

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

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Tobias Florian Illenseer
aus Ostercappeln

Tag der mündl. Prüfung: 20.12.2006

**Hochauflösende Verfahren
zur numerischen Berechnung von
strahlungsgetriebenen Scheibenwinden**

Gutachter: Prof. Dr. Wolfgang J. Duschl
Prof. Dr. Iring Bender

Hochauflösende Verfahren zur numerischen Berechnung von strahlungsgetriebenen Scheibenwinden

In dieser Arbeit wird das dreidimensionale System der gasdynamischen Gleichungen in allgemein krummlinig-orthogonalen Koordinaten formuliert und auf zwei Raumdimensionen reduziert, indem nur Probleme mit bestimmten Symmetrien betrachtet werden. Zur Lösung der so erhaltenen hyperbolischen Erhaltungsgleichungen wird ein neues numerisches Verfahren für krummlinige Gitter entwickelt. Umfangreiche Tests belegen, dass die mit dieser Methode gewonnenen Resultate eine im Vergleich mit anderen Verfahren mindestens ebenso gute Approximation für die tatsächlichen Lösungen darstellen.

Mit Hilfe des neuen numerischen Verfahrens wird die Dynamik der strahlungsgetriebenen Scheibenwinde untersucht. Es werden Stationäre Lösungen für bestimmte Einflussrandbedingungen gefunden. Außerdem wird untersucht, inwiefern die Resultate von der künstlichen Viskosität des Verfahrens abhängen. Berechnungen auf sphärischen und zylindrischen Gittern ergeben kleine Unterschiede in den Lösungen in Abhängigkeit von der jeweiligen Geometrie.

High resolution schemes for the numerical computation of radiation driven disk winds

In the thesis at hand I formulate the three-dimensional system of gas dynamic equations in general orthogonal curvilinear coordinates. By considering separate symmetries the system is reduced to a two-dimensional one. To solve the emerging problem of hyperbolic conservation laws on curvilinear grids I introduce a new numerical scheme. Numerous tests in various environments proof that this method provides reliable approximations, which correspond to those of other methods.

In a second step I examine the dynamics of line-driven accretion disk winds by applying the new scheme. Stationary results only ensue from certain inflow boundary conditions. Furthermore I investigate the dependence of the solutions on the amount of artificial viscosity. Simulations on spherical grids show minor differences compared to those in cylindrical geometries.

Denn was fängt man am Jüngsten Tag, wenn die menschlichen Werke gewogen werden, mit drei Abhandlungen über die Ameisensäure an, und wenn es ihrer dreißig wären?! Andererseits, was weiß man vom Jüngsten Tag, wenn man nicht einmal weiß, was alles bis dahin aus der Ameisensäure werden kann?!

Robert Musil

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	7
1 Einleitung	11
2 Physikalisches Modell	15
2.1 Aktive Galaxienkerne	15
2.2 Windmodell	17
2.2.1 Gleichungen der Gasdynamik	18
2.2.2 Gravitationskraft	19
2.2.3 Strahlungsbeschleunigung	20
3 Mathematische Formulierung	27
3.1 Krummlinig-orthogonale Koordinaten	27
3.1.1 Koordinatensysteme	27
3.1.2 Kovariante Ableitung und affiner Zusammenhang	28
3.1.3 Gleichungen in Erhaltungsform	30
3.1.4 Energiegleichung mit Zentrifugalkraftterm	32
3.2 Flussvektoren	33
3.2.1 Jacobimatrizen der Flussvektoren	35
3.2.2 Diagonalisierung der Jacobimatrizen	37

4	Numerisches Verfahren	39
4.1	Das FV-Schema nach Kurganov und Tadmor	39
4.1.1	Integrale Erhaltungsgleichung	41
4.1.2	Semidiskretes Gleichungssystem	42
4.1.3	Der Grenzwert $\Delta t \rightarrow 0$	49
4.1.4	Approximation der Flussintegrale	56
4.2	Rekonstruktion	58
4.2.1	Das Konzept der Totalen Variation	60
4.2.2	Begrenzung der Steigungen	61
4.2.3	Volumenzentren der Zellen	63
4.2.4	Rekonstruktion der primitiven Variablen	63
4.3	Quellterme	64
4.3.1	Geometrische Quellterme	65
4.4	Zeitintegration	67
4.4.1	CFL Bedingung	68
4.4.2	Randbedingungen	69
4.4.3	Runge-Kutta-Schema	71
5	Realisierung	73
5.1	Programmstruktur	73
5.1.1	Initialisierung	74
5.1.2	Hauptprogramm	74
5.2	Benutzerfunktionen	76
5.2.1	Setzen der Kontrollvariablen	76
5.2.2	Anfangs- und Randbedingungen	77
5.3	Wichtige Module	79
5.3.1	Geometrie	80
5.3.2	Physik	81
5.3.3	Limitier	83
5.3.4	Quellterme	84

6	Numerische Tests	85
6.1	Testumgebung	85
6.2	1D-Riemannprobleme	86
6.2.1	Sods Stoßrohr-Test	86
6.2.2	Toros Testproblem Nr. 2	92
6.3	2D-Riemannprobleme	93
6.3.1	Kartesische Tests	94
6.3.2	Polarkoordinaten	95
6.4	Mach-3-Windtunnel mit Stufe	102
6.5	Sedov-Explosion	106
6.5.1	Polarkoordinaten	107
6.5.2	Zylinder- und Kugelkoordinaten	111
6.6	Bondi-Akkretion	116
6.6.1	Polarkoordinaten	117
6.6.2	Zylinder- und Kugelkoordinaten	121
6.7	Kollaps einer rotierenden Gaskugel	126
7	Modellrechnungen	137
7.1	Simulationsumgebung	137
7.1.1	Numerische Berechnung der Quellterme	138
7.1.2	Anfangsbedingungen	142
7.1.3	Randbedingungen	145
7.1.4	Modellparameter	148
7.2	Simulationsergebnisse	150
7.2.1	Zeitliche Entwicklung	151
7.2.2	Veränderung der Randbedingungen	155
7.2.3	Einfluss des Koordinatensystems	157
7.2.4	Künstliche Viskosität und Drehimpuls	159
7.2.5	Beschleunigung durch Linienabsorption	161
7.2.6	Grenzen der Modelle	162
7.3	Vergleich mit anderen Modellrechnungen	163

7.3.1	Stationarität der Lösungen	163
7.3.2	Instabilitäten	165
8	Resümee	167
A	Divergenz von Tensorfeldern	171
B	Eigenvektoren der Jacobimatrizen	175
C	Charakteristische Gleichungen	177
D	Verzeichnis der Abkürzungen	181
	Literaturverzeichnis	183

Kapitel 1

Einleitung

Die Natur, wie sie sich uns Menschen in ihrer Gesamtheit offenbart, ist ein äußerst komplexes System. Es ist daher erstaunlich und als ein großes Verdienst der Naturwissenschaften anzusehen, dass es immer wieder gelungen ist, diese Vielfalt durch eine überschaubare Zahl von fundamentalen Gesetzen zu beschreiben. Noch erstaunlicher ist es, dass diese Gesetze nicht nur in unserer unmittelbaren Umgebung Gültigkeit besitzen, sondern geeignet sind, das Verhalten von Objekten mit kosmischen Dimensionen vorherzusagen. Als Leonhard Euler 1755 seine Gleichung zur Beschreibung der Dynamik von Flüssigkeiten und Gasen aufstellte, hatte er wahrscheinlich noch nicht im Kopf, dass sie eines Tages eine Grundlage für das Verständnis nahezu aller sichtbaren Objekte des Nachthimmels bilden würde.

Trotz ihrer scheinbaren Einfachheit sieht man sich aber auch heute – mehr als 250 Jahre später – häufig vor ein unlösbares Problem gestellt, will man in einem konkreten Fall eine Lösung für diese Gleichung angeben. Meistens bieten sich dann zwei Möglichkeiten: Entweder erlaubt es das betrachtete physikalische System, dass man die Gleichung z.B. durch eine geschickte Koordinatentransformation oder die Vernachlässigung bestimmter Effekte weiter vereinfacht, oder man entwickelt ein Verfahren, mit dem man die Lösung approximativ bestimmen kann. Beide Methoden lassen sich auch kombinieren, indem man zunächst eine Vereinfachung der Eulerschen Gleichung vornimmt und dann für die neue Gleichung eine Näherungslösung sucht.

Durch Entwicklung der elektronischen Rechner in der zweiten Hälfte des zwanzigsten Jahrhunderts hat die Methode der numerischen Approximation sehr stark an Bedeutung gewonnen, da es nun möglich wurde, die Berechnungen effizient zu automatisieren. Außerdem haben die enormen Leistungssteigerungen im Bereich der Halbleiter-Elektronik dazu geführt, dass immer

komplexere Probleme angegangen werden konnten. Dennoch ist es nicht allein auf die leistungsfähigeren Computer zurückzuführen, dass man heutzutage in der Lage ist, die Eulersche Gleichung in drei Raumdimensionen mit sehr hoher Genauigkeit näherungsweise zu lösen. Auch bei der Entwicklung der numerischen Verfahren hat es seit der Methode von Lax (1954) und Friedrichs (1954) und der wegweisenden Arbeit von Godunov (1959) erhebliche Fortschritte gegeben.

Im Bereich der astrophysikalischen Simulationen wurden lange Zeit hauptsächlich zwei Methoden für die Lösung hydrodynamischer Probleme in mehr als einer Raumdimension verwendet. Beide Verfahren wurden fast gleichzeitig in den 1980er Jahren entwickelt. Seit den ersten detaillierten Beschreibungen der jeweiligen Methode in Colella und Woodward (1984) sowie Norman und Winkler (1986) hat es immer wieder Erweiterungen gegeben, die es ermöglicht haben, kompliziertere astrophysikalische Probleme zu untersuchen. Im Kern jedoch, also dort, wo das hydrodynamische Transportproblem gelöst wird, haben sich diese Verfahren nicht geändert.

In den letzten Jahren gab es allerdings Bestrebungen, Verfahren, die in den Ingenieurwissenschaften schon längere Zeit Verwendung finden, auch in der Astrophysik zu etablieren. Bislang wurde immer davon abgesehen, die sog. Riemannlöser auch im astrophysikalischen Bereich zu verwenden, weil man mit ihnen oftmals nur ganz bestimmte hydrodynamische Probleme lösen konnte. Die Ursache dafür ist prinzipieller Natur, da die Riemannlöser voraussetzen, dass man in der Lage ist, das Eigenwertproblem der betrachteten hyperbolischen Erhaltungsgleichung zu lösen. Für die Eulergleichung ist dies möglich, sofern man ein ideales Gas betrachtet. Schon eine kleine Veränderung der Zustandsgleichung kann hier aber zu Problemen führen.

Allerdings wurden auch in diesem Bereich erhebliche Fortschritte gemacht. So gibt es mittlerweile eine ganze Reihe von approximativen Riemannlösern, die sich dazu eignen, komplexere hydrodynamische Probleme mit ausreichender Genauigkeit zu lösen. Einen ganz neuen Zugang lieferte hier der Vorschlag von Kurganov und Tadmor (2000), der den Vorzug der Einfachheit eines zentralen Differenzenschemas hat, dies aber mit den guten Erhaltungseigenschaften der Riemannlöser verbindet. Ein weiterer Vorteil dieses Verfahrens ist die semidiskrete Formulierung. Sie erlaubt es, das Problem der Lösung eines partiellen Differentialgleichungssystems auf die Lösung eines Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen zu reduzieren, die die zeitliche Entwicklung des hydrodynamischen Systems auf einem diskreten räumlichen Gitter beschreiben. In Kurganov und Tadmor (2002) konnten die Autoren außerdem zeigen, dass mit Hilfe derselben Methoden im Gegensatz zu vielen gängigen Verfahren, die alle Raumdimensionen getrennt voneinander als eindimen-

sionale Probleme betrachten, ein vollständig zweidimensionales numerisches Schema entwickelt werden kann. So verwundert es nicht, dass das Verfahren von Kurganov und Tadmor auch in die Entwicklung neuerer Programmcodes zur Lösung von hydrodynamischen Problemen in der Astrophysik, wie z.B. in Ricker u. a. (1999) beschrieben, eingeflossen ist.

Trotz der heutzutage zur Verfügung stehenden Computerressourcen kann es sinnvoll sein, ein dreidimensionales hydrodynamisches Problem durch bestimmte Koordinatentransformationen und die Ausnutzung von Symmetrien auf zwei Dimensionen zu reduzieren. Insbesondere in der Astrophysik, aber auch in den Ingenieurwissenschaften und der Meteorologie hat man es häufig mit rotationssymmetrischen Systemen zu tun, auf die sich diese Reduktion auf zwei Raumdimensionen anwenden lässt. Leider haben derartige Koordinatentransformationen aber auch die unerfreuliche Eigenschaft, dass sie zu neuen Quelltermen und anderen geometrischen Korrekturfaktoren in den hydrodynamischen Gleichungen führen. Ein numerisches Verfahren, das für kartesische Gitter entwickelt wurde, ist daher in der Regel nicht so einfach auf krummlinige Gitter zu übertragen.

In dieser Arbeit wird erstmals der Nachweis erbracht, dass sich das zweidimensionale kartesische Verfahren von Kurganov und Tadmor auch für eine sehr allgemeine Klasse von krummlinig-orthogonalen Koordinaten formulieren lässt. Dazu wird zunächst in Kapitel 3 das System der dreidimensionalen Eulergleichungen durch eine Koordinatentransformation auf zwei Raumdimensionen reduziert, indem eine Symmetrie bezüglich einer der Koordinaten angenommen wird. Dann wird, basierend auf den Darstellungen von Kurganov und Tadmor (2002), in Kapitel 4 die grundlegende Gleichung des Kurganov-Tadmor (KT)-Verfahrens in den verallgemeinerten krummlinig-orthogonalen Koordinaten hergeleitet. Die Beweisführung ist dabei so allgemein gehalten, dass man die Resultate im Prinzip auf die Lösung beliebiger hyperbolischer Erhaltungsgleichungen, die sich in diesen Koordinaten formulieren lassen, anwenden kann.

Diesem theoretischen Teil folgt ein Abschnitt über die konkrete Realisierung des Verfahrens in einem Computerprogramm und ein ausführliches Kapitel, in dem die mit dem Programm ermittelten numerischen Lösungen untersucht werden. Dabei wird ein besonderes Augenmerk auf das Verhalten der Lösungen für unterschiedliche krummlinige Gitter gerichtet und nachgewiesen, dass deren Einfluss auf die Resultate minimal ist. Im direkten Vergleich mit anderen numerischen Methoden erweist sich das KT-Verfahren als sehr robust und effizient, wobei die Güte der Approximationen annähernd gleich ist.

Um die Leistungsfähigkeit des Verfahrens im Hinblick auf astrophysikalische

Probleme zu testen, wird in Kapitel 2 ein einfaches Modell eines strahlungsgetriebenen Scheibenwindes entwickelt, wie er vermutlich in den Zentren von aktiven Galaxien entsteht. Für dieses Modell werden in Kapitel 7 dann die mit Hilfe des neuen numerischen Verfahrens gewonnenen Lösungen diskutiert. Ähnliche Simulationen wurden für Aktive Galaxienkerne schon von Proga und Kallman (2004) und für Kataklysmische Variable Sterne von Pereyra und Kallman (2003) durchgeführt. Trotz der recht ausgefeilten Modelle wird seit mittlerweile fast zehn Jahren die Frage erörtert, ob diese Art von Scheibenwinden überhaupt stationäre Lösungen haben (siehe dazu Pereyra u. a. 2006).

Offenbar haben die neuen Modelle, die immer mehr physikalische Prozesse zu beschreiben bemüht waren, keine Klärung dieser Frage erbracht. Es liegt daher nahe zu vermuten, dass dieses Problem viel fundamentaler ist und möglicherweise entweder auf das verwendete numerische Verfahren oder die jeweils unterschiedlich implementierten Randbedingungen zurückzuführen ist. Mit dem KT-Verfahren ist es gelungen, stationäre Lösungen sowohl für sphärisch-symmetrische Gitter, wie sie bei Proga und Kallman (2004) eingesetzt werden, als auch für zylindrische Gitter, wie sie von Pereyra und Kallman (2003) verwendet werden, zu erzeugen. Dabei spielt die Wahl der Randbedingungen eine entscheidende Rolle.

Kapitel 2

Physikalisches Modell

2.1 Aktive Galaxienkerne

Seit einigen Jahren gibt es Bestrebungen für eine Reihe von extragalaktischen Objekten, die allgemein als „Aktive Galaxienkerne“ (engl. Active Galactic Nucleus (AGN)) bezeichnet werden, ein vereinheitlichtes Modell zu entwickeln. Zu diesen Objekten gehören die Seyfert-Galaxien (Typ 1 und 2), Quasare, BL-Lac Objekte und die Gruppe der Radio-Galaxien. Jedes dieser Objekte für sich weist charakteristische Merkmale im Spektrum auf, die es deutlich von den anderen unterscheidet. Allerdings hat die Fülle von Beobachtungsdaten der letzten Jahrzehnte immer mehr Objekte zu Tage gefördert, die sowohl Eigenschaften der einen als auch der anderen Klasse aufweisen. So sind z.B. Quasare mit geringer Leuchtkraft kaum von Seyfert-Galaxien vom Typ 1 zu unterscheiden. Dies lässt die Schlussfolgerung zu, dass es einen universellen Parameter gibt, der für die Unterschiede verantwortlich ist.

In den Beobachtungen schränkt man die Quellen für das jeweils emittierte charakteristische Spektrum auf sehr kleine Regionen in Zentren von Galaxien – sofern diese identifiziert werden können – von der Größenordnung 1 pc ein. Aus hochauflösenden Aufnahmen im Radiobereich schließt man ferner, dass diese Objekte nicht sphärisch symmetrisch sind, sondern eher eine axiale Symmetrie aufweisen. Es liegt daher die Vermutung nahe, dass sich die oben genannten Objekte in ihrem Inklinationswinkel voneinander unterscheiden.

Das zur Zeit favorisierte Modell eines AGN besteht im Wesentlichen aus den in Abbildung 2.1 dargestellten Komponenten Jet, Akkretionsscheibe und Staubtorus. Außerdem schließt man aus der Beobachtung von schmalen und breiten Emissionslinien, dass es zwei verschiedene Regionen gibt,

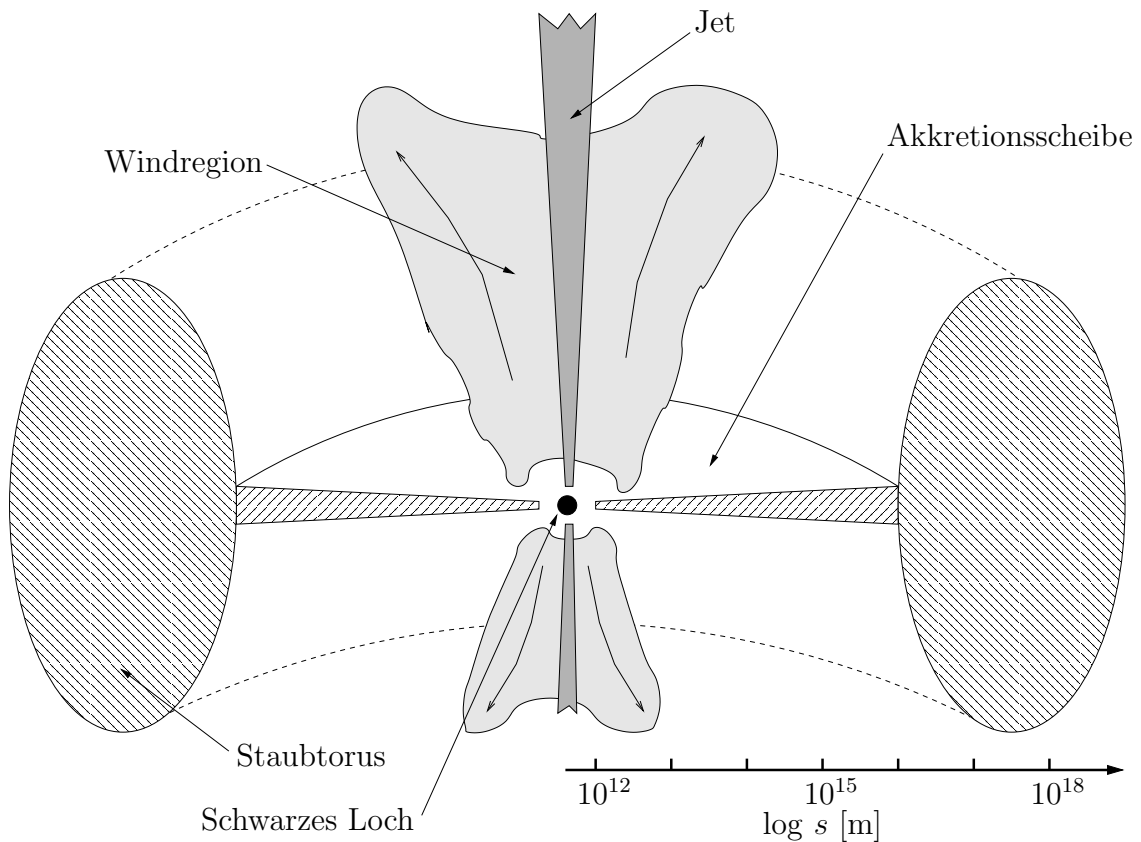


Abbildung 2.1: Schematisches Modell eines Aktiven Galaxienkerns

in denen sich Gaswolken mit unterschiedlichen charakteristischen Geschwindigkeiten bewegen. Dabei lokalisiert man die sog. broad line region (BLR) mit den höheren Geschwindigkeiten in einem engeren Bereich innerhalb des Staubtorus, während die narrow line region (NLR) weiter außen liegt. Ein möglicher Mechanismus für die Beschleunigung der Gaswolken in der BLR ist der in dieser Arbeit diskutierte Scheibenwind.

Als primäre Energiequelle wird in diesem Modell die Akkretionsscheibe angesehen. Im Gegensatz zu gewöhnlichen Sternen bezieht sie ihre Energie nicht aus thermonuklearen Reaktionen sondern, aus der Umwandlung von Gravitationsenergie in thermische Energie über viskose Prozesse. Ausgehend von den theoretischen Modellen von Shakura und Sunyaev (1973) konnte gezeigt werden, dass dies einen sehr effizienten Mechanismus zur Erzeugung von Strahlung liefert, der es ermöglicht, die z. T. außerordentlich hohe Leuchtkraft von Quasaren zu erklären.

Diese Modelle gehen davon aus, dass aus einem weiter außen liegenden Ma-

teriereservoir Gas mit Drehimpuls auf ein kompaktes zentrales Objekt akkretiert wird. Der Drehimpuls führt dazu, dass die Gasmassen eine abgeflachte Struktur annehmen, und die viskosen Prozesse bewirken eine Abnahme der potentiellen Energie des Gases, die in Form von Strahlung emittiert wird. Dieses Standardbild hat sich mittlerweile etabliert, auch wenn die Details und dabei insbesondere die Ursache für die Viskosität nach wie vor diskutiert werden.

Für die im nächsten Abschnitt beschriebenen Winde spielt das konkrete Modell für die Akkretionsscheibe nur insofern eine Rolle, als es eine Randbedingung für den Wind liefert. Geht man davon aus, dass die Scheibe optisch dick ist und somit jedes Oberflächenelement wie ein Schwarzer Körper strahlt, so kann man zeigen, dass das emittierte Spektrum unabhängig von der Beschreibung der Viskosität ist. Allerdings ergibt sich eine indirekte Abhängigkeit vom Scheibenmodell über die Akkretionsrate. Diese kann für unterschiedliche Scheibenmodelle stark variieren. In den Windmodellen wird sie als Parameter behandelt, so dass im Prinzip beliebige Akkretionsscheiben betrachtet werden können.

2.2 Windmodell

Das in dieser Arbeit vorgestellte Modell zur Beschreibung von AGN-Winden basiert auf den Gleichungen der klassischen Hydrodynamik. Das bedeutet, dass zunächst einmal alle relativistischen Effekte vernachlässigt werden, also sowohl der Einfluss des Gravitationsfeldes des zentralen schwarzen Lochs auf die Geometrie des Raumes als auch Fehler, die dadurch entstehen, dass die Gleichungen nicht lorentzinvariant sind. Ferner werden alle viskosen Prozesse vernachlässigt, so dass sich die Navier-Stokes-Gleichung für den Impulstransport auf die Euler-Gleichung reduziert. Es wird also ein reines Advektionsproblem ohne diffusiven Transport betrachtet. Dementsprechend wird auch in der Energiegleichung die viskose Heizung nicht berücksichtigt.

Das Gravitationsfeld wird durch das Newtonsche Gravitationspotential beschrieben, wobei die Masse der Akkretionsscheibe als klein gegenüber der des schwarzen Lochs angenommen wird und das schwarze Loch als Punktmasse betrachtet wird. Die Basis für die Beschleunigung des Windes bilden Wechselwirkungsprozesse zwischen dem von der Akkretionsscheibe emittierten Strahlungsfeld und Elektronen im Gas.

Außerdem verlangt man, dass sowohl die Akkretionsscheibe als auch der Wind rotationssymmetrisch um die Achse durch das Zentrum der Scheibe

sind. So reduziert man das dreidimensionale Problem auf zwei Raumdimensionen, indem man die grundlegenden Gleichungen auf entsprechende Koordinatensysteme spezialisiert.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, dass der Einfluss von Magnetfeldern nicht in die Rechnungen eingeht.

2.2.1 Gleichungen der Gasdynamik

Die theoretische Grundlage für die Beschreibung der Dynamik von Flüssigkeiten und Gasen bilden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie, wie sie in der Kontinuumsmechanik entwickelt werden. Sie beschreiben das Verhalten von Massendichte, Impulsdichte und Energiedichte eines Gases oder einer Flüssigkeit als Funktionen des Ortes und der Zeit. Man bezeichnet diese Variablen als konservativ, da sie die eigentlichen Erhaltungseigenschaften widerspiegeln. Alternativ können die Gleichungen auch für die sog. primitiven Variablen Massendichte, Geschwindigkeit und Druck formuliert werden. Dieser Variablensatz wird üblicherweise in der Hydrodynamik verwendet. Da beide Formulierungen äquivalent sind, seien die Gleichungen hier nur in der gewöhnlichen Form, wie sie auch in vielen Lehrbüchern zu finden ist, angegeben¹. In Kapitel 4 wird sich allerdings zeigen, dass die Wahl der Variablen im Hinblick auf die Erhaltungseigenschaften eines numerischen Verfahrens von großer Bedeutung ist.

Die Massenerhaltung wird in der Kontinuumsmechanik durch die Kontinuitätsgleichung beschrieben. Sie besagt, dass die zeitliche Änderung der Massendichte ϱ in einem Volumenelement identisch dem Massenfluss $\varrho \mathbf{v}$ durch die Oberfläche desselben ist. Oder einfacher ausgedrückt: Es können keine Gasteilchen erzeugt oder vernichtet werden.

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

Die zweite Gleichung der Gasdynamik beschreibt die Impulserhaltung in einem nicht-viskosen Fluid und wurde erstmals 1755 von Leonhard Euler angegeben.

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\varrho} \nabla P + \mathbf{f} \quad (2.2)$$

Dabei bezeichnet P den Druck und \mathbf{f} eine noch näher zu spezifizierende Beschleunigung durch eine externe Kraft. Schließlich wird eine Gleichung für

¹Eine kovariante Herleitung der Gleichungen aus den Erhaltungssätzen mit Hilfe des Reynoldsschen Transporttheorems findet sich in Mihalas und Weibel Mihalas (1984).

den Transport der spezifischen inneren Energie ε benötigt.

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varepsilon = -\frac{P}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.3)$$

Der Quellterm auf der rechten Seite steht für die von der Gasströmung verrichtete Kompressionsarbeit. Um das Gleichungssystem zu schließen, muss man noch eine Zustandsgleichung $P(\rho, \varepsilon)$ angeben. Für ein ideales Gas lautet diese

$$P = (\gamma - 1) \rho \varepsilon \quad (2.4)$$

Dabei ist γ das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten c_P/c_V .

In Kapitel 3 werden diese Gleichungen auf bestimmte krummlinig-orthogonale Koordinatensysteme spezialisiert. Es sei an dieser Stelle schon darauf hingewiesen, dass der Nabla-Operator hier die kovariante Ableitung bezeichnet. Das bedeutet, dass Koordinatensysteme mit nicht-euklidischen Geometrien i.A. zu zusätzlichen Quelltermen, sog. Scheinkräften führen.

2.2.2 Gravitationskraft

In den oben angegebenen Gleichungen für die Impulserhaltung können zusätzliche Kräfte neben den Druckgradienten eine Beschleunigung des Gases bewirken. Da der Wind seinen Ursprung in der Nähe eines sehr massereichen kompakten Objekts haben soll, ist es unbedingt erforderlich, eine adäquate Beschreibung der Gravitationsbeschleunigung in das Modell aufzunehmen.

Dabei sollen zunächst zwei Näherungen gemacht werden. Zum einen soll die Lösung für das Windproblem in einem Bereich gesucht werden, der weit genug vom Zentralobjekt entfernt ist, so dass für das Gravitationsfeld das klassische newtonsche Potential verwendet werden kann. Diese Näherung ist so lange gut, wie man sich auf Skalen bewegt, die mindestens um eine Größenordnung über dem Schwarzschildradius der Zentralmasse liegen. Die räumliche Ausdehnung des zu untersuchenden Bereichs deckt sich in der Größenordnung eher mit der, die für die Akkretionsscheibe angenommen wird, was in etwa Skalen von 100 bis 1000 Schwarzschildradien entspricht. Diese Näherung erscheint also plausibel. Man sollte aber im Kopf behalten, dass die Lösungen für Radien deutlich unter 100 Schwarzschildradien ungenau werden können.

Die zweite Approximation betrifft die Beschaffenheit des Gases im Wind. Es wird angenommen, dass die Dichte der Gasmassen mit zunehmender Distanz von der Äquatorialebene der Akkretionsscheibe rapide abnimmt. Die Bedingungen sollen denen in der Korona von massereichen heißen Sternen

gleichen. Man erwartet, dass die betrachteten Dichten in der Größenordnung von 10^{-10} bis 10^{-12} kg/m³ liegen, so dass das Gas als optisch dünn behandelt werden kann. Außerdem ist die gesamte im Wind enthaltene Gasmasse dann so gering, dass die Eigengravitation des Gases gegenüber der Gravitation des Zentralobjekts vernachlässigt werden kann.

In der newtonschen Theorie lässt sich die Gravitationsbeschleunigung, die auf ein Gas wirkt, durch den Gradienten des Gravitationspotentials ausdrücken.

$$\mathbf{f}_{\text{grav}} = -\nabla\Phi.$$

Wird das Potential durch eine Punktmasse M im Ursprung erzeugt, so gilt

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{MG}{|\mathbf{r}|}$$

und daher für die Gravitationsbeschleunigung

$$\mathbf{f}_{\text{grav}} = -\frac{MG}{|\mathbf{r}|^3}\mathbf{r}. \quad (2.5)$$

G ist hier die newtonsche Gravitationskonstante und \mathbf{r} der Ortsvektor.

2.2.3 Strahlungsbeschleunigung

Die Gravitationskraft bewirkt eine Beschleunigung der Gase auf das kompakte Objekt im Zentrum und würde daher einen Akkretionsprozess in Gang setzen. Um einen Wind zu erzeugen, der aus dem inneren Bereich des Aktiven Galaxienkerns ausströmt, ist daher eine dem entgegengerichtete Beschleunigung erforderlich. Im Bereich der Sternwinde werden schon seit geraumer Zeit eine Vielzahl von Prozessen diskutiert, die Ausflüsse zur Folge haben können. Für einen umfassenden Überblick über dieses Gebiet sei auf die Einführung von Lamers und Cassinelli (1999) verwiesen.

Grundsätzlich sind die für Sternatmosphären diskutierten Prozesse auch auf Akkretionsscheiben anwendbar. Allerdings gilt sowohl für Sterne als auch für Akkretionsscheiben, dass die Bedingungen in der Photosphäre einen maßgeblichen Einfluss auf die Art des Beschleunigungsmechanismus haben. Ein wichtiger Parameter ist in diesem Zusammenhang die Effektivtemperatur T_{eff} . Für Akkretionsscheiben ist sie eine Funktion des Abstands vom Zentrum s und gegeben durch (vgl. Pringle 1981)

$$T_{\text{eff}}(s) = \left(\frac{3L_D}{4\pi\sigma} \frac{s_0}{s^3} \left(1 - \sqrt{\frac{s_0}{s}} \right) \right)^{1/4} \quad (2.6)$$

mit dem inneren Rand der Scheibe s_0 , der Stefan-Boltzmann-Konstante σ und der Leuchtkraft der Akkretionsscheibe

$$L_D = \frac{\dot{M}_0 M G}{2s_0}. \quad (2.7)$$

\dot{M}_0 ist die Akkretionsrate, M die Masse des Zentralobjekts und G wieder die newtonsche Gravitationskonstante. Für eine detaillierte Herleitung dieser Zusammenhänge sei auf Frank u. a. (2002) verwiesen. Die Temperaturkurve liegt bei einem typischen AGN mit einem massereichen Schwarzen Loch von etwa $10^8 M_\odot$, einer Akkretionsrate von $\dot{M}_0 = 10^{-1} M_\odot/\text{a}$ und einem inneren Scheibenradius $s_0 = 3 R_S$ (Schwarzschildradien) in der Größenordnung von etwa 10^4 K bis 10^5 K . Das entspricht der Größenordnung der Effektivtemperaturen von heißen massereichen Sternen. Bei dieser Art von Sternen beobachtet man starke Ausflüsse mit Windgeschwindigkeiten von über 1000 km/s . Man kann daher erwarten, dass solche Winde auch bei Akkretionsscheiben auftreten. Seine Beschleunigung bezieht diese Art von Wind aus Wechselwirkungsprozessen zwischen Strahlung und Materie, bei der die Photonen Impuls auf die Ionen im Wind übertragen. Dieser Impulsübertrag ist gegeben durch (vgl. Padmanabhan 2000, Kap. 6.8):

$$\mathbf{f}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int_0^\infty d\nu \oint \chi_\nu I_\nu(\mathbf{r}, \hat{n}) \hat{n} d\Omega. \quad (2.8)$$

Darin ist c die Lichtgeschwindigkeit, ν die Frequenz der Strahlung, χ_ν die totale Extinktion, I_ν das Strahlungsfeld, \mathbf{r} der Ortsvektor, \hat{n} der Richtungseinheitsvektor und $d\Omega$ das Raumwinkelement.

Es ist im Allgemeinen sehr schwierig wenn nicht sogar unmöglich, diese Beschleunigung explizit anzugeben. Das liegt zum einen daran, dass das Strahlungsfeld eine unbekanntes orts- und richtungsabhängige Größe darstellt, und zum anderen hängt die totale Extinktion in der Regel vom Zustand und von der Zusammensetzung des betrachteten Gases ab. Das heißt, dass das Integral in Gl. (2.8) strenggenommen nur dann ausgewertet werden kann, wenn bereits eine Lösung sowohl für das hydrodynamische Problem als auch für das Strahlungsfeld angegeben werden kann. Will man nicht auch noch die Strahlungstransportgleichung lösen, ist man also auf approximative Beschreibungen des Strahlungsfeldes angewiesen.

Die folgenden Betrachtungen zum Beschleunigungsmechanismus finden sich in zahlreichen Arbeiten wieder, die sich in den letzten Jahren mit dem Problem des strahlungsgetriebenen Scheibenwindes befasst haben. Besonders

hingewiesen sei an dieser Stelle auf die ausführlichen Darstellungen in Proga u. a. (1998) und Pereyra u. a. (1997).

