a modified version of the pressure correction scheme presented by Bijl & Wesseling (1998) and a modified version of the operator splitting scheme introduced by Stone & Norman (1992) as described in chapter 3 of this thesis.

The documentation uses FORTRAN 90/95 features and syntax. An introduction to FORTRAN 90/95 is given e.g. by Metcalf & Reid (1996).

B.1 Data structure

B.1.1 Setting up the grid

Grid dimensions An illustration of a tensor-product grid as implemented in the code is given in Figure B.1.1. The syntax used in this figure will become clear during the course of this chapter. The active zone, where the discretized equations are being solved, comprises $n_1 \times n_2$ grid cells. It is confined by four boundaries b1 to b4, where boundary conditions can be defined. The complete grid may have an additional number of ghost-cells (see Stone & Norman 1992) beyond each boundary, which may also be used to define boundary conditions, i.e. g_{11} cells on the left side of b1, g_{12} cells on the right side of b2, g_{21} cells below b3 and g_{22} cells above b4. We therefore define the numbers of grid cells in each direction of the 2D-grid including ghost-cells as $n_{g1} := n_1 + g_{11} + g_{12}$ and $n_{g2} := n_2 + g_{21} + g_{22}$.

Four grid positions Allowing for a finite volume discretization scheme, we discern between four grid positions or simply "grids": The cell centres (cc), where variables of a scalar nature, like the density den are defined, the surfaces facing in the x^1 -direction (s1), where for example the x^1 -velocity component v1 is set, the surfaces facing in the x^2 -direction (s2), where the x^2 -velocity component v2 is defined and finally the cell knots (kn). In the



Figure B.1.1: Computational domain. Definitions of type(GRD) indices and boundaries b1 - b4. The diction $g_cc(i, j)$ stands for all array components of the type(GRD) structure variable g_cc defined on the cell center with indices i, j.

following we refer to the set of all cell centres as the "cc-grid" or simply cc and accordingly s1, s2 and kn. The four grids are of different dimensions: the cc-grid has the dimension $n_{g1} \times n_{g2}$, the s1-grid $(n_{g1} + 1) \times n_{g2}$, the s2-grid $n_{g1} \times (n_{g2} + 1)$ and the kn-grid has the dimension $(n_{g1} + 1) \times (n_{g2} + 1)$.

Indices Indices start with 1 in the FORTRAN convention if no ghost-cells are used, nevertheless, for generality, we define two variables for the first indices, namely i_{01} and i_{02} . The last indices are then given by n_{01} and n_{02} . If the number of ghost-cells left of the b1-boundary g_{11} is greater than zero, indices along x^1 start with $i_{g1} = i_{01} - g_{11} < 1$. Also we define $n_{g1} = n_{01} + g_{12}$, $i_{g2} = i_{02} - g_{21}$ and $n_{g2} = n_{02} + g_{22}$. Along x^1 the first index of the active zone is called i_{a1} . For the cc-grid i_{a1} is identical to i_{01} and we thus write $i_{a1}^{cc} \equiv i_{01}^{cc}$. Since the s1-grid starts at the boundary b1, which by definition is not part of the active zone, $i_{a1}^{s1} = i_{01}^{s1} + 1$. The last index in the active zone is given by n_{a1} , which again is identical to n_{01} for the cc-grid, $n_{a1}^{cc} \equiv n_{01}^{cc}$, whereas for the s1-grid $n_{a1}^{s1} \equiv n_{01}^{s1} - 1$. All other indices on the remaining grids and in direction x^2 are defined analogously.

Coordinate Systems Following table gives an overview on the implementation of the coordinate systems and their coordinates.

coordinates	cartesian	cylindrical	spherical
x^1	x	z	r
x^2	y	r	$0 \leq \theta \leq 180^\circ$

B.1.2 Type definitions

Most operations used in the code are carried out using defined types. In this documentation these types are refered to by the word type followed by their bracketed keywords: e.g. type(VAR) refers to types used for physical or geometrical data, like the density or cell-volumes. The components of a defined type are refered to in the FORTRAN 90 syntax using the %-symbol. Therefore the component z of a defined type variable q is refered to as q%z.

Table B.1.1 gives an overview of some of the most important types and their components used in the software, which will be explained in more detail in the following:

Physical variables All discretized physical or geometrical variables used in a computation are type(VAR) structures. The value of a discretized variable, such as the density, is stored in an allocatable array component z. The array component must be of the same dimension as the grid it is defined on and has to be allocated accordingly. All type(VAR) structure variables are given identities or names, which are stored in the character component id. This can be usefull in debugging sessions. The logical component free is needed for the allocation and deallocation of temporary variables and will be explained in section B.2. The remaining components are structures themselves and are explained in the following.

The working precission of floating point real numbers (FP) is ensured by specifying a kind parameter value FP at the beginning of each run. For example a variable a declared by REAL(FP) :: a is of the same precission as the literal constants 1.7_FP or $1.324432e-2_FP$.

Boundary information A type(BND) structure variable is only used as a component of a type(VAR) parent structure. It comprises information on one of the boundaries b1 - b4 it is defined on. The allocatable array z stores values of inhomogenous Dirichlet boundary conditions. Inhomogenous von Neumann boundary conditions are possible in principle but are currently not implemented.