Wie schon zuvor erwähnt, erwartet man, dass das Gas im Wind eine sehr geringe Dichte hat und somit als optisch dünn angesehen werden kann. Das bedeutet, dass die Strahlung den Wind praktisch ungestört durchdringen kann. In dieser Approximation reicht es aus, das Strahlungsfeld in der Scheibenphotosphäre zu kennen. Nimmt man ferner an, dass die Strahlung im Wesentlichen über elastische Streuung mit den Elektronen des Ionengases wechselwirkt, so gelangt man zu einer einfachen Beschreibung der Beschleunigung:

$$\mathbf{f}_e = \frac{\sigma_e}{c} \oint I(\mathbf{r}_p, \hat{n}) \hat{n} \, d\Omega. \quad (2.9)$$

Das Frequenzintegral konnte ausgeführt werden, weil der Koeffizient für die elastische Elektronenstreuung σ_e eine Konstante und somit unabhängig von der Frequenz ist. Für eine Akkretionsscheibe hat das über die Frequenz integrierte Strahlungsfeld an der Scheibenoberfläche die Gestalt

$$I(s) = \frac{\mathcal{F}(s)}{\pi} = \frac{\sigma T_{\text{eff}}^4}{\pi} = \frac{3L_D}{4\pi^2} \frac{s_0}{s^3} \left(1 - \sqrt{\frac{s_0}{s}}\right) \quad (2.10)$$

mit dem Oberflächenfluss \mathcal{F} der Akkretionsscheibe. Hierbei wurde das Stefan-Boltzmann-Gesetz und die Effektivtemperatur aus Gl. (2.6) verwendet. Im Prinzip ist es nun möglich, die Integration in Gl. (2.9) auszuführen. Dazu muss man lediglich die Integrationsvariablen entsprechend transformieren.

Dass eine geringe Dichte es erlaubt, das Medium als optisch dünn zu behandeln, ist leider nur die halbe Wahrheit. Ein Problem ergibt sich, wenn die Photonen nicht nur elastisch an freien Elektronen streuen, sondern über Absorptions- und Reemissionsprozesse mit den Hüllenelektronen der Ionen wechselwirken. Dies kann allerdings nur dann passieren, wenn die Ionen nicht vollständig ionisiert sind, also bei Temperaturen unterhalb von etwa 10^8 K. Bei der Absorption von Photonen wird ebenfalls Impuls vom Strahlungsfeld auf das Ionengas übertragen. Dieser Mechanismus ist sogar um ein Vielfaches effektiver als die reine Elektronenstreuung und sollte daher berücksichtigt werden.

Im Allgemeinen ist es schwierig, dieses physikalische Problem zu lösen, da die Wechselwirkung zwischen Photonen und Ionen eine Änderung des Strahlungsfeldes zur Folge hat. Eine korrekte Behandlung würde also die Lösung der Strahlungstransportgleichung nötig machen. Dies ist analytisch nicht möglich und numerisch sehr aufwendig. Will man diesen Mechanismus dennoch in das Windmodell aufnehmen, ist man auf geeignete Approximationen angewiesen.

Die folgenden Ausführungen gehen auf einen Vorschlag von Sobolev (1960) zurück. Die wesentliche Voraussetzung für diese sog. Sobolev-Approximation ist die Annahme, dass die Strömung des Gases mehr oder weniger monoton ist. Ein Photon, das bei einer bestimmten Frequenz in der Photosphäre emittiert wird, kann dann nur in einer sehr schmalen Zone von Ionen im Wind absorbiert werden, nämlich nur genau dann, wenn die Resonanzlinie eine entsprechende Dopplerverschiebung erfahren hat.

Analog zu der Beschleunigung durch elastische Elektronenstreuung kann man den Linienanteil an der Strahlungsbeschleunigung (Gl. 2.8) schreiben als

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int_0^\infty d\nu \oint \kappa_\nu I_\nu(\mathbf{r}, \hat{n}) \hat{n} d\Omega. \quad (2.11)$$

mit dem Absorptionskoeffizienten κ_ν . In der Sobolev-Approximation kann das Linienprofil aufgrund der schmalen Wechselwirkungszone wie eine Delta-Funktion behandelt werden. Daher ergibt sich für ein Ensemble von Linien mit den für die jeweilige Linie charakteristischen Linienabsorptionskoeffizienten κ_l

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \sum_l \kappa_l \int_0^\infty d\nu \oint I_\nu(\mathbf{r}, \hat{n}) \hat{n} d\Omega.$$

Nun kann man das Frequenzintegral in ein Wegintegral entlang der Richtung des Sichtvektors \hat{n} umwandeln (vgl. Shu 1991, Kap. 9). Mit der Resonanzfrequenz ν_0 im Ruhesystem des Ions ergibt sich für die Transformation der Differentiale²

$$d\nu = \frac{\nu_0}{c} |\hat{n} \cdot \nabla(\hat{n} \cdot \mathbf{v})| ds.$$

Führt man außerdem die optische Liniendicke τ_l nach Sobolev (1960)

$$\tau_l = \frac{c}{\nu_0} \frac{\rho \kappa_l}{|\hat{n} \cdot \nabla(\hat{n} \cdot \mathbf{v})|} \quad (2.12)$$

ein, so ergibt sich für die Linienbeschleunigung

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \sum_l \kappa_l \int_0^\infty ds \oint I_{\nu(s)}(\mathbf{r}, \hat{n}) \frac{\kappa_l \rho}{\tau_l} \hat{n} d\Omega.$$

Nun wandelt man das Wegintegral über s in ein Integral über die optische Dicke um

$$d\tilde{\tau}_l = \kappa_l \rho ds$$

²Die Variable s parametrisiert hier den Weg, den die Photonen zurücklegen und ist **nicht** identisch mit der Koordinaten s in Gl. (2.10).

und ersetzt die Intensität des Strahlungsfeldes am Ort \mathbf{r} im Wind durch die abgeschwächte photosphärische Intensität

$$I_{\nu(s)}(\mathbf{r}, \hat{n}) = e^{-\tilde{\tau}} I_{\nu_p}(\mathbf{r}_p, \hat{n}).$$

ν_p ist die Frequenz, die das Photon bei der Erzeugung in der Photosphäre hat. Das Integral über die optische Dicke lässt sich damit ausführen, und so erhält man die Linienbeschleunigung in der Sobolev-Approximation

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \sum_l \kappa_l \oint I_{\nu_p}(\mathbf{r}_p, \hat{n}) \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau_l} \hat{n} \, d\Omega \quad (2.13)$$

Man beachte, dass die Ortsabhängigkeit der Linienbeschleunigung nun indirekt über die optische Dicke (Gl. 2.12) in die Gleichung einfließt. Ähnlich wie bei der elastischen Elektronenstreuung konnte so das Strahlungsfeld auf die bekannte photosphärische Strahlung zurückgeführt werden. Das Raumwinkelintegral lässt sich hier allerdings nicht so einfach ausführen, weil die optische Dicke auch vom Richtungseinheitsvektor \hat{n} abhängt. Man ist also auf weitere Approximationen angewiesen.

Zunächst kann man eine Näherung von Castor (1974) übernehmen, die den Integranden etwas vereinfacht.

$$\frac{1 - e^{-\tau}}{\tau_l} \approx \min\left(\Delta\nu, \frac{1}{\tau_l}\right)$$

Dabei bezeichnet $\Delta\nu$ die Dopplerverbreiterung der Absorptionslinien durch die thermische Bewegung:

$$\Delta\nu = \nu - \nu_0 = \nu_0 \left(1 + \frac{v_{\text{th}}}{c}\right) - \nu_0 = \frac{\nu_0 v_{\text{th}}}{c}. \quad (2.14)$$

Mit Hilfe dieser Approximation haben Castor u. a. (1975) den Ausdruck unter dem Integral parametrisieren können, indem sie Summation über die einzelnen Linien und Integration über den Raumwinkel vertauscht und das Verhalten der Summe in Abhängigkeit von der optischen Dicke τ_l untersucht haben.

$$\sum_l \frac{I_{\nu_p}(\mathbf{r}_p, \hat{n}) \kappa_l}{I(\mathbf{r}_p, \hat{n}) \sigma_e} \min\left(\Delta\nu, \frac{1}{\tau_l}\right) \approx k \left(\frac{\kappa_l}{\sigma_e \Delta\nu \tau_l}\right)^\alpha = k \left(\frac{c \kappa_l}{\nu_0 \sigma_e v_{\text{th}} \tau_l}\right)^\alpha \quad (2.15)$$

Dabei sind k und α temperaturabhängige Parameter von der Größenordnung $\sim \frac{1}{2}$, und $I(\mathbf{r}_p, \hat{n})$ ist die über die Frequenz integrierte Strahlungsintensität

in der Photosphäre. Damit schreibt sich die Linienbeschleunigung in der parametrisierten Form als

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{r}) = \frac{\sigma_e}{c} \oint I(\mathbf{r}_p, \hat{n}) k \left(\frac{c\kappa_l}{\nu_0 \sigma_e v_{th} \tau_l} \right)^\alpha \hat{n} \, d\Omega. \quad (2.16)$$

In der Literatur wird dies häufig als Castor-Abbott-Klein (CAK)-Approximation bezeichnet. Die Intensität $I(\mathbf{r}_p, \hat{n})$ ist durch Gl. (2.10) und die optische Dicke τ_l durch Gl. (2.12) gegeben, so dass sich das Raumwinkelintegral im Prinzip berechnen lässt. Wegen der komplizierten Abhängigkeit vom Vektor \hat{n} gibt es keine analytischen Lösungen, und man kann lediglich versuchen, das verbleibende Problem numerisch zu lösen.

Kapitel 3

Mathematische Formulierung

3.1 Krummlinig-orthogonale Koordinaten

Die im vorangegangenen Kapitel angegebenen Gleichungen sollen nun auf eine bestimmte Klasse von krummlinig-orthogonalen Koordinaten spezialisiert werden. Dazu bedient man sich am besten des formalen Apparats der Differentialgeometrie und schreibt die Gleichungen in kovarianter Form als Vektor- und Tensorgleichungen. Eine recht ausführliche Darstellung dazu findet sich im Anhang von Stone und Norman (1992). An dieser Stelle soll allerdings ein etwas anderer algebraischer Weg zur Herleitung besprochen werden, um zu zeigen, dass die geometrischen Quellterme aus lediglich vier voneinander unabhängigen Funktionen zusammengesetzt werden können. Diese Funktionen wiederum können aus den Skalenfaktoren und deren Ableitungen bestimmt werden. Das ist im Hinblick auf das in Kapitel 4 entwickelte numerische Schema von Bedeutung.

3.1.1 Koordinatensysteme

Im Folgenden werden krummlinig-orthogonale Koordinatensysteme $\{\xi, \eta, \phi\}$ betrachtet, die gewissen Einschränkungen unterworfen sind. Zunächst einmal sei die Metrik g_{ij} diagonal, d.h. das Linienelement lässt sich schreiben als

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j = (h_\xi d\xi)^2 + (h_\eta d\eta)^2 + (h_\phi d\phi)^2. \quad (3.1)$$

Ferner sollen die Skalenfaktoren h_ξ, h_η, h_ϕ nur von den Koordinaten ξ und η abhängen. Das impliziert eine gewisse Art von (Rotations-)Symmetrie der betrachteten Koordinatensysteme. Man kann nun zwei Arten von Basisvektoren und zugehörigen dualen Einsformen einführen:

- Koordinatenbasis

$$\begin{aligned} \widehat{e}_\xi &= \frac{\partial}{\partial \xi} & \widehat{e}_\eta &= \frac{\partial}{\partial \eta} & \widehat{e}_\phi &= \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \widetilde{\omega}^\xi &= d\xi & \widetilde{\omega}^\eta &= d\eta & \widetilde{\omega}^\phi &= d\phi \end{aligned}$$

- Orthonormalbasis¹

$$\begin{aligned} \widehat{e}_{\hat{\xi}} &= \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} & \widehat{e}_{\hat{\eta}} &= \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} & \widehat{e}_{\hat{\phi}} &= \frac{1}{h_\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \widetilde{\omega}^{\hat{\xi}} &= h_\xi d\xi & \widetilde{\omega}^{\hat{\eta}} &= h_\eta d\eta & \widetilde{\omega}^{\hat{\phi}} &= h_\phi d\phi \end{aligned}$$

Wie man leicht sieht, besitzt das Linienelement bezüglich des Orthonormalsystems die Darstellung

$$ds^2 = (\widetilde{\omega}^{\hat{\xi}})^2 + (\widetilde{\omega}^{\hat{\eta}})^2 + (\widetilde{\omega}^{\hat{\phi}})^2 = \delta_{\hat{k}\hat{l}} \widetilde{\omega}^{\hat{k}} \widetilde{\omega}^{\hat{l}} \quad (3.2)$$

Die Metrik ist in dieser Basis also die Einheitsabbildung und somit unabhängig von den Koordinaten. Man erkaufte sich diese Unabhängigkeit allerdings durch eine Abhängigkeit der Basisvektoren bzw. der dualen Einsformen von den Koordinaten.

3.1.2 Kovariante Ableitung und affiner Zusammenhang

Eine Spezialisierung des in Kapitel 2.2.1 angegebenen partiellen Differentialgleichungssystems auf bestimmte Koordinaten erfordert die Kenntnis der kovarianten Ableitung bezüglich einer Basis. Zweckmäßigerweise wählt man als Basis die lokale Orthonormalbasis. Das hat den Vorteil, dass die Darstellungen von Vektoren und Tensoren in krummlinigen Koordinaten durch orthonormale Transformationen aus denen in kartesischen Koordinaten hervorgehen. Vektoren erfahren also lediglich eine Drehung, ihr Betrag bleibt erhalten.

Man kann nun den affinen Zusammenhang durch die Entwicklungskoeffizienten der kovarianten Ableitung der Basisvektoren einführen:

$$\nabla_{\widehat{e}_i} \widehat{e}_j = \Gamma^k_{ij} \widehat{e}_k. \quad (3.3)$$

Ist der Zusammenhang metrisch, so gilt:

$$\Gamma^k_{ij} = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{li}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{jl}}{\partial x^i} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l} + c_{lij} + c_{lji} - c_{ijl} \right), \quad (3.4)$$

¹Der gedachte Index soll im Folgenden immer anzeigen, dass sich die jeweilige Größe auf die Orthonormalbasis bezieht.

wobei g^{kl} die Inverse der Metrik ist und die Kommutatorkoeffizienten c_{ijk} über die Lie-Klammer definiert werden.

$$[\widehat{e}_i, \widehat{e}_j] = c_{ij}{}^k \widehat{e}_k = g^{kl} c_{ijl} \widehat{e}_k \quad (3.5)$$

Sie sind nur in einer Nicht-Koordinatenbasis von null verschieden. Für das oben angegebene Orthonormalsystem verschwinden hingegen alle Ableitungen der Metrik, so dass der affine Zusammenhang durch die Kommutatorkoeffizienten eindeutig bestimmt ist. Man berechnet diese, indem man die Lie-Klammer auf eine beliebige, von den Koordinaten abhängende Funktion anwendet.

$$\begin{aligned} [\widehat{e}_\xi, \widehat{e}_\eta] f(\xi, \eta, \phi) &= \left[\frac{1}{h_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi}, \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \right] f(\xi, \eta, \phi) \\ &= \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{h_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} f \right) - \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{h_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} f \right) \\ &= \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial f}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{h_\eta} \right) - \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{h_\xi} \right) \\ &= \left(-\frac{1}{h_\xi h_\eta} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \right) \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial f}{\partial \eta} + \left(\frac{1}{h_\eta h_\xi} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} \right) \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ &= \left(c_{\xi\eta\eta} \widehat{e}_\eta + c_{\xi\eta\xi} \widehat{e}_\xi \right) f \end{aligned}$$

Im letzten Schritt können die Koeffizienten der inversen Metrik weggelassen werden, da im Orthonormalsystem wegen Gleichung (3.2) auch $g^{\hat{k}\hat{l}} = \delta^{\hat{k}\hat{l}}$ gilt. Auf die gleiche Weise erhält man

$$\begin{aligned} [\widehat{e}_\xi, \widehat{e}_\phi] f &= \left(-\frac{1}{h_\xi h_\phi} \frac{\partial h_\phi}{\partial \xi} \right) \frac{1}{h_\phi} \frac{\partial f}{\partial \phi} = \left(c_{\xi\phi\phi} \widehat{e}_\phi \right) f \\ [\widehat{e}_\eta, \widehat{e}_\phi] f &= \left(-\frac{1}{h_\eta h_\phi} \frac{\partial h_\phi}{\partial \eta} \right) \frac{1}{h_\phi} \frac{\partial f}{\partial \phi} = \left(c_{\eta\phi\phi} \widehat{e}_\phi \right) f. \end{aligned}$$

Dabei wurde die oben gemachte Einschränkung verwendet, dass die Skalenfaktoren nur Funktionen der Veränderlichen ξ und η , also unabhängig von ϕ sind. Nutzt man noch die Antisymmetrie in den ersten beiden Indizes, so kann man folgende Liste der vier nicht-verschwindenden Kommutatorkoeffizienten aufstellen.

$$\begin{aligned} c_{\eta\xi\eta} &= \frac{1}{h_\xi h_\eta} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} & c_{\xi\eta\xi} &= \frac{1}{h_\xi h_\eta} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} \\ c_{\phi\xi\phi} &= \frac{1}{h_\xi h_\phi} \frac{\partial h_\phi}{\partial \xi} & c_{\phi\eta\phi} &= \frac{1}{h_\eta h_\phi} \frac{\partial h_\phi}{\partial \eta} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Da die Ableitungen der Metrik alle identisch null sind, ergibt sich mit Hilfe von Gleichung (3.4) sofort der affine Zusammenhang

$$\begin{aligned}\Gamma_{\hat{\xi}\hat{\eta}}^{\hat{\eta}} &= c_{\hat{\eta}\hat{\xi}} & \Gamma_{\hat{\eta}\hat{\xi}}^{\hat{\xi}} &= c_{\hat{\xi}\hat{\eta}} \\ \Gamma_{\hat{\xi}\hat{\phi}}^{\hat{\phi}} &= c_{\hat{\phi}\hat{\xi}} & \Gamma_{\hat{\eta}\hat{\phi}}^{\hat{\phi}} &= c_{\hat{\phi}\hat{\eta}}\end{aligned}\quad (3.7)$$

und daraus die Entwicklung der kovarianten Ableitungen der Basisvektoren Gleichung (3.3). Diese wiederum erlaubt es einem, die Divergenz von Vektor- und Tensorfeldern in der Orthonormalbasis auszudrücken, wie sie im nächsten Kapitel benötigt wird². Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, dass alle Korrekturterme, die durch die krummlinigen Koordinaten in die Gleichungen eingehen, durch die vier Kommutatorkoeffizienten festgelegt sind und damit aus den drei Skalenfaktoren h_ξ, h_η, h_ϕ und deren Ableitungen berechnet werden können.

3.1.3 Gleichungen in Erhaltungsform

Wie schon in Kapitel 2.2.1 angemerkt, gibt es verschiedene Variablensätze, in denen die hydrodynamischen Gleichungen formuliert werden können. Um die Gleichungen in Erhaltungsform aufzustellen, ist es zweckmäßig, den Tensor der Impulsstromdichte einzuführen.

$$\mathbf{T} = \varrho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + P \mathbb{I}_3 \quad (3.8)$$

Außerdem definiert man die Gesamtenergie pro Einheitsvolumen als Summe aus spezifischer innerer Energie mal der Dichte und kinetischer Energie pro Volumenelement.

$$e = \varrho \varepsilon + \frac{\varrho}{2} \mathbf{v}^2 \quad (3.9)$$

Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie lauten dann

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \varrho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{T} = \varrho \mathbf{f} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot ((e + P)\mathbf{v}) = \varrho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}. \quad (3.12)$$

Zusammen mit der Zustandsgleichung (2.4) ergibt sich das geschlossene System von Erhaltungsgleichungen für die konservativen Variablen Dichte ϱ , Impuls $\varrho \mathbf{v}$ und Gesamtenergie e .

²Für die etwas längere Herleitung siehe Anhang A

Damit die Gleichungen einer numerischen Lösung zugänglich werden, muss man Koordinaten einführen. Der in den vorangegangenen Kapiteln entwickelte Formalismus für krummlinige Koordinaten erlaubt eine Darstellung der Gleichungen für bestimmte orthonormale Systeme. Dazu zählen auch die häufig verwendeten Zylinderkoordinaten und Kugelkoordinaten. Allerdings ist es von Vorteil, für die folgende Herleitung bei den allgemeineren Koordinaten zu bleiben. Es wird sich nämlich zeigen, dass auf diese Weise ein sehr flexibles numerisches Schema entwickelt werden kann, mit dem man z.B. auch Probleme in oblat-sphäroiden Koordinaten löst.

Mit Hilfe der in Anhang A hergeleiteten Formeln lassen sich die Gleichungen sofort in eine koordinatenabhängige Form bringen. Zur Vereinfachung der Schreibweise führt man noch die Determinante der Metrik ein.

$$g = h_\xi^2 h_\eta^2 h_\phi^2 \quad \text{also} \quad \frac{1}{h_\xi h_\eta h_\phi} = \frac{1}{\sqrt{g}} \quad (3.13)$$

Ferner soll im Folgenden die ϕ -Abhängigkeit sämtlicher physikalischer Größen vernachlässigt werden. Damit reduziert man das Problem auf zwei Raumdimensionen und verlangt somit von den physikalischen Systemen eine gewisse Symmetrie. Das muss nicht notwendigerweise eine Rotationssymmetrie sein, auch wenn die Wahl der Variablen ϕ das vielleicht suggerieren könnte. So erhält man mit Gleichung (A.5) für Kontinuitäts- und Energiegleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi \varrho v_\xi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi \varrho v_\eta) \right) = 0 \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi (e + P) v_\xi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi (e + P) v_\eta) \right) \\ = \varrho (f_\xi v_\xi + f_\eta v_\eta + f_\phi v_\phi). \end{aligned} \quad (3.15)$$

und mit Gleichung (A.6) für die Komponenten der Impulsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho v_\xi}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi (\varrho v_\xi v_\xi + P)) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi (\varrho v_\xi v_\eta)) \right) \\ + c_{\xi\hat{\eta}\hat{\eta}} (\varrho v_\eta v_\xi) - c_{\hat{\eta}\xi\hat{\eta}} (\varrho v_\eta v_\eta + P) - c_{\hat{\phi}\xi\hat{\phi}} (\varrho v_\phi v_\phi + P) = \varrho f_\xi \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho v_\eta}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi (\varrho v_\eta v_\xi)) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi (\varrho v_\eta v_\eta + P)) \right) \\ + c_{\hat{\eta}\xi\hat{\eta}} (\varrho v_\xi v_\eta) - c_{\xi\hat{\eta}\hat{\eta}} (\varrho v_\xi v_\xi + P) - c_{\hat{\phi}\xi\hat{\phi}} (\varrho v_\phi v_\phi + P) = \varrho f_\eta \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho v_\phi}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi (\varrho v_\phi v_\xi)) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi (\varrho v_\phi v_\eta)) \right) \\ + c_{\hat{\phi}\xi\hat{\phi}} (\varrho v_\xi v_\phi) + c_{\hat{\phi}\eta\hat{\phi}} (\varrho v_\eta v_\phi) = \varrho f_\phi \end{aligned} \quad (3.18)$$

Der letzten Gleichung entspricht im zylinder- und kugelsymmetrischen Fall die Drehimpulsgleichung. Um dies deutlich zu machen, beseitigt man die geometrischen Quellterme, indem man die Gleichung mit h_ϕ multipliziert und die Darstellung der Kommutatorkoeffizienten (Gl. 3.6) ausnutzt. Man definiert zweckmäßigerweise den spezifischen Drehimpuls

$$\ell = h_\phi v_{\hat{\phi}} \quad (3.19)$$

und erhält dann die Drehimpulsgleichung im verallgemeinerten orthogonalen Koordinatensystem.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho \ell) + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_\eta h_\phi (\varrho \ell v_\xi) \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_\xi h_\phi (\varrho \ell v_\eta) \right) \right) = \varrho h_\phi f_{\hat{\phi}} \quad (3.20)$$

Verschwindet die ϕ -Komponente der externen Kraft, sieht man sofort, dass der Drehimpuls $\varrho \ell$ erhalten bleibt.

3.1.4 Energiegleichung mit Zentrifugalkraftterm

Wie sich erst im nächsten Kapitel zeigen wird, ist die zuletzt gemachte Umformung und die Einführung des spezifischen Drehimpulses nicht ganz unproblematisch. Auf diese Weise bekommt man nämlich in der Energie eine explizite Koordinatenabhängigkeit. Diese Problematik tritt erst in Kapitel 3.2.1 wirklich hervor, weil dort die Kettenregel bei der Ableitung der Flussvektoren nach den konservativen Variablen angewendet wird.

Um die explizite Koordinatenabhängigkeit zu beseitigen, muss man das Gleichungssystem modifizieren und eine neue Energievariable einführen. Man definiert diese modifizierte Energievariable als Differenz der Gesamtenergie und der Rotationsenergie:

$$\tilde{e} = e - e_{rot} = e - \frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 = \varrho \varepsilon + \frac{\varrho}{2} (v_\xi^2 + v_\eta^2) \quad (3.21)$$

Setzt man diese Definition in die Energiegleichung (3.15) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{e}}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_\eta h_\phi (\tilde{e} + P) v_\xi \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_\xi h_\phi (\tilde{e} + P) v_\eta \right) \right) \\ = \varrho \left(f_\xi v_\xi + f_\eta v_\eta + f_{\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 \right) \\ - \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_\eta h_\phi \frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 v_\xi \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_\xi h_\phi \frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 v_\eta \right) \right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Mit Hilfe der Kontinuitäts- und der Drehimpulsleichung (Gln. 3.14, 3.20) zeigt man, dass

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 \right) &= \frac{1}{\sqrt{g}} \left\{ \frac{1}{2} v_{\hat{\phi}}^2 \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_{\eta} h_{\phi} \varrho v_{\hat{\xi}}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_{\xi} h_{\phi} \varrho v_{\hat{\eta}}) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{v_{\hat{\phi}}}{h_{\phi}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_{\eta} h_{\phi}^2 v_{\hat{\phi}} v_{\hat{\xi}}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_{\xi} h_{\phi}^2 v_{\hat{\phi}} v_{\hat{\eta}}) \right) \right\} + \varrho f_{\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}} \end{aligned}$$

gilt und kann die beiden letzten Summanden auf der rechten Seite von Gleichung (3.22) vereinfachen und zusammenfassen.

$$\begin{aligned} & - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 \right) - \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_{\eta} h_{\phi} \frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 v_{\hat{\xi}} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_{\xi} h_{\phi} \frac{\varrho}{2} v_{\hat{\phi}}^2 v_{\hat{\eta}} \right) \right) \\ &= \frac{1}{h_{\xi} h_{\phi}} \frac{\partial h_{\phi}}{\partial \xi} \varrho v_{\hat{\xi}} v_{\hat{\phi}}^2 + \frac{1}{h_{\eta} h_{\phi}} \frac{\partial h_{\phi}}{\partial \eta} \varrho v_{\hat{\eta}} v_{\hat{\phi}}^2 - \varrho f_{\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}} \\ &= \varrho \left(c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}}^2 v_{\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}}^2 v_{\hat{\eta}} \right) - \varrho f_{\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}} \end{aligned}$$

In Zylinder- und Kugelkoordinaten sind diese beiden Energiequellterme gleichbedeutend mit den Zentrifugalkraftkomponenten multipliziert mit der Impulsdichte. Daher definiert man

$$f_{z,\hat{\xi}} = c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}}^2 \quad \text{und} \quad f_{z,\hat{\eta}} = c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} v_{\hat{\phi}}^2 \quad (3.23)$$

und schreibt die modifizierte Energiegleichung wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{e}}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_{\eta} h_{\phi} (\tilde{e} + P) v_{\hat{\xi}} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_{\xi} h_{\phi} (\tilde{e} + P) v_{\hat{\eta}} \right) \right) \\ = \varrho \left((f_{\hat{\xi}} + f_{z,\hat{\xi}}) v_{\hat{\xi}} + (f_{\hat{\eta}} + f_{z,\hat{\eta}}) v_{\hat{\eta}} \right). \quad (3.24) \end{aligned}$$

Diese Formulierung ist mathematisch äquivalent zur Transportgleichung für die Gesamtenergie. Allerdings sollte man sich darüber im Klaren sein, dass die Transformation der Energievariablen einen Einfluss auf die Erhaltungseigenschaften eines numerischen Verfahrens hat. An dieser Stelle macht man Abstriche in Bezug auf die Gesamtenergieerhaltung zu Gunsten der Drehimpulserhaltung.

3.2 Flussvektoren

Die im vorangegangenen Kapitel durchgeführten Umformungen erlauben es einem nun, das System der gasdynamischen Erhaltungsgleichungen in ver-

allgemeinerten orthogonalen Koordinaten in sehr kompakter Weise als Vektorgleichung hinzuschreiben. Dazu fasst man die Erhaltungsgrößen, Flüsse und Quellterme in Spaltenvektoren zusammen. Die Zeilen dieser Vektoren beziehen sich dann auf die jeweiligen Gleichungen.

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \varrho \\ \varrho v_{\hat{\xi}} \\ \varrho v_{\hat{\eta}} \\ \varrho \ell \\ \tilde{e} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho v_{\hat{\xi}} \\ \varrho v_{\hat{\xi}} v_{\hat{\xi}} + P \\ \varrho v_{\hat{\eta}} v_{\hat{\xi}} \\ \varrho \ell v_{\hat{\xi}} \\ (\tilde{e} + P) v_{\hat{\xi}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho v_{\hat{\eta}} \\ \varrho v_{\hat{\xi}} v_{\hat{\eta}} \\ \varrho v_{\hat{\eta}} v_{\hat{\eta}} + P \\ \varrho \ell v_{\hat{\eta}} \\ (\tilde{e} + P) v_{\hat{\eta}} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Um die verschiedenen Einflüsse der Quellterme unterscheiden zu können, trennt man den Quelltermvektor am besten noch einmal auf in Geometrievektoren,

$$\mathbf{S}_{g_1}(\mathbf{u}) = \varrho \begin{bmatrix} 0 \\ v_{\hat{\eta}} \left(v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\eta}} - v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) \\ v_{\hat{\xi}} \left(v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}} - v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}} \right) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{g_2}(\mathbf{u}) = P \begin{bmatrix} 0 \\ c_{\hat{\eta}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\phi}} \\ c_{\hat{\xi}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

einen Zentrifugalkraftvektor und einen Vektor für die externen Kräfte

$$\mathbf{S}_z(\mathbf{u}) = \varrho \begin{bmatrix} 0 \\ f_{z,\hat{\xi}} \\ f_{z,\hat{\eta}} \\ 0 \\ f_{z,\hat{\xi}} v_{\hat{\xi}} + f_{z,\hat{\eta}} v_{\hat{\eta}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_e(\mathbf{u}) = \varrho \begin{bmatrix} 0 \\ f_{\hat{\xi}} \\ f_{\hat{\eta}} \\ h_{\phi} f_{\hat{\phi}} \\ f_{\hat{\xi}} v_{\hat{\xi}} + f_{\hat{\eta}} v_{\hat{\eta}} \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Damit schreibt sich das System aus Kontinuitäts-, Euler- und Energiegleichung wie folgt:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_{\eta} h_{\phi} \mathbf{F}) + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \eta} (h_{\xi} h_{\phi} \mathbf{G}) = \mathbf{S}_{g_1} + \mathbf{S}_{g_2} + \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_e. \quad (3.28)$$

Zusammen mit der Zustandsgleichung (2.4) und der Beziehung zwischen innerer Energie und modifizierter Energievariable (Gl. 3.21) ist das System abgeschlossen, da auf diese Weise der Druck $P(\mathbf{u})$ als Funktion der konservativen Variablen berechnet werden kann.

Man beachte, dass diese so einfach erscheinende Vektorgleichung in Wirklichkeit ein fünfdimensionales System gekoppelter partieller Differentialgleichungen darstellt. Sie gehört zur Klasse der hyperbolischen Erhaltungsgleichungen.

3.2.1 Jacobimatrizen der Flussvektoren

Es ist erforderlich, eine charakteristische Zerlegung der Flüsse vorzunehmen, um sich einer Lösung der Gleichung (3.28) mit dem in Kapitel 4 beschriebenen Verfahren zu nähern. Das bedeutet, man schreibt die Ableitungen der Flussvektoren nach den Koordinaten um in Ableitungen des Vektors der konservativen Variablen multipliziert mit der Jacobimatrix des jeweiligen Flusses. Diese Jacobimatrizen können diagonalisiert werden und so erhält man eine pseudo-lineare Form. Die Eigenwerte der Jacobimatrizen bedeuten dabei so etwas wie die lokalen Ausbreitungsgeschwindigkeiten für den Transport der Erhaltungsgrößen. Es ist zu beachten, dass bei einem zweidimensionalen System die beiden Jacobimatrizen in der Regel nicht simultan diagonalisierbar sind.

Die geometrischen Terme in den Flussableitungen bedeuten eine zusätzliche Schwierigkeit bei der oben geschilderten Umformung. Um dieses Problem zu umgehen nutzt man die Homogenität der Flüsse aus.

$$\mathbf{F}(\lambda \mathbf{u}) = \lambda \mathbf{F}(\mathbf{u}) \quad (3.29)$$

Wie man sich leicht überzeugt, erfüllen obige Flüsse diese Relation. Dazu drückt man P mit Hilfe der Gleichungen (2.4) und (3.21) als Funktion der konservativen Variablen ϱ , ϱv_{ξ} , ϱv_{η} und \tilde{e} aus

$$P = (\gamma - 1) \left(e - \frac{1}{2\varrho} \left((\varrho v_{\xi})^2 + (\varrho v_{\eta})^2 \right) \right).$$

Daraus ist sofort ersichtlich, dass $P(\lambda \mathbf{u}) = \lambda P(\mathbf{u})$ gilt. Auf die gleiche Weise schreibt man die Flüsse als Funktionen der konservativen Variablen und beweist damit die Beziehung (3.29).

Mit Hilfe der Homogenitätsbeziehung zeigt man dann, indem man beide Seiten nach λ differenziert³

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \mathbf{F}(\mathbf{u})) \Big|_{\lambda=1} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} (\mathbf{F}(\lambda \mathbf{u})) \Big|_{\lambda=1} \\ \Leftrightarrow \mathbf{F}(\mathbf{u}) &= \frac{\partial \mathbf{F}(\lambda \mathbf{u})}{\partial (\lambda \mathbf{u})} \Big|_{\lambda=1} \mathbf{u} = \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{u}. \end{aligned}$$

³vgl. Hirsch 1988a, Kap. 16.2

Daher gilt für die Flussableitungen in der Erhaltungsgleichung (3.28)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi}(h_\eta h_\phi \mathbf{F}(\mathbf{u})) &= \frac{\partial}{\partial \xi}(h_\eta h_\phi) \mathbf{F}(\mathbf{u}) + h_\eta h_\phi \frac{\partial}{\partial \xi}(\mathbf{F}(\mathbf{u})) \\
&= \frac{\partial}{\partial \xi}(h_\eta h_\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{u} + h_\eta h_\phi \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi} \\
&= \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \frac{\partial}{\partial \xi}(h_\eta h_\phi \mathbf{u}).
\end{aligned} \tag{3.30}$$

An dieser Stelle kommt der Transformation der Energievariablen (Gl. 3.21) eine wesentliche Bedeutung zu. Im letzten Term der zweiten Zeile wurde die Kettenregel bzgl. der ξ -Ableitung angewandt. Dies ist in der Form nur möglich, wenn \mathbf{F} nicht explizit von den Koordinaten abhängt. Genau das wurde erreicht, indem der Rotationsenergieterm $\frac{\rho}{2} v_\phi^2 = \frac{\rho}{2} \left(\frac{\ell}{h_\phi} \right)^2$ mit dem Skalenfaktor $h_\phi(\xi, \eta)$ aus der Energievariablen eliminiert wurde.

Ganz analog erhält man für die Flussableitung in η -Richtung

$$\frac{\partial}{\partial \eta}(h_\xi h_\phi \mathbf{G}(\mathbf{u})) = \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right) \frac{\partial}{\partial \eta}(h_\xi h_\phi \mathbf{u}). \tag{3.31}$$

So gelangt man zu ähnlichen Jacobimatrizen, wie sie für das zweidimensionale Eulersystem in kartesischen Koordinaten aufgestellt werden können (vgl. Toro 1997, Kap. 3.2, Gl. 3.70). Man erhält wegen des Drehimpulses lediglich zusätzlich eine Zeile und eine Spalte.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\gamma-1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2) - v_\xi^2 & -(\gamma-3)v_\xi & -(\gamma-1)v_\eta & 0 & \gamma-1 \\ -v_\eta v_\xi & v_\eta & v_\xi & 0 & 0 \\ -\ell v_\xi & \ell & 0 & v_\xi & 0 \\ \left(\frac{\gamma-1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2) - H \right) v_\xi & H - (\gamma-1)v_\xi^2 & -(\gamma-1)v_\eta v_\xi & 0 & \gamma v_\xi \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -v_\eta v_\xi & v_\eta & v_\xi & 0 & 0 \\ \frac{\gamma-1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2) - v_\eta^2 & -(\gamma-1)v_\xi & -(\gamma-3)v_\eta & 0 & \gamma-1 \\ -\ell v_\eta & 0 & \ell & v_\eta & 0 \\ \left(\frac{\gamma-1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2) - H \right) v_\eta & -(\gamma-1)v_\xi v_\eta & H - (\gamma-1)v_\eta^2 & 0 & \gamma v_\eta \end{pmatrix}. \tag{3.33}$$

Zur Verkürzung der Schreibweise wurde die Funktion H eingeführt

$$H = \frac{\tilde{e} + P}{\rho} = \varepsilon + \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2) = w + \frac{1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2) = \frac{c_s^2}{\gamma-1} + \frac{1}{2}(v_\xi^2 + v_\eta^2)$$

mit der spezifischen Enthalpie w und der Schallgeschwindigkeit c_s

$$c_s = \sqrt{\gamma \frac{P}{\varrho}}. \quad (3.34)$$

3.2.2 Diagonalisierung der Jacobimatrizen

Die Eigenwerte und Eigenvektoren berechnet man mit den üblichen Verfahren aus der linearen Algebra. Das soll hier nicht im Detail ausgeführt werden. Da die Jacobimatrizen eine gewisse Ähnlichkeit mit denen im zwei- bzw. dreidimensionalen Fall der Eulergleichungen aufweisen, ist es nicht überraschend, dass die Eigensysteme gleich sind.

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_F^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_F &= \text{diag}(v_{\hat{\xi}}, v_{\hat{\xi}}, v_{\hat{\xi}}, v_{\hat{\xi}} - c_s, v_{\hat{\xi}} + c_s) \\ \mathbf{L}_G^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_G &= \text{diag}(v_{\hat{\eta}}, v_{\hat{\eta}}, v_{\hat{\eta}}, v_{\hat{\eta}} - c_s, v_{\hat{\eta}} + c_s) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Die Transformationsmatrizen werden aus den links- bzw. rechtshändigen Eigenvektoren⁴ gebildet

$$\mathbf{L}_F^{-1} = \left(\mathbf{l}_F^{(1)}, \mathbf{l}_F^{(2)}, \mathbf{l}_F^{(3)}, \mathbf{l}_F^{(4)}, \mathbf{l}_F^{(5)} \right)^{Tr} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{L}_F = \left(\mathbf{r}_F^{(1)}, \mathbf{r}_F^{(2)}, \mathbf{r}_F^{(3)}, \mathbf{r}_F^{(4)}, \mathbf{r}_F^{(5)} \right)$$

sowie

$$\mathbf{L}_G^{-1} = \left(\mathbf{l}_G^{(1)}, \mathbf{l}_G^{(2)}, \mathbf{l}_G^{(3)}, \mathbf{l}_G^{(4)}, \mathbf{l}_G^{(5)} \right)^{Tr} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{L}_G = \left(\mathbf{r}_G^{(1)}, \mathbf{r}_G^{(2)}, \mathbf{r}_G^{(3)}, \mathbf{r}_G^{(4)}, \mathbf{r}_G^{(5)} \right).$$

Das Eigenwertspektrum ist also identisch mit dem der Eulerflüsse im dreidimensionalen kartesischen Fall, bei dem man nur den Transport entlang zweier Raumrichtungen betrachtet. Es ist sehr erfreulich, dass sich die Eigenwerte auf so einfache Weise darstellen lassen, da sie bei dem in Kapitel 4 beschriebenen Verfahren eine zentrale Rolle einnehmen.

⁴deren explizite Darstellung findet sich im Anhang B

Kapitel 4

Numerisches Verfahren

4.1 Das Finite-Volumen-Schema nach Kurganov und Tadmor

Die Grundidee aller Finite-Volumen (FV)-Verfahren zur Lösung von nichtlinearen Erhaltungsgleichungen, zu denen auch das in dieser Arbeit verwendete von Kurganov und Tadmor (2000) zählt, ist die Zerlegung des Rechengebiets in Zellen endlicher Größe mit abschnittsweise konstanten Anfangsdaten. Für diese Daten ermittelt man an den Zellgrenzen die Lösung des Riemannproblems der zugrunde liegenden Erhaltungsgleichung. Deshalb findet sich in der Literatur auch häufig der Begriff Riemannlöser für diese Klasse der numerischen Verfahren.

Godunov (1959) löste das Riemannproblem für das System der Eulergleichungen exakt, was – auch heute – einen nicht unerheblichen Rechenaufwand mit sich bringt. Daher gab es immer wieder Bestrebungen, das Verfahren zu verbessern, indem man statt der exakten Riemannlöser approximative benutzte. Dazu zählen unter anderen die Verfahren von Roe (1981) sowie Harten, Lax und van Leer (1983). Ein weiterer Nachteil, den auch zum Teil die approximativen Ansätze haben, ist die nur beschränkte Anwendbarkeit auf reale physikalische Probleme, da in vielen Fällen keine exakte Lösung des Riemannproblems bekannt ist.

Noch vor Godunov stellten Lax (1954) und Friedrichs (1954) ein zentrales Verfahren vor, das keine approximativen Riemannlöser benötigte. Ein großer Nachteil dieses Schemas ist allerdings die hohe künstliche Viskosität. Sie verhindert, dass Unstetigkeiten, wie sie etwa in Stoßfronten vorkommen, scharf aufgelöst werden. Dieses Problem weisen alle Verfahren erster Ordnung auf;

es ist grundsätzlicher Natur, wie von Godunov (1959) gezeigt wurde. Allerdings wies Godunov in derselben Arbeit nach, dass Verfahren höherer Ordnung in der Nähe von Unstetigkeiten zu Oszillationen führen und daher generell instabil sind (siehe dazu auch Kapitel 4.2).

Einen möglichen Ausweg lieferte van Leer (1976) mit seinem Monotonic Upstream-Centred Scheme for Conservation Laws (MUSCL), indem er aus den konstanten Anfangsdaten stückweise lineare Funktionen rekonstruierte. Deren Steigungen limitierte er, so dass in der Nähe von Unstetigkeiten Oszillationen unterdrückt werden. Dieser Ansatz kann im Prinzip mit einem beliebigen Verfahren (Lax-Friedrichs, Roe, etc.) zur Berechnung der numerischen Flüsse kombiniert werden.

Das Schema von Kurganov und Tadmor (2000) baut darauf auf, indem es stückweise lineare Rekonstruktionen verwendet. Allerdings bietet es in zweierlei Hinsicht entscheidende Verbesserungen:

1. **Simplizität:** Es verwendet ein zentrales Differenzenschema, ähnlich dem von Lax und Friedrichs, nur mit deutlich geringerer künstlicher Viskosität.
2. **Es ist Semidiskret:** D.h. es wird zunächst nur bezüglich der Raumdimensionen diskretisiert, so dass ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen bzgl. der Zeitableitung entsteht. Das ermöglicht die Berechnung der Zeitentwicklung mit - im Prinzip - beliebigen Lösern für gewöhnliche Differentialgleichungen.

Wie Kurganov und Tadmor (2002) zeigen konnten, ist es außerdem möglich, das Verfahren auf zwei oder mehr Dimensionen zu erweitern, ohne sie getrennt voneinander behandeln zu müssen. In ihrer Arbeit entwickeln sie vollständig zweidimensionale Schemata auf kartesischen Gittern.

Basierend auf dieser Arbeit soll in den folgenden Kapiteln eine Beschreibung gefunden werden, die es einem ermöglicht, auch auf krummlinigen Gittern zu rechnen. Es wird gezeigt, dass auch in krummlinigen Koordinaten – bei geeigneter Wahl der Rekonstruktion – ein semidiskretes Schema zweiter Ordnung entwickelt werden kann.

Es sei noch angemerkt, dass die Herleitung zunächst keinerlei Gebrauch von den zugrunde liegenden Erhaltungsgleichungen macht. Sie besitzt daher eine viel umfassendere Gültigkeit, auch wenn das Verfahren letztendlich auf das System der Erhaltungsgleichungen (3.28) angewandt werden soll.

4.1.1 Integrale Erhaltungsgleichung

Ein fundamental wichtiger Schritt für die Herleitung des semidiskreten Schemas ist der Übergang von einer Formulierung des Transportproblems als Differentialgleichung wie in Kapitel 3 beschrieben hin zu einer Integralschreibweise. Das sieht man sofort ein, wenn man sich noch einmal das Prinzip der FV-Verfahren ins Gedächtnis ruft. Dort sollen aus stückweise konstanten Anfangsdaten, die über gewissen Kontrollvolumen definiert sind, Lösungen zu späteren Zeiten berechnet werden. Wenn man nicht von dem uninteressanten Fall identischer Daten im ganzen Rechengebiet ausgeht, so ergeben sich an den Grenzen der Kontrollvolumina zwangsläufig Sprünge. Das bedeutet, die Anfangsdaten sind **nicht** stetig, was bei der Lösung einer Differentialgleichung ein gewisses Problem darstellt. Streng genommen existiert dann an den Zellgrenzen keine Lösung.

Dieses Dilemma vermeidet man, indem man die Differentialgleichung über ein Raumgebiet integriert und so zu einer integralen Formulierung des Problems übergeht. Man beachte, dass beide Gleichungen nicht als äquivalent angesehen werden können, denn während die Integralgleichung unstetige Lösungen zulässt, sind sie bei der Differentialgleichung ausgeschlossen. Der Lösungsraum wird also durch den Übergang erweitert. Wie sich allerdings in Experimenten zeigt, kommen in der Natur tatsächlich unstetige Lösungen vor, so dass die integrale Formulierung letztendlich sogar ein genaueres Abbild der Physik darstellt.

Die Integralgleichung erhält man in ganz einfacher Weise, indem man die Differentialgleichung (3.28)

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi \mathbf{F}) + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi \mathbf{G}) = \mathbf{S}$$

über $[t_n, t_{n+1}] \times [\xi_-, \xi_+] \times [\eta_-, \eta_+] \times [\phi_-, \phi_+]$ integriert. Man beachte dabei, dass das Volumenelement in krummlinigen Koordinaten durch

$$dV = \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta \, d\phi$$

gegeben ist. Im Folgenden seien wieder alle Größen als unabhängig von ϕ angenommen, so dass die ϕ -Integration nur zu einem konstanten Faktor $(\phi_+ - \phi_-)$ führt, der durch Division aus den Gleichungen eliminiert werden kann.

Integration der linken Seite von (3.28) liefert:

$$\begin{aligned}
& \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta \, dt + \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi \mathbf{F}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi \mathbf{G}) \right) d\xi \, d\eta \, dt \\
&= \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \mathbf{u}(\xi, \eta, t_{n+1}) \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta - \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \mathbf{u}(\xi, \eta, t_n) \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta \\
&\quad + \int_{\eta_-}^{\eta_+} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [h_\eta h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_-}^{\xi_+} d\eta \, dt + \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [h_\xi h_\phi \mathbf{G}]_{\eta_-}^{\eta_+} d\xi \, dt.
\end{aligned}$$

Bezeichnet man die räumlichen Mittelwerte mit

$$\langle X(t) \rangle = \frac{1}{\Delta V} \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \mathbf{X}(\xi, \eta, t) \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta \quad \text{mit} \quad \Delta V = \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta, \quad (4.1)$$

so kann man die integrale Erhaltungsgleichung wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{u}(t_{n+1}) \rangle &= \langle \mathbf{u}(t_n) \rangle - \frac{1}{\Delta V} \int_{\eta_-}^{\eta_+} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [h_\eta h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_-}^{\xi_+} d\eta \, dt \\
&\quad - \frac{1}{\Delta V} \int_{\xi_-}^{\xi_+} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [h_\xi h_\phi \mathbf{G}]_{\eta_-}^{\eta_+} d\xi \, dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \langle \mathbf{S} \rangle \, dt.
\end{aligned} \quad (4.2)$$

An dieser Gleichung lässt sich das grundlegende Konzept der FV Verfahren ablesen: Man starte mit den Mittelwerten $\langle \mathbf{u}(t_n) \rangle$ in einem Kontrollvolumen ΔV zur Zeit t_n , finde geeignete Approximationen für die Flussintegrale und Quellterme über den Zeitschritt $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ und gelange so zu neuen Mittelwerten $\langle \mathbf{u}(t_{n+1}) \rangle$ gemäß Gleichung (4.2). Die Kunst besteht darin, eben diese „geeigneten Approximationen“ zu bestimmen.

4.1.2 Semidiskretes Gleichungssystem

Zur Herleitung der grundlegenden Gleichung des Kurganov Verfahrens betrachte man ein Kontrollvolumen, wie es in Figur 4.1 abgebildet ist. Die dort eingetragenen Gebiete seien wie folgt definiert:

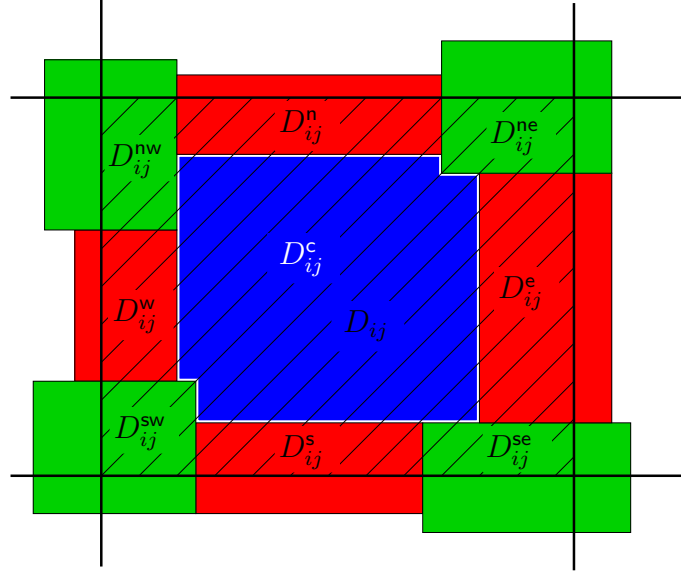


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung eines Kontrollvolumens

Schraffierte Fläche: Gebiet der gesamten Zelle

$$D_{ij} = \left[\xi_{i-\frac{1}{2}}, \xi_{i+\frac{1}{2}} \right] \times \left[\eta_{j-\frac{1}{2}}, \eta_{j+\frac{1}{2}} \right]$$

Rote Flächen: Versetzte Gebiete an den Zellkanten; sie werden zusammengesetzt aus den beiden Teilgebieten der jeweils benachbarten Zellen, z.B. das östliche Gebiet

$$D_{i+\frac{1}{2},j} = D_{ij}^e \cup D_{i+1,j}^w,$$

dabei sind die rot schraffierten Flächen gegeben durch

$$\begin{aligned} D_{ij}^w &= \left[\xi_{i-\frac{1}{2}}, \xi_+^w \right] \times \left[\eta_+^{sw}, \eta_-^{nw} \right], & D_{ij}^e &= \left[\xi_-^e, \xi_{i+\frac{1}{2}} \right] \times \left[\eta_+^{se}, \eta_-^{se} \right] \\ D_{ij}^s &= \left[\xi_+^{sw}, \xi_-^{se} \right] \times \left[\eta_{j-\frac{1}{2}}, \eta_+^s \right], & D_{ij}^n &= \left[\xi_+^{nw}, \xi_-^{ne} \right] \times \left[\eta_-^n, \eta_{j+\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned}$$

Grüne Flächen: Versetzte Gebiete über den Zellecken; sie werden aus den vier Teilgebieten der angrenzenden Nachbarzellen gebildet, z.B. das südöstliche Gebiet

$$D_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = D_{ij}^{se} \cup D_{i+1,j}^{sw} \cup D_{i,j-1}^{ne} \cup D_{i+1,j-1}^{nw},$$

wobei die schraffierten Flächen wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned} D_{ij}^{sw} &= \left[\xi_{i-\frac{1}{2}}, \xi_+^{sw} \right] \times \left[\eta_{j-\frac{1}{2}}, \eta_+^{sw} \right], & D_{ij}^{se} &= \left[\xi_-^{se}, \xi_{i+\frac{1}{2}} \right] \times \left[\eta_{j-\frac{1}{2}}, \eta_+^{se} \right] \\ D_{ij}^{nw} &= \left[\xi_{i-\frac{1}{2}}, \xi_+^{nw} \right] \times \left[\eta_-^{nw}, \eta_{j+\frac{1}{2}} \right], & D_{ij}^{ne} &= \left[\xi_-^{ne}, \xi_{i+\frac{1}{2}} \right] \times \left[\eta_-^{ne}, \eta_{j+\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned}$$

Blaue Fläche: Der Rest, der übrig bleibt, wenn man Kanten- und Eckgebiete vom gesamten Gebiet der Zelle abzieht; also mathematisch formuliert:

$$D_{ij}^c = \overline{\left(D_{ij} \cap \bigcup_{\alpha} D_{ij}^{\alpha} \right)}.$$

Die Gebietsgrößen ermittelt man, indem man die Maxima und Minima der lokalen Ausbreitungsgeschwindigkeiten an den Zellrändern bestimmt. Am östlichen und westlichen Rand definiert man:

$$\begin{aligned} a_{i\pm\frac{1}{2},j}^+ &= \max_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^-)} \left[\lambda_{\max} \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right), 0 \right] \\ a_{i\pm\frac{1}{2},j}^- &= \min_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2}}^-)} \left[\lambda_{\min} \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right), 0 \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

und am nördlichen und südlichen

$$\begin{aligned} b_{i,j\pm\frac{1}{2}}^+ &= \max_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{u}_{j\pm\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{j\pm\frac{1}{2}}^-)} \left[\lambda_{\max} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right), 0 \right] \\ b_{i,j\pm\frac{1}{2}}^- &= \min_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{u}_{j\pm\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{j\pm\frac{1}{2}}^-)} \left[\lambda_{\min} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right), 0 \right]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Mit den Abbildungen λ_{\max} und λ_{\min} seien die maximalen bzw. minimalen Eigenwerte der Jacobimatrizen bezeichnet, wenn man \mathbf{u} entlang der Phasenraumkurve \mathcal{C} variiert. Dabei verbindet z.B. $\mathcal{C}(\mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^-)$ die links- und rechtseitigen Zellrandwerte bei $\xi_{i-\frac{1}{2}}$ über den Riemannfächer. Im echt nicht-linearen und linear entarteten Fall reicht es aus, λ_{\max} und λ_{\min} mit den beiden Zellrandwerten zu berechnen. In den Ecken bildet man die Maxima und Minima mit den benachbarten Zellen, also z.B.

$$A_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^+ = \max \left(a_{i-\frac{1}{2},j}^+, a_{i-\frac{1}{2},j-1}^+ \right).$$

Mit Hilfe dieser lokalen Ausbreitungsgeschwindigkeiten lassen sich die Gebietsgrenzen berechnen, indem man die Breite der Flächen als den Weg definiert, den eine Störung in der Zeit Δt vom Zellenrand aus zurücklegt. Dabei ist zu beachten, dass aufgrund der krummlinigen Geometrie diese Distanz

nicht durch den Koordinatenabstand gegeben ist, sondern vielmehr durch Integrale von der Art

$$\begin{aligned} \int_{\xi_{i\pm\frac{1}{2}}}^{\xi_{\pm}^{\text{w,e}}} h_{\xi}(\xi, \eta) \, d\xi &\approx h_{\xi}(\xi_{i\pm\frac{1}{2}}, \eta) (\xi_{\pm}^{\text{w,e}} - \xi_{i\pm\frac{1}{2}}) \\ \int_{\eta_{j\pm\frac{1}{2}}}^{\eta_{\pm}^{\text{s,n}}} h_{\eta}(\xi, \eta) \, d\eta &\approx h_{\eta}(\xi, \eta_{j\pm\frac{1}{2}}) (\eta_{\pm}^{\text{s,n}} - \eta_{j\pm\frac{1}{2}}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die Approximation gilt für kleine Δt , da sich dann $\xi_{\pm}^{\text{w,e}}$ und $\eta_{\pm}^{\text{s,n}}$ nur geringfügig von den Zellrändern $\xi_{i\pm\frac{1}{2}}$ bzw. $\eta_{j\pm\frac{1}{2}}$ unterscheiden. Ähnliche Darstellungen findet man auch für die Gebietsgrenzen der Eckgebiete. Daraus ergeben sich dann folgende Beziehungen für die Ausdehnung der Gebiete

$$\begin{aligned} \xi_{+}^{\text{w}} &= \xi_{i-\frac{1}{2}} + \frac{a_{i-\frac{1}{2}}^{+} \Delta t}{h_{\xi}(\xi_{i-\frac{1}{2}}, \eta)}, & \xi_{-}^{\text{e}} &= \xi_{i+\frac{1}{2}} + \frac{a_{i+\frac{1}{2}}^{-} \Delta t}{h_{\xi}(\xi_{i+\frac{1}{2}}, \eta)}, \\ \eta_{+}^{\text{s}} &= \eta_{j-\frac{1}{2}} + \frac{b_{j-\frac{1}{2}}^{+} \Delta t}{h_{\eta}(\xi, \eta_{j-\frac{1}{2}})}, & \eta_{-}^{\text{n}} &= \eta_{j+\frac{1}{2}} + \frac{b_{j+\frac{1}{2}}^{-} \Delta t}{h_{\eta}(\xi, \eta_{j+\frac{1}{2}})} \end{aligned} \quad (4.6)$$

an den Kanten und in den Ecken

$$\begin{aligned} \xi_{+}^{\text{sw}} &= \xi_{i-\frac{1}{2}} + \frac{A_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{+} \Delta t}{h_{\xi}(\xi_{i-\frac{1}{2}}, \eta)}, & \xi_{-}^{\text{se}} &= \xi_{i+\frac{1}{2}} + \frac{A_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{-} \Delta t}{h_{\xi}(\xi_{i+\frac{1}{2}}, \eta)}, \\ \xi_{+}^{\text{nw}} &= \xi_{i-\frac{1}{2}} + \frac{A_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{+} \Delta t}{h_{\xi}(\xi_{i-\frac{1}{2}}, \eta)}, & \xi_{-}^{\text{ne}} &= \xi_{i+\frac{1}{2}} + \frac{A_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{-} \Delta t}{h_{\xi}(\xi_{i+\frac{1}{2}}, \eta)}, \\ \eta_{+}^{\text{sw}} &= \eta_{j-\frac{1}{2}} + \frac{B_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{+} \Delta t}{h_{\eta}(\xi, \eta_{j-\frac{1}{2}})}, & \eta_{-}^{\text{nw}} &= \eta_{j+\frac{1}{2}} + \frac{B_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{-} \Delta t}{h_{\eta}(\xi, \eta_{j+\frac{1}{2}})}, \\ \eta_{+}^{\text{se}} &= \eta_{j-\frac{1}{2}} + \frac{B_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{+} \Delta t}{h_{\eta}(\xi, \eta_{j-\frac{1}{2}})}, & \eta_{-}^{\text{ne}} &= \eta_{j+\frac{1}{2}} + \frac{B_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{-} \Delta t}{h_{\eta}(\xi, \eta_{j+\frac{1}{2}})}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Gemäß Gleichung (4.1) definiert man Mittelwerte und Volumina über bestimmte Gebiete, z.B. nördliches Kantengebiet:

$$\langle \mathbf{X}(t) \rangle_{D_{ij}^{\text{n}}} = \frac{1}{\Delta V_{ij}^{\text{n}}} \int_{\xi_{+}^{\text{nw}}}^{\xi_{-}^{\text{ne}}} \int_{\eta_{+}^{\text{n}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{X}(\xi, \eta, t) \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta$$

mit dem Volumenelement

$$\Delta V_{ij}^n = \int_{\xi_+^{nw}}^{\xi_-^{ne}} \int_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}^n} \sqrt{g} \, d\xi \, d\eta.$$

Wie im einführenden Abschnitt angemerkt, benötigt man außerdem für ein Schema höherer als erster Ordnung eine Interpolationsvorschrift. Dazu verwendet man eine lineare Rekonstruktion

$$\tilde{\mathbf{u}}(\xi, \eta) = \mathbf{u}_0 + \mathbf{\Delta}_\xi(\xi - \xi_0) + \mathbf{\Delta}_\eta(\eta - \eta_0) \quad (4.8)$$

mit geeigneten Approximationen für die Steigungen und Entwicklungspunkte (siehe dazu auch Kapitel 4.2). Man verlangt

$$\langle \tilde{\mathbf{u}} \rangle_{D_{ij}} = \langle \mathbf{u}(\xi, \eta) \rangle_{D_{ij}} = \mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_0, \quad (4.9)$$

woraus sofort

$$\xi_0 = \langle \xi \rangle_{D_{ij}} \quad \text{und} \quad \eta_0 = \langle \eta \rangle_{D_{ij}} \quad (4.10)$$

folgt. Die Entwicklungspunkte sind also durch die Zellschwerpunkte festgelegt. Das ist eine sehr wichtige Forderung. Wie Mönchmeyer und Müller (1989) gezeigt haben, vermeidet man so, dass bei krummlinigen Koordinaten in der Nähe von Koordinatensingularitäten numerische Fehler durch die Diskretisierung entstehen. Ferner sollten die Zellmittelwerte, sofern man sie mit Punktwerten in der Zelle identifiziert, an den Volumenzentren verankert werden.

Ausgehend von der integralen Erhaltungsgleichung (4.2) führt man nun eine Rekonstruktion über dem Gebiet der Zelle durch, gefolgt von einer Mittelung über die versetzten Gebiete, nochmaliger Rekonstruktion – diesmal über den versetzten Gebieten – und zum Schluss eine Mittelung über die ursprüngliche Zelle. So gelangt man von Zellmittelwerten \mathbf{u}_{ij}^n zum Zeitpunkt t_n über Zwischenwerte $\mathbf{w}_{ij}^{\alpha, \beta}$ in den versetzten Zellen zu neuen Zellmittelwerten \mathbf{u}_{ij}^{n+1} zu einem späteren Zeitpunkt t_{n+1} .

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{\Delta V_{ij}} \int_{D_{ij}} \tilde{\mathbf{w}}_{ij}(\xi, \eta, t_{n+1}) \, dV$$

Dabei bezeichne $\tilde{\mathbf{w}}_{ij}(\xi, \eta, t_{n+1})$ die Gesamtheit aller zweiten Rekonstruktionen innerhalb einer Zelle über den versetzten Gebieten (in Figur 4.1 die

Schnittmenge der roten und grünen Flächen mit der schraffierten Fläche sowie die blaue Fläche im Zentrum). Man kann dieses Integral aufteilen und über alle Gebiete getrennt integrieren:

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{\Delta V_{ij}} \left\{ \sum_{\alpha \in \{\text{w,e,s,n}\}} \int_{D_{ij}^\alpha} \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\alpha(\xi, \eta, t_{n+1}) \, dV \right. \\ \left. + \sum_{\beta \in \{\text{sw,se,nw,ne}\}} \int_{D_{ij}^\beta} \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\beta(\xi, \eta, t_{n+1}) \, dV + \int_{D_{ij}^c} \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^c(\xi, \eta, t_{n+1}) \, dV \right\}.$$

Das Integral über das blaue Gebiet (letzter Summand) lässt sich wiederum als Differenz der Integrale über die gesamte Zelle und der Integrale über die Teilgebiete (in Figur 4.1 rote und grüne schraffierte Flächen) schreiben. Mit der Schreibweise für die Mittelung (Gl. 4.1) ergibt sich

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{\Delta V_{ij}} \left\{ \sum_{\alpha \in \{\text{w,e,s,n}\}} \Delta V_{ij}^\alpha \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\alpha(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\alpha} \right. \\ + \sum_{\beta \in \{\text{sw,se,nw,ne}\}} \Delta V_{ij}^\beta \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\beta(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\beta} \\ + \Delta V_{ij} \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^c(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}} \tag{4.11} \\ - \sum_{\alpha \in \{\text{w,e,s,n}\}} \Delta V_{ij}^\alpha \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^c(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\alpha} \\ \left. - \sum_{\beta \in \{\text{sw,se,nw,ne}\}} \Delta V_{ij}^\beta \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^c(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\beta} \right\}.$$

Da das Gebiet im Zentrum vollständig im Gebiet der ursprünglichen Zelle liegt, unterscheiden sich die Mittelwerte der ersten und zweiten Rekonstruktion dort nicht. Störungen von den Nachbarzellen gelangen nur bis an die Grenzen der roten und grünen Gebiete innerhalb der Zelle. Daher gilt

$$\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^c(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}} = \mathbf{w}_{ij}^c(t_{n+1}) = \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}}$$

für die Mittelung über die gesamte Zelle und auch für alle Teilgebiete der Zelle. Mit der Bedingung (4.9) an die Rekonstruktion und der Integralen

Erhaltungsgleichung (4.2) folgert man

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(\xi, \eta, t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}} = & \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{1}{\Delta V_{ij}} \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[h_\eta h_\phi \mathbf{F} \right]_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} d\eta dt \\ & - \frac{1}{\Delta V_{ij}} \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[h_\xi h_\phi \mathbf{G} \right]_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} d\xi dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}} dt. \end{aligned}$$

Setzt man diese Beziehung in Gleichung (4.11) ein und fasst die Summen zusammen, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = & \frac{1}{\Delta V_{ij}} \left\{ \sum_{\alpha \in \{\text{w,e,s,n}\}} \Delta V_{ij}^\alpha \left(\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\alpha(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\alpha} - \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\alpha} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{\beta \in \{\text{sw,se,nw,ne}\}} \Delta V_{ij}^\beta \left(\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\beta(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\beta} - \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\beta} \right) \right\} \\ & + \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{1}{\Delta V_{ij}} \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[h_\eta h_\phi \mathbf{F} \right]_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} d\eta dt \\ & - \frac{1}{\Delta V_{ij}} \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[h_\xi h_\phi \mathbf{G} \right]_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} d\xi dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}} dt. \end{aligned}$$

Zur semidiskreten Formulierung gelangt man, indem man \mathbf{u}_{ij}^n durch Subtraktion auf die linke Seite der Gleichung holt, durch Δt dividiert und den Limes

für $\Delta t \rightarrow 0$ bildet.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \mathbf{u}_{ij}(t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{u}_{ij}^{n+1} - \mathbf{u}_{ij}^n}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t \Delta V_{ij}} \left\{ \Delta V_{ij} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}} dt \right. \\
&+ \sum_{\alpha \in \{\mathbf{w}, \mathbf{e}, \mathbf{s}, \mathbf{n}\}} \Delta V_{ij}^\alpha \left(\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\alpha(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\alpha} - \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\alpha} \right) \\
&+ \sum_{\beta \in \{\mathbf{sw}, \mathbf{se}, \mathbf{nw}, \mathbf{ne}\}} \Delta V_{ij}^\beta \left(\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^\beta(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\beta} - \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^\beta} \right) \\
&\left. - \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [h_\eta h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} d\eta dt - \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} [h_\xi h_\phi \mathbf{G}]_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} d\xi dt \right\}
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Es bleibt noch zu zeigen, dass der Grenzwert tatsächlich existiert. In diesem Fall hängt die rechte Seite in komplizierter Weise von den Zellmittelwerten $\mathbf{u}_{ij}(t)$ sowie denen der benachbarten Zellen ab. Diese Mittelwerte sind dabei als Funktionen der Zeit anzusehen, so dass sich letztendlich ein gekoppeltes System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung vom Typ

$$\frac{d}{dt} \mathbf{u}_{ij}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_{ij}(t), \mathbf{u}_{i-1,j}(t), \mathbf{u}_{i,j-1}(t), \dots)$$

für die Zellmittelwerte aller Zellen im Rechengebiet ergibt.

4.1.3 Der Grenzwert $\Delta t \rightarrow 0$

Das Problem, den Grenzwert für $\Delta t \rightarrow 0$ in Gleichung (4.12) zu bestimmen, beschränkt sich im Wesentlichen darauf, für alle Terme eine lineare Entwicklung nach Δt durchzuführen. Dann ist zu zeigen, dass in der geschweiften Klammer die konstanten Terme verschwinden, sich also das Δt in den linearen Termen gerade mit dem $\frac{1}{\Delta t}$ vor der Klammer weghebt und somit alle Summanden der Ordnung $\frac{1}{\Delta t}$ auf der rechten Seite null sind.

Im Folgenden wird exemplarisch für alle Kantengebiete das nördliche Gebiet einer Zelle, wie es in Abbildung 4.2 (rote Fläche) dargestellt ist, betrachtet. Der Flächeninhalt des Teilgebiets D_{ij}^n innerhalb der Zelle (schraffiert)

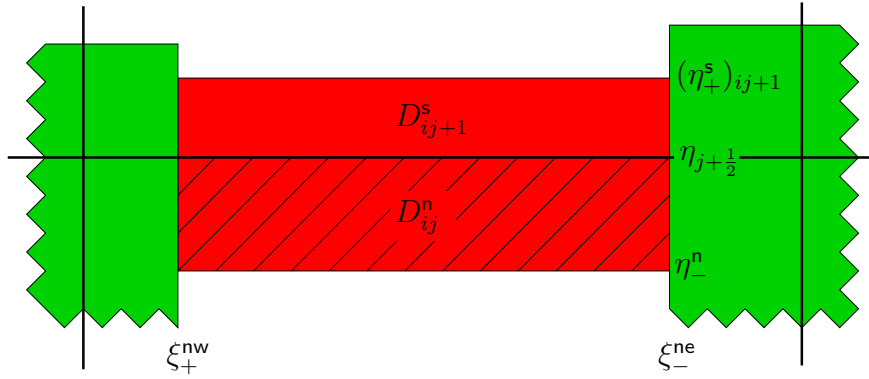


Abbildung 4.2: Nördliches Teilgebiet einer Zelle

berechnet sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \Delta V_{ij}^n &= \int_{D_{ij}^n} dV = \int_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \int_{\xi_+^{nw}}^{\xi_-^{ne}} h_\xi h_\eta h_\phi \, d\xi \, d\eta \\ &= \int_{\xi_+^{nw}}^{\xi_-^{ne}} h_\xi h_\eta h_\phi (\eta_{j+\frac{1}{2}} - \eta_-^n) \, d\xi \Big|_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}((\eta_{j+\frac{1}{2}} - \eta_-^n)^2) \end{aligned}$$

und nach Einsetzen der Gebietsgrenze für η_-^n (Gl. 4.6)

$$\Delta V_{ij}^n = -b_{j+\frac{1}{2}}^- \Delta t \int_{\xi_+^{nw}}^{\xi_-^{ne}} h_\xi h_\phi \, d\xi \Big|_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (4.13)$$

ebenso:
$$\Delta V_{ij+1}^s = b_{j+\frac{1}{2}}^+ \Delta t \int_{\xi_+^{nw}}^{\xi_-^{ne}} h_\xi h_\phi \, d\xi \Big|_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

Auf die gleiche Weise erhält man für eine beliebige Funktion $f(\xi, \eta)$

$$\begin{aligned}
\Delta V_{ij}^n \langle f(\xi, \eta) \rangle_{D_{ij}^n} &= \int_{D_{ij}^n} f(\xi, \eta) \, dV \\
&= -b_{j+\frac{1}{2}}^- \Delta t \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} f(\xi, \eta) h_\xi h_\phi \, d\xi \Big|_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\
\Delta V_{ij+1}^s \langle f(\xi, \eta) \rangle_{D_{ij+1}^s} &= \int_{D_{ij+1}^s} f(\xi, \eta) \, dV \\
&= b_{j+\frac{1}{2}}^+ \Delta t \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} f(\xi, \eta) h_\xi h_\phi \, d\xi \Big|_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^2).
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Man beachte, dass im Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ die untere Integralgrenze gegen $\xi_{i-\frac{1}{2}}$ und die obere gegen $\xi_{i+\frac{1}{2}}$ streben und das Integral somit entlang der nördlichen Kante bei $\eta_{j+\frac{1}{2}}$ ausgewertet wird.