The shape of the component z varies depending on the grid-position the type (VAR) parent structure is defined on. If the parent is defined on cc, the boundary component values are defined on s1 along b1 and b2 and on s2 along b3 and b4, whereas boundary component values of a type(VAR) parent set on s1 are defined on s1 along b1 and b2 and on the cell-knots along b3 and b4 and if the parent is defined on s2, the boundary component values are defined on kn along b1 and b2 and on s2 along b3 and b4.

The integer-component b = 1, ..., 4 identifies the boundary on which the parent structure is defined. The type of boundary condition is given in the component o, where an optional amount of boundary conditions can be defined. Currently implemented are o=0 for Dirichlet, o=1 for von Neumann boundary conditions and o=2 if ghost-cells are being used. The component *g* will be explained below.

type	components	comments
type (VAR)	<pre>real(FP), dimension(:,:), pointer :: z character(len=id_len) :: id logical :: free type (BND) :: b1 type (BND) :: b2 type (BND) :: b3 type (BND) :: b4 type (GRD), pointer :: g type (GRD), pointer :: g_s1 type (GRD), pointer :: g_s2</pre>	value array variable identifier status flag for deallocation b1 bd. information b2 bd. information b3 bd. information b4 bd. information points on relative 'home' grid relative 'knot' grid relative surface grid facing x^1 relative surface grid facing x^2
type (BND)	<pre>real(FP), dimension(:), pointer :: z integer :: b integer :: o type (GRD), pointer :: g</pre>	boundary value array identifier of bd. (1 to 4) options: 0 = Dirichlet, 1 = von Neumann, 2 = ghost-cells 'home' grid
type (TDM)	<pre>type (VAR) :: 1 type (VAR) :: d type (VAR) :: u integer :: dir character(len=id_len) :: id logical :: free type (GRD), pointer :: g</pre>	lower diagonal band diagonal band upper diagonal band "direction" dir = 1 or 2 identity status flag for deallocation associated grid
type (FPM)	<pre>type (VAR) :: dl type (VAR) :: l type (VAR) :: d type (VAR) :: u type (VAR) :: du character(len=id_len) :: id logical :: free type (GRD), pointer :: g</pre>	left block diagonal band lower diagonal band diagonal band upper diagonal band right block diagonal band identity status flag for deallocation associated grid
type (GRD)	<pre>integer :: i01 integer :: i02 integer :: n01 integer :: n02 integer :: ig1 integer :: ig2 integer :: ng1 integer :: ng2 integer :: ia1 integer :: ia2 integer :: na1 integer :: na2 integer :: g11 integer :: g21 integer :: g22 type (VAR), pointer :: x1 type (VAR), pointer :: x2 type (VAR), pointer :: v type (VAR), pointer :: v type (VAR), pointer :: v type (VAR), pointer :: sinth type (TDM), pointer :: D1 type (TDM), pointer :: D2 type (TDM), pointer :: DD1 type (TDM), pointer :: DD1 type (TDM), pointer :: DD2 </pre>	first index in x^1 incl. bd. (i_{01}) first index in x^2 incl. bd. (i_{02}) last index in x^1 incl. bd. (n_{01}) last index in x^2 incl. bd. (n_{02}) first index in x^2 incl. g.c. (i_{g1}) first index in x^2 incl. g.c. (n_{g1}) last index in x^2 incl. g.c. (n_{g2}) first index of a.z. in x^1 (i_{a1}) first index of a.z. in x^2 (i_{a2}) last index of a.z. in x^2 (n_{a2}) last index of a.z. in x^2 (n_{a2}) # g.c. at g11 (g_{11}) # g.c. in g12 (g_{21}) # g.c. in g22 (g_{22}) x^1 -coordinate x^2 -coordinate δx^1 volume sin θ (target only allocated in spherical coord. system.) Jacobian of 1. derivative in x^1 Jacobian of 2. derivative in x^2 identifier: "g_cc", "g_s1", "g_s2" or "g kn"

Table B.1.1: Some of the most important defined types and their components. Only an incomplete sample of the components of the type(GRD) structure is presented. In the table following abbreviations have been used: bd. = boundary, g.c. = ghost cell, a.z. = active zone.

Memory allocation and pointer association of boundary components (p%b1 - b4) is only done for non-temporary type(VAR) (i.e. p%free = .false.) and type(TDM) structures. See the section on tridiagonal matrices for the definition of boundary components of type(TDM) matrix bands.

Tridiagonal matrices Tridiagonal matrices (TDM) are implemented using structures of type(TDM). The three matrix bands are stored in three structure components of type(VAR), where the component d stands for the diagonal band, 1 stands for the band below the diagonal band and u for the band above the diagonal.

TDM are generally associated with operators that are defined in a certain direction. For example the operator ∂_{x^1} can be associated with a matrix, say D1_cc on the cc-grid, which acts upon an operand as a partial derivative along x^1 . This direction of a type(TDM) structure variable is defined by its integer component dir, which has either the value 1 or 2.

Preset matrices using finite difference discretization schemes are implemented such as the Jacobians of partial derivatives and dimensionally split Laplace operator. The type(BND) components of the type(VAR) matrix bands store boundary conditions. Since for TDM only two boundaries have to be defined, the four type(BND) components can store two different type of boundary conditions (Dirichlet and von Neumann). They have to be copied into the matrix bands by a subroutine before an operation with a type(VAR) operand is carried out unless ghost-cells are being used (see Section B.2.1). If ghost-cells define the boundary conditions, the matrix elements along the boundaries do not differ in principle from the remaining elements. Since the boundary component values for type(TDM) contain matrix entries they are defined on the same grid as the value arrays of the matrix.

Using overloaded operators, preset matrices can be combined to define more complex finite difference matrices (see Section B.2.2).

Five-point matrices Five-point matrices (FPM) are implemented using structures of type(FPM). The five matrix bands are stored in five components of type(VAR), where the component d stands for the diagonal band, d1 and 1 stand for the two bands below the diagonal band and du and u for the two bands above the diagonal. The boundary components of the bands are not allocated. Boundary conditions have to be set in the band elements. A type(FPM) matrix is usually defined by a combination of two type(TDM) structures the boundary elements of which have been fixed in advance according to the needed boundary conditions (see Section B.2.1).

Grid information After the grid has been set up successfully, four elements of the structure type(GRD), namely g_cc, g_s1, g_s2 and g_kn, are initiated. These structure variables contain information on each of the four grids. The postfixes of the variable names are self-explanatory. The meaning of the integer components listed in Table B.1.1, specifying the indices, have been described in the previous section. The values of these are assigned accordingly, e.g. g_cc%ia1 has the value of i_{a1}^{cc} , g_s1%ia1 has the value of i_{a1}^{s1} and so forth. During grid set-up, various type(VAR) and type(TDM) variables associated with data that remains constant on a constant grid, i.e. geometrical data or finite difference matrices, are initiated. These structure variables have to be defined separately for each grid. For example v_cc is a type(VAR) structure variable associated with the control volume of

cc-grid cells and D1_s1 is a type(TDM) matrix acting as a first derivative on type(VAR) variables defined on s1.

The type(GRD) structure components point on variables according to the grid the type(GRD) parent structure is associated with. For example $g_cc%v$ points on v_cc , $g_s1%D1$ points on D1_s1 and so on. Table B.1.1 gives an incomplete list of these components.

On the other hand, the component g of type(VAR) structures points on the type(GRD) structure variable that is associated with the same grid as the type(VAR) parent variable, e.g. the component g of the density variable den defined on the cc-grid points on g_cc, which is associated with its "home"-grid. Likewise for example den%g_s1 points on g_s1. The component g of the velocity variable in x^1 -direction v1 points on g_s1, whereas v1%g_s1 points on g_cc, v1%g_s2 points on g_kn and so on. Like this, grid data at the position of a variable can be accessed and used in operations without a knowledge of where the parent is defined. For example the expression q%g%v is equivalent to v_cc, if q is defined on cc, and equivalent to v_s1, if q is defined on s1.

The type(GRD) structure is of the size 1, so the symbol $g_cc(i,j)$ in Figure B.1.1 refers to the vector-shape of its subcomponents, e.g. $g_cc\%v\%z(i,j)$.

Figure B.1.2 illustrates the association of pointer components with variables linked to cellsurfaces. The somewhat counterintuitive association of $g_s2\%s1 \Rightarrow s2_s2$, $s2_s2$ representing the surface defined on s2 and facing in x^2 , is usefull for the implementation of Upwind-schemes.

B.2 Operators, functions and assignments

B.2.1 Interface assignments

The assignment symbol "=" can be defined by assignment interface procedures. This FORTRAN 90 feature calls up subroutines as implemented in the code according to the type of the left and right hand side variables, e.g. in the case of type(VAR) operands by the source-code subroutine assign_VAR_VAR or of type(TDM) operands by subroutine assign_TDM_TDM. Therefore, the assignment

M = N

is equivalent to

call subroutine assign_TDM_TDM(M, N) ,

and

p = q

is equivalent to

call subroutine assign_VAR_VAR(p, q).

These subroutines assign all array component elements of a variable on the r.h.s. of an equation to all array component elements of a variable on the l.h.s..



Figure B.1.2: Association of surface components. The type(VAR) variable name refers to the direction a surface is facing, e.g. $s1_cc$ faces in the x^1 -direction. Postfixes refer to the grid-position of a variable, e.g. $s1_cc$ is positioned in the cell-centre, $s1_s1$ is positioned on the surface of a cell-centered control volume. The type(GRD) surface component targets $s1_s2$ and $s2_s1$ are not allocated.

Assignment of boundaries

Note that generally p/z(i01,:), where p is a type (VAR) structure variable defined on s1, is not equal to p/b1/z(:), although both arrays are of the same size and defined at the same position in the grid. However, the arrays can be equalized by either of the assignments

p = p%b1,

by which all ghost cells and array values along the boundary b1 p%z(g_s1%ig1:g_s1%i01,:) are set equal to the boundary array components p%b1%z(:) or

p%b1 = p,

where the boundary array components p%b1%z(:) are set equal to p%z(g_s1%i01,:). The assignment of an integer to a boundary component defines an option, e.g.

$$p\%b1 = 1$$

corresponds to p%b1%o = 1, whereas the assignment of a FP value, type(VAR) or type(BND) defines the one-dimensional boundary array component, e.g.

$$p\%b1 = 1._FP$$

corresponds to p%b1%z = 1. FP.