Nach dieser Vorarbeit ist man in der Lage, in der ersten Summe von Gleichung (4.12) den Term für $\alpha = \mathbf{n}$, also den des nördlichen Kantengebiets, auszuwerten. $\tilde{\mathbf{w}}_{ij+\frac{1}{2}}^{\mathbf{n}}(t_{n+1})$ ist dabei gleichbedeutend mit der linearen Rekonstruktion gemäß Gl. (4.8) über dem Gebiet $D_{ij+\frac{1}{2}} = D_{ij}^{\mathbf{n}} \cup D_{ij+1}^{\mathbf{s}}$:

$$\tilde{\mathbf{w}}_{ij+\frac{1}{2}}(t_{n+1}) = \tilde{\mathbf{w}}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} = \mathbf{w}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} + \Delta \xi^{n+1} (\xi - \xi_0) + \Delta \eta^{n+1} (\eta - \eta_0).$$

Wegen der Bedingung (4.9) gilt auch hier:

$$\xi_0 = \langle \xi \rangle_{D_{ij+\frac{1}{2}}} \quad \text{und} \quad \eta_0 = \langle \eta \rangle_{D_{ij+\frac{1}{2}}},$$

woraus folgt, dass

$$\begin{aligned}
\Delta V_{ij}^n \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} \rangle_{D_{ij}^n} &= \Delta V_{ij}^n \mathbf{w}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} + \Delta \xi^{n+1} \Delta V_{ij}^n \left(\langle \xi \rangle_{D_{ij}^n} - \langle \xi \rangle_{D_{ij+\frac{1}{2}}} \right) \\
&\quad + \Delta \eta^{n+1} \Delta V_{ij}^n \left(\langle \eta \rangle_{D_{ij}^n} - \langle \eta \rangle_{D_{ij+\frac{1}{2}}} \right) \\
&= \Delta V_{ij}^n \mathbf{w}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{\Delta \xi^{n+1}}{\Delta V_{ij+\frac{1}{2}}} \left\{ \Delta V_{ij+1}^s \int_{D_{ij}^n} \xi \, dV - \Delta V_{ij}^n \int_{D_{ij+1}^s} \xi \, dV \right\} \\
&\quad + \frac{\Delta \eta^{n+1}}{\Delta V_{ij+\frac{1}{2}}} \left\{ \Delta V_{ij+1}^s \int_{D_{ij}^n} \eta \, dV - \Delta V_{ij}^n \int_{D_{ij+1}^s} \eta \, dV \right\},
\end{aligned}$$

wobei $\Delta V_{ij+\frac{1}{2}} = \Delta V_{ij}^n + \Delta V_{ij+1}^s$ verwendet wurde. Mit den Gleichungen (4.13) und (4.14) kommt man auf das wichtige Zwischenergebnis

$$\Delta V_{ij}^n \left\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij}^n} = \Delta V_{ij}^n \mathbf{w}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (4.15)$$

Den Mittelwert $\mathbf{w}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1}$ erhält man durch Integration über das gesamte Gebiet $D_{ij+\frac{1}{2}}$ der versetzten Zelle (rote Fläche in Abb. 4.2). Dabei ist zu beachten, dass sich die Rekonstruktionen in den Teilgebieten D_{ij}^n und D_{ij+1}^s unterscheiden. Es gilt also

$$\mathbf{w}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} = \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\Delta V_{ij+\frac{1}{2}}} \left\{ \Delta V_{ij}^n \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij}^n} + \Delta V_{ij+1}^s \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij+1}^s} \right\}$$

und mit Gleichung (4.15) eingesetzt für $\alpha = n$ in der ersten Summe von Gleichung (4.12)

$$\begin{aligned} & \Delta V_{ij}^n \left\{ \left\langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^n(t_{n+1}) \right\rangle_{D_{ij}^n} - \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(t_{n+1}) \right\rangle_{D_{ij}^n} \right\} \\ &= \frac{\Delta V_{ij}^n \Delta V_{ij+1}^s}{\Delta V_{ij+\frac{1}{2}}} \left\{ \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij+1}^s} - \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij}^n} \right\} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Bislang wurden lediglich die Integrationsgebiete umgeformt und die linearen Rekonstruktionen eingesetzt, also letztendlich noch keinerlei Information über das zu lösende Transportproblem verwendet. Das geschieht nun im nächsten Schritt, indem die Größen zum Zeitpunkt t_{n+1} mittels der integralen Erhaltungsgleichung (4.2) durch solche zur Zeit t_n ausgedrückt werden¹.

$$\begin{aligned} \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{n+1} \right\rangle_{D_{ij}^n} &= \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n \right\rangle_{D_{ij}^n} - \frac{1}{\Delta V_{ij}^n} \int_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[h_\eta h_\phi \mathbf{F} \right]_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} d\eta dt \\ &\quad - \frac{1}{\Delta V_{ij}^n} \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[h_\xi h_\phi \mathbf{G} \right]_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} d\xi dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}^n} dt \\ &= \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n \right\rangle_{D_{ij}^n} - \frac{\Delta t}{\Delta V_{ij}^n} \left[\int_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \left[h_\eta h_\phi \mathbf{F} \right]_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} d\eta + \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} \left[h_\xi h_\phi \mathbf{G} \right]_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} d\xi \right]_{t_n + \frac{\Delta t}{2}} \\ &\quad + \Delta t \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}^n} \Big|_{t_n + \frac{\Delta t}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned}$$

¹Man beachte den Unterschied zwischen den Indizes „n“ für die Zeit t_n und „n“ für nördlich.

Auf die gleiche Weise zeigt man, dass

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^{n+1} \rangle_{D_{ij+1}^s} &= \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^n \rangle_{D_{ij+1}^s} - \frac{\Delta t}{\Delta V_{ij+1}^s} \left[\int_{\eta_{j+\frac{1}{2}}}^{(\eta_+^s)_{ij+1}} [h_\eta h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} d\eta \right. \\ &\quad \left. + \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} [h_\xi h_\phi \mathbf{G}]_{\eta_{j+\frac{1}{2}}}^{(\eta_+^s)_{ij+1}} d\xi \right]_{t_n + \frac{\Delta t}{2}} + \Delta t \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij+1}^s} \Big|_{t_n + \frac{\Delta t}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

gilt. Da die Volumenelemente wegen Gleichung (4.13) alle von der Ordnung Δt sind, gilt das auch für den Faktor vor der geschweiften Klammer in Gleichung (4.16). Es können also alle Terme von der Ordnung Δt und höher innerhalb dieser Klammer vernachlässigt werden. Das bedeutet, dass die Summanden mit den Quelltermen verschwinden und ebenso die Flussintegrale über \mathbf{F} wegen

$$\begin{aligned} \int_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} [h_\eta h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} d\eta \Big|_{t_n + \frac{\Delta t}{2}} &= (\eta_{j+\frac{1}{2}} - \eta_-^n) [h_\eta h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} \Big|_{t_n + \frac{\Delta t}{2}, \eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= b_{j+\frac{1}{2}}^+ \Delta t [h_\phi \mathbf{F}]_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} \Big|_{t_n + \frac{\Delta t}{2}, \eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Es bleibt also von Gleichung (4.16), wenn man noch die Volumenelemente durch Gleichung (4.13) und die verbleibenden Mittelwerte durch ihre entsprechenden Integrale (Gl. 4.14) ersetzt

$$\begin{aligned} \Delta V_{ij}^n \left\{ \langle \tilde{\mathbf{w}}_{ij}^n(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^n} - \langle \tilde{\mathbf{u}}_{ij}(t_{n+1}) \rangle_{D_{ij}^n} \right\} \\ = \frac{\Delta t}{b_{j+\frac{1}{2}}^+ - b_{j+\frac{1}{2}}^-} \left\{ b_{j+\frac{1}{2}}^+ b_{j+\frac{1}{2}}^- \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} \left(h_\xi h_\phi \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n \Big|_{\eta_+^n} - h_\xi h_\phi \tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^n \Big|_{(\eta_+^s)_{ij+1}} \right) d\xi \right. \\ \left. + \int_{\xi_+^{\text{nw}}}^{\xi_-^{\text{ne}}} \left(b_{j+\frac{1}{2}}^+ [h_\xi h_\phi \mathbf{G}]_{\eta_-^n}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + b_{j+\frac{1}{2}}^- [h_\xi h_\phi \mathbf{G}]_{\eta_{j+\frac{1}{2}}}^{(\eta_+^s)_{ij+1}} \right) \Big|_{t_n + \frac{\Delta t}{2}} d\xi \right\} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \tag{4.17}$$

Ähnlich komplizierte Ausdrücke erhält man für die drei verbleibenden Kantenabschnitte. Ein wichtiges Resultat dieser langen Rechnung sieht man sofort: Bei Division durch Δt existiert der Grenzwert für $\Delta t \rightarrow 0$.

Bei den Eckgebieten müsste man im Prinzip genauso vorgehen. Um den Beweis etwas abzukürzen, sei hier nur gezeigt, dass die Eckflächen alle von der Ordnung Δt^2 sind. Für die nordwestliche Fläche gilt:

$$\begin{aligned}\Delta V_{ij}^{\text{nw}} &= \int_{D_{ij}^{\text{nw}}} dV = \int_{\eta_-^{\text{nw}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_+^{\text{nw}}} h_\xi h_\eta h_\phi \, d\xi \, d\eta \\ &= \left(\eta_{j+\frac{1}{2}} - \eta_-^{\text{nw}} \right) \left(\xi_+^{\text{nw}} - \xi_{i-\frac{1}{2}} \right) h_\xi h_\eta h_\phi \Big|_{\xi_{i-\frac{1}{2}}, \eta_{j+\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ &= -B_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^- A_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^+ \Delta t^2 h_\phi(\xi_{i-\frac{1}{2}}, \eta_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta t^4).\end{aligned}$$

Man kann dann schlussfolgern, dass bei Division durch Δt im Grenzübergang die Beiträge durch die Eckgebiete verschwinden.

Nun kann man die gewonnenen Resultate in Gleichung (4.12) einsetzen und die verbleibenden Terme zusammenfassen. Da sich im Limes $\Delta t \rightarrow 0$ die Integralgrenzen verhalten wie

$$\begin{aligned}\xi_+^{\text{sw}}, \xi_+^{\text{nw}} &\rightarrow \xi_{i-\frac{1}{2}}, & \xi_-^{\text{se}}, \xi_-^{\text{ne}} &\rightarrow \xi_{i+\frac{1}{2}} \\ \eta_+^{\text{se}}, \eta_+^{\text{ne}} &\rightarrow \eta_{j-\frac{1}{2}}, & \eta_-^{\text{nw}}, \eta_-^{\text{ne}} &\rightarrow \eta_{j+\frac{1}{2}},\end{aligned}$$

heben sich die letzten beiden Flussintegrale gegen Terme aus der ersten Summe weg. Es ist zweckmäßig zur Abkürzung der Schreibweise die numerischen Flüsse an den Zellrändern einzuführen.

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \left\{ \left(a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}) - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}) \right) \right. \\ &\quad \left. - a_{i+\frac{1}{2}}^+ a_{i+\frac{1}{2}}^- (\tilde{\mathbf{u}}_{ij} - \tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}) \right\} h_\eta h_\phi \Big|_{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \, d\eta \\ \mathcal{G}_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{b_{j+\frac{1}{2}}^+ - b_{j+\frac{1}{2}}^-} \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \left\{ \left(b_{j+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}) - b_{j+\frac{1}{2}}^- \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{i,j+1}) \right) \right. \\ &\quad \left. - b_{j+\frac{1}{2}}^+ b_{j+\frac{1}{2}}^- (\tilde{\mathbf{u}}_{ij} - \tilde{\mathbf{u}}_{i,j+1}) \right\} h_\xi h_\phi \Big|_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \, d\xi\end{aligned}\tag{4.18}$$

Dies sind die Flüsse über den östlichen bzw. nördlichen Rand. Die am westlichen bzw. südlichen Rand ergeben sich einfach durch die Ersetzung der

Indizes $i \rightarrow i - 1$ in der ersten und $j \rightarrow j - 1$ in der zweiten Gleichung. Damit lässt sich die Formel (4.12) für die Zeitentwicklung der Zellmittelwerte in sehr kompakter Form schreiben.

$$\frac{d\mathbf{u}_{ij}}{dt} = -\frac{\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta V_{ij}} - \frac{\mathcal{G}_{j+\frac{1}{2}} - \mathcal{G}_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta V_{ij}} + \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}} \quad (4.19)$$

Das Zellvolumen wird gemäß (4.1) durch Integration

$$\Delta V_{ij} = \int_{D_{ij}} dV = \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} h_{\xi} h_{\eta} h_{\phi} d\xi d\eta \quad (4.20)$$

bestimmt. Es gibt zwei wichtige Unterschiede zu den von Kurganov und Tadmor (2002) berechneten numerischen Flüssen, denn die hier vorgestellte Herleitung ist in zweierlei Hinsicht allgemeingültiger.

1. Die Veränderung von Flächen- und Volumenelementen entlang der gekrümmten Koordinatenlinien wird berücksichtigt. Das äußert sich zum einen in den Skalierungsfaktoren unter den Flussintegralen (Gl. 4.18) und zum anderen in der Berechnung der Zellvolumina sowie der Zellmittelwerte (Gl. 4.1).
2. In den Gleichungen (4.18) ist noch nicht auf eine bestimmte Quadraturregel zur Approximation der Integrale spezialisiert worden. Im Prinzip stehen einem hier also noch alle Möglichkeiten offen, wie man die Integrale entlang der Zellkanten auswertet. Es macht allerdings wenig Sinn, eine Quadraturregel sehr hoher Fehlerordnung zu verwenden, da aufgrund der Rekonstruktion das Verfahren insgesamt nur von zweiter Ordnung in der räumlichen Diskretisierung ist.

Der räumliche Diskretisierungsfehler geht also an zwei Stellen in die Rechnung ein. Will man das Verfahren in dieser Hinsicht verbessern, muss man zum einen eine neue Rekonstruktionsvorschrift einführen und zum anderen in den Flussintegralen Quadraturregeln höherer Ordnung verwenden. Letzteres ist unproblematisch, da eine Vielzahl solcher Quadraturvorschriften bekannt sind. Wie in Kapitel 4.2 erörtert wird, muss man hingegen bei der Rekonstruktion darauf achten, unerwünschte Oszillationen zu unterdrücken. Quadratische Rekonstruktionsvorschriften, die diesen Anforderungen im kartesischen Fall genügen, finden sich in Kurganov und Tadmor (2002) sowie Kurganov und Petrova (2001). Es wäre also noch zu überprüfen, ob eine Ausdehnung auf den krummlinigen Fall möglich ist. Eine zentrale Rolle spielen

dabei die Forderung (4.9) und deren Auswirkungen auf das Zwischenergebnis (4.15).

Für eine praktische Umsetzung des geschilderten Verfahrens fehlen nun noch drei Dinge. Zunächst – wie schon erwähnt – die Festlegung einer Quadraturregel, dann eine Vorschrift für die Steigungen in der Rekonstruktion und zu guter Letzt ein geeignetes Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungssysteme, um die Zeitintegration durchzuführen.

4.1.4 Approximation der Flussintegrale

In nahezu jedem Lehrbuch über numerische Mathematik finden sich zahlreiche Quadraturvorschriften für die numerische Integration (siehe z.B. Hämmerlin und Hoffmann 1989, Kap. 7). Wie schon erwähnt, sind an dieser Stelle speziell solche Quadraturregeln von Interesse, deren Fehlerrestglied von kubischer Ordnung in der Diskretisierung ist. Damit scheiden die Rechteckregeln aus. Die einfachste mögliche Variante ist die Mittelpunktsregel, bei der das Integral gemäß

$$\int_a^b f(x) \, dx = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \mathcal{O}((b-a)^3) \quad (4.21)$$

approximiert wird. Sie hat den Vorteil, dass zu ihrer Berechnung nur eine Funktionsauswertung in der Mitte des Intervalls nötig ist. Das kann in Bezug auf die Effizienz eines numerischen Verfahrens von Bedeutung sein. Die mit Hilfe der Mittelpunktsregel berechneten numerischen Flüsse haben daher auch den Vorzug großer Einfachheit. Eine Anwendung auf die Formeln (4.18) liefert

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{mr}} &= \frac{\Delta A_{i+\frac{1}{2},j}}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} \left\{ a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^e) - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^w) - a_{i+\frac{1}{2}}^+ a_{i+\frac{1}{2}}^- (\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^e - \tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^w) \right\} \\ \mathcal{G}_{j+\frac{1}{2}}^{\text{mr}} &= \frac{\Delta A_{i,j+\frac{1}{2}}}{b_{j+\frac{1}{2}}^+ - b_{j+\frac{1}{2}}^-} \left\{ b_{j+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n) - b_{j+\frac{1}{2}}^- \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^s) - b_{j+\frac{1}{2}}^+ b_{j+\frac{1}{2}}^- (\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n - \tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^s) \right\} \end{aligned} \quad (4.22)$$

mit den Flächenelementen

$$\begin{aligned} \Delta A_{i+\frac{1}{2},j} &= h_\eta^e h_\phi^e \Delta \eta \\ \Delta A_{i,j+\frac{1}{2}} &= h_\xi^n h_\phi^n \Delta \xi. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Wichtig ist die Unterscheidung der östlichen und westlichen bzw. der nördlichen und südlichen Werte für $\tilde{\mathbf{u}}$. Obwohl die Wertepaare jeweils in der Mitte der Zellkanten berechnet werden – also bei denselben Koordinaten – unterscheiden sie sich unter Umständen voneinander. Das liegt daran, dass einmal die Rekonstruktion innerhalb der Zelle $\tilde{\mathbf{u}}_{ij}$ verwendet wird, während bei $\tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^w$ und $\tilde{\mathbf{u}}_{ij+1}^s$ die der Nachbarzellen genommen wird.

Das Verfahren ist in dieser Beziehung vollkommen symmetrisch, daher spricht man auch von einem zentralen Schema. Grundsätzlich können die Werte aller Nachbarzellen einen Einfluss auf die zeitliche Änderung der Zellmittlerwerte einer Zelle haben. Es ist bekannt, dass dies zu Problemen bei Überschallströmungen führt, weil dort keine Informationsausbreitung entgegen der Strömung möglich ist. Dieses Problem löst das Verfahren auf sehr elegante Weise, indem es die Ausbreitungsgeschwindigkeiten so wählt (vgl. Gln. 4.3 und 4.4), dass dies unterbunden wird. Werden die Differenzen in einer Diskretisierung immer so gebildet, dass auf die Informationsausbreitung Rücksicht genommen wird, so spricht man auch von *upwinding* und bei den entsprechenden Verfahren von *upwind*-Verfahren. Für die Klasse der hier beschriebenen Verfahren hat sich daher der Terminus *central-upwind*-Verfahren durchgesetzt.

In Gleichung (4.19) werden außerdem noch Approximationen für die Volumina benötigt. Aus Konsistenzgründen sollte man hier dieselbe Quadraturformel wie für die Flussintegrale verwenden. Wendet man die Mittelpunktsregel auf das Integral (4.20) an, so ergibt sich

$$\Delta V_{ij}^{\text{mr}} = h_\xi(\xi_i, \eta_j) h_\eta(\xi_i, \eta_j) h_\phi(\xi_i, \eta_j) \Delta\xi \Delta\eta. \quad (4.24)$$

Eine zweite Möglichkeit zur Approximation der Integrale bietet die Sehnentrapezregel

$$\int_a^b f(x) \, dx = \frac{b-a}{2} \left(f(a) + f(b) \right) + \mathcal{O}((b-a)^3). \quad (4.25)$$

Im Unterschied zur Mittelpunktsregel benötigt sie zwei Funktionsauswertungen und ist daher etwas kostspieliger im Hinblick auf die Computerressourcen. Wie sich später zeigen wird, bietet sie allerdings gerade in Bezug auf krummlinige Koordinatensysteme einen Vorteil, der daher rührt, dass sich die geometrischen Größen innerhalb einer Zelle ändern können. Es macht daher durchaus Sinn bei gleicher Fehlerordnung und kostspieligerer Auswertung, die Trapezregel zu verwenden, da sie statt eines Wertes in der Mitte des

Integrationsintervalls die beiden Randwerte berücksichtigt. Die numerischen Flüsse haben die Gestalt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{tr}} &= \frac{1}{2a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} \left\{ \Delta A_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\xi}} \left(a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{ne}}) - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^{\text{nw}}) \right) \right. \\
&\quad \left. + \Delta A_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\hat{\xi}} \left(a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{se}}) - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^{\text{sw}}) \right) \right. \\
&\quad \left. - a_{i+\frac{1}{2}}^+ a_{i+\frac{1}{2}}^- \left(\Delta A_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\xi}} (\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{ne}} - \tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^{\text{nw}}) + \Delta A_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\hat{\xi}} (\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{se}} - \tilde{\mathbf{u}}_{i+1,j}^{\text{sw}}) \right) \right\} \\
\mathcal{G}_{j+\frac{1}{2}}^{\text{tr}} &= \frac{1}{2b_{j+\frac{1}{2}}^+ - b_{j+\frac{1}{2}}^-} \left\{ \Delta A_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\eta}} \left(b_{j+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{ne}}) - b_{j+\frac{1}{2}}^- \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{i,j+1}^{\text{se}}) \right) \right. \\
&\quad \left. + \Delta A_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\eta}} \left(b_{j+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{nw}}) - b_{j+\frac{1}{2}}^- \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{u}}_{i,j+1}^{\text{sw}}) \right) \right. \\
&\quad \left. - b_{j+\frac{1}{2}}^+ b_{j+\frac{1}{2}}^- \left(\Delta A_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\eta}} (\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{ne}} - \tilde{\mathbf{u}}_{i,j+1}^{\text{se}}) + \Delta A_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\eta}} (\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{\text{nw}} - \tilde{\mathbf{u}}_{i,j+1}^{\text{sw}}) \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Man sieht deutlich den Unterschied zur Mittelpunktsregel. Statt der Daten an den Kantenmitten werden die rekonstruierten Größen in den Ecken benötigt. Außerdem muss man bei den Flächenelementen in den Ecken zwischen den beiden Raumrichtungen unterscheiden.

$$\begin{aligned}
\Delta A_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\xi}} &= h_{\eta}^{\text{ne}} h_{\phi}^{\text{ne}} \Delta \eta, & \Delta A_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\hat{\xi}} &= h_{\eta}^{\text{se}} h_{\phi}^{\text{se}} \Delta \eta \\
\Delta A_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\eta}} &= h_{\xi}^{\text{ne}} h_{\phi}^{\text{ne}} \Delta \xi, & \Delta A_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\hat{\eta}} &= h_{\xi}^{\text{nw}} h_{\phi}^{\text{nw}} \Delta \xi
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Auch hier sei wieder das entsprechende Volumelement für die Trapezregel angegeben:

$$\Delta V_{ij}^{\text{tr}} = \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{4} \left(h_{\xi}^{\text{sw}} h_{\eta}^{\text{sw}} h_{\phi}^{\text{sw}} + h_{\xi}^{\text{se}} h_{\eta}^{\text{se}} h_{\phi}^{\text{se}} + h_{\xi}^{\text{nw}} h_{\eta}^{\text{nw}} h_{\phi}^{\text{nw}} + h_{\xi}^{\text{ne}} h_{\eta}^{\text{ne}} h_{\phi}^{\text{ne}} \right). \tag{4.28}$$

Im Fall kartesischer Koordinaten sind alle Skalierungsfunktionen identisch eins. Flächen- und Volumelemente nehmen dann eine sehr einfache Gestalt an, und es werden sowohl für die Mittelpunktsregel als auch für die Sehnen-trapezregel die semidiskreten Formeln von Kurganov und Tadmor (2002) reproduziert.

4.2 Rekonstruktion

Ein wesentlicher Baustein des oben beschriebenen numerischen Verfahrens ist die Rekonstruktion abschnittsweise linearer Funktionen $\tilde{\mathbf{u}}$ aus den Zell-

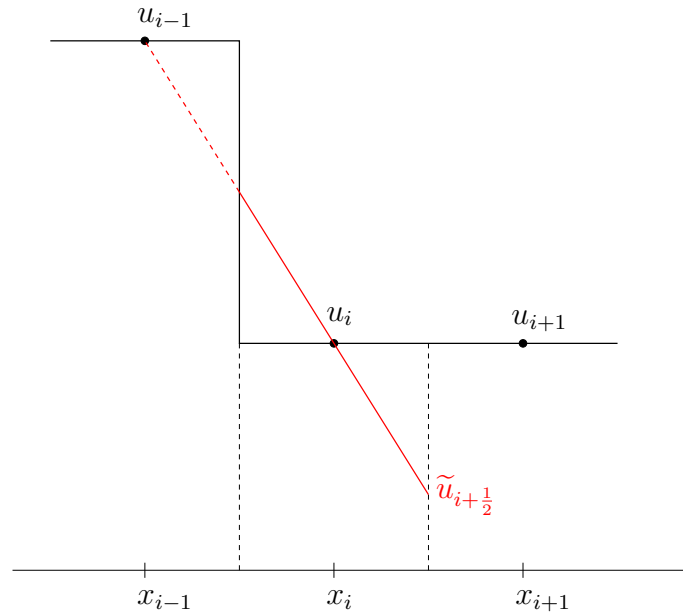


Abbildung 4.3: Erzeugung lokaler Extrema in der Nähe von Unstetigkeiten

mittelwerten \mathbf{u} . Auf diese Weise gelangt man zu einem Verfahren zweiter Ordnung und vermeidet das Problem der hohen künstlichen Viskosität bei Verfahren erster Ordnung. Eine einfache Möglichkeit, dies zu realisieren, wäre es *upwind*-Differenzen der Mittelwerte von benachbarten Zellen als Steigungen in der Rekonstruktion zu verwenden. Man wird allerdings sehr schnell feststellen, dass ein solches Verfahren numerisch instabil ist, sobald Unstetigkeiten in den Lösungen auftreten. Wie von Godunov (1959) gezeigt wurde, ist dies ein grundsätzliches Problem aller monoton-linearen Differenzenverfahren höherer als erster Ordnung.

Lineare Rekonstruktionen führen zur Erzeugung lokaler Extrema in der Nähe von Unstetigkeiten. Man verdeutlicht dieses Verhalten am besten anhand eines einfachen Beispiels. Dazu betrachte man eine Stufenfunktion, wie sie in Abbildung 4.3 zu sehen ist. Die Stufe bewege sich von links nach rechts, so dass die *upwind*-Steigung der Daten in Zelle i durch den Differenzenquotienten

$$\Delta_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

gegeben ist. Mit der linearen Rekonstruktion

$$\tilde{u}_i(x) = u_i + \Delta_i(x - x_i)$$

errechnet man daher einen Zellrandwert

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}} = u_i + \Delta_i(x_{i+\frac{1}{2}} - x_i) = \frac{3}{2}u_i - \frac{1}{2}u_{i-1} < u_i, \quad \text{falls } u_{i-1} > u_i.$$

Diese Über- und Unterschießer induzieren unphysikalische Oszillationen in den numerischen Lösungen von Erhaltungsgleichungen. Zumindest für eindimensionale Strömungen kann gezeigt werden, dass sowohl die Euler- als auch die Navier-Stokes-Gleichungen die Erzeugung lokaler Extrema in der Nähe von Unstetigkeiten nicht zulassen.

Wie man sich anhand der Abbildung 4.3 auch sofort klar macht, entsteht dieses Problem allein durch die lineare Rekonstruktion. In einem Verfahren erster Ordnung ist $\Delta_i = 0$ und daher $\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}} = u_i$.

4.2.1 Das Konzept der Totalen Variation

Eine Folgerung aus dem Theorem von Godunov (1959) ist, dass es keine **lineare** Funktion der Steigungen gibt, die die Oszillationen unterbindet. Man ist auf nicht-lineare Korrekturen angewiesen. Van Leer (1973) und Boris und Book (1973) haben unabhängig voneinander das Konzept der Limiter entwickelt, um diese ungewollten Oszillationen in den numerischen Lösungen zu unterdrücken.

Alle darauf basierenden Verfahren verlangen, dass die physikalischen Lösungen der zu Grunde liegenden Erhaltungsgleichung keine Oszillationen zulassen. Man beschreibt dieses Verhalten am besten mit dem Begriff der Totalen Variation. Für eine skalare Erhaltungsgleichung der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (4.29)$$

definiert man die *Totale Variation* der Lösung u durch

$$\mathrm{TV}(u) = \limsup_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} \int_{-\infty}^{\infty} |u(x + \delta) - u(x)| \, dx. \quad (4.30)$$

Man kann zeigen, dass die Totale Variation der Lösung einer homogenen skalaren Erhaltungsgleichung vom Typ (4.29) eine nicht anwachsende Funktion der Zeit ist (Lax 1990). Für eine diskrete Lösung zum Zeitpunkt t_n schreibt man die Totale Variation als Summe der räumlichen Differenzen

$$\mathrm{TV}(u^n) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n|. \quad (4.31)$$

In der englischsprachigen Literatur werden numerische Verfahren, bei denen die Totale Variation eine nicht anwachsende Funktion der Zeit ist, als *Total Variation Diminishing (TVD)* bezeichnet. Für ein solches Verfahren ist

$$\mathrm{TV}(u^{n+1}) \leq \mathrm{TV}(u^n). \quad (4.32)$$

Gelten für ein numerisches Verfahren die folgenden Bedingungen als Funktionen der Zeit:

1. Es können keine neuen lokalen Extrema entstehen,
2. Der Wert eines lokalen Minimums (Maximums) wird nicht kleiner (größer),

so bezeichnet man es als *monotonieerhaltend*. Man kann zeigen, dass alle TVD-Verfahren die Monotonie erhalten. Es genügt also der Nachweis, dass ein numerisches Verfahren die Bedingung (4.32) erfüllt, um zu gewährleisten, dass es die unerwünschten Oszillationen unterdrückt.

Es sei an dieser Stelle ausdrücklich darauf hingewiesen, dass das Verhalten von Lösungen von nichtlinearen Erhaltungsgleichungen Gegenstand der aktuellen Forschung in der Mathematik ist. Nur in einigen Fällen konnte tatsächlich der Nachweis erbracht werden, dass die Lösungen die Erzeugung lokaler Extrema nicht zulassen. Es gibt allerdings im Fall der Euler- und Navier-Stokes-Gleichungen bislang auch keinen experimentellen Befund dafür, dass in der Nähe von Unstetigkeiten Oszillationen entstehen.

4.2.2 Begrenzung der Steigungen

Eine Möglichkeit, die TVD-Bedingung (4.32) zu erfüllen, besteht darin, die Steigungen durch geeignete nicht-lineare Funktionen, sog. *Limiters*, zu begrenzen. Das Prinzip der Limiter lässt sich wieder am besten anhand eines einfachen Beispiels erläutern. Dazu betrachte man die Funktionsweise des minmod-Limiters. Er ist definiert durch

$$\text{minmod}(a, b) = \begin{cases} a & \text{falls } ab > 0 \text{ und } |a| < |b| \\ b & \text{falls } ab > 0 \text{ und } |a| > |b| \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.33)$$

Um die Wirkungsweise besser zu verstehen, betrachte man noch einmal das Beispiel aus Abbildung 4.3 und wähle als Argumente der minmod-Funktion die rechts- und linksseitigen Differenzenquotienten bezogen auf die Zelle i .

$$\Delta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad \Delta_{i-\frac{1}{2}} = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

Setzt man die Steigung in der Zelle i mit Hilfe der minmod-Funktion, dann gilt wegen $u_{i+1} = u_i$ und somit $\Delta_{i+\frac{1}{2}} = 0$

$$\Delta_i = \text{minmod}\left(\Delta_{i+\frac{1}{2}}, \Delta_{i-\frac{1}{2}}\right) = 0.$$

Das hat zur Folge, dass der Randwert $\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}$ auf den Zellmittelwert u_i gesetzt wird. Die Funktionsweise lässt sich also kurz so umreißen: In der Umgebung von steilen Gradienten in den Lösungen schaltet der Limiter um auf ein Schema erster Ordnung.

Der Limiter würde in diesem Beispiel dasselbe Resultat liefern, wenn $u_i < u_{i+1}$ ist, denn dann läge in Zelle u_i ein lokales Minimum vor und die Vorzeichen von $\Delta_{i+\frac{1}{2}}$ und $\Delta_{i-\frac{1}{2}}$ unterschieden sich. Nur im Fall einer monotonen Funktion, also wenn z.B. $u_{i-1} > u_i > u_{i+1}$ gilt, würde die dem Betrag nach kleinere der beiden Steigungen für Δ_i ausgewählt.

Man kann die minmod-Funktion auch für drei und mehr Argumente definieren.

$$\text{minmod}(a_1, \dots, a_n) = \begin{cases} x & \text{falls } a_1 \cdot \dots \cdot a_n > 0 : x = \min(|a_1|, \dots, |a_n|) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.34)$$

Damit lässt sich die Klasse der *monotoniced-centred*-Limiter (mc-Limiter) schreiben als die minmod-Funktion dreier Differenzenquotienten

$$\Delta_{i-\frac{1}{2}} = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad \Delta_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2(x_i - x_{i-1})}, \quad \Delta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i},$$

also der rechts- und linksseitigen sowie der zentralen Differenz.

$$\text{mc}(\Delta_{i-\frac{1}{2}}, \Delta_i, \Delta_{i+\frac{1}{2}}) = \text{minmod}(\theta\Delta_{i-\frac{1}{2}}, \Delta_i, \theta\Delta_{i+\frac{1}{2}}) \quad (4.35)$$

Mit dem Parameter $\theta \in [1; 2]$ kann man die künstliche Viskosität dieser Limiter einstellen. Für $\theta = 1$ ist die Wirkungsweise der mc-Limiter identisch mit der des normalen minmod-Limiters, angewandt auf die rechts- und linksseitigen Differenzenquotienten. Größere Werte von θ bewirken eine geringere künstliche Viskosität. Allerdings entstehen erfahrungsgemäß, abhängig von der jeweiligen Simulation, für $\theta \gtrsim 1,5$ oftmals numerische Instabilitäten.

Für die Klasse der oben angegebenen mc-Limiter findet sich bei Kurganov und Tadmor (2000) ein Beweis für die TVD-Eigenschaft (4.32) des eindimensionalen semidiskreten KT-Verfahrens.

Es gibt noch eine ganze Reihe von Limiterfunktionen. Eine gute Auswahl findet sich bei Toro (1997). Als ein weiteres Beispiel für einen Limiter sei hier lediglich noch der superbee-Limiter genannt, weil er ebenfalls im Programm realisiert wurde.

$$\text{superbee}(a, b) = \begin{cases} \text{sgn}(a) \cdot \min(|a|, |b|, \frac{1}{2} \max(|a|, |b|)) & \text{falls } ab > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.36)$$

4.2.3 Volumenzentren der Zellen

Die Rekonstruktionsvorschrift (4.8) enthält außer den Steigungen noch den Entwicklungspunkt (ξ_0, η_0) . Die Bedingung (4.9) liefert eine Vorschrift, nach der die Lage dieser Punkte in den Zellen festgelegt wird. Es gilt

$$(\xi_0)_{ij} = \langle \xi \rangle_{D_{ij}} \quad \text{und} \quad (\eta_0)_{ij} = \langle \eta \rangle_{D_{ij}},$$

was gleichbedeutend mit den Schwerpunkten der Zellen ist. Man kann diese Ausdrücke in vielen Fällen analytisch berechnen. Es ist aber auch hier von Vorteil, wenn man sie durch die entsprechenden Quadraturregeln approximiert, zum einen, weil numerischen Verfahren Gefahr laufen, inkonsistent zu werden, wenn man gewisse Ausdrücke exakt bestimmt und andere approximiert, zum anderen aber auch, weil man so einen generischen Algorithmus angeben kann, der für alle denkbaren Geometrien die Zellschwerpunkte ermittelt. Man unterscheidet auch an dieser Stelle wieder zwischen Mittelpunktsregel

$$(\xi_0^{\text{mr}})_{ij} = \xi_i \quad \text{und} \quad (\eta_0^{\text{mr}})_{ij} = \eta_j \quad (4.37)$$

und Trapezregel

$$\begin{aligned} (\xi_0^{\text{tr}})_{ij} &= \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{4 \Delta V_{ij}^{\text{tr}}} \left(\xi_{i+\frac{1}{2}} (h_\xi^{\text{ne}} h_\eta^{\text{ne}} h_\phi^{\text{ne}} + h_\xi^{\text{se}} h_\eta^{\text{se}} h_\phi^{\text{se}}) \right. \\ &\quad \left. + \xi_{i-\frac{1}{2}} (h_\xi^{\text{nw}} h_\eta^{\text{nw}} h_\phi^{\text{nw}} + h_\xi^{\text{sw}} h_\eta^{\text{sw}} h_\phi^{\text{sw}}) \right) \\ (\eta_0^{\text{tr}})_{ij} &= \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{4 \Delta V_{ij}^{\text{tr}}} \left(\eta_{j+\frac{1}{2}} (h_\xi^{\text{ne}} h_\eta^{\text{ne}} h_\phi^{\text{ne}} + h_\xi^{\text{nw}} h_\eta^{\text{nw}} h_\phi^{\text{nw}}) \right. \\ &\quad \left. + \eta_{j-\frac{1}{2}} (h_\xi^{\text{se}} h_\eta^{\text{se}} h_\phi^{\text{se}} + h_\xi^{\text{sw}} h_\eta^{\text{sw}} h_\phi^{\text{sw}}) \right). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Bei Verwendung der Mittelpunktsregel sind die Näherungswerte für die Zellschwerpunkte also identisch mit den geometrischen Mittelpunkten. Im Fall der Trapezregel sind die Ausdrücke sehr viel komplizierter. Wie man sich leicht überzeugt, ist die Abweichung von den analytischen Ausdrücken in Kugel- und Zylinderkoordinaten bei den mittels der Trapezregel bestimmten Approximationen geringer.