Boundary matrix elements The boundary elements of predefined type(TDM) matrix variables initially comply with boundary conditions defined by ghost-cells. Let D1_cc be the preset Jacobian of a finite difference derivative along x^1 , then the function call bound(D1_cc, o1, o2) returns a similar type(TDM) matrix, the boundary conditions of which are defined by the integer numbers o1 and o2. This new matrix can be copied into a type(TDM) variable, e.g. M1_cc, by writing

$$M1_cc = bound(D1_cc, o1, o2)$$
.

Now, M1_cc is the Jacobian of a finite difference derivative along x^1 complying with boundary conditions defined by o1 and o2. Options are 0 for Dirichlet, 1 for von Neumann and 2 for ghost-cells.

Defining operators Matrix-vector operations can only be done using type(FPM) matrix variables. Two type(TDM) variables M1 and M2, with M1%dir = 1 and M2%dir = 2 and well-defined boundary elements can be assigned to a type(FPM) variable A by writing

$$A = (/M1, M2/)$$
,

An operation A.dot.q will then be equivalent to the mathematical expression $Aq \equiv M_1q + M_2q$ (please, also see Section B.2.2).

B.2.2 Overloaded operators and interface procedures

The data stored in the array component of structure and real variables can be manipulated using interface procedures and overloaded operators. For example the operator "+" may either be used to add each element of the array components of two type(VAR) variables p and q or of each band of two type(TDM) variables M and N. Each of the tasks can be defined in separate functions, e.g. the source-code functions by the names of type(VAR) function add_VAR_VAR and type(GRD) function add_TDM_TDM, that are both called up by the overloaded operator "+" (cf. Figure B.2.3).

So the operation

is equivalent to

M = M + N	
$M = add_TDM_TDM(M)$	N),
p = p + q	
<pre>p = add_VAR_VAR(p,</pre>	q).

is equivalent to

whereas

A large selection of overloaded operators and interface procedures and assignments are implemented in the code, which simplifies implementing algorithms on an abstract level, without the usage of indices. At the same time, the compatibility of the operands is checked prior to the operation implemented in the respective procedure to avoid uncontroled program abortion due to flawed memory access.

```
! Module header
interface operator (+)
     module procedure add_VAR_VAR
     module procedure add_TDM_TDM
                              :
end interface
                          :
contains
! Module functions
type (VAR) function add_VAR_VAR(p, q)
     ! Overloaded Binary Operator "+"
     ! PURPOSE: Summation of two type(VAR) operands.
     type (VAR), intent(in) :: p, q
     ! allocation of result on grid given by p%g
     call alloc (add_VAR_VAR, [..], p%g, free=.true.)
     ! operation
     add_VAR_VAR\%z = p\%z + q\%z
     ! deallocation of temporary storage
     if (p%free) call destroy (p, [...])
     if (q%free) call destroy (q, [...])
```

end function add_VAR_VAR

Figure B.2.3: Example of a simple interface procedure in module variable defining the addition of two type(VAR) operands. The referenced interface procedures alloc and destroy allocate and deallocate temporary storage.

Combining operations Operators and different kind of operands can be combined in a complex manner. For example the mathematical expression

$$r = \frac{p + Aq}{p}$$

could be implemented, writing

$$r = (p + A.dot.q) / p$$
,

where r, p and q are physical variables and A is an operator and r, p and q are type(VAR) variables and A is a type(FPM) matrix structure.

Preset matrices can be combined to define more complex operators. For example the viscous operator in Equation (A.2.13)

$$M_z^z = -\frac{4}{3}(\mu \partial_z^2 + (\partial_z \mu) \cdot \partial_z) \frac{1}{\rho}$$

can be implemented by writing

Boundary condition of a matrix-vector product The four boundary conditions of an operation of the kind

$$p = A.dot.q$$

are given by the components o of the boundary components of the operand, i.e. q%b1%o, q%b2%o, q%b3%o and q%b4%o. They have to comply with the matrix elements of A located at the grid boundaries (see Section B.2.1). In case of Dirichlet boundary conditions, o=0, the boundary values of the operand are given by the arrays q%b1%z, q%b2%z, q%b3%z and q%b4%z, if ghost-cells are being used, o=2, boundary values are given by q%z.

Allocation and deletion of temporary variables A function, for example of the kind type(VAR) function add_VAR_VAR, requires the allocation of memory storage for the function result, which has to be liberated at some stage after its transfer. The logical component free of variables allocated as function results is therefore set to .true., whereas for global variables free = .false..Like this, at the end of each operation or assignment, temporary operands can be identified and killed, which avoids memory leackage and the accidental deletion of global variables. A simple example of this is given in Figure B.2.3.

In many cases it is more efficient to use array components in an operation, e.g. r/z = p/z + q/z, instead of the parent structures themselves, as in r = p + q, since this circumvents manual allocation and deallocation of temporary storage. A lot of times a combination of both is favourable, since operations between arrays and structures, e.g. r/z = r + p/z, are also possible.

B.3 Modules

The following gives a short description of the modules implemented in the code, which are also given in Figure 4.2.2. In this figure the modules are divided into groups I and II. In the modules in group I, the grid and data types are being taken care of, whereas in the modules in group II this data structure is used for an implementation of time-integration schemes and physical equations on a higher level of abstraction.

B.3.1 Modules in group I

floatprec Sets working precision and specifies kind parameter values. Defines and assigns simple floating point (FP) parameters. Contains simple real(FP) function(s).

parameter Defines grid parameters. Reads data files file.dat and var.dat.

types Specifies main structure types and their components (cf. Table B.1.1).

check Contains functions designed to check conformity and association status of derived types.

B.3. MODULES

liberate Contains functions designed to destroy temporary arrays.

assign Contains all interface assignments to allow assignments of values between different type variables.

allocate Contains routines allocating memory storage for array components.

variable Contains routines and operators resulting in type(VAR).
The dot-product ".dot." between two vectors of type(VAR) results in a scalar and is thus
defined in module scalar.

matrix Contains routines and operators resulting in tridiagonal matrices type(TDM) and five-point matrices type(FPM).

scalar Contains routines and operators resulting in variables of size 1.

mesh Sets up staggered, tensor-product grid for cartesian and axisymmetric cylindrical and spherical coordinates in 2D. Stores basic values for coordinates, cell volumes and surfaces in a structure of type(TPG). Structures of type(TPG) can not be used in basic operations defined in modules matrix, variable and scalar.

grid In this module the components of type(GRD) structure variables are initiated and the component pointers associated. This includes tridiagonal-matrices for finite difference operations, that are defined in this module, along with their boundary conditions.

B.3.2 Modules in group II

Declare In this module global variables are declared.

Muscl Contains routines related to upwind transport.

Loeser This module solves linear equations. For a given type(VAR) r.h.s. and a type(FPM) Jacobian it returns a type(VAR) solution. Subroutine Solver uses a left, incomplete LU factorization preconditioner on a BiCGSTAB method.

InOut Contains routines related to Input and Output of data.

Momentum1 Contains routines related to the x^1 -momentum equation, e.g. vertical momentum in cylindrical and radial momentum in spherical coordinates.

Momentum2 Contains routines related to the x^2 -momentum equation, e.g. radial momentum in cylindrical and poloidal momentum in spherical coordinates.

Momentum3 Contains routines related to the x^3 -momentum equation, i.e. angular momentum in cylindrical and spherical coordinates.

Pressure Contains routines related to pressure-correction scheme, density equation, viscosity and remaining variables, mainly used for monitoring.

modZEUS Contains routines related to time-integration using a modified version of the ZEUS-2D scheme (Stone & Norman 1992)

Druck Contains routines related to time-integration, using a pressure correction scheme.

Initial Contains routines setting up initial conditions.

Control Controles time-integration schemes and time-loop.

B.4 Input Files

This gives an overview on the parameter-files, framed by marked boxes in Figure 4.2.2.

file.dat Describes path of parameter file var.dat. Read from subroutine in module parameter.

var.dat Contains fixed parameters needed to set up grid.

sim.dat Contains numerical and physical parameters needed to set up initial conditions and during simulations. These are reread every 100 time-step by subroutine ReadSimDat in module InOut.

Literaturverzeichnis

Abramowitz, M., Stegun, I.A. 1964, *Handbook of Mathematical Functions*, General Publishing Company, Toronto

Anders, E., Grevesse, N. 1989, *Abundances of the elements - Meteoritic and solar*, Geochimica et Cosmochimica Acta, 53, 197

Appenzeller, I., Mundt, R. 1989, T Tauri stars, A&A Rev. 1, 291

Aris, R. 1962, Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New York

Beam, R.M., Warming, R.F. 1978, An Implicit Factored Scheme for the Compressible Navier-Stokes Equations, AIAA J., 16, 393

Bertout, C. 1989, T Tauri stars - Wild as dust, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 27, 351

Bijl, H., Wesseling, P. 1998, A Unified Method for Computing Incompressible and Compressible Flows in Boundary-Fitted Coordinates, J. Comp. Phys., 141, 153

Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Hersant, F., Huré, J.-M., Robert, F. 2002, *Turbulent ra*dial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets, A&A, 384, 1107

Boss, A.P. 1996, Evolution of the Solar Nebula. III. Protoplanetary Disks Undergoing Mass Accretion, ApJ, 469, 906

Boss, A.P., Myhill, E.A. 1992, Protostellar hydrodynamics: constructing and testing a spatially and temporally second-order-accurate method. I. Spherical coordinates, ApJS, 83, 311

Bouwman, J., de Koter, A., van den Ancker, M.E., Waters, L.B.F.M. 2000, *The composition of the circumstellar dust around the Herbig Ae stars AB Aur and HD 163296*, A&A, 360, 213

Bryden, G., Chen, X., Lin, D.N.C., Nelson, R., Papaloizou, J.C.B. 1999, *Tidally Induced Gap Formation in Protostellar Disks: Gap Clearing and Suppression of Protoplanetary Growth*, ApJ, 514, 344 Calvet, N., Hartmann, L.W., Strom, S.E. 2000, *Evolution of Disk Accretion*, Protostars and Planets IV, Hrsg. Mannings, V., Boss, A.P., Russell, S.S.. University of Arizona Press, Tucson, 377