4.2.4 Rekonstruktion der primitiven Variablen

Bislang wurde immer davon ausgegangen, dass die Rekonstruktion (4.8) auf den konservativen Variablen operiert. Das ist jedoch nicht zwingend erforderlich. Schon für das MUSCL-Verfahren konnte gezeigt werden, dass auch

eine Rekonstruktion in den primitiven Variablen möglich ist (vgl. Toro 1997, Kap. 14.4). Beide Beschreibungen sind nicht äquivalent und können zu unterschiedlichen Resultaten führen. Das belegen die Tests in Kapitel 6.

Da für die Berechnung der numerischen Flüsse (4.18) mit Hilfe der physikalischen Flüsse \mathbf{F} und \mathbf{G} an den Zellgrenzen die primitiven Variablen sowieso bekannt sein müssen, handelt man sich durch die Rekonstruktion in den primitiven Variablen auch keine zusätzliche Konversion zwischen konservativen und primitiven Variablen ein. Der numerische Aufwand bleibt also gleich.

Im Allgemeinen ist schwer zu sagen, welcher Art der Rekonstruktion man den Vorzug geben sollte. Für das System der Eulergleichungen (3.28) allerdings findet sich ein Argument, das für die Rekonstruktion in primitiven Variablen spricht. Bei den numerischen Tests in Abschnitt 6.7 erweisen sich die Simulationen mit primitiver Rekonstruktion für die Limiter mit geringerer künstlicher Viskosität als stabiler. Bei konservativer Rekonstruktion können leichter zu steile Gradienten im Druck entstehen, weil die Limiter lediglich auf die Gesamtenergie wirken. Daher kommt es manchmal in Bereichen, in denen die Gesamtenergie durch die kinetische Energie dominiert wird, zu negativen Drücken. Eine Möglichkeit, dieses Problem in den Griff zu bekommen, besteht darin, Limiter mit besonders hoher künstlicher Viskosität zu benutzen. Dies hat allerdings insbesondere auf die lokale Drehimpulserhaltung negative Auswirkungen (vgl. Kapitel 6.7).

4.3 Quellterme

Bislang wurde noch nichts über die konkrete numerische Behandlung der Quellterme gesagt. In der Regel ist dieser Teil auch weniger problematisch als die Formulierung des Advektionsschrittes. Es gibt allerdings doch einiges zu beachten.

Zum einen sollte aus Konsistenzgründen für die Zellmittelwerte der Quellterme (vgl. Gl. 4.19) die gleiche Quadraturregel wie für die Flussintegrale verwendet werden. Dies ist insbesondere im Hinblick auf die geometrischen Quellterme von Bedeutung. Zum anderen sollte man darauf achten, dass die Limiter keinen Einfluss auf die physikalischen Quellterme haben. Ansonsten würden etwaige gewollte Oszillationen in den Quelltermen durch die Limiter gedämpft. Dies gilt nicht für die geometrischen Quellen, denn sie gehen durch eine Koordinatentransformation aus den kartesischen hydrodynamischen Gleichungen hervor und sind somit Teil des Advektionsproblems, das die TVD-Eigenschaft hat.

Allgemein gilt für alle Quellterme

$$\langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}} = \mathbf{S}_{ij} = \frac{1}{\Delta V_{ij}} \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S}(t, \xi, \eta, \mathbf{u}, \dots) h_\xi h_\eta h_\phi \, d\xi \, d\eta,$$

wobei die Volumenelemente durch Integration gemäß Gleichung (4.20) bzw. je nach Quadraturformel mittels der Gleichungen (4.24, 4.28) bestimmt werden. Die Punkte sollen andeuten, dass die Quellterme möglicherweise auch noch von anderen Größen abhängen können, z.B. weiteren räumlichen Ableitungen der Variablen \mathbf{u} . Auf diese Weise ist es auch möglich, Viskositätsterme, wie sie in den Navier-Stokes-Gleichungen auftreten zu berücksichtigen.

Auch das Quelltermintegral muss mit Hilfe einer der Quadraturformeln approximiert werden. Es ergeben sich für die Mittelpunktsregel (Gl. 4.21)

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{ij}^{\text{mr}} &= \frac{1}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}} \mathbf{S}(t, \xi_i, \eta_j, \mathbf{u}_{ij}, \dots) h_\xi(\xi_i, \eta_j) h_\eta(\xi_i, \eta_j) h_\phi(\xi_i, \eta_j) \Delta\xi \Delta\eta \\ &= \mathbf{S}(t, \xi_i, \eta_j, \mathbf{u}_{ij}, \dots) \end{aligned} \quad (4.39)$$

und die Trapezregel (Gl. 4.25)

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{ij}^{\text{tr}} &= \frac{\Delta\xi \Delta\eta}{4 \Delta V_{ij}^{\text{tr}}} \left(\mathbf{S}_{ij}^{\text{sw}}(t, \mathbf{u}_{ij}^{\text{sw}}, \dots) h_\xi^{\text{sw}} h_\eta^{\text{sw}} h_\phi^{\text{sw}} + \mathbf{S}_{ij}^{\text{se}}(t, \mathbf{u}_{ij}^{\text{se}}, \dots) h_\xi^{\text{se}} h_\eta^{\text{se}} h_\phi^{\text{se}} \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{S}_{ij}^{\text{nw}}(t, \mathbf{u}_{ij}^{\text{nw}}, \dots) h_\xi^{\text{nw}} h_\eta^{\text{nw}} h_\phi^{\text{nw}} + \mathbf{S}_{ij}^{\text{ne}}(t, \mathbf{u}_{ij}^{\text{ne}}, \dots) h_\xi^{\text{ne}} h_\eta^{\text{ne}} h_\phi^{\text{ne}} \right) \\ &= \frac{\sum_{\beta \in \{\text{sw, se, nw, ne}\}} \mathbf{S}_{ij}^\beta(t, \mathbf{u}_{ij}^\beta, \dots) h_\xi^\beta h_\eta^\beta h_\phi^\beta}{\sum_{\beta \in \{\text{sw, se, nw, ne}\}} h_\xi^\beta h_\eta^\beta h_\phi^\beta} \end{aligned} \quad (4.40)$$

mit dem Volumenelement aus Gleichung (4.24) bzw. (4.28).

4.3.1 Geometrische Quellterme

Als geometrische Quellterme seien hier alle Terme bezeichnet, die die Kommutatorkoeffizienten (3.6) enthalten. Diese hängen von den Skalenfaktoren h_ξ , h_η und h_ϕ sowie deren Ableitungen ab. In vielen Fällen ist es möglich, diese Ableitungen für ein bestimmtes Koordinatensystem exakt anzugeben. Leider handelt man sich auf diese Weise artifizielle Strömungen ein, die dadurch hervorgerufen werden, dass man in den Quelltermen – durch die exakte Berechnung der Ableitungen – eine höhere Genauigkeit erzielt als in den numerischen Flüssen.

Man verdeutlicht sich dieses Problem am besten anhand eines einfachen Beispiels. Dazu betrachte man ein hydrostatisches Problem für das System der Eulergleichungen (3.28) ohne externe Kräfte. Es verschwinden also die Zeitableitungen und alle Terme, die die Geschwindigkeiten enthalten. Die Gleichung für die ξ -Komponente des Impulses reduziert sich auf

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi P) - P(c_{\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}}) = 0$$

oder mit Hilfe der Darstellung der Kommutatorkoeffizienten (3.6):

$$\frac{\partial P}{\partial \xi} = 0.$$

Die Druckgradienten müssen also überall verschwinden. Das ist nichts anderes als die hydrostatische Bedingung.

Man wende sich nun der diskretisierten Variante dieser Gleichung zu. Mit Gleichung (4.19) erhält man für eine beliebige Zelle

$$\frac{[\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}]_2 - [\mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}]_2}{\Delta V_{ij}} - \left\langle P(c_{\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}}) \right\rangle_{D_{ij}} = 0. \quad (4.41)$$

Dabei ist für die numerischen Flüsse nur die ξ -Komponente der Impulsgleichung, also die zweite Komponente der Flussvektoren, einzusetzen. Nimmt man nun an, dass der Druck konstant ist, die Gradienten also überall verschwinden, ergibt sich für die numerischen Flüsse mit Hilfe der Mittelpunktsregel

$$[\mathcal{F}_{i\pm\frac{1}{2}}^{\text{mr}}]_2 = \Delta A_{i\pm\frac{1}{2},j} P_0$$

und für den Mittelwert des geometrischen Quellterms

$$\begin{aligned} \left\langle P(c_{\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}}) \right\rangle_{D_{ij}} &= \frac{P_0}{\Delta V_{ij}} \int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} \int_{\eta_{j-\frac{1}{2}}}^{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \left(h_\phi \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} + h_\eta \frac{\partial h_\phi}{\partial \xi} \right) d\xi d\eta \\ &\approx P_0 \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi) \Big|_{\xi_i, \eta_j}. \end{aligned}$$

Mit den Flächenelementen der Mittelpunktsregel (4.23) schreibt sich Gl. (4.41) dann wie folgt:

$$P_0 \frac{\Delta \eta}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}} \left\{ \left(h_\eta^e h_\phi^e - h_\eta^w h_\phi^w \right) - \Delta \xi \frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi) \Big|_{\xi_i, \eta_j} \right\} = 0.$$

Man sieht sofort, dass die Differenz in der geschweiften Klammer nur dann identisch null ist, wenn man die Ableitung der Skalierungsfunktionen durch zentrale Differenzen mittels der Zellrandwerte approximiert. Für die diskretisierten Kommutatorkoeffizienten schreibt man daher, wenn man die Mittelpunktsregel zur Approximation der Flussintegrale verwendet²:

$$\begin{aligned} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}}^{\text{mr}} &= h_{\phi}^{\text{c}}(h_{\eta}^{\text{e}} - h_{\eta}^{\text{w}}) \frac{\Delta\eta}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}} & c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}}^{\text{mr}} &= h_{\phi}^{\text{c}}(h_{\xi}^{\text{n}} - h_{\xi}^{\text{s}}) \frac{\Delta\xi}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}} \\ c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}^{\text{mr}} &= h_{\eta}^{\text{c}}(h_{\phi}^{\text{e}} - h_{\phi}^{\text{w}}) \frac{\Delta\eta}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}} & c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}^{\text{mr}} &= h_{\xi}^{\text{c}}(h_{\phi}^{\text{n}} - h_{\phi}^{\text{s}}) \frac{\Delta\xi}{\Delta V_{ij}^{\text{mr}}}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Eine ähnliche Betrachtung führt auf die Formeln für die Kommutatorkoeffizienten der Trapezregel. Allerdings reicht es hier nicht mehr aus, lediglich einen Term pro Zelle anzugeben. Die Approximation der Integrale mittels der Trapezregel erfordert die Auswertung der Integranden in den vier Ecken der Zellen. Dementsprechend ergeben sich auch pro Zelle viermal die vier Kommutatorkoeffizienten. Es seien an dieser Stelle nur die für den Ausdruck $c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}}$ aufgelistet. Die anderen lassen sich dann ganz analog berechnen.

$$\begin{aligned} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}}^{\text{tr,sw}} &= \frac{1}{4} h_{\phi}^{\text{sw}}(h_{\eta}^{\text{se}} - h_{\eta}^{\text{sw}}) \frac{\Delta\eta}{\Delta V_{ij}^{\text{tr}}} & c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}}^{\text{tr,se}} &= \frac{1}{4} h_{\phi}^{\text{se}}(h_{\eta}^{\text{se}} - h_{\eta}^{\text{sw}}) \frac{\Delta\eta}{\Delta V_{ij}^{\text{tr}}} \\ c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}}^{\text{tr,nw}} &= \frac{1}{4} h_{\phi}^{\text{nw}}(h_{\eta}^{\text{ne}} - h_{\eta}^{\text{nw}}) \frac{\Delta\eta}{\Delta V_{ij}^{\text{tr}}} & c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}}^{\text{tr,ne}} &= \frac{1}{4} h_{\phi}^{\text{ne}}(h_{\eta}^{\text{ne}} - h_{\eta}^{\text{nw}}) \frac{\Delta\eta}{\Delta V_{ij}^{\text{tr}}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Wichtig ist an dieser Stelle, dass nur Eckdaten der Zelle $\{ij\}$ Verwendung finden. Das liegt daran, dass in den numerischen Flüssen die Flächenelemente nur mit Hilfe der Werte in den Zellecken gewonnen werden (vgl. 4.27). Daher dürfen auch die Kommutatorkoeffizienten nicht mit Werten aus benachbarten Zellen gebildet werden. Andernfalls handelt man sich das oben geschilderte Problem mit den künstlichen Druckgradienten ein, da sich die geometrischen Quellterme nicht mit den entsprechenden Termen in den Flussintegralen zu null addieren können.

4.4 Zeitintegration

Durch die Abspaltung der Zeitdifferentiation von den räumlichen Differenzen im semidiskreten KT-Schema hat man ein sehr flexibles Verfahren gewonnen. Man kann je nach Anforderung an das numerische Problem einfache explizite

²Mit dem Index „c“ werden die zentralen Werte bei (ξ_i, η_j) gekennzeichnet.

Verfahren, Mehrschrittverfahren oder auch implizite Verfahren zur Lösung des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems verwenden.

Es ist hilfreich, das verbleibende Differentialgleichungsproblem etwas zu abstrahieren. Die rechte Seite in der Zeitentwicklungsgleichung (4.19) ist als Funktion der Gittergrößen \mathbf{u}_{ij} zum Zeitpunkt t aufzufassen³. Daher schreibt man

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_{ij}) = -\frac{\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta V_{ij}} - \frac{\mathcal{G}_{j+\frac{1}{2}} - \mathcal{G}_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta V_{ij}} + \langle \mathbf{S} \rangle_{D_{ij}}.$$

Mit den Ausführungen der vorangegangenen Kapitel ist es möglich, diese Funktion auszuwerten. Sind die Gittergrößen \mathbf{u}_{ij} zu einem Anfangszeitpunkt t_0 gegeben, kann man im Prinzip mit einem einfachen expliziten Eulerschema die Daten zu einem späteren Zeitpunkt $t_0 + \Delta t$ gemäß

$$\mathbf{u}_{ij}(t_0 + \Delta t) = \mathbf{u}_{ij}(t_0) + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{u}_{ij}(t_0)) \quad (4.44)$$

berechnen. Bei solch einem expliziten Verfahren unterliegt die Zeitschrittweite allerdings einer wichtigen Einschränkung: Der Courant-Friedrichs-Levi (CFL) Bedingung. Für den Fall, dass man versucht, das gewöhnliche Differentialgleichungssystem implizit zu lösen, sei noch angemerkt, dass man auf sehr effiziente Verfahren angewiesen ist. Die so einfach erscheinende Gleichung ist nämlich eine Vektorgleichung, die für **jeden** Gitterpunkt gelöst werden muss. Dabei hängt die Funktion \mathbf{f} in nichtlinearer Weise von den \mathbf{u}_{ij} der jeweiligen Zelle und der benachbarten Zellen ab, so dass eine Umkehrung dieser Abbildung ziemlich aufwendig ist.

4.4.1 CFL Bedingung

Damit bei einem Expliziten Schema zur Zeitintegration das Verfahren stabil bleibt, ist es nötig, die Zeitschrittweite zu begrenzen. Wie Courant, Friedrichs und Levi gezeigt haben (vgl. Hirsch 1988b, Kap. 8.1.2), besteht ein Zusammenhang zwischen dem maximalen Zeitschritt Δt , der räumlichen Auflösung Δx und den Signalgeschwindigkeiten innerhalb einer Zelle a_i .

$$\max_i \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_k |a_i^{(k)}| \right) < 1 \quad (4.45)$$

Der Index i durchläuft dabei alle Gitterzellen und der Index k alle Signalgeschwindigkeiten innerhalb der Zelle i . Anschaulich bedeutet diese in der

³Der Einfachheit halber wurde hier die explizite Abhängigkeit von der Zeit t und den Gitterpunkten ξ_i, η_j in der Notation weggelassen.

Literatur unter dem Namen CFL Bedingung bekannte Relation, dass Signale, die von den Zellrändern ausgehen, innerhalb eines Zeitschrittes nicht mit Signalen benachbarter Zellen interferieren dürfen.

Um die Zeitschrittweite zu begrenzen, führt man daher die sog. *Courant* oder *CFL Zahl* ein. Für ein zweidimensionales Problem ergibt sich dann für den Zeitschritt

$$\Delta t = \text{CFL} \cdot \left\{ \max_{i,j} \left(\frac{\max_k |a_i^{(k)}|}{\Delta x}, \frac{\max_k |b_j^{(k)}|}{\Delta y} \right) \right\}^{-1} \quad \text{mit } 0 < \text{CFL} < 1. \quad (4.46)$$

Die Signalgeschwindigkeiten erhält man wiederum aus den Eigenwerten der Jacobimatrizen.

Im Falle krummliniger Koordinaten ist darauf zu achten, dass man statt der Koordinatenabstände Δx und Δy die echte räumliche Ausdehnung der Zellen, also die diskrete Form der Linienelemente, verwendet.

$$\Delta x \rightarrow h_\xi \Delta \xi \quad \text{und} \quad \Delta y \rightarrow h_\eta \Delta \eta$$

4.4.2 Randbedingungen

Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten, die Randbedingungen für ein numerisches Verfahren zur Lösung von zeitabhängigen hydrodynamischen Problemen zu stellen. Für einen umfassenden Überblick sei auf Hirsch (1988a) verwiesen. Im Allgemeinen hängen die Randwerte von der Lösung des Riemannproblems und daher von den Eigenwerten der Jacobimatrizen am Rand des Rechengebiets ab.

Man muss also bei der Festlegung von Randwerten darauf achten, wie die Charakteristiken am Rand verlaufen. Generell gilt: Für jede einlaufende Charakteristik ist ein Randwert festzulegen und für jede auslaufende Charakteristik muss der Randwert mittels einer Kompatibilitätsbedingung mit Hilfe von Werten aus dem Rechengebiet bestimmt werden. Beachtet man diese fundamentale Regel nicht, so läuft man Gefahr, dass das Gleichungssystem am Rand überbestimmt ist.

Upwind Verfahren erfüllen diese Bedingungen automatisch. Um dieses Verhalten besser zu verstehen, betrachte man eine einfache lineare Advektionsgleichung vom Typ

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{mit } a > 0 \quad (4.47)$$

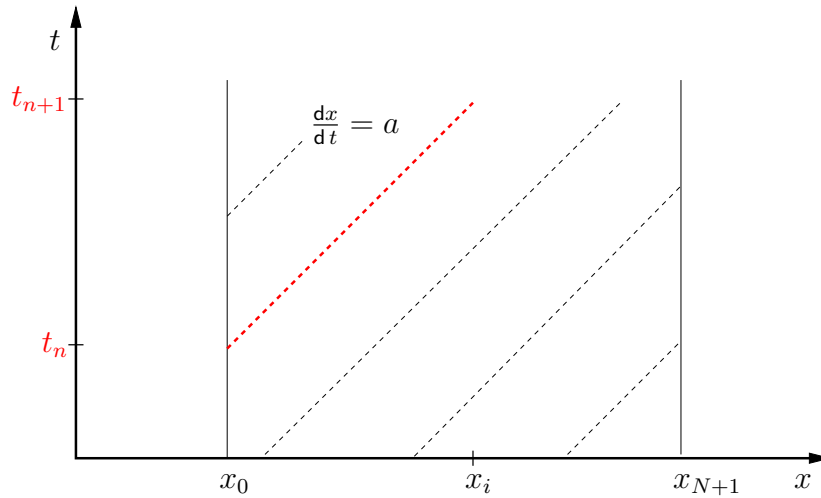


Abbildung 4.4: Charakteristiken bei der lineare Advektionsgleichung

und deren *upwind* Approximation mittels

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n) \quad \text{mit } i = 1 \dots N.$$

Man sieht sofort, dass für $i = 1$ ein Randwert für u_0 festgelegt werden muss, während es unerheblich ist, was am Rand bei $i = N+1$ eingesetzt wird. Dieser Wert hat keinerlei Auswirkungen auf die Daten bei $i = N$. Da $a > 0$ ist, laufen die Charakteristiken $\frac{dx}{dt} = a$ bei $i = 1$ ins Rechengebiet ein, während sie bei $i = N$ herauslaufen.

Diese Situation ist in Abbildung 4.4 schematisch dargestellt. Die Schar der Charakteristiken wird durch die gestrichelten Linien repräsentiert. Eine Lösung u_i^{n+1} bei x_i zum Zeitpunkt t_{n+1} wird durch den Randwert u_0^n zur Zeit t_n bestimmt. Im Gegensatz dazu haben die Werte bei x_{N+1} keinerlei Auswirkungen auf die Lösung innerhalb des Rechengebiets.

Wie schon in Kapitel 4.1.4 angemerkt wurde, hat sich für das KT Verfahren die Bezeichnung *central-upwind* Verfahren durchgesetzt, weil es trotz des zentralen Schemas die Ausbreitungsrichtung der Signale berücksichtigt. Das bedeutet, dass an einem Rand, an dem alle Charakteristiken aus dem Rechengebiet herauslaufen (Überschall-Ausfluss), die Eigenwerte der Jacobimatrix alle größer als null⁴ sind und daher die minimale Wellengeschwindigkeit

⁴Das hängt natürlich von der Position des Randes bezogen auf die Lage des Rechengebiets ab. Der Einfachheit halber sei hier davon ausgegangen, dass für die Koordinaten am Rand $x_{N+1} > x_N$ gilt, andernfalls wären alle Eigenwerte kleiner als null.

$a_{N+\frac{1}{2}}^- = 0$ gesetzt wird (vgl. Gln. 4.3, 4.4). Das hat zur Folge, dass die Randwerte nicht in die Flussberechnung eingehen (vgl. Gln. 4.22, 4.26) und somit auch keinerlei Auswirkungen auf die Lösung haben.

Bei Unterschall-Strömungen ist die Lage komplizierter. Hier können und müssen die Daten vom Rand eine Rolle spielen, da die Eigenwerte sowohl positiv als auch negativ sein können. Gleiches gilt bei Überschall-Einflüssen; weil in diesem Fall alle Charakteristiken ins Rechengebiet hineinlaufen, müssen sogar alle Größen am Rand festgelegt werden.

Wie man die Randbedingungen in diesen Fällen korrekt stellt, ist nicht Gegenstand der Untersuchungen in dieser Arbeit. Dazu sei auf die entsprechende Fachliteratur verwiesen. Wie schon im einleitenden Abschnitt zu diesem Kapitel angemerkt, findet sich bei Hirsch (1988a) eine recht ausführliche Darstellung nebst vieler Literaturangaben. Da aber die charakteristischen Gleichungen des jeweils betrachteten Systems von Erhaltungsgleichungen dabei eine zentrale Rolle einnehmen, sei an dieser Stelle auf Anhang C verwiesen. Mit Hilfe der dort aufgelisteten charakteristischen Gleichungen für das System (3.28) kann man sich die Kompatibilitätsbedingungen beschaffen, mit denen man für die auslaufenden Charakteristiken die Randwerte berechnet.

4.4.3 Runge-Kutta-Schema

Das explizite Euler-Schema aus Gleichung (4.44) ist zwar eine einfache, aber keineswegs besonders gute Lösung des Zeitintegrationsproblems, da es lediglich erster Ordnung in Δt ist. Eine deutliche Verbesserung lässt sich mit Hilfe der Verfahren von Shu (1988) und Shu und Osher (1988) erzielen. Kurganov und Tadmor (2000) haben gezeigt, dass diese Verfahren auch auf das KT Schema anwendbar sind.

Diese Verfahren bilden eine Familie von Prädiktor-Korrektor-Verfahren, bei denen der erste Schritt aus dem expliziten Eulerschema besteht:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{ij}^{(1)} &= \mathbf{u}_{ij}(t_n) + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{u}_{ij}(t_n)) \\ \mathbf{u}_{ij}^{(k+1)} &= \zeta_k \mathbf{u}_{ij}(t_n) + (1 - \zeta_k) \left(\mathbf{u}_{ij}^{(k)} + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{u}_{ij}^{(k)}) \right) \\ \mathbf{u}_{ij}(t_n + \Delta t) &= \mathbf{u}_{ij}^{(s)} \quad \text{für } k = 1, \dots, s-1 \end{aligned} \quad (4.48)$$

und

$$(\zeta_1, \zeta_2) = \begin{cases} (\frac{1}{2}, 0) & \text{für } s = 2 \\ (\frac{3}{4}, \frac{1}{3}) & \text{für } s = 3. \end{cases}$$

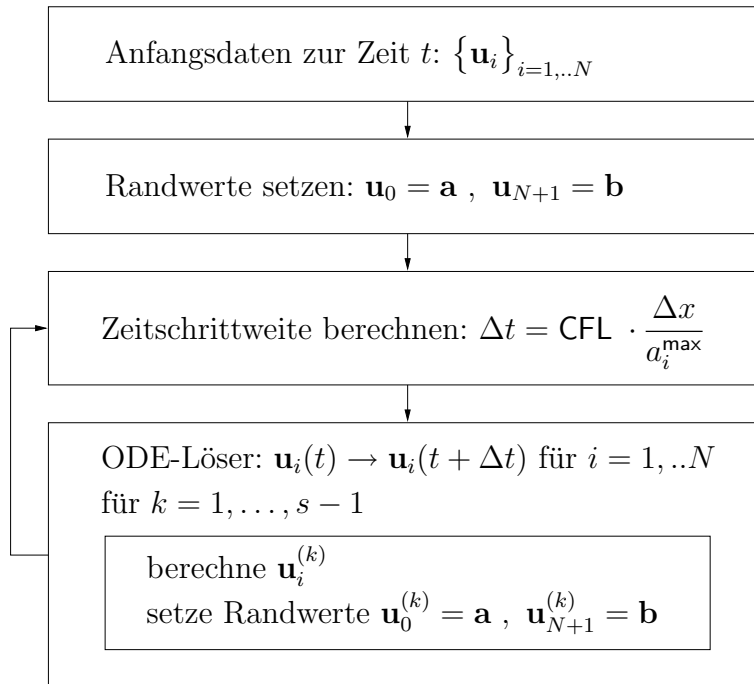


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung der Zeitintegration

Für $s = 2$ ist dieses Schema identisch mit dem Verfahren von Heun mit nur einer Iteration des Korrektors.

Das Grundschema dieses Zeitintegrationsverfahrens findet sich in Abbildung 4.5. Hierbei ist wichtig, dass jedes Mal in die Zeitschrittberechnung die Randwerte einbezogen werden. Außerdem müssen bei jedem Korrektorschritt die Randwerte neu gesetzt werden.

Kapitel 5

Realisierung

5.1 Programmstruktur

Eine wesentliche Aufgabe bei der Entwicklung numerischer Verfahren ist deren effiziente Realisierung in einem Computerprogramm. Nur so ist man auch in der Lage zu zeigen, dass mit ihrer Hilfe tatsächlich Lösungen gewonnen werden können, die sich z.B. mit astronomischen Beobachtungen oder Laborergebnissen vergleichen lassen. Zu diesem Zweck wurde, basierend auf dem im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Verfahren, ein neues Computerprogramm in der Programmiersprache FORTRAN 95 entwickelt.

Die Hauptaufgabe des Programms lässt sich in wenigen Worten so umreißen: Berechne, ausgehend von einem Satz diskreter Anfangswerte zu einem Zeitpunkt t_0 unter Berücksichtigung der Randwerte, eine Approximation für die Lösung des partiellen Differentialgleichungssystems (3.28) zu einem späteren Zeitpunkt t_1 und speichere das Ergebnis. Das im Kapitel 4 beschriebene Verfahren dient dabei als Grundlage für den Algorithmus, der die zeitliche Entwicklung beschreibt. Neben dieser Hauptaufgabe verlangt eine konkrete Realisierung aber auch eine Reihe von Verwaltungsalgorithmen, die z.B. die Ein- und Ausgabe regeln.

Die Programmiersprache FORTRAN 95 bietet zur besseren Strukturierung eines Programms die Möglichkeit, die wesentlichen Algorithmen in Untereinheiten, sog. Modulen, zusammenzufassen. Davon wurde intensiv Gebrauch gemacht, weil es die Lesbarkeit eines Programmes erheblich erhöht, ohne einen nachteiligen Einfluss auf die Effizienz zu haben. Ziel dieses Abschnitts ist es, einen groben Einblick in die Organisation des Programmcodes und die Aufteilung der verschiedenen Arbeitsschritte auf die Module zu geben.

5.1.1 Initialisierung

Im Großen und Ganzen bringt jedes Modul seine eigene Initialisierungsroutine mit, in der ein Speicherbereich für die im Modul verwendeten Variablen reserviert wird und wichtige Variablen mit Werten initialisiert werden. Diese Unterprogramme werden zu Beginn des Hauptprogramms der Reihe nach aufgerufen, wie in dem Programmauszug 5.1 zu sehen ist. Die Parameter `Control` und `Mesh` dienen zur Ablaufsteuerung des Programms. Ihre Datentypen werden im Modul `Types` in der Datei `types.f90` festgelegt. Kurz umrissen läuft die Programminitialisierung so ab, dass im Unterprogramm `InitProgram` durch den Benutzer die wesentlichen Simulationsparameter gesetzt und an die anderen Initialisierungsroutinen übergeben werden.

Ebenso besitzen die meisten Module ein entsprechendes Unterprogramm, das bei Beendigung des Hauptprogramms z.B. den Speicher wieder freigibt. Diese Unterprogramme werden in umgekehrter Reihenfolge am Programmende aufgerufen.

```

...
40 call InitIntegration
   call InitProgram(Control,Mesh,...)
   call InitInfo
   call InitLogging(Control,Mesh,...)
   call InitMesh(Control,Mesh)
45 call InitPhysics(Control,Mesh,...)
   call InitSources(Control,Mesh,...)
   call InitBoundary(Control,Mesh,...)
   call InitBoundaryData(Control,Mesh,...)
   call InitOutput(Control,Mesh,...)
50 call InitTimedisc(Control,Mesh)
   call InitFluxes(Control,Mesh)
...

```

Listing 5.1: Programminitialisierung in `main.f90`

5.1.2 Hauptprogramm

Das Hauptprogramm besteht im Wesentlichen aus einer Schleife, die so lange durchlaufen wird, bis eine maximale Anzahl von Iterationen oder der vom Benutzer vorgegebene Endzeitpunkt erreicht worden ist. Zur Programmsteuerung werden die Kontrollparameter `Control` und `Mesh` an die entsprechenden Unterprogramme übergeben. Die Feldgrößen `cvar` und `pvar` enthalten

die konservativen bzw. primitiven Variablen für alle Gitterpunkte zum jeweils aktuellen Zeitpunkt.

In einem Schleifendurchlauf arbeitet das Hauptprogramm die folgenden drei Arbeitsschritte ab (siehe Listing 5.2):

1. Bestimmung der maximalen Zeitschrittweite Δt ,
2. ggf. Datenausgabe in eine externe Datei,
3. Berechnung der Lösung zum neuen Zeitpunkt $t + \Delta t$.

Die beiden Unterprogramme `CalcTimestep` und `SolveODE` befinden sich im Modul `Timedisc` in der Datei `timedisc.f90`. `CalcTimestep` ermittelt die mögliche Zeitschrittweite, indem ein Ausdruck von der Form (4.46) ausgewertet wird, und in `SolveODE` wird das System der gewöhnlichen Differentialgleichungen (4.19) gelöst. Die entscheidenden Schritte dieses Vorgangs findet man in der schematische Darstellung der Zeitintegration in Abbildung 4.5. Zur Zeit wird nur das in Abschnitt 4.4.3 beschriebene Runge-Kutta Verfahren unterstützt. Es ist allerdings ohne größeren Aufwand möglich, das Programm an dieser Stelle zu erweitern. Die dafür benötigte Schnittstelle dafür ist bereits vorhanden.

```
...
101 ! main loop
102 do i=1,Control%maxiter
    ...
110     call CalcTimestep(Control,Mesh,cvar,pvar,...)
111     ! write data to file
112     if (time.eq.otime) then
113         call WriteOutput
            ...
120         if (time.gt.Control%stoptime) exit
            ...
129     end if
130     call SolveODE(Control,Mesh,...,cvar,pvar,...)
131 end do
...
```

Listing 5.2: Hauptschleife in `main.f90`

5.2 Benutzerfunktionen

Das Modul `Init` in der Datei `init.f90` ist dafür vorgesehen, die simulationsspezifischen Einstellungen vorzunehmen. In dieser Unterprogrammeinheit findet sich das zentrale Unterprogramm `InitProgram`, mit dem die Kontrollvariablen gesetzt werden. Außerdem muss der Benutzer die Anfangsbedingungen für die Simulation in `InitData` festlegen. Die Unterprogramme `InitBoundaryData`, `SetUserBoundary` und `SetUserFaceBoundary` müssen nur dann angepasst werden, wenn besondere Randbedingungen gelten sollen, ansonsten kann aus einer Reihe von Standardrandbedingungen mittels der Kontrollvariablen ausgewählt werden.

5.2.1 Setzen der Kontrollvariablen

Neben den Variablen `Control` und `Mesh` gibt es noch weitere Strukturen, die der Programmsteuerung dienen. Da wären zunächst `FileIO` und `LogIO`. Mit ihrer Hilfe steuert man die Ein- und Ausgabe der Simulationsdaten sowie etwaiger Protokolldaten, die dazu dienen, eine abgebrochene Simulation fortsetzen zu können. Außerdem gibt es die Variablen `BoundCond` und `SourceTerms`, mit denen man die Randbedingungen festlegt und eventuell Quellterme, wie z.B. die Gravitation einer Punktmasse aktiviert. Eine kurze Erläuterung der Funktionsweise aller Variablenkomponenten findet sich bei deren Typdefinition in der Datei `types.f90`.

Komponente	Funktion	mögliche Werte
<code>maxiter</code>	maximale Anzahl der Zeitschritte	<i>integer</i> > 1
<code>stoptime</code>	Abbruchzeit für die Simulation	<i>real</i> > 0
<code>geometry</code>	Geometrie; z.B. kartesisch, polar, etc.	1, ... 7
<code>physics</code>	Physik; z.B. ideales Gas mit Drehimpuls	1, ... 4
<code>nvar</code>	Anzahl der physikalischen Variablen	4, 5
<code>primrecon</code>	Rekonstruktion in primitiven Variablen	<i>true, false</i>
<code>fluxtype</code>	Quadraturregel für die Flussintegrale	1, 2
<code>limiter</code>	Limiterfunktion	1, ... 4
<code>CFL</code>	Courant Zahl	$1 > \textit{real} > 0$

Tabelle 5.1: Komponenten der Variablen `Control`

In Tabelle 5.1 sind die wichtigsten Komponenten der Variablen `Control` mit ihren möglichen Werten aufgelistet. Die Bedeutung der Auswahlmöglichkeiten bei manchen Variablen wird in Abschnitt 5.3 behandelt.