Courant, R., Friedrichs, K.O., Lewy, H. 1928, Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik, Mathematische Annalen, 100, 32

Drouart, A., Dubrulle, B., Gautier, D., Robert, F. 1999, *Structure and Transport in the Solar Nebula from Constraints on Deuterium Enrichment and Giant Planets Formation*, Icarus, 140, 129

Duschl, W.J., Gail, H.-P., Tscharnuter, W.M. 1996, *Destruction processes for dust in protoplanetary accretion disks*, A&A, 312, 624

Duschl, W.J., Strittmatter, P.A., Biermann, P.L. 2000, A note on hydrodynamic viscosity and selfgravitation in accretion disks, A&A, 357, 1123

Eggum, G.E., Coroniti, F.V., Katz, J.I. 1987, Radiation-hydrodynamic calculation of sub-Eddington accretion disks, ApJ, 301, 634

Fabian, D., Jäger, C., Henning, Th., Dorschner, J., Mutschke, H. 2000, *Steps toward interstellar silicate mineralogy. V. Thermal Evolution of Amorphous Magnesium Silicates and Silica*, A&A, 364, 282

Frank, J., King, A., Raine, D. 1992, *Accretion power in astrophysics*, Cambridge University Press, Cambridge

Gad-el-Hak, M. 1998, *Fluid Mechanics from the Beginning to the Third Millennium*, Int. J. Engng Ed. Vol. 14, No.3, 177

Gail, H.-P. 1998, Chemical reactions in protoplanetary accretion disks. IV. Multicomponent dust mixture, A&A, 332, 1099

Gail, H.-P. 2001, Radial mixing in protoplanetary accretion disks. I. Stationary disc models with annealing and carbon combustion, A&A, 378, 192

Gail, H.-P. 2003, Radial mixing in protoplanetary accretion disks. IV. Metamorphosis of the silicate dust component, A&A, submitted

Godunov, S.K. 1959, A difference scheme for numerical computation of discontinuous solution of hydrodynamic equations, Matematicheskii Sbornik, 47, 271

Gracia, J. 2002, *Time-dependent accretion onto black holes*, Dissertation der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg.

Gracia, J., Peitz, J., Keller, Ch., Camenzind, M. 2003, *Evolution of bimodal accretion flow*, MNRAS, accepted, astro-ph/0301113

LITERATURVERZEICHNIS

Günther, R., Kley, W. 2002, Circumbinary disk evolution, A&A, 387, 550

Hairer, E., Norsett, S.P., Wanner, G. 1993, *Solving ordinary differential equations I*, 2nd rev. ed. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York

Hairer, E., Norsett, S.P., Wanner, G. 1996, *Solving ordinary differential equations II*, 2nd rev. ed. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York

Hanner, M.S., Hackwell, J.A., Russel, R.W., Lynch, D.K. 1994, Silicate emission feature in the spectrum of comet Mueller 1993a, Icarus, 112, 490

Harlow, F.H., Amsden, A.A. 1968, Numerical calculation of almost incompressible flows, J. Comp. Phys., 3, 80

Harlow, F.H., Welch, J.E. 1965, *Numerical calculation of time-dependent viscous incompres*sible flow of fluid with a free surface, The Physics of Fluids, 8, 2182

Hawley, J.F., Gammie, C.F., Balbus, S.A. 1995, *Local Three-dimensional Magnetohydrody*namic Simulations of Accretion Disks, ApJ, 440, 742

Hawley, J.F., Smarr, L.L., Wilson, J. R. 1984, *A numerical study of nonspherical black hole accretion*. *II - Finite differencing and code calibration*, ApJS, 55, 211

Hill, H.G.M., Grady, C.A., Nuth, J.A., Heap, S.R. 2002, Observational Evidence for Very Large-scale Dust and Gas Transport in Protostellar Nebulae, Lunar Planet Sci. Conf., 33, 1247

Hirsch, C. 1988, *Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1*, Chichester: John Wiley, Sons Ltd.

Hirsch, C. 1990, *Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 2*, Chichester: John Wiley, Sons Ltd.

Hujeirat, A., Rannacher, R. 1998, A Numerical Approach Towards Steady State Solutions in Boundary Layers in Astrophysics, Int. J. Numer. Meth. Fluids, 28, 1

Kant, I. 1755, *Allgemeine Naturgeschichte und Theorie des Himmels*, Königsberg und Leipzig: Johann Friedrich Petersen

Keller, Ch., Gail, H.-P. 2003, *Radial mixing in protoplanetary accretion disks*. VI. Mixing by *large-scale radial flows*, A&A, submitted

Klahr, H.H., Henning, Th., Kley, W. 1999, On the Azimuthal Structure of Thermal Convection in Circumstellar Disks, ApJ, 514, 325

Kley, W. 1989, Radiation hydrodynamics of the boundary layer in accretion disks. I -Numerical methods, A&A, 208, 98 Kley, W. 1998, On the treatment of the Coriolis force in computational astrophysics, A&A, 338, L37

Kley, W., D'Angelo, G., Henning, Th. 2001, *Three-dimensional Simulations of a Planet Embedded in a Protoplanetary Disk*, ApJ, 547, 457

Kley, W., Hensler, G. 1987, Two-dimensional numerical models of the boundary layer of accretion disks in cataclysmic variables, A&A, 172, 124

Kley, W., Lin, D.N.C. 1992, Two-dimensional viscous accretion disk models. I - On meridional circulations in radiative regions, ApJ, 397, 600

Kley, W., Papaloizou, J.C.B., Lin, D.N.C. 1993, On the Angular Momentum Transport Associated with Convective Eddies in Accretion Disks, ApJ, 416, 679

Kluźniak, W., Kita, D. 2000, Three-Dimensional Structure of an α -Accretion Disk, preprint [astro-ph/0006266]

Landau, L.D., Lifshitz, E.M. 1959, Fluid Mechanics, Addison-Wesley, Reading, Mass.

Laplace, P.S. 1796, Exposition du Système du Monde, Circle-Sociale, Paris

Larson, R.B. 1969, Numerical calculations of the dynamics of a collapsing proto-star, MNRAS, 145, 271

Laughlin, G., Różyczka, M. 1996, The Effect of Gravitational Instabilities on Protostellar Disks, ApJ, 456, 279

Lucy, L.B. 1977, A numerical approach to the testing of the fission hypothesis, AJ, 82, 1013

Lynden-Bell, D., Pringle, J.E. 1974, The evolution of viscous discs and the origin of the nebular variables, MNRAS 168, 603

Marcy, G.M., Cochran, W.D., Mayor, M. 2000, *Extrasolar Planets around Main-Sequence Stars*, Protostars and Planets IV, Hrsg. Mannings, V., Boss, A.P., Russell, S.S.. University of Arizona Press, Tucson, 1285

Mathis, J.S., Rumpl, W., Nordsieck, K.H. 1977, *The size distribution of interstellar grains*, ApJ, 217, 425

Mayor, M., Queloz, D. 1995, A Jupiter-Mass Companion to a Solar-Type Star, Nature, 378, 355

Meeus, G., Waters, L.B.F.M., Bouwman, J., van den Ancker, M.E., Waelkens, C., Malfait, K. 2001, *ISO spectroscopy of circumstellar dust in 14 Herbig Ae/Be systems: Towards an understanding of dust processing*, A&A, 365, 476

Meister, A. 1998, Comparison of Different Krylov Subspace Methods Embedded in an Implicit Finite Volume Scheme for the Computation of Viscous and Inviscid Flow Fields on

LITERATURVERZEICHNIS

Unstructured Grids, J. Comput. Phys., 140, 311

Meister, A. 1999, *Numerik linearer Gleichungssysteme*, Friedr. Vieweg, Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden

Metcalf, M., Reid, J. 1996, FORTRAN 90/95 explained, Oxford University Press

Morfill, G.E. 1983, Some cosmochemical consequences of a turbulent protoplanetary cloud, Icarus, 53, 41

Narayan, R., Mahadevan, R., Quataert, E. 1998, *Advection-dominated accretion around black holes*, Theory of Black Hole Accretion Disks, Hrsg. Abramowicz, M.A., Bjornsson, G., Pringle, J.E.. Cambridge University Press, 148

Navier, C.L.M.H. 1823, Mémoire sur les lois du mouvement des fluides, Mém. Acad. Roy. Sci., 6, 389

Norman, M.L. 1980, Numerical study of rotating interstellar clouds: Equilibrium and collapse, Ph.D. thesis, Univ. California Davis, LLNL report UCRL-52946

Norman, M.L., Wilson J.R., Barton, R. 1980, A new calculation on rotating protostar collapse, ApJ, 239, 968

Nowak, M., Lehr, D. 1998, *Stable oscillations of black hole accretion discs*, Theory of Black Hole Accretion Disks, Hrsg. Abramowicz, M.A., Bjornsson, G., Pringle, J.E.. Cambridge University Press, 233

Nuth, J.A. 1999, Constraints on Nebular Dynamics Based on Observations of Annealed Magnesium Silicate Grains in Comets and in Disks Around Herbig AE and Be Stars, Lunar Planet Sci. Conf., 30, 1726

Nuth, J.A., Hill, H.G.M. 2000, *The Formation Age of Comets: Predicted Physical and Chemical Trends*, Lunar Planet Sci. Conf., 31, 1229

Nuth, J.A., Hill, H.G.M., Kletetschka, G. 2000, *Determining the ages of comets from the fraction of crystalline dust*, Nature, 406, 275

Padgett, D.L., Brandner, W., Stapelfeldt, K.R., Strom, S.E., Terebey, S., Koerner, D. 1999, *HUBBLE SPACE TELESCOPE/NICMOS Imaging of Disks and Envelopes around Very Young Stars*, AJ, 117, 1490

Pollack, J.B., Hollenbach, D., Beckwith, S., Simonelli, D.P., Roush, T., Fong, W. 1994, *Composition and radiative properties of grains in molecular clouds and accretion disks*, ApJ, 421, 615

Pringle, J.E. 1981, Accretion discs in astrophysics, Ann. Rev. Astron. Astrophys., 19, 137

Regev, O., Gitelman, L. 2002, Asymptotic models of meridional flows in thin viscous accretion disks, A&A, 396, 623