Komponente	Funktion	mögliche Werte
<code>xmin, xmax</code>	x -Ausdehnung des Rechengebiets	<i>real</i>
<code>ymin, ymax</code>	y -Ausdehnung des Rechengebiets	<i>real</i>
<code>imin, imax</code>	minimaler und maximaler x -Index	<i>integer</i>
<code>jmin, jmax</code>	minimaler und maximaler y -Index	<i>integer</i>

Tabelle 5.2: Benutzerdefinierte Komponenten der Variablen `Mesh`

Die Eigenschaften des Gitters stellt man mit Hilfe der `Mesh` Variablen (vgl. Tabelle 5.2) ein. Alle weiteren gitterspezifischen Größen werden dann im Unterprogramm `InitMesh` initialisiert. Dazu gehören unter anderem die Flächen- und Volumenelemente sowie die Kommutatorkoeffizienten, die in Abhängigkeit von der gewählten Quadraturregel für die Flussintegrale berechnet werden.

Die wichtigsten Ein- und Ausgabevariablen sind in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Dort gibt man die gewünschten Dateinamen und Ausgabezeiten an. Außerdem kann für die Datenausgabe zwischen verschiedenen Dateiformaten gewählt werden. Zur Zeit werden zwei Möglichkeiten unterstützt, eine simple spaltenweise Ausgabe, die zusätzlich nach Blöcken in den räumlichen Variablen und der zeitlichen Abfolge unterteilt ist sowie eine strukturierte Ausgabe im OpenDX-Format des IBM Data Explorers.

Komponente	Funktion	mögl. Werte
<code>FileIO%filename</code>	Name der Ausgabedatei	<i>string</i>
<code>FileIO%type</code>	Dateityp	1,2
<code>FileIO%outstart</code>	Beginn der Ausgabe	<i>real</i> > 0
<code>FileIO%outend</code>	Ende der Ausgabe	<i>real</i> > 0
<code>FileIO%step</code>	Zeitschritt zwischen den Ausgaben	<i>real</i> > 0
<code>LogIO%filename</code>	Name der Protokolldatei	<i>string</i>
<code>LogIO%logdt</code>	Zeitabstand in Echtzeit (Sekunden)	<i>integer</i>

Tabelle 5.3: Ein- und Ausgabevariablen

5.2.2 Anfangs- und Randbedingungen

Für jede Simulation ist es zwingend erforderlich, dass die konservativen Variablen im gesamten Rechengebiet auf definierte Anfangswerte gesetzt werden.

Dies geschieht im Unterprogramm `InitData` im Modul `Init`. Die konservativen Variablen sind in der dreifach indizierten Feldgröße `cvar` abgelegt. Die ersten beiden Indizes laufen entlang der x - und y -Koordinaten¹, während sich der letzte Index auf die Komponenten des Vektors der Erhaltungsgrößen bezieht. Diese hängen vom Wert der Variablen `Control%physics` ab. Generell gilt, dass die erste Komponente die Dichte enthält, gefolgt von den Impulsdichten in x - und y -Richtung und ggf. der Drehimpulsdichte. Im Fall eines idealen Gases enthält die letzte Komponente die Energievariable nach Gl. (3.21).

Es ist auch möglich, die Anfangsbedingungen in den primitiven Variablen zu formulieren. Dann ist es allerdings erforderlich, sie in die konservativen Variablen zu transformieren. Das geschieht mit dem im Modul `Physics` definierten Unterprogramm `Convert2Conservative`. Die primitiven Variablen sind ebenfalls in einer dreifach indizierten Feldgröße `pvar` abgelegt. Auch hier beziehen sich die ersten beiden Indizes auf die Koordinaten, während der letzte Index, abhängig von der gewählten Physik, den Vektor der primitiven Variablen für jede Zelle enthält. Die erste Komponente ist wieder die Dichte, gefolgt von den Geschwindigkeitskomponenten und ggf. dem spezifischen Drehimpuls sowie eventuell dem Druck².

Randbedingung	Wert von <code>bctype</code>
benutzerdefiniert	0
verschwindende Gradienten	1
Extrapolation 1. Ordnung	2
periodisch	3
reflektierend	4
reflektierend an einer Achse	5

Tabelle 5.4: Standardrandbedingungen

Bei den Randbedingungen stehen einem zwei Möglichkeiten offen. Zum einen ist es möglich, aus einer begrenzten Zahl von Standardrandbedingungen auszuwählen, zum anderen kann der Benutzer aber auch individuelle Randbedingungen festlegen. Ersteres ist sehr einfach zu bewerkstelligen. Dazu muss man lediglich in `InitProgram` die Komponente `bctype` der Variablen `BoundCond` für jeden der vier Ränder auf einen bestimmten numerischen Wert größer als null setzen (vgl. Tabelle 5.4).

¹Im Programm werden die Koordinaten ξ und η mit x und y bezeichnet.

²siehe dazu auch Abschnitt 5.3.2

Will man individuelle Randbedingungen stellen, muss man `bctype` für den jeweiligen Rand auf null setzen und die Randwerte in den Unterprogrammen `SetUserBoundary` und `SetUserFaceBoundary` durch entsprechende Zuweisungen mit Daten belegen. Die Ränder werden zusammen mit dem Inneren des Rechengebiets in den Variablen `cvar` und `pvar` abgespeichert. Die Randindizes sind dabei um eins kleiner (größer) als der minimale (maximale) Index der jeweiligen Koordinaten. So ist z.B. der Randwert bei `Mesh%xmin` beim Index `Mesh%imin-1` abgespeichert. Diese zusätzlichen Daten werden in der Literatur auch häufig als Geisterzellen bezeichnet, weil neben den Daten für die Zellmittelwerte innerhalb des Rechengebiets an allen Rändern jeweils eine weitere Reihe von Zellen angefügt wird.

Das lineare Rekonstruktionsverfahren erfordert es außerdem noch, dass auch an den dem Rechengebiet zugewandten Zellrändern der Randzellen die Zellranddaten definiert werden. Daher muss der Benutzer die entsprechenden Variablen im Unterprogramm `SetUserFaceBoundary` mit Daten belegen.

5.3 Wichtige Module

Grundsätzlich kann man über die im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Kontrollvariablen viele Simulationsparameter den eigenen Bedürfnissen anpassen. Allerdings ist man darauf angewiesen, dass das Programm dann auch die benötigte Funktionalität zur Verfügung stellt. Will man hingegen beispielsweise andere Koordinaten oder neue physikalische Effekte untersuchen, ist man dazu gezwungen, tiefer in den Programmcode einzugreifen.

Die sehr allgemein gehaltenen Strukturen des numerischen Verfahrens erlauben es, dass man mit nur wenigen Anpassungen gänzlich neue physikalische Probleme untersuchen kann. Grundsätzlich ist man nicht einmal auf ein hydrodynamisches Problem festgelegt. Solange man nur eine Advektionsgleichung vom Typ (3.28) betrachtet, muss man nicht viele Ergänzungen vornehmen. Hier erweist sich die modulare Struktur des Programms als äußerst nützlich.

In den folgenden Abschnitten soll ein Einblick in die Implementierungsstrategie bei den entscheidenden Unterprogrammeinheiten gegeben werden. Generell gilt für die meisten Basiselemente, dass es ein generisches Unterprogramm gibt, wo mittels einer `select`-Anweisung zwischen verschiedenen Möglichkeiten ausgewählt wird. Die unterste Ebene bilden dann soweit möglich elementweise wirkende Funktionen oder Unterprogramme. Diese Vorgehensweise erlaubt es, die wesentlichen Programmfunktionen durch Kontrollvariablen

zu steuern, ohne dabei Einbußen bei der Effizienz hinnehmen zu müssen. Hinzu kommt, dass die elementweise wirkenden Unterprogramme von ihrer Struktur her sehr einfach zu verstehen sind, da sie lediglich auf skalaren Größen operieren. So kann auch jemand, der nicht so vertraut mit Details des Programmcodes ist, ohne große Schwierigkeiten eigene elementare Unterprogramme hinzufügen.

5.3.1 Geometrie

In Kapitel 3 wurden verallgemeinerte orthonormale Koordinatensysteme eingeführt, und es wurde ganz bewusst darauf verzichtet, schon an dieser Stelle auf bestimmte Koordinaten zu spezialisieren. Diese Herangehensweise zahlt sich nun aus, denn es ist ohne große Umstände möglich, den Programmcodes um neue Koordinaten zu erweitern.

Eine wesentliche Rolle spielen dabei die Skalierungsfaktoren h_ξ , h_η und h_ϕ , denn mit ihrer Hilfe können alle relevanten geometrischen Größen berechnet werden. Es sei an dieser Stelle noch einmal ausdrücklich auf Abschnitt 4.3.1 verwiesen. Dort wurde gezeigt, dass es besser ist, die Ableitungen der Skalierungsfunktionen, die für die Kommutatorkoeffizienten gebraucht werden, nicht analytisch, sondern numerisch zu bestimmen. Man kann also ein neues Koordinatensystem einführen, indem man ein elementares Unterprogramm hinzufügt, das die Skalierungsfaktoren als Funktionen der Koordinaten berechnet.

Zur Veranschaulichung betrachte man z.B. den Programmkopf des elementaren Unterprogramms zur Berechnung der Skalierungsfunktionen für Kugelkoordinaten:

```

elemental subroutine ScaleFactors_spherical(x,y, &
      hx,hy,hz)
  real, intent(in)   :: x,y
  real, intent(out) :: hx,hy,hz

```

Die Variablen x und y stehen für die krummlinig orthogonalen Koordinaten r und θ , wie sie üblicherweise definiert werden. Die Skalierungsfaktoren für Kugelkoordinaten lauten dann:

$$h_r = 1, \quad h_\theta = r, \quad h_\phi = r \sin \theta.$$

Sie werden im Programm durch hx , hy und hz repräsentiert. Will man die neuen Koordinaten benutzen, ist lediglich in der Datei `meshsetup.f90` an geeigneter Stelle ein Eintrag hinzuzufügen (siehe Listing 5.3) und die Variable

```

77 select case(Control%geometry)
78   case(1)
   ...
87   case(4)
88     ! spherical mesh
89     call CalcCellProperties(Control,Mesh, &
90       ScaleFactors_spherical)
   ...
102 end select

```

Listing 5.3: Berechnung der geometrischen Größen in `meshsetup.f90`

`Control%geometry` mit dem entsprechenden Wert zu initialisieren. Neben dieser Ergänzung ist es außerdem nützlich – wenn auch nicht zwingend erforderlich –, wenn man elementare Transformationen zwischen kartesischen und krummlinigen Koordinaten und Vektorgrößen zur Verfügung stellt. Die Berechnung einiger Quellterme verlangt dies. Für die reinen Eulergleichungen ist es nicht von Belang. In Tabelle 5.5 ist eine Liste der zur Zeit unterstützten Koordinatensysteme angegeben.

Koordinatensystem	<code>Control%geometry</code>
kartesische Koordinaten	1
ebene Polarkoordinaten	2
Zylinderkoordinaten	3
Kugelkoordinaten	4
logarithmische Zylinderkoordinaten	5
logarithmische Kugelkoordinaten	6
oblat-spheroide Koordinaten	7

Tabelle 5.5: Koordinatensysteme

5.3.2 Physik

Die Bezeichnung für das `Physics` Modul mag ein wenig missverständlich sein. Es ist nicht grundsätzlich so, dass ein neues physikalisches Problem automatisch bedeutet, dass der Programmcode in diesem Modul zu ergänzen ist. Viele Veränderungen verlangen eher neue Quellterme, und die müssen im Modul `Sources` hinzugefügt werden. Damit beschäftigt sich das Kapitel 5.3.4.

Im `Physics` Modul befinden sich die elementaren Funktionen, die für die Berechnung der numerischen Flüsse benötigt werden (vgl. Gln. 4.22, 4.26). Dazu gehören Unterprogramme für die Berechnung der Flussvektoren sowie der minimalen und maximalen Eigenwerte der Jacobimatrizen. Außerdem muss man Transformationen zwischen den primitiven und konservativen Variablen definieren.

Die Kopfzeilen des Unterprogramms zur Berechnung der minimalen und maximalen Wellengeschwindigkeiten für das Problem der Eulergleichungen sieht folgendermaßen aus:

```

elemental subroutine CalculateWaveSpeeds_euler(rho, &
        v,p,gamma,amin,amax)
  real, intent(in)   :: rho,v,p,gamma
  real, intent(out) :: amin,amax

```

Als Funktionsparameter müssen die Dichte, die Geschwindigkeit entlang der entsprechenden Koordinaten, der Druck und das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten γ übergeben werden. Die Ausgabeparameter sind dann minimaler und maximaler Eigenwert der betrachteten Jacobimatrix.

Die Flussvektoren für die Eulerflüsse liefert ebenfalls ein elementares Unterprogramm.

```

elemental subroutine CalculateFlux_euler3D(rho,v,P, &
        m1,m2,m3,E,f1,f2,f3,f4,f5)
  real, intent(in)   :: rho,v,P,m1,m2,m3,E
  real, intent(out) :: f1,f2,f3,f4,f5

```

Eingabeparameter sind hier Dichte, Geschwindigkeit, Druck, die Impulskomponenten und die Gesamtenergie. Für das System (3.28) ist die dritte Impulskomponente durch den Drehimpuls und die Energie durch Gl. (3.21) gegeben. Rückgabewerte sind dann die fünf Flusskomponenten.

Außerdem definiert man elementare Transformationen, die primitive in konservative Variablen konvertieren und umgekehrt:

```

elemental subroutine Prim2Cons_euler3D(gamma,rho_in, &
        u,v,K,P,rho_out,mu,mv,L,E)
  real, intent(in)   :: gamma,rho_in,u,v,K,P
  real, intent(out) :: rho_out,mu,mv,L,E

elemental subroutine Cons2Prim_euler3D(gamma,rho_in, &
        mu,mv,L,E,rho_out,u,v,K,P)
  real, intent(in)   :: gamma,rho_in,mu,mv,L,E
  real, intent(out) :: rho_out,u,v,K,P

```

Obige Deklarationen gelten für das zweidimensionale System der Eulergleichungen mit Drehimpuls. Ein- und Ausgabeparameter sind die Variablensätze Dichte, Impulse (bzw. Drehimpuls) und Energie sowie Dichte, Geschwindigkeiten (bzw. spezifischer Drehimpuls) und Druck. Zusätzlich wird bei idealen Gasen für die Umrechnung der Faktor γ benötigt.

Ähnlich wie in Kapitel 5.3.1 übernehmen generische Unterprogramme die Schnittstellenfunktion zum Rest des Programms. Dies soll hier nicht im einzelnen erläutert werden. Die entsprechende Variable zur Steuerung ist `Control%physics`. Derzeit bietet das Programm vier verschiedene Auswahlmöglichkeiten (vgl. Tabelle 5.6).

Problemstellungen	<code>Control%physics</code>
Eulersystem für ideales Gas	1
Eulersystem für isothermes Gas	2
wie 1 mit Drehimpuls	3
wie 2 mit Drehimpuls	4

Tabelle 5.6: Physikalische Problemstellungen

5.3.3 Limiter

Die Limiter in einem TVD Verfahren bieten die Möglichkeit, Einfluss auf die künstliche Viskosität und damit auch die Stabilität auszuüben. Grundsätzlich ist dieser Eingriff mehr qualitativer als quantitativer Natur, weil das Verhalten der nichtlinearen Limiterfunktionen sehr schwer zu fassen ist. Um so wichtiger ist es, dass man bei einer Simulation die Möglichkeit hat, verschiedene Limiter zu testen.

Limiter	<code>Control%limiter</code>
minmod	1
monotonized centred	2
superbee	3
minbee	4

Tabelle 5.7: Limiterfunktionen

Das Programm bietet zur Zeit die vier in Tabelle 5.7 aufgelisteten Limiterfunktionen, ist aber auch in dieser Beziehung beliebig erweiterbar. Als Beispiel für eine elementare Funktion, die einen Limiter beschreibt, sei hier die

Kopfzeile der `minmod2` Funktion angegeben. Sie realisiert den in Gl. (4.33) angegebenen `minmod`-Limiter.

```

elemental function minmod2(arg1,arg2) result(limarg)
  real, intent(in) :: arg1,arg2
  real                :: limarg

```

Das Unterprogramm `LimitSlopes` stellt die Verbindung zwischen elementaren Limiterfunktionen und dem Rest des Programms her. Möchte man einen neuen Limiter benutzen, muss man dort eine entsprechende Anweisung einfügen.

5.3.4 Quellterme

Für viele Anwendungen ist es erforderlich, eigene Quellterme definieren zu können. Letztendlich bedeutet dies, dass der Vektor, der die externe Kraft in Gl. (3.28) beschreibt, bestimmte Werte erhält. Das zentrale Unterprogramm zur Berechnung der Quellterme `CalculateSources` findet man im Modul `Sources` in der Datei `sources.f90`. Hier werden allerdings ausschließlich die Quellterme der externen Kräfte berechnet, da die geometrischen Quellterme Teil des Advektionsproblems sind und damit im Modul `Fluxes` besser aufgehoben sind.

In Abschnitt 4.3 wurde gezeigt, dass man bei der Diskretisierung der Quellterme auf die verwendete Quadraturregel Rücksicht nehmen muss. Daher wird bei der Berechnung der Quellterme schon zu Beginn des Unterprogramms `CalculateSources` zwischen Mittelpunktsregel und Trapezregel unterschieden und entsprechend verzweigt.

Die Quellterme für die Mittelpunktsregel erhält man auf sehr einfache Weise aus den Zellmittelwerten aller Größen. Bei der Trapezregel ist es schwieriger, da die Eckwerte der Zellen benötigt werden. Man muss also zunächst interpolierte Daten in den Zellecken berechnen und dann gemäß Gl. 4.40 die vier Eckquellterme aufsummieren. Diese Prozedur ist etwas umständlicher, hat aber den Vorteil, dass pro Zelle vier Eckwerte in die Quelltermberechnung eingehen. Ändern sich Quellterme auf der Skala der Diskretisierung merklich, kann das eine Rolle spielen und unter Umständen zu besseren Resultaten führen als die Mittelpunktsregel.

Kapitel 6

Numerische Tests

6.1 Testumgebung

Bevor die verschiedenen Tests des numerischen Verfahrens im einzelnen besprochen werden, sind zunächst ein paar Vorbemerkungen erforderlich. Grundsätzlich sind alle Ergebnisse mit Hilfe des für diese Arbeit entwickelten Programms zur Lösung hydrodynamischer Probleme mit Hilfe des KT Verfahrens gewonnen worden. Eine Ausnahme bilden einige der im Abschnitt 6.2 gezeigten Lösungen, die zum Vergleich mit anderen numerischen Verfahren angeführt werden. Sie wurden mit einem Schulungsprogramm des Höchstleistungsrechenzentrums in Stuttgart gewonnen, das von Roller (2004) entwickelt worden ist. Ferner wurde zum Vergleich bei den Kollapssimulationen in Abschnitt 6.7 das Programm NIRVANA von Ziegler (1998, 1999, 2003) verwendet. Die Initialisierungsdateien aller unten aufgeführten Tests liegen dem Programmcode bei. Es ist also ohne weiteres möglich, die Ergebnisse für das KT Verfahren zu reproduzieren.

Die Rechnungen wurden auf herkömmlichen Personal Computern (PC) durchgeführt. Als Compiler für die Übersetzung des FORTRAN 95 Programms in maschinenlesbare Binärdateien diente der Intel Fortran Compiler in der Version 9.1 für das Betriebssystem Linux. Für alle Datentypen wurde doppelte Genauigkeit verwendet, und die Optimierungen des Compilers auf die jeweilige Rechnerarchitektur von Intel wurden genutzt.

6.2 1D-Riemannprobleme

In den ursprünglichen Arbeiten von Kurganov und Tadmor (2000, 2002) wurde die Rekonstruktion nur in den konservativen Variablen durchgeführt. Daher soll nun zunächst getestet werden, ob eine Rekonstruktion in primitiven Variablen zu anderen Ergebnissen führt. Das eindimensionale Riemannproblem eignet sich besonders gut, um das grundlegende Verhalten eines numerischen Verfahrens zur Lösung der Eulergleichungen zu untersuchen. Gesucht werden dabei Lösungen der eindimensionalen Eulergleichungen

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \varrho \\ \varrho v \\ e \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho v \\ \varrho v^2 + P \\ (e + P)v \end{bmatrix} \quad (6.1)$$

mit der Zustandsgleichung für ein ideales Gas und der Gesamtenergie E

$$P = (\gamma - 1)\varrho\varepsilon, \quad e = \varrho\varepsilon + \frac{1}{2}\varrho v^2.$$

Als Riemannproblem wird nun folgende Fragestellung bezeichnet: Wie lautet die Lösung $\mathbf{u}(x, t)$ für $x_0 < x < x_1$ und $t > t_0$, wenn zum Zeitpunkt t_0 die Anfangsbedingungen durch Stufenfunktionen von der Art

$$(\varrho(x, t_0), v(x, t_0), P(x, t_0)) = \begin{cases} (\varrho_l, v_l, P_l) & \text{für } x_0 < x < x_{\frac{1}{2}} \\ (\varrho_r, v_r, P_r) & \text{für } x_{\frac{1}{2}} < x < x_1 \end{cases},$$

mit $x_0 < x_{\frac{1}{2}} < x_1$ gegeben sind (siehe Toro 1997, Kap. 4)? Die Ränder sollen dabei so weit entfernt liegen, dass die Störungen, die vom Punkt $x_{\frac{1}{2}}$ ausgehen, sie zum Zeitpunkt t noch nicht erreicht haben können. Dieses Problem lässt sich mittels Fixpunktiteration beliebig genau, also quasi exakt, für die Größen ϱ, v und P an jedem Ort x zur Zeit t lösen¹.

6.2.1 Sod's Stoßrohr-Test

Es gibt natürlich im Prinzip beliebig viele Probleme dieser Art, aber es haben sich im Laufe der Zeit einige Anfangsbedingungen als Quasistandards für den Test numerischer Verfahren herausgebildet. Zu diesen Tests gehört ein Vorschlag von Sod (1978):

	ϱ	v	P
$x < x_{\frac{1}{2}}$	1,000	0,0	1,0
$x > x_{\frac{1}{2}}$	0,125	0,0	0,1

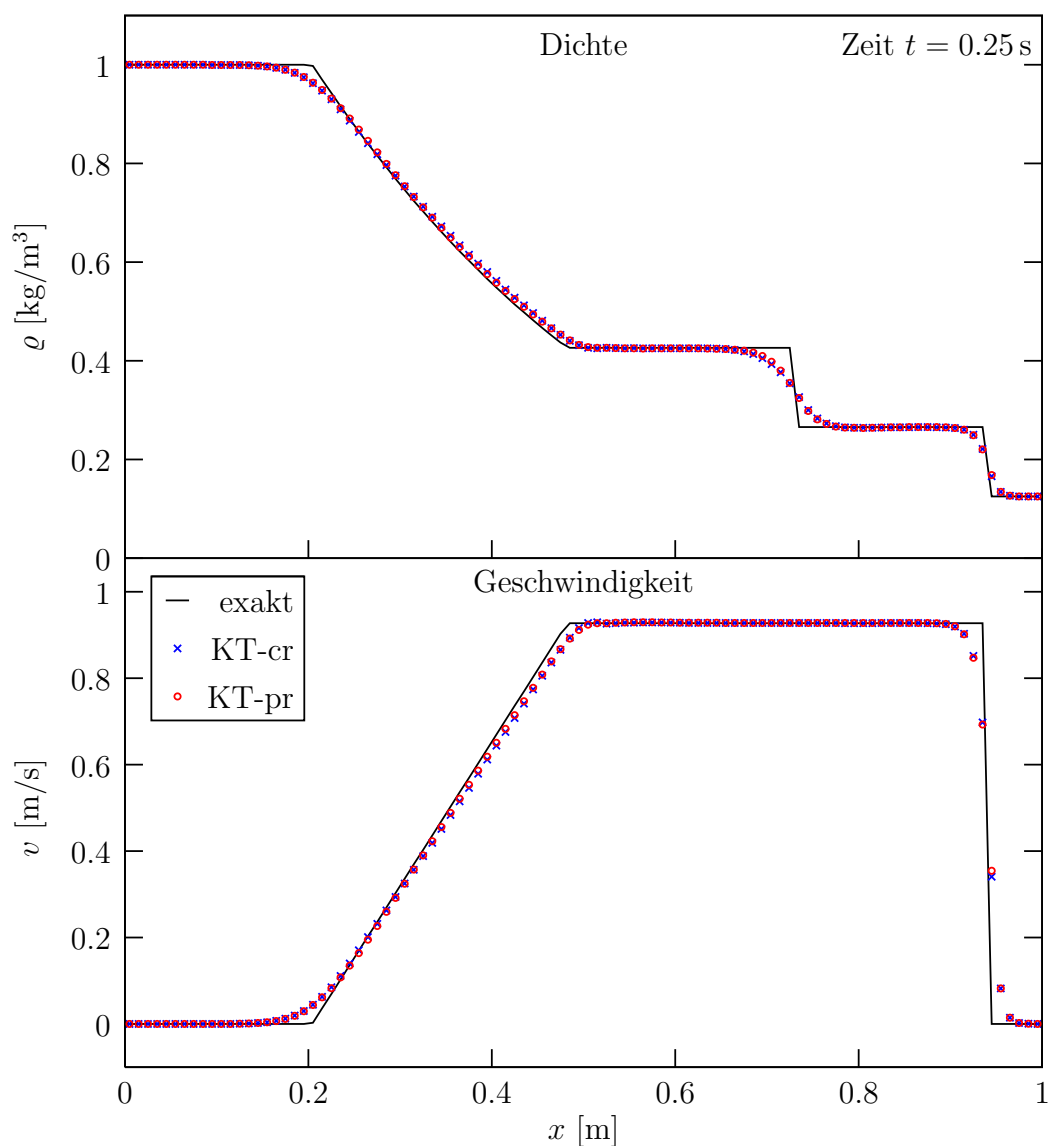


Abbildung 6.1: Sod-Problem: Vergleich von konservativer (KT-cr) und primitiver (KT-pr) Rekonstruktion

Im Folgenden werden verschiedene Simulationsergebnisse für das Sod-Problem miteinander verglichen. Bei allen Berechnungen wurde das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten auf $\gamma = 1,4$ gesetzt. Damit die Ergebnisse besser mit denen anderer hydrodynamischer Lösungsverfahren verglichen

¹Ein Algorithmus zur exakten Lösung des Riemannproblems findet sich z.B. bei Toro (1997, Kap. 4.9)

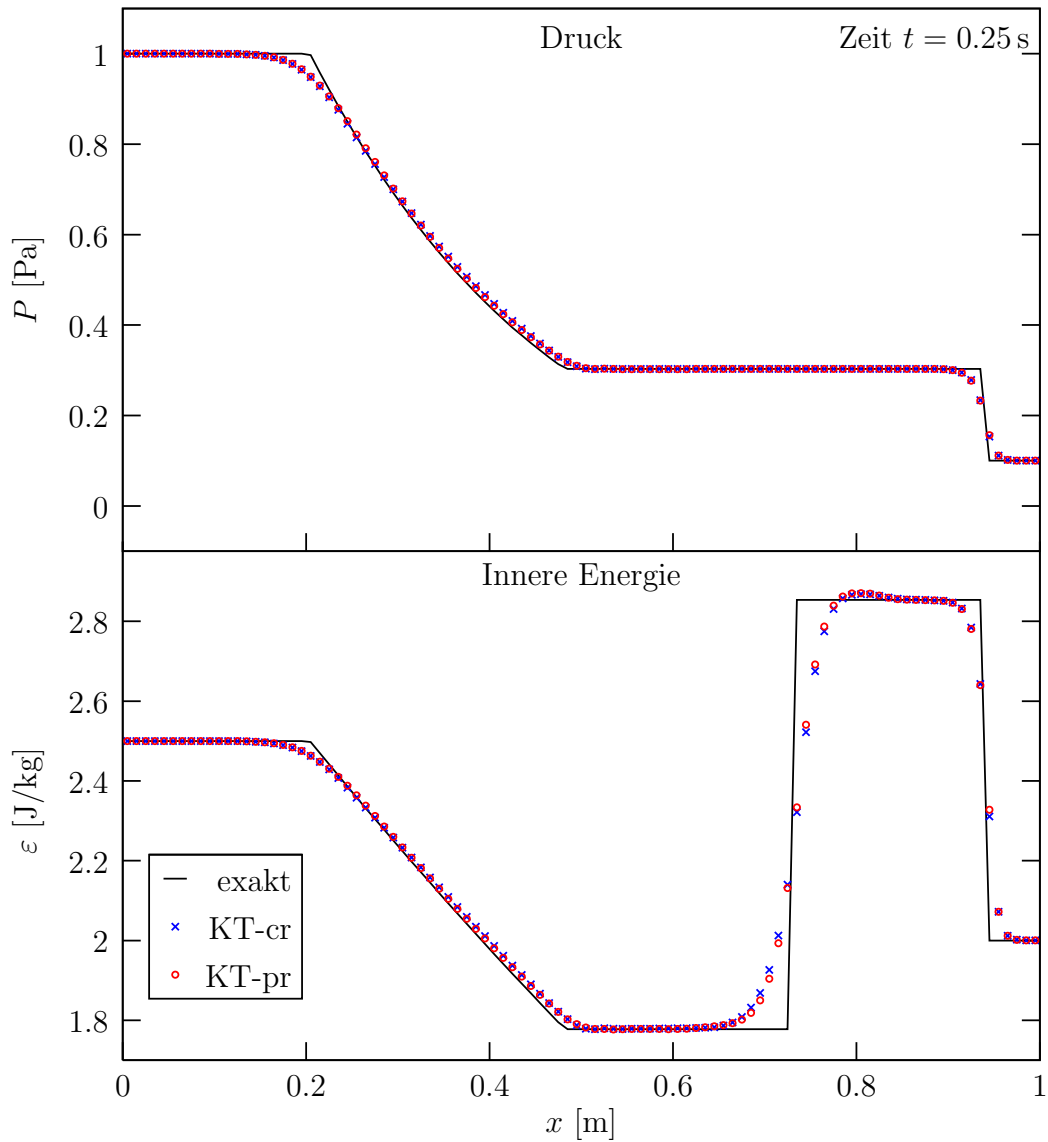


Abbildung 6.2: Sod-Problem: Vergleich von konservativer (KT-cr) und primitiver (KT-pr) Rekonstruktion

werden können, wurde überall der minmod-Limiter verwendet, weil er bei nahezu allen TVD Verfahren zur Anwendung kommt. Die räumliche Auflösung beträgt bei allen Simulationen 100 Gitterpunkte.

In den Abbildungen 6.1 und 6.2 werden die Lösungen des Sod-Problems für das KT Verfahren mit primitiver (KT-pr) und konservativer (KT-cr) Rekonstruktion miteinander verglichen. Die Abweichungen beider Lösungen von-

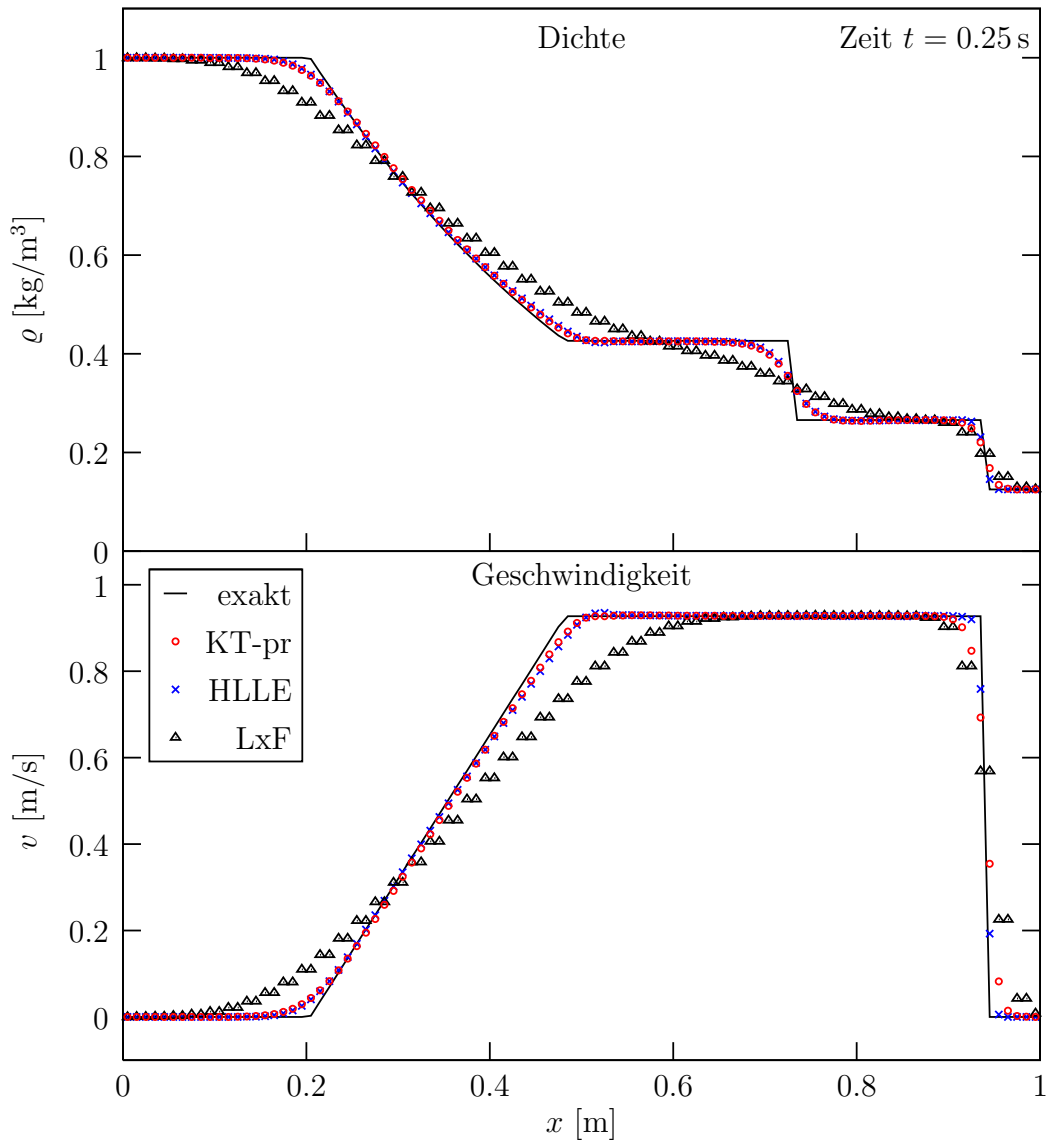


Abbildung 6.3: Sod-Problem: Vergleich mit anderen numerischen Verfahren

einander sind minimal. Die Stoßgeschwindigkeiten werden in beiden Fällen richtig reproduziert. An manchen Stellen erscheinen die Unstetigkeiten allerdings nicht besonders scharf aufgelöst. Das liegt hauptsächlich am minmod-Limiter, der eine vergleichsweise hohe künstliche Viskosität zur Folge hat.

Die Abbildungen 6.3 und 6.4 zeigen ebenfalls das Sod-Problem für das KT Verfahren dieses Mal allerdings im Vergleich mit dem MUSCL-Verfahren. Es kamen dabei zwei unterschiedliche Algorithmen zur Flussberechnung zum

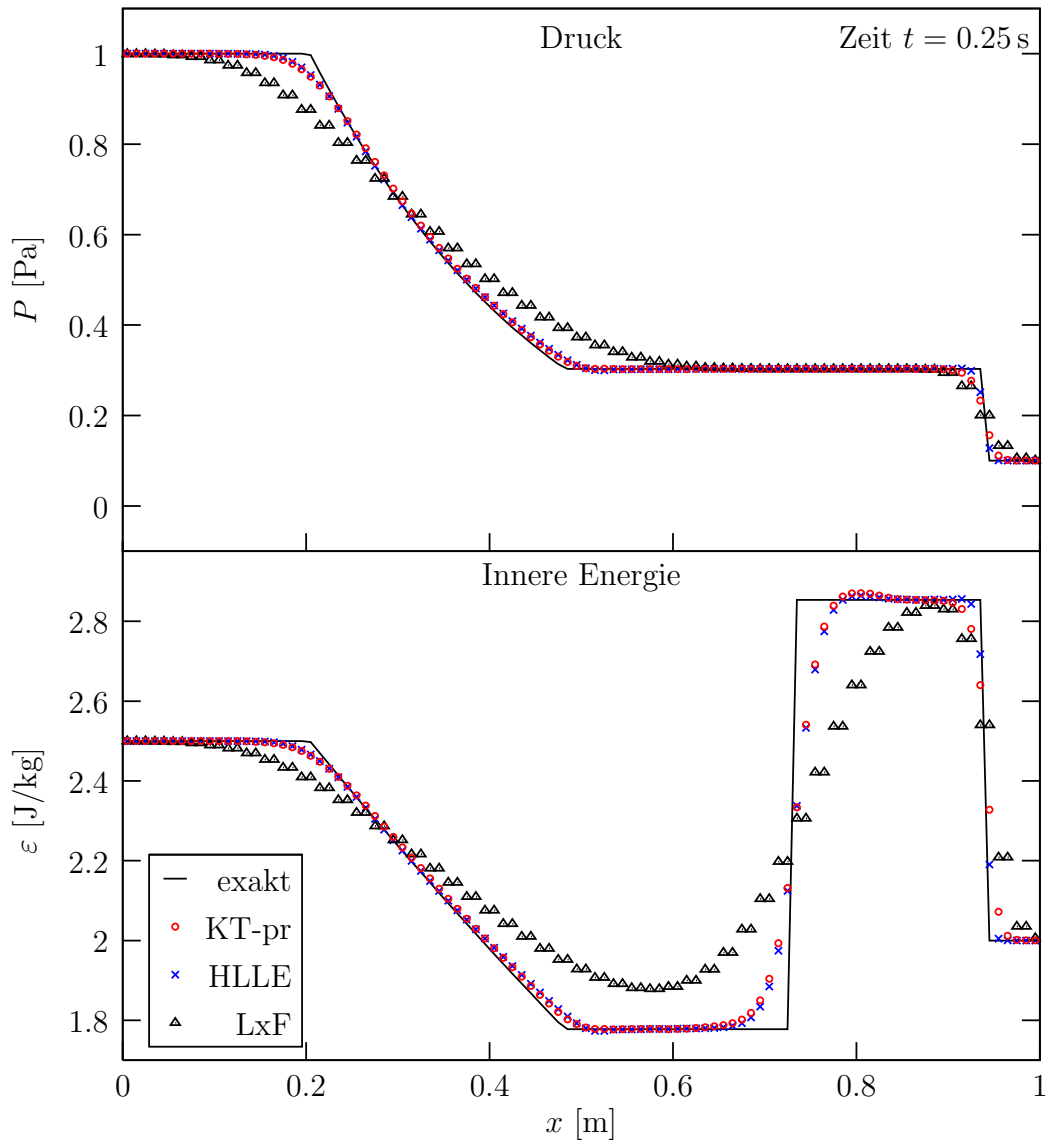


Abbildung 6.4: Sod-Problem: Vergleich mit anderen numerischen Verfahren

Einsatz. Der Harten-Lax-van Leer-Einfeldt (HLLE)-Fluss (benannt nach den Anfangsbuchstaben der Namen) geht auf einen Vorschlag von Einfeldt (1988) zurück und stellt eine Verbesserung des HLL-Flusses von Harten u. a. (1983) dar. Dieses Schema arbeitet ebenfalls mit den minimalen und maximalen Eigenwerten der Jacobimatrizen. Daher verwundert es nicht, dass sich die Lösungen von KT-pr und HLLE trotz der ansonsten sehr unterschiedlichen Verfahren recht ähnlich sehen.

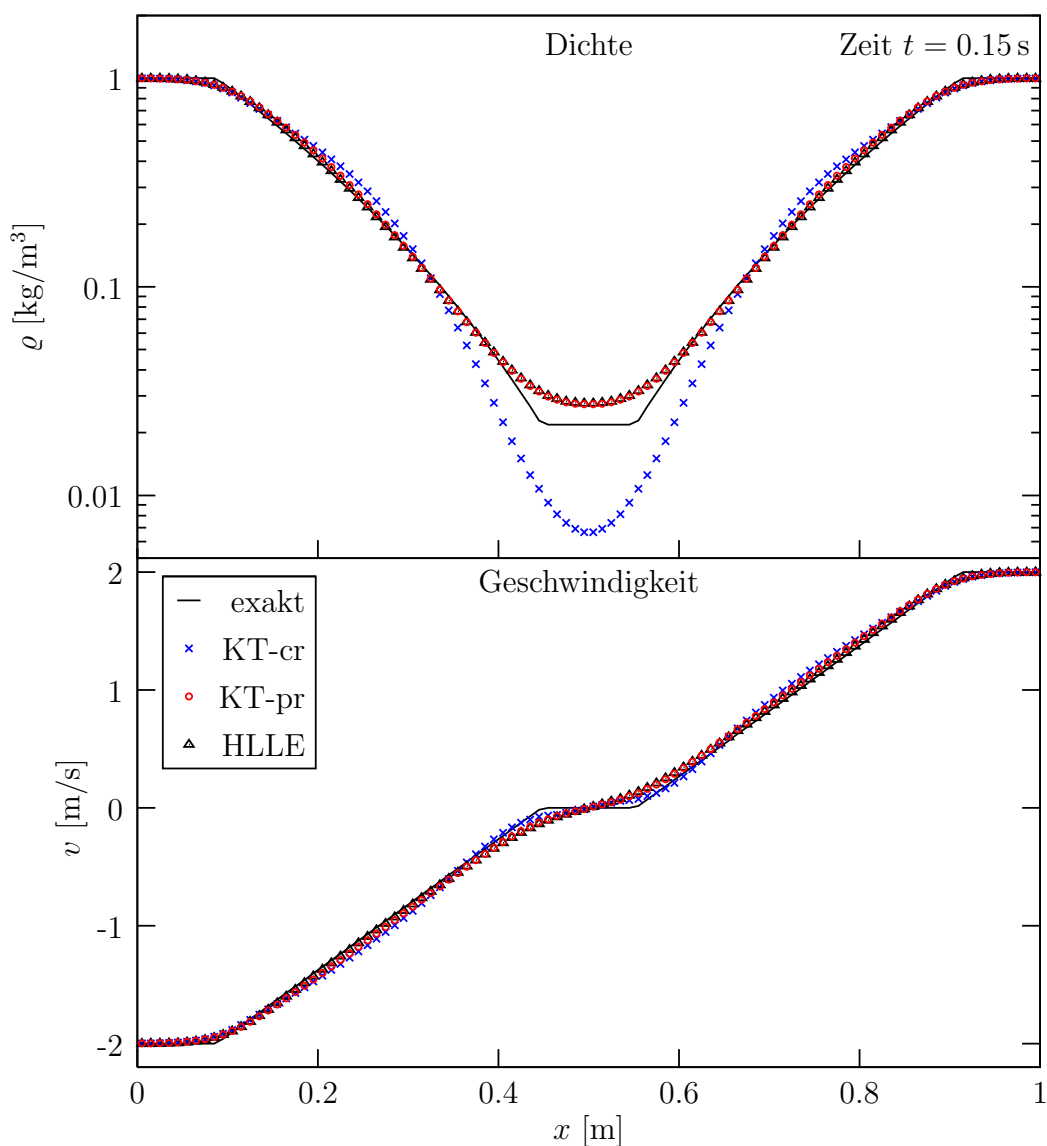


Abbildung 6.5: Toro Testproblem Nr. 2: Vergleich von konservativer (KT-cr) und primitiver Rekonstruktion (KT-pr,HLLE)

Die dritte Lösung wurde ebenfalls mit dem MUSCL-Verfahren erzeugt, allerdings kam das zentrale Lax-Friedrichs Schema für die Flussberechnung zur Anwendung. Durch die MUSCL-Rekonstruktion erhält man auch so ein Verfahren zweiter Ordnung. Dennoch ist die künstliche Viskosität, verglichen mit den beiden anderen Verfahren, enorm hoch und das, obwohl in allen drei Fällen derselbe Limiter benutzt wurde.

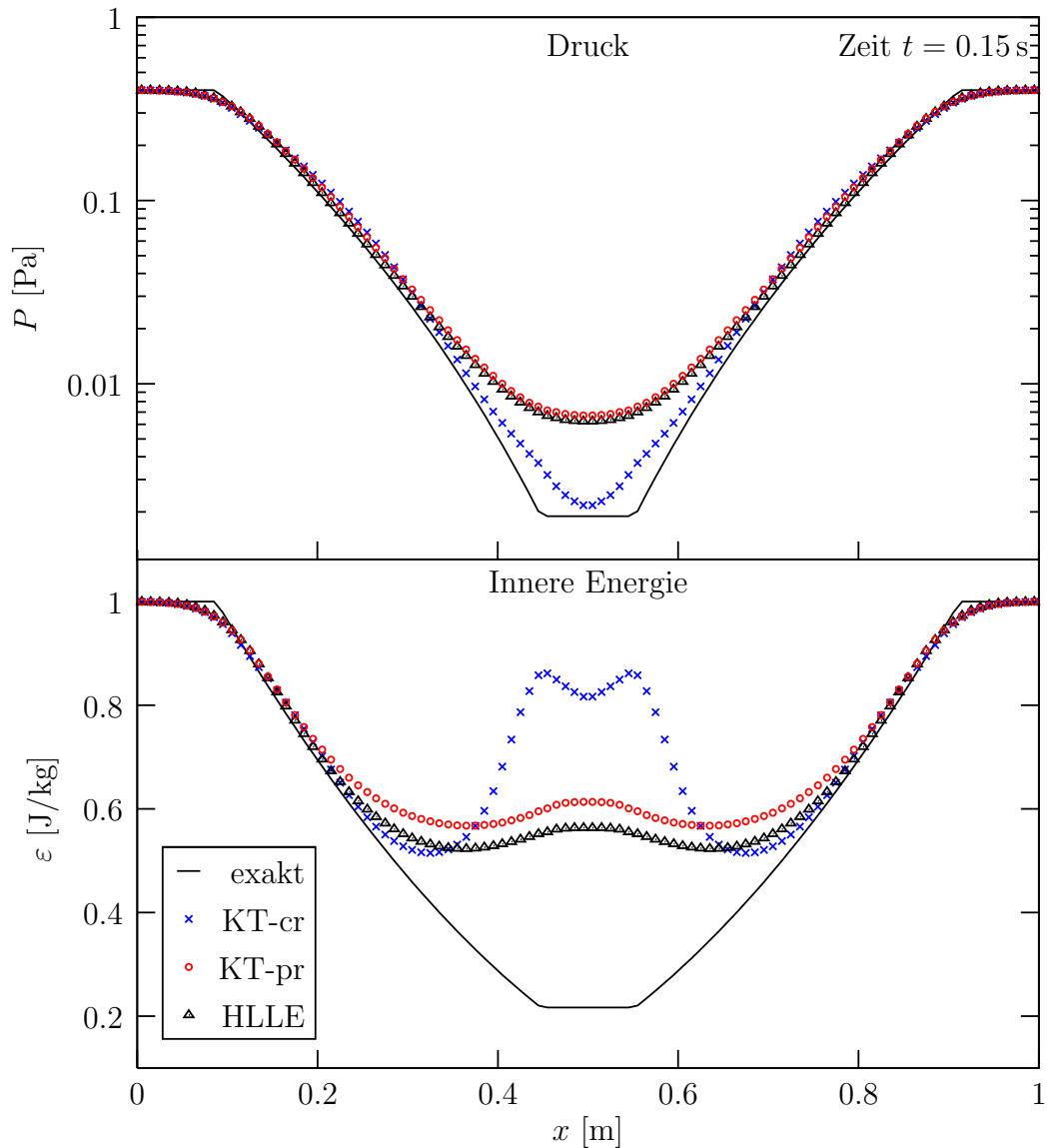


Abbildung 6.6: Toro Testproblem Nr. 2: Vergleich von konservativer (KT-cr) und primitiver Rekonstruktion (KT-pr,HLLE)

6.2.2 Toros Testproblem Nr. 2

Das nächste Beispiel für ein Riemannproblem ist einer Reihe von Testproblemen aus Toro (1997) entnommen und behandelt den Fall einer Unstetigkeit allein in der Geschwindigkeit. Die Lösung des Riemannproblems ergibt zwei Verdünnungs- und eine Kontaktwelle mit verschwindendem Dichtesprung in der Mitte. In diesem Test erweisen sich die beiden Arten der Rekonstruktion

als doch nicht ganz äquivalent. Am deutlichsten sind die Unterschiede in der inneren Energie zu sehen (vgl. Abb. 6.6 unten). Die Anfangsbedingungen für das Testproblem Nr. 2 von Toro lauten:

	ϱ	v	P
$x < x_{\frac{1}{2}}$	1, 0	-2, 0	0, 4
$x > x_{\frac{1}{2}}$	1, 0	2, 0	0, 4

Man beachte, dass die Abweichungen von der exakten Lösung in Dichte und Druck (Abbn. 6.5 oben und 6.6 oben) nur deshalb zu sehen sind, weil bei der Darstellung eine logarithmische Skala gewählt wurde. Diese sehr kleinen Fehler verstärken sich aber bei der Berechnung der spezifischen inneren Energie

$$\varepsilon = \frac{P}{(\gamma - 1)\varrho}.$$

Offenbar ist die Art der Rekonstruktion in diesem Test ausschlaggebend dafür, ob die Dichte in der Mitte über- oder unterschätzt wird. Vergleicht man nämlich die KT-Resultate mit primitiver Rekonstruktion (KT-pr) mit den Ergebnissen, die das MUSCL-Verfahren – mit ebenfalls primitiver Rekonstruktion – für den HLLE-Fluss liefert, so erkennt man eine sehr gute Übereinstimmung. Tendenziell muss man bei diesem Test der Rekonstruktion der primitiven Variablen den Vorzug geben. Im Gegensatz zur konservativen Rekonstruktion entsteht nämlich in der inneren Energie zumindest so etwas wie ein Plateau in der Mitte des Rechengebiets, wenn auch um einiges über dem Niveau der exakten Lösung. Die Problematik dieses Tests liegt darin, dass in der Mitte ein Vakuum erzeugt wird, also ein Bereich, in dem die Dichte gegen null geht.

6.3 2D-Riemannprobleme

Ähnlich den eindimensionalen Tests kann man auch in der Ebene eine Klasse von Testproblemen mit abschnittsweise konstanten Anfangsdaten einführen. Dazu betrachtet man ein quadratisches Rechengebiet, teilt dies in vier gleich große Quadranten auf und setzt in jedem dieser Quadranten konstante Anfangsbedingungen. Der Nomenklatur von Kurganov und Tadmor (2002) folgend seien die Quadranten ausgehend von oben rechts entgegen dem Uhrzeigersinn durchnummeriert (siehe Abb. 6.7).

P_2	ϱ_2	P_1	ϱ_1
u_2	v_2	u_1	v_1
P_3	ϱ_3	P_4	ϱ_4
u_3	v_3	u_4	v_4

Abbildung 6.7: Nummerierung der Quadranten für die 2D Riemannprobleme

Mit diesen Anfangsbedingungen löst man dann das System der zweidimensionalen Eulergleichungen für ein ideales Gas. Anders als bei den eindimensionalen Riemannproblemen gibt es für diese Tests keine exakten Lösungen, mit denen sich die Ergebnisse vergleichen lassen. Allerdings haben Schulz-Rinne u. a. (1993) sehr genau untersucht, was für Arten von nichtlinearen Wellen in einem ausgewählten Satz von Beispielfiguren entstehen. Außerdem hat man die Möglichkeit, die Resultate unterschiedlicher numerischer Verfahren miteinander zu vergleichen.

Damit es möglich ist, die hier gewonnenen Ergebnisse denen von Kurganov und Tadmor (2002) gegenüberzustellen, wurden bei allen Simulationen identische Parameter gewählt. Als Limiter kommt überall der weniger dissipative monotone-centered Limiter mit dem Parameter $\theta = 1,3$ (siehe Gl. 4.35) zum Einsatz. Das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten wurde auf $\gamma = 1,4$ festgelegt.

6.3.1 Kartesische Tests

Zunächst soll das zweidimensionale Riemannproblem für das System der Eulergleichungen in kartesischen Koordinaten untersucht werden.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \quad (6.2)$$

mit den Vektoren

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \varrho \\ \varrho u \\ \varrho v \\ e \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho u \\ \varrho u^2 + P \\ \varrho uv \\ (e + P)u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho v \\ \varrho uv \\ \varrho v^2 + P \\ (e + P)v \end{bmatrix},$$

der Zustandsgleichung und der spezifischen Gesamtenergie e

$$P = (\gamma - 1)\varrho\varepsilon, \quad e = \varrho\varepsilon + \frac{1}{2}\varrho(u^2 + v^2).$$

In den Abbildungen 6.8 und 6.9 ist die Lösung zur Zeit $t = 0,3$ s – was in etwa 0,3 dynamischen Zeitskalen entspricht – für Testkonfiguration Nr. 19 aus Kurganov und Tadmor (2002) mit den Anfangsbedingungen (SI Einheiten):

$$\begin{array}{llll} P_2 = 1 & \varrho_2 = 2 & P_1 = 1 & \varrho_1 = 1 \\ u_2 = 0 & v_2 = -0,3 & u_1 = 0 & v_1 = 0,3 \end{array}$$

$$\begin{array}{llll} P_3 = 0,4 & \varrho_3 = 1,0625 & P_4 = 0,4 & \varrho_4 = 0,5197 \\ u_3 = 0 & v_3 = 0,2145 & u_4 = 0 & v_4 = -0,4259 \end{array}$$

abgebildet. Diese Anfangsbedingungen erzeugen alle denkbaren nichtlinearen Wellen an den Unstetigkeitsstellen: Zwischen den Quadranten 2 und 3 einen Stoß, zwischen 1 und 4 einen Verdünnungsfächer und zwischen 1 und 2 sowie 3 und 4 je eine Kontaktunstetigkeit. Bei allen gezeigten Simulationsergebnissen beträgt die Auflösung 200×200 Gitterzellen.

Wie man unschwer erkennen kann, sind die Resultate für alle vier Testsimulationen nahezu identisch. Die Stoßgeschwindigkeiten sind überall gleich und auch an den Kontaktunstetigkeiten sieht man keine Unterschiede.

Gleiches gilt bei diesem zweidimensionalen Problem im Gegensatz zum eindimensionalen Test von Toro in Kapitel 6.2 auch für die spezifische innere Energie (Abb. 6.9). Es spielt offenbar keine Rolle, ob man mit einer primitiven oder einer konservativen Rekonstruktion arbeitet.

6.3.2 Polarkoordinaten

In diesem Abschnitt sollen wiederum zweidimensionale Riemannprobleme untersucht werden. Neben den Lösungen auf kartesischen Gittern finden sich auch solche auf krummlinigen Gittern in ebenen Polarkoordinaten. Das System der Eulergleichungen ist hier gegeben durch Gl. (3.28) ohne Drehimpuls und externe Kraftterme.

Die Koordinaten ξ, η und ϕ bezeichnen dabei den Radius r , Polarwinkel φ und Vertikalkoordinate z (in dieser Reihenfolge!), so dass die Symmetrie bzgl. der Koordinaten ϕ respektive z in diesem Fall keine Rotationssymmetrie, sondern eine Translationssymmetrie entlang der z -Achse zur Folge hat. Da der spezifische Drehimpuls ℓ und somit die Geschwindigkeit v_ϕ in diesem System

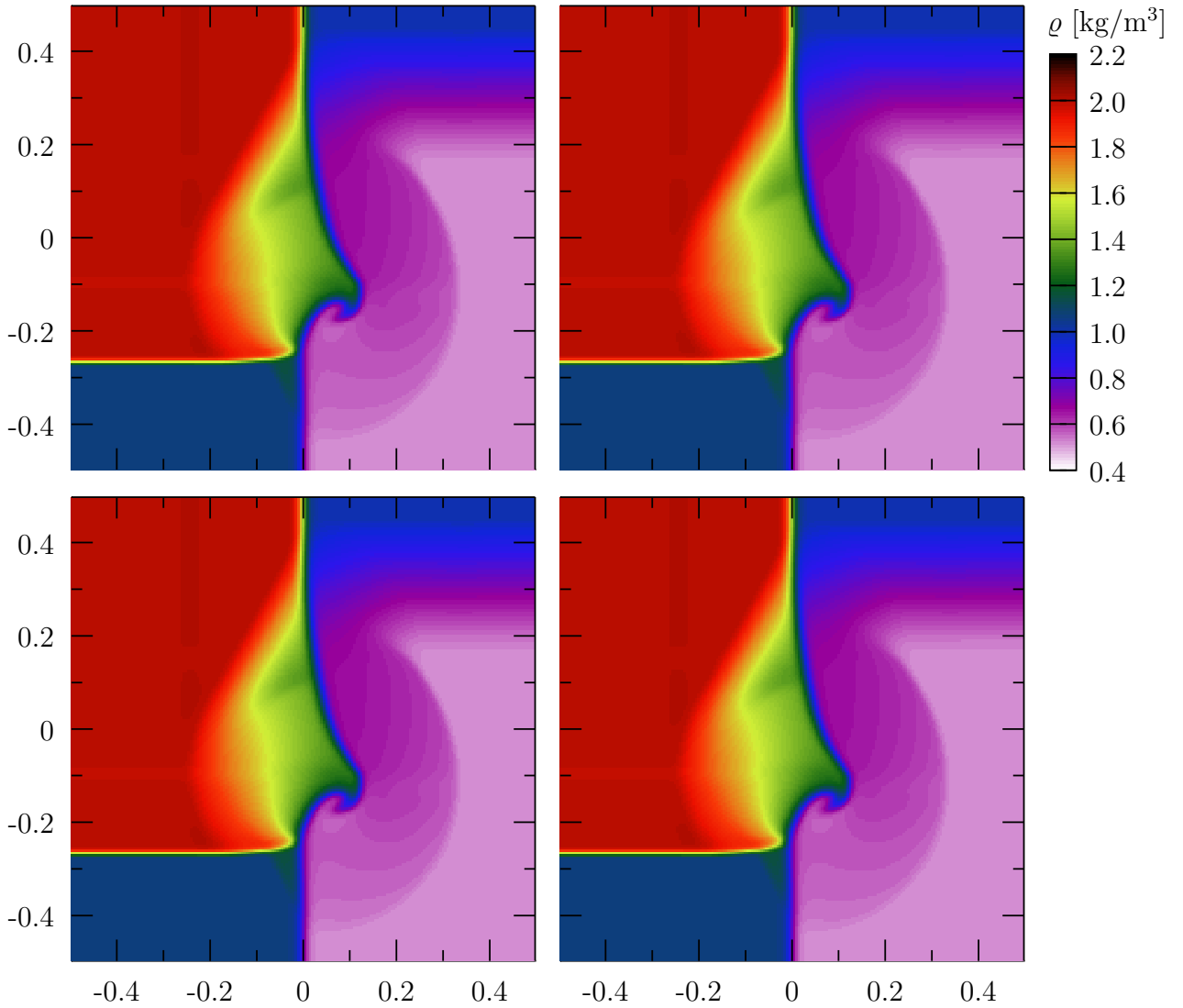


Abbildung 6.8: KT-Test Nr. 19, Massendichten zur Zeit $t = 0,3$ s: Vergleich von konservativer (links) und primitiver (rechts) Rekonstruktion mit Mittelpunktsregel (oben) und Trapezregel (unten) für die Flussintegrale; die Längeneinheit ist Meter.

verschwindet, gibt es auch keine Zentrifugalkraftterme von der Art (3.23). Statt dessen finden sich die Zentrifugalkräfte, die in diesem polaren System selbstverständlich vorhanden sein müssen, in den Geometriequelltermen im Vektor \mathbf{S}_{g1} wieder. Die Skalierungsfunktionen für dieses Koordinatensystem lauten:

$$h_r = 1, \quad h_\varphi = r, \quad h_z = 1,$$

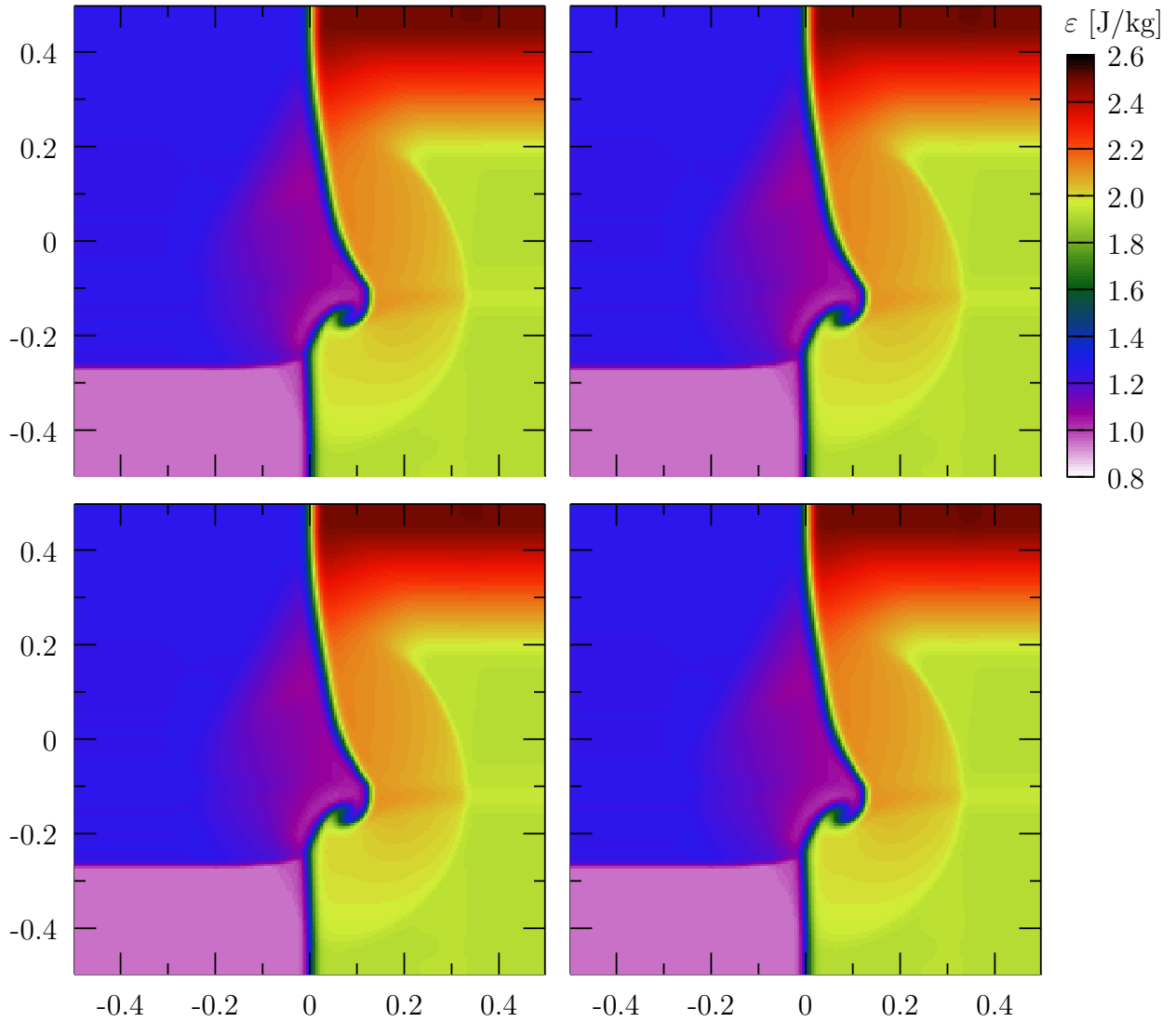


Abbildung 6.9: KT-Test Nr. 19, Spezifische innere Energie zur Zeit $t = 0,3$ s: Vergleich von konservativer (links) und primitiver (rechts) Rekonstruktion mit Mittelpunktsregel (oben) und Trapezregel (unten) für die Flussintegrale; die Längeneinheit ist Meter.

woraus sich die Kommutatorkoeffizienten gemäß Gl. (3.6) zu

$$\begin{aligned}
 c_{\varphi r \varphi} &= \frac{1}{h_r h_\varphi} \frac{\partial h_\varphi}{\partial r} = \frac{1}{r}, & c_{r \varphi r} &= \frac{1}{h_\varphi h_r} \frac{\partial h_r}{\partial \varphi} = 0 \\
 c_{z r z} &= \frac{1}{h_r h_z} \frac{\partial h_z}{\partial r} = 0, & c_{z \varphi z} &= \frac{1}{h_\varphi h_z} \frac{\partial h_z}{\partial \varphi} = 0
 \end{aligned}$$

ergeben. Damit lässt sich das System der Eulergleichungen in ebenen Polarkoordinaten folgendermaßen schreiben:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \mathbf{F}) + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \varphi} = \mathbf{S}_{g1} + \mathbf{S}_{g2} \quad (6.3)$$

mit dem Vektor der Erhaltungsgrößen und den Flussvektoren

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \varrho \\ \varrho v_r \\ \varrho v_\varphi \\ e \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho v_r \\ \varrho v_r^2 + P \\ \varrho v_\varphi v_r \\ (e + P)v_r \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varrho v_\varphi \\ \varrho v_r v_\varphi \\ \varrho v_\varphi^2 + P \\ (e + P)v_\varphi \end{bmatrix},$$

den Geometriequelltermen

$$\mathbf{S}_{g1}(\mathbf{u}) = \frac{\varrho}{r} \begin{bmatrix} 0 \\ v_\varphi^2 \\ v_r v_\varphi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{g2}(\mathbf{u}) = \frac{P}{r} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

sowie der Zustandsgleichung und der Gleichung für die Gesamtenergie

$$P = (\gamma - 1)\varrho\varepsilon, \quad e = \varrho\varepsilon + \frac{1}{2}\varrho(v_r^2 + v_\varphi^2).$$

Die folgenden Tests zeigen Lösungen für Problem Nr. 6 aus Kurganov und Tadmor (2002) sowohl für das Gleichungssystem (6.2) als auch für die äquivalente Variante (6.3) in Polarkoordinaten. Die Anfangsbedingungen sind (SI Einheiten):

$$\begin{array}{llll} P_2 = 1 & \varrho_2 = 2 & P_1 = 1 & \varrho_1 = 1 \\ u_2 = 0,75 & v_2 = 0,5 & u_1 = 0,75 & v_1 = -0,5 \end{array}$$

$$\begin{array}{llll} P_3 = 1 & \varrho_3 = 1 & P_4 = 1 & \varrho_4 = 3 \\ u_3 = -0,75 & v_3 = 0,5 & u_4 = -0,75 & v_4 = -0,5, \end{array}$$

so dass zwischen den vier Quadranten überall Kontaktunstetigkeiten vorliegen.

Die Auflösung bei den Simulationen beträgt im kartesischen Fall 200×200 Gitterzellen und im krummlinigen Gitter 100×400 in r - und φ -Richtung. Als Randbedingungen kommen auf dem polaren Gitter verschwindende Gradienten an beiden r -Rändern und periodische Randbedingungen an den φ -Rändern zum Einsatz. Die φ -Koordinate läuft von $\varphi = \frac{\pi}{4}$ bis $\varphi = 2\pi + \frac{\pi}{4}$.

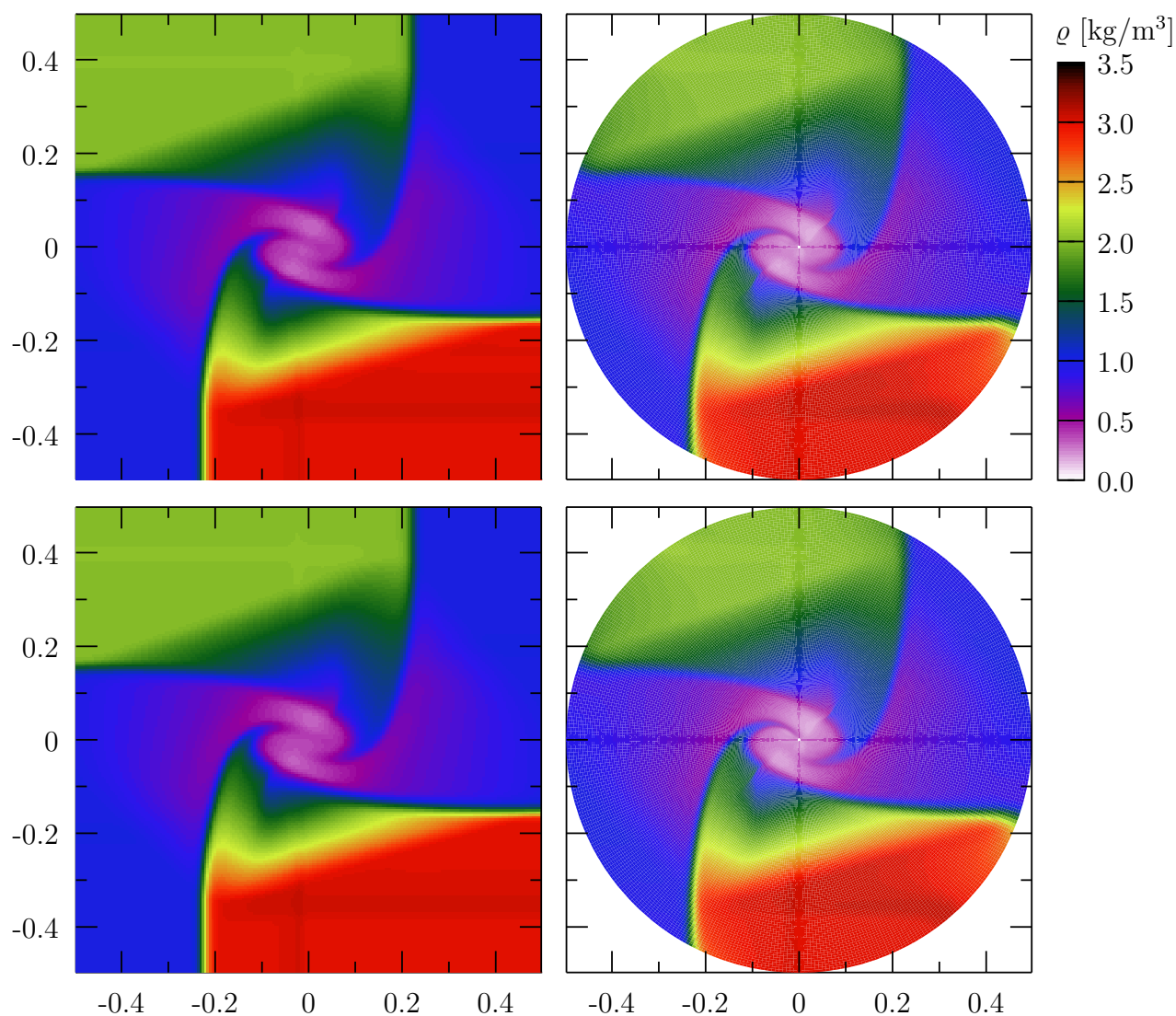


Abbildung 6.10: KT-Test Nr. 6, Massendichten zur Zeit $t = 0,3$ s: Vergleich von kartesischer (links) und polarer (rechts) Geometrie sowie konservativer (oben) und primitiver (unten) Rekonstruktion; die Längeneinheit ist Meter.

Die Schnittlinie zwischen φ_{\min} und φ_{\max} verläuft also quer durch den ersten Quadranten und nicht entlang der x -Achse. Damit vermeidet man, dass die anfängliche Unstetigkeit zwischen dem ersten und vierten Quadranten auf einem Rand liegt.