Robertson, J.A., Frank, J. 1986, A numerical study of two-dimensional accretion flows, MNRAS, 221, 279

Różyzcka, M. 1985, Two-dimensional models of stellar wind bubbles. I - Numerical methods and their application to the investigation of outer shell instabilities, A&A, 143, 59

Różyczka, M., Bodenheimer, P., Bell, K.R. 1994, A Numerical Study of Viscous Flows in Axisymmetic alpha-Accretion Disks, ApJ, 423, 736

Ruden, S.P., Lin, D.N.C. 1986, The global evolution of the primordial solar nebula, ApJ, 308, 883

Ruden, S.P., Pollack, J.B. 1991, *The dynamical evolution of the protosolar nebula*, ApJ, 375, 740

Schmit, U., Tscharnuter W.M. 1999, On the Formation of the Fine-Scale Structure in Saturn's B Ring, Icarus, 138, 173

Shakura, N.I., Sunyaev, R.A. 1973, Black holes in binary systems. Observational appearance, A&A, 24, 337

Siemiginowska, A. 1988, Meridional circulations in thin accretion disks, Acta Astron., 38, 21

Sod, G.A. 1978, A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws, J. Comput. Phys., 27, 1

Stokes, G.G. 1845, On the Theories of Internal Friction of Fluids in Motion, Trans. Camb. Phi. Soc., 8, 287

Stone, J.M., Norman, M.L. 1992, ZEUS-2D: A radiation magnetohydrodynamics code for astrophysical flows in two space dimensions. I - The hydrodynamic algorithms and tests, ApJS, 80, 753

Urpin, V.A. 1984, Hydrodynamic Flows in Accretion Disks, Soviet Astron. 28, 50

Van Kan, J.J.I.M. 1986, A second-order accurate pressure correction method for viscous incompressible flow, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 7, 870

Van Leer, B. 1977, Towards the ultimate conservative difference scheme. IV: A new approach to numerical convection, J. Comp. Phys, 23, 276

Wehrstedt, M., Gail, H.-P. 2002, Radial mixing in protoplanetary accretion disks. II. Time dependent disk models with annealing and carbon combustion, A&A, 385, 181

Wehrstedt, M., Gail, H.-P. 2003, Radial mixing in protoplanetary accretion disks. V. Model calculations with different element compositions, submitted

Wooden, D.H., Butner, H.M., Harker, D.E., Woodward, C.E. 2000, Mg-Rich Silicate Crystals in Comet Hale-Bopp: ISM Relics or Solar Nebula Condensates?, Icarus, 143, 126

Wooden, D.H., Harker, D.E., Woodward, C.E., Butner, H.M., Koike, Ch., Witteborn, F.C., McMurtry, C.W. 1999, *Silicate Mineralogy of the Dust in the Inner Coma of Comet C/1995* 01 (Hale-Bopp) Pre- and Postperihelion, ApJ, 517, 1034

LITERATURVERZEICHNIS

Danksagung

Diese Arbeit wurde finanziert mit Mitteln aus dem Sonderforschungsbereich 359 der Deutschen Forschungsgemeinschaft.

Mein herzlicher Dank geht an Herrn Prof. Dr. H.-P. Gail für die hilfreiche und freundliche Betreuung dieser Arbeit.

Ich danke herzlich Herrn Prof. Dr. M. Camenzind für die Erstellung des Zweitgutachtens und die vorausgehende Durchsicht des Manuskripts.

Herrn Dr. S. Appl danke ich herzlich für seine Betreuung und freundschaftliche Zusammenarbeit in der Anfangsphase dieser Arbeit und wertvollen Kommentare zum Manuskript.

Herrn Prof. Dr. W. M. Tscharnuter danke ich herzlich für das Interesse an meiner Arbeit und hilfreiche Unterstützung.

Herrn Prof. Dr. R. Rannacher danke ich für hilfreiche Kommentare und die Zur-Verfügung-Stellung eines Arbeitsplatzes in der Anfangsphase dieser Arbeit.

Herrn U. Küster vom Hochleistungsrechenzentrum in Stuttgart danke ich für seine Beratung zu Implementierungsfragen.

Herrn R. Kürschner danke ich für viele wertvolle Fachgespräche.

Herrn S. Hezel danke ich für die Durchsicht des Manuskripts.

Herrn Prof. Dr. C. D. Munz danke ich für die freundliche Beratung und wertvollen Kommentare zu meiner Arbeit.

Herrn M. Mayer danke ich für die Administration der Institutsrechner.

Meinen Eltern Werner und Marlis Keller und meiner ganzen Familie bin ich zu tiefem Dank verbunden für ihre fortwährende Unterstützung und Freundschaft.

Alessa Pedrotti danke ich von ganzem Herzen, dass sie mir zur Seite steht.

Herrn Dr. Sebastian Els danke ich für seine Freundschaft, Motivation und großartige Zusammenarbeit.

Ich danke Andrea Ferrarotti, Martina Buchhaupt, Gunter Kaliwoda, Michael Wehrstedt und Christian Graf für die freundschaftliche Arbeitsatmosphäre.

Allen Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Astrophysik sei für die kollegiale Zusammenarbeit gedankt.