In Abbildung 6.10 ist die Massendichte für das Problem der vier Kontaktunstetigkeiten für ein kartesisches und ein polares Gitter aufgetragen. Man sieht sofort die gute Übereinstimmung sowohl für eine Rekonstruktion in conserva-

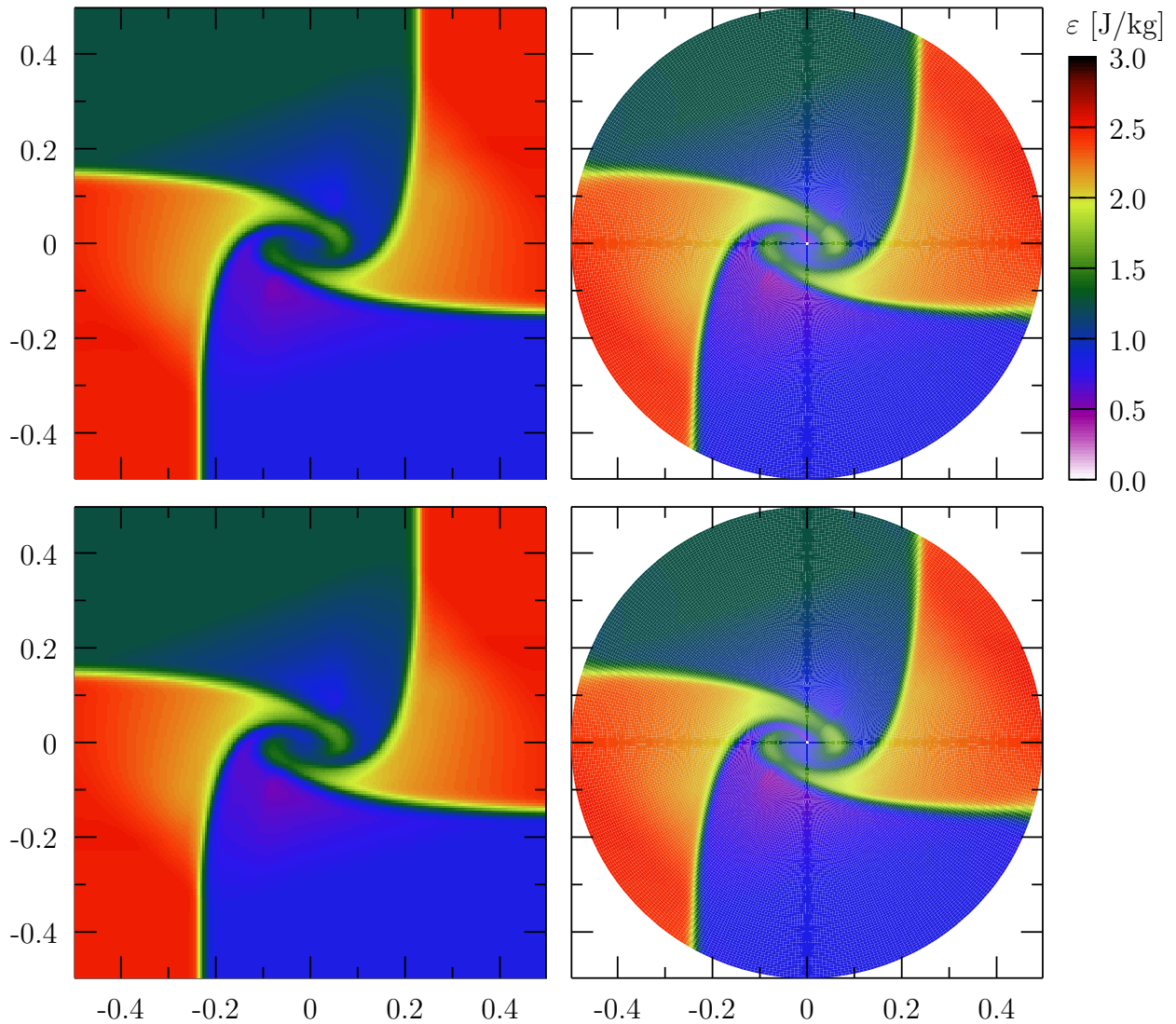


Abbildung 6.11: KT-Test Nr. 6, spezifische innere Energie zur Zeit $t = 0,3$ s: Vergleich von kartesischer (links) und polarer (rechts) Geometrie sowie konservativer (oben) und primitiver (unten) Rekonstruktion; die Längeneinheit ist Meter.

tiven als auch in primitiven Variablen. Lediglich an den äußeren Rändern der polaren Diagramme scheinen die Unstetigkeiten etwas anders zu verlaufen. Das ist auf zwei Effekte zurückzuführen. Zum einen werden die Gitterzellen in polarer Richtung nach außen breiter, die räumliche Auflösung des Gitters also schlechter, und zum anderen sind die Randbedingungen an diesem krummen Rand nicht so gut gestellt, da hier lediglich die Daten aus dem Inneren

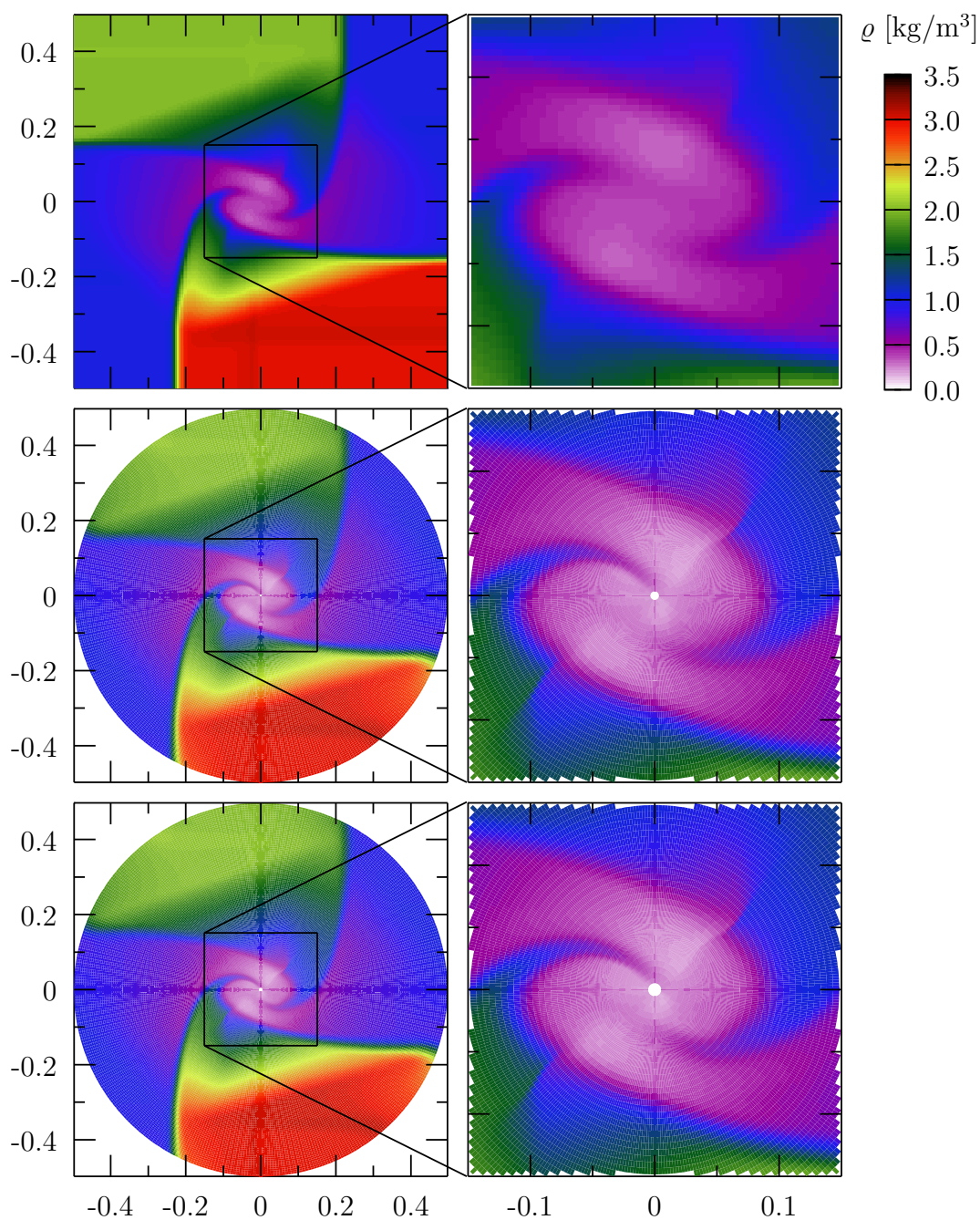


Abbildung 6.12: KT-Test Nr. 6, Massendichten zur Zeit $t = 0,3$ s: Vergleich von kartesischer (oben) und polarer (Mitte, unten) Geometrie bei der Auflösung von Strukturen im Inneren; die polaren Simulationen unterscheiden sich außerdem bei der Flussberechnung durch Mittelpunktsregel (Mitte) und Trapezregel (unten); in allen Fällen wurde mit primitiver Rekonstruktion gearbeitet; die Längeneinheit ist Meter.

des Rechengebiets in die Randzellen kopiert wurden (räumliche Extrapolation 0. Ordnung). Krümmungseffekte fließen dabei nicht mit ein, müssten aber eigentlich berücksichtigt werden.

Ein Test für die spezifische innere Energie liefert ähnlich gute Resultate wie schon im vorangegangenen Kapitel. Wie man an Abbildung 6.11 ablesen kann, gibt es auch für das Problem der vier reinen Kontaktunstetigkeiten keine nennenswerten Abweichungen zwischen konservativer und primitiver Rekonstruktion.

Ein wichtiger Unterschied zwischen den Lösungen in Polarkoordinaten und denen in kartesischen Koordinaten ist die unterschiedliche räumliche Auflösung in verschiedenen Bereichen des Rechengebiets. Es wurden mit Absicht für beide Arten eine gleiche Gesamtzahl von Gitterzellen gewählt, so dass die verwendeten Computerressourcen – zumindest was den Speicherplatz angeht – gleich waren. Entlang der Achsen ist die Auflösung ebenfalls identisch. Allerdings erreicht man mit dem polaren Gitter im Zentrum in polarer Richtung eine erheblich bessere Auflösung. Die Rechenzeit erhöht sich für die Rechnungen in Polarkoordinaten jedoch beträchtlich, weil die geringe Ausdehnung der Zellen in der Nähe des Zentrums zu einem sehr kleinen Courant-Zeitschritt führt.

Um die Unterschiede in der Auflösung noch stärker hervorzuheben, ist in Abbildung 6.12 ein vergrößerter Ausschnitt des zentralen Gebiets zu sehen. In den beiden polaren Darstellungen kann man deutlich feinere Strukturen erkennen, die im kartesischen Gitter ausgeschmiert sind. Die beiden Ergebnisse in Polarkoordinaten unterscheiden sich zudem auch noch in der verwendeten Quadraturregel. Es fällt sofort auf, dass die Aussparung im Zentrum bei der Trapezregel (Abb. 6.12 unten) größer ist. Das ist eine direkte Folge der Berechnung der Zellschwerpunkte. In der Nähe der Achse ist die Abweichung der Zellgeometrie von einer rechteckigen Zelle am größten, daher liegt dort der Zellschwerpunkt nicht in der Mitte der Zelle, sondern etwas weiter außen. Die Lage der Zellschwerpunkte wird also im Zentrum von der Trapezregel besser wiedergegeben. Ansonsten kann man mit bloßem Auge keine nennenswerten Abweichungen ausmachen.

6.4 Mach-3-Windtunnel mit Stufe

Der folgende Test geht auf Emery (1968) zurück und hat sich seit der Arbeit von Woodward und Colella (1984) als zweidimensionales Testproblem etabliert. Neuere Simulationsergebnisse finden sich auch bei Stone und Norman (1992).

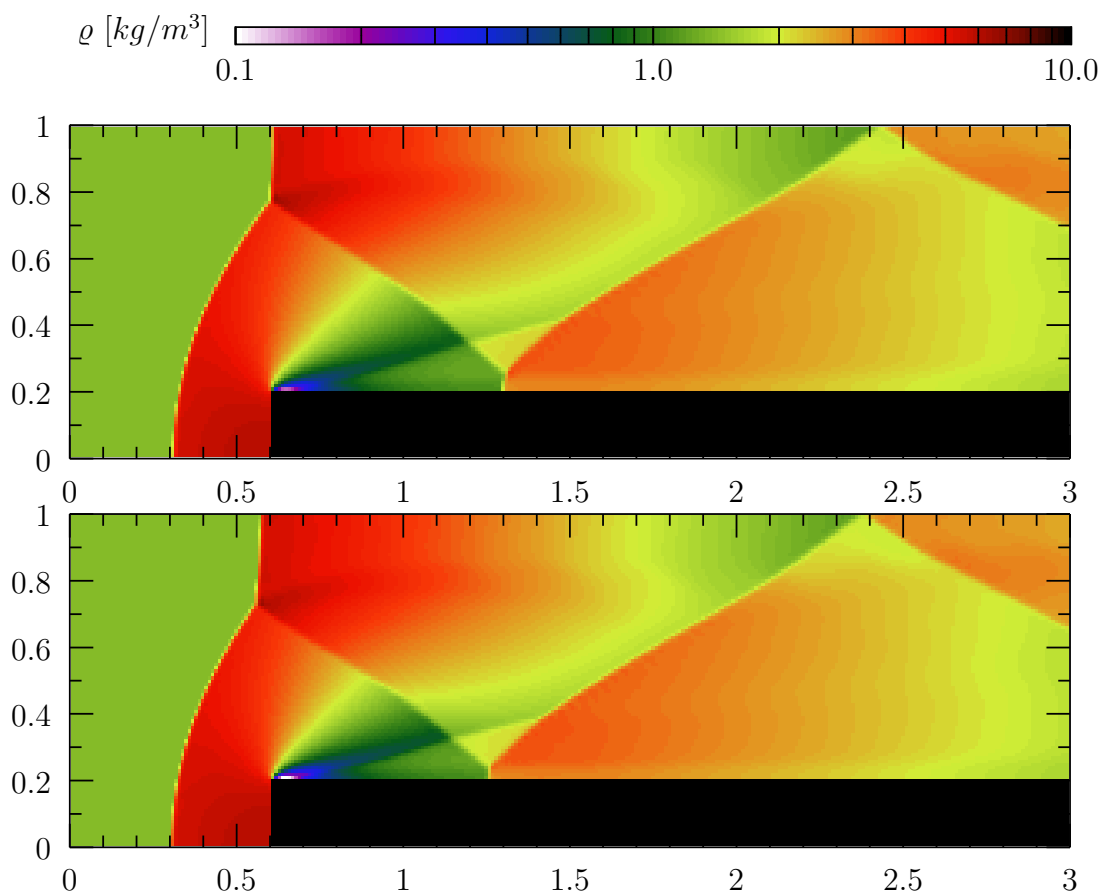


Abbildung 6.13: Mach-3-Windtunnel mit Stufe, Massendichte zur Zeit $t = 4,0$ s: Vergleich von Mittelpunktsregel (oben) und Trapezregel (unten) für die Flussintegrale bei einer Auflösung von 300×100 Gitterpunkten; die Längeneinheit ist Meter.

Dieser Test wird wiederum auf einem kartesischen Gitter durchgeführt. Gelöst wird folglich das System (6.2). Das Rechengebiet bildet ein Rechteck mit den Seitenverhältnissen $3 : 1$ und der Besonderheit, dass sich bei $x = 0,6$ m eine Stufe der Höhe $0,2$ m erhebt.

Als Anfangsbedingungen setzt man überall

$$\rho_0 = 1,4 \text{ kg/m}^3, \quad u_0 = 3 \text{ m/s}, \quad v_0 = 0 \text{ m/s}, \quad P_0 = 1 \text{ Pa}.$$

Mit $\gamma = 1,4$ ist die Schallgeschwindigkeit $c_s = 1,0 \text{ m/s}$. Somit strömt das Gas mit Mach 3 durch den Tunnel. Die gleichen Werte setzt man auch am linken Rand, so dass man dort einen Überschall-Einfluss hat. Am rechten Rand werden die Werte extrapoliert, was einem Überschall-Ausfluss gleichkommt. Oben und unten gelten reflektierende Randbedingungen.

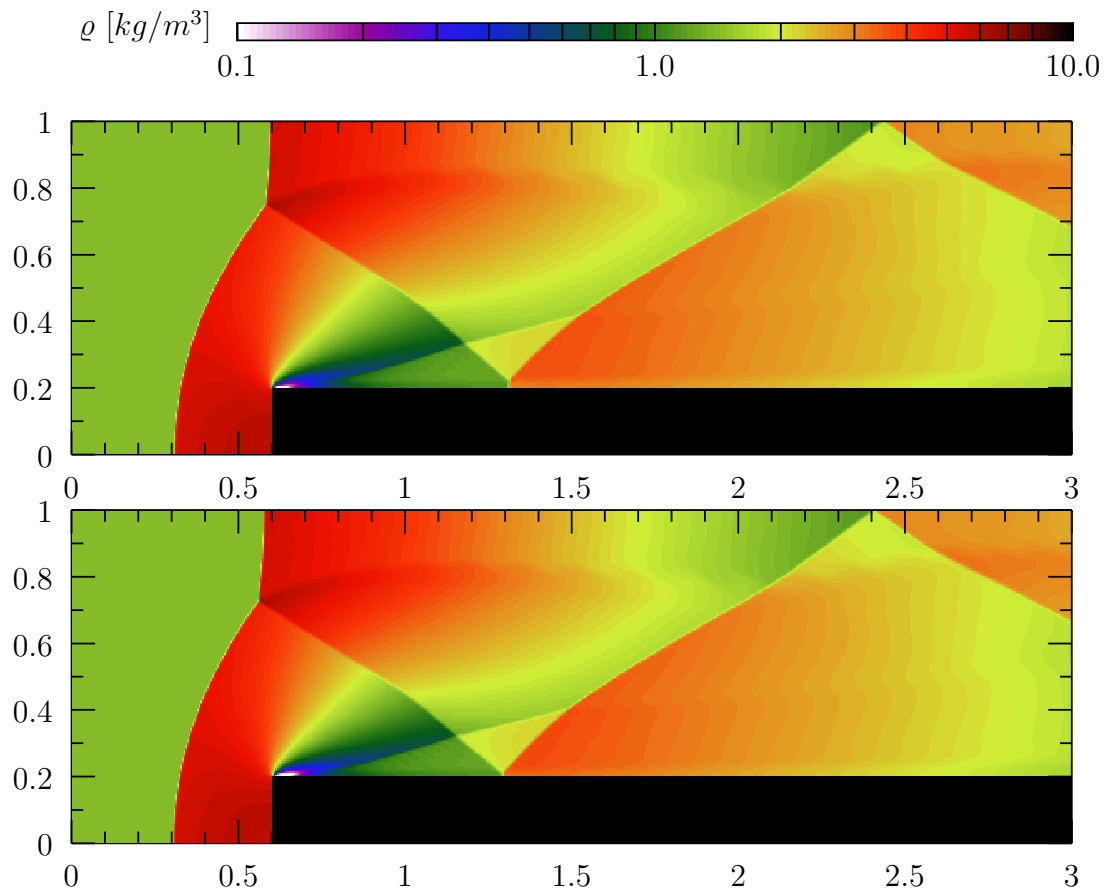


Abbildung 6.14: Mach-3-Windtunnel mit Stufe, Massendichte zur Zeit $t = 4,0$ s: Vergleich von Mittelpunktsregel (oben) und Trapezregel (unten) für die Flussintegrale bei einer Auflösung von 600×200 Gitterpunkten; die Längeneinheit ist Meter.

Die Stufe selbst ist im Programm ebenfalls als Rand realisiert. Das bedeutet, dass die Zellen innerhalb der Stufe in jedem Zeitschritt auf feste Werte gesetzt werden und die Randzellen der Stufe wie ein reflektierender Rand auf die Strömung im Tunnel wirken. Richtig gewählte Randbedingungen sind für diesen Test von enormer Wichtigkeit. Insbesondere die exakte Lage der Stufenkante und die Randbedingungen an dieser Stelle haben einen großen Einfluss auf das Verhalten der Strömung und die genaue Lage der Stöße. Stone und Norman (1992) begründen damit auch die vergleichsweise große Ungenauigkeit und die starke Abhängigkeit von der Auflösung bei ihren Simulationsergebnissen. Ein Problem ihres ZEUS-2D Programms ist dabei das gestaffelte Gitter, weil dies dazu führt, dass Geschwindigkeiten, Dichten und Drücke nicht an denselben Gitterpunkten definiert sind. Im zentralen KT-

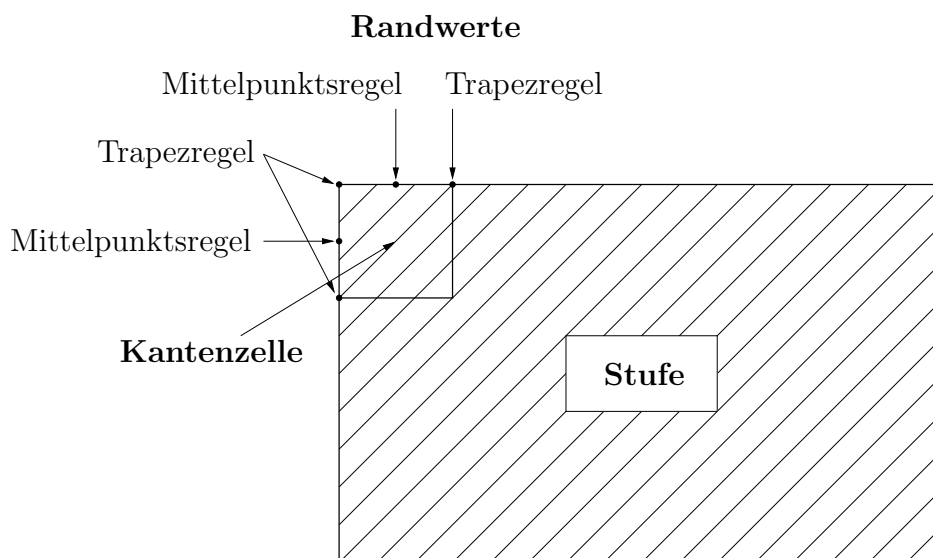


Abbildung 6.15: Randwerte an der Stufe für das Windtunnelproblem

Verfahren hat man dieses Problem nicht, da alle Daten mit Punktdaten an den Volumenzentren identifiziert werden.

Es ergeben sich allerdings leichte Unterschiede für die beiden Quadraturverfahren. Dabei scheint die Trapezregel zu etwas besseren Resultaten zu führen. Vergleicht man nämlich die Simulationsergebnisse in Abbildung 6.13 mit denen bei höherer Auflösung in Abbildung 6.14, so stellt man z.B. fest, dass die minimale Dichte direkt an der Stufenkante bei Anwendung der Trapezregel in der niedrigen Auflösung schon eher dem Wert bei hoher Auflösung entspricht.

Ferner beobachtet man überall leichte Unterschiede bei der Lage der Unstetigkeitsstellen. Eine Ursache für die Abweichungen ist möglicherweise die etwas anders realisierte Randbedingung an der Stufenkante. Während bei der Mittelpunktsregel in der Eckzelle nur Randwerte an den zwei Zellkanten gesetzt werden, nutzt die Trapezregel tatsächlich Daten in der Ecke (siehe Abb. 6.15).

Die Auflösung der Stöße ist aber in allen Fällen sehr gut und auch die Kontaktunstetigkeit beim Tripelpunkt am oberen Rand ($x \approx 0,6$ m) wird richtig reproduziert. Mit etwas gutem Willen kann man sogar in den hoch aufgelösten Simulationen die Kelvin-Helmholtz-Instabilität im oberen viertel des Rechengebiets erkennen. Für ein scharfes Bild reicht aber auch hier die Auflösung nicht. Wirklich sichtbar wird sie erst bei einer um den Faktor 5 besseren Auflösung. Zum Vergleich betrachte man auch die Lösungen dieses

Problems in Ricker u. a. (1999), die auf adaptiven Gittern mit einer effektiven Auflösung von 3840×1280 Zellen berechnet wurden.

6.5 Sedov-Explosion

Bislang waren die zweidimensionalen Tests mehr qualitativer als quantitativer Natur. Das Problem ist, dass es in mehr als einer Raumdimension einfach keine nichttrivialen Lösungen der gasdynamischen Gleichungen gibt. Eine weitere Testmöglichkeit bietet sich aber, wenn man Systeme mit speziellen Symmetrien betrachtet.

In diesem Abschnitt wird das rotations- bzw. kugelsymmetrische Problem einer starken Explosion untersucht. Eine zeitabhängige Lösung dieses Problems wurde erstmals unabhängig voneinander von Sedov (1946) und von Neumann (1947) berechnet. Neuere Darstellungen des Lösungsweges finden sich auch in Sedov (1959) und Landau und Lifschitz (1991). Es können zwar keine analytischen Funktionen für die Dichte, die Radialgeschwindigkeit und den Druck angegeben werden, jedoch findet sich ein Gleichungssystem, das mit Hilfe eines numerischen Verfahrens zur Nullstellensuche gelöst werden kann. So kann man die gesuchten Größen quasi mit beliebiger Genauigkeit als Funktionen der Zeit und der Radialkoordinate bestimmen.

Eine wesentliche Voraussetzung für die Lösung dieses Problems ist, dass eine beträchtliche Energiemenge plötzlich zur Zeit t_0 an einem Punkt freigesetzt wird, so dass eine Stoßwelle großer Intensität entsteht. Damit ist ein großer Sprung im Druck verknüpft, der es einem gestattet, den Druck des ungestörten Gases P_1 gegenüber dem Druck P_2 direkt hinter dem Stoß zu vernachlässigen. Die Dichte wird anfangs als konstant angenommen und die Radialgeschwindigkeit sei null.

Für die Simulationen wurden folgende Anfangsbedingungen gesetzt:

$$\varrho(t_0) = 1 \text{ kg/m}^3, \quad v_r(t_0) = 0, \quad P_1(t_0) = 10^{-5} \text{ Pa.}$$

Aufgrund der endlichen Auflösung eines numerischen Verfahrens ist es nicht möglich, die Explosionsenergie tatsächlich in einem Punkt freizusetzen. Stattdessen wählt man ein (möglichst) kleines kreis- bzw. kugelförmiges Volumen mit dem Radius Δr . Dann berechnet sich der Druck innerhalb dieses Volumens gemäß der Zustandsgleichung für ein ideales Gas

$$P_2(t_0) = \frac{3(\gamma - 1)E_0}{(1 + d)\pi\Delta r^d}, \quad d = 2 \text{ oder } 3,$$

wobei E_0 die gesamte freigesetzte Energie ist und d die Anzahl der Raumdimensionen für das betrachtete Problem angibt. Es wurde bei allen Simulationen $E_0 = 1$ J angenommen.

Die Größe des durch Δr festgelegten Gebiets beeinflusst leider die numerischen Resultate. Wählt man die räumliche Ausdehnung des Gebiets zu groß, werden die tatsächlichen Anfangsbedingungen eines unendlich schmalen Druckpulses nicht gut wiedergegeben, wählt man es zu klein, sind unter Umständen zu wenig Gitterpunkte innerhalb des Gebiets, was sich ebenfalls auf die zeitliche Entwicklung der Stoßwelle auswirkt. Für brauchbare Resultate, die sich mit den analytischen Lösungen vergleichen lassen, sollte man darauf achten, dass das Gebiet innerhalb des Stoßes am Anfang etwa fünf Gitterpunkte umfasst. Es gibt zwei Möglichkeiten, die Korrektheit der Resultate zu überprüfen:

1. die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Stoßwelle,
2. der asymptotische Wert des Drucks für $r \rightarrow 0$.

Außerdem beeinflusst auch der innere Radius des Rechengebiets in polaren oder sphärischen Geometrien die numerischen Ergebnisse. Daher ist es wichtig, dass diese Simulationsparameter für den jeweiligen Test angegeben werden.

6.5.1 Polarkoordinaten

Für das zweidimensionale Sedov-Problem werden wieder die numerischen Lösungen der Gleichungssysteme (6.2) und (6.3) untersucht und miteinander verglichen. Die Anfangsbedingungen sind wie eingangs beschrieben gewählt worden. Im Fall der kartesischen Koordinaten setzt man bei den Zellen, deren Zellschwerpunkt kleiner als der vorgegebene maximale Radius Δr des Anfangspulses ist, die konstanten Anfangswerte für den Druck. Dabei wählt man Δr so, dass im Polarkoordinatensystem noch etwa fünf Gitterzellen in radialer Richtung im Druckpuls enthalten sind.

Die Auflösungen betragen 100×100 Zellen für das kartesische Gitter und 50×60 in r und φ für das polare Gitter. Das Rechengebiet erstreckt sich im kartesischen Fall in beiden Raumrichtungen (in Metern) von $-0,3$ bis $0,3$ und in radialer Richtung auf dem polaren Gitter von 10^{-5} bis $0,3$. Der Radius des Volumens, in dem anfangs die Energie freigesetzt wird, ist $\Delta r = 0,03$.

In Abbildung 6.16 sieht man zunächst die Dichtekonturen für beide Geometrien und die unterschiedlichen Methoden zur Flussberechnung zum Zeitpunkt

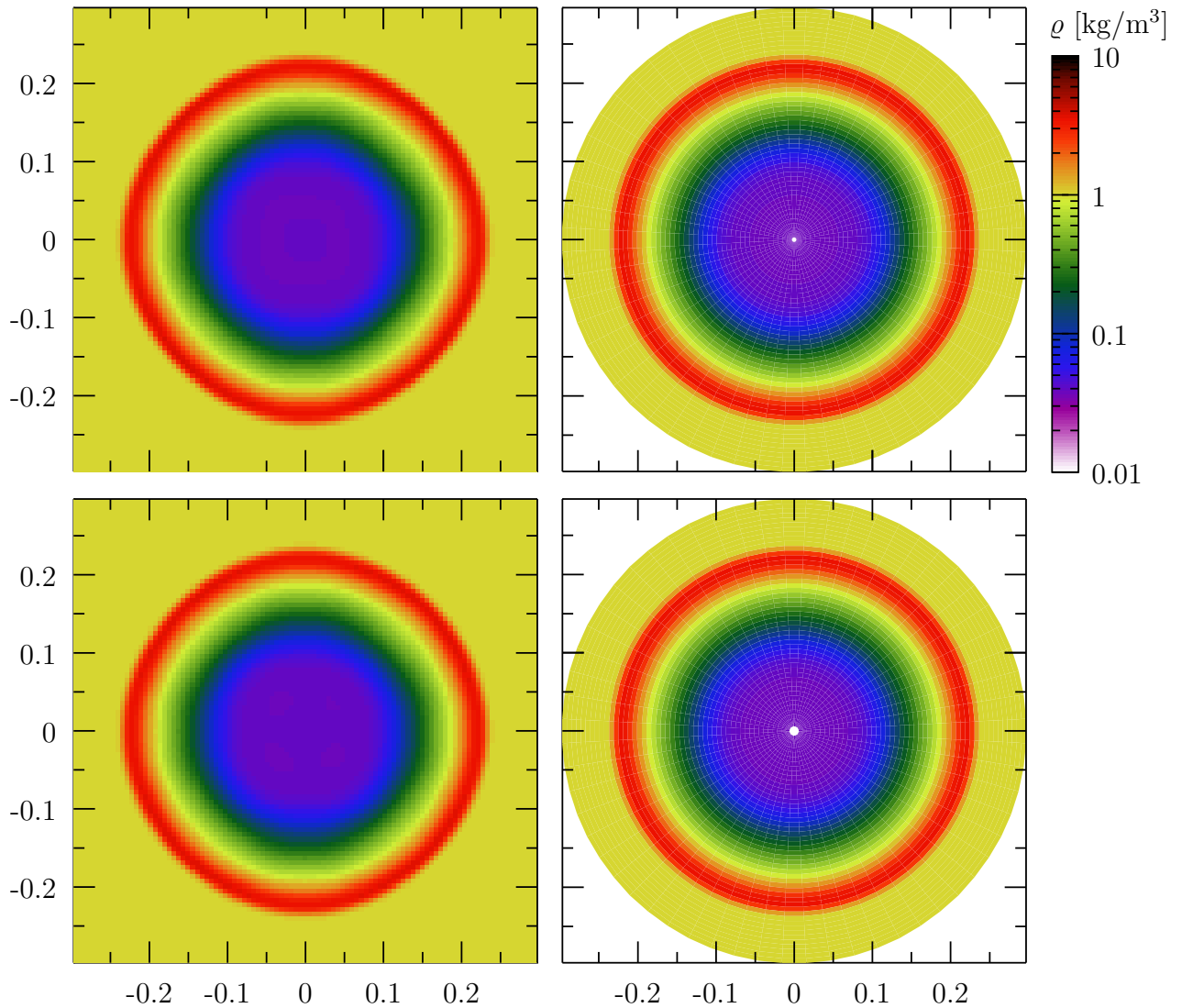


Abbildung 6.16: 2D-Sedov-Explosion, Massendichte zur Zeit $t = 0,05$ s: Vergleich von kartesischer (links) und polarer (rechts) Geometrie bei Verwendung der Mittelpunktsregel (oben) und Trapezregel (unten) für die Flussintegrale; die Längeneinheit ist Meter.

$t = 0,05$ s. Der rote Bereich mit dem Dichtemaximum kennzeichnet die Lage der Stoßwelle zu diesem Zeitpunkt. Dies scheint von allen Simulationen gleichermaßen reproduziert zu werden. Man kann bei den kartesischen Diagrammen lediglich eine leichte Abweichung von den ringförmigen Strukturen der Polardiagramme ausmachen.

Um die Ergebnisse auch quantitativ analysieren zu können, sind in den Abbil-

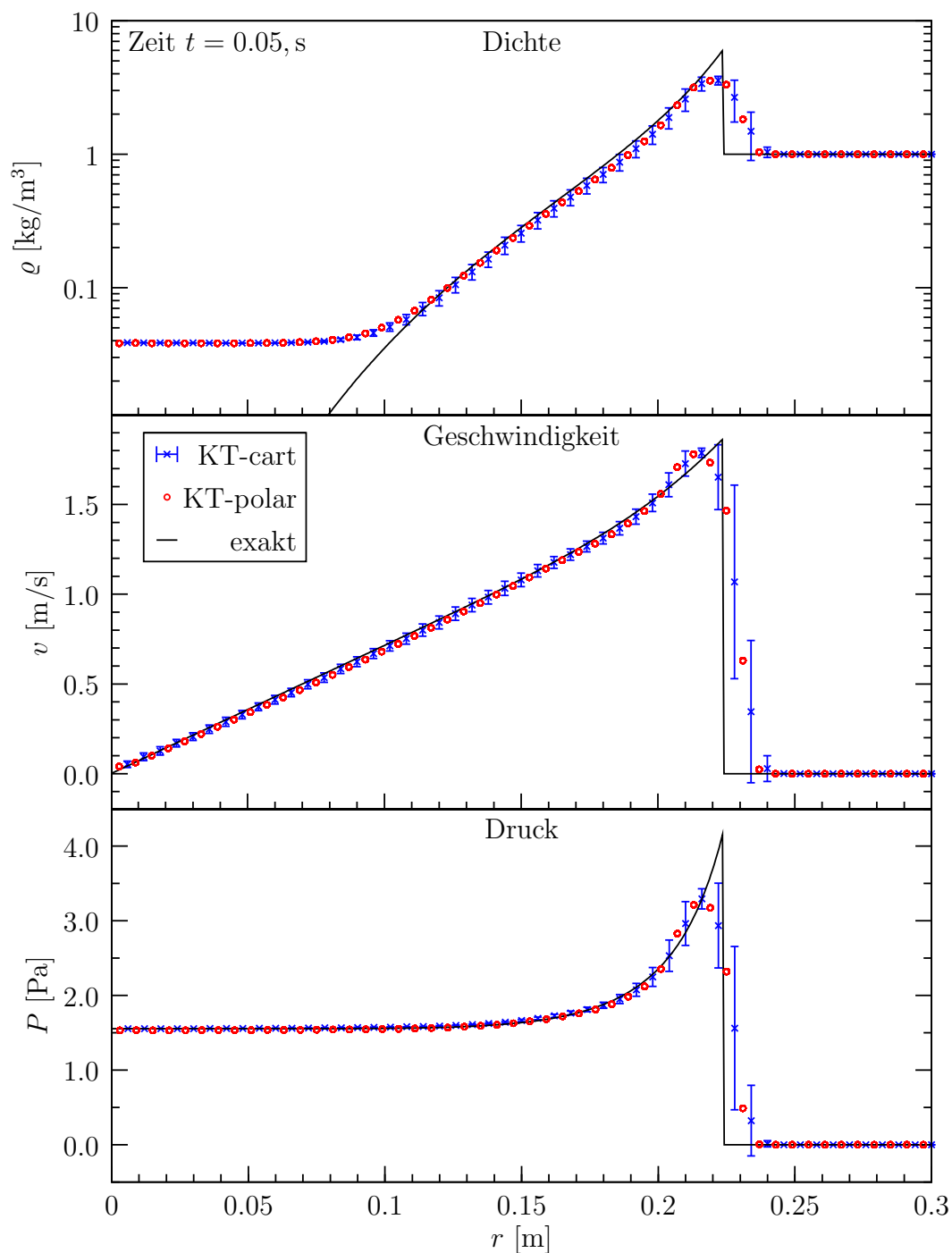


Abbildung 6.17: 2D-Sedov-Explosion zur Zeit $t = 0,05 s$ für die *Mittelpunktsregel*: Vergleich der numerischen Simulationen in kartesischer (KT-cart) und polarer (KT-polar) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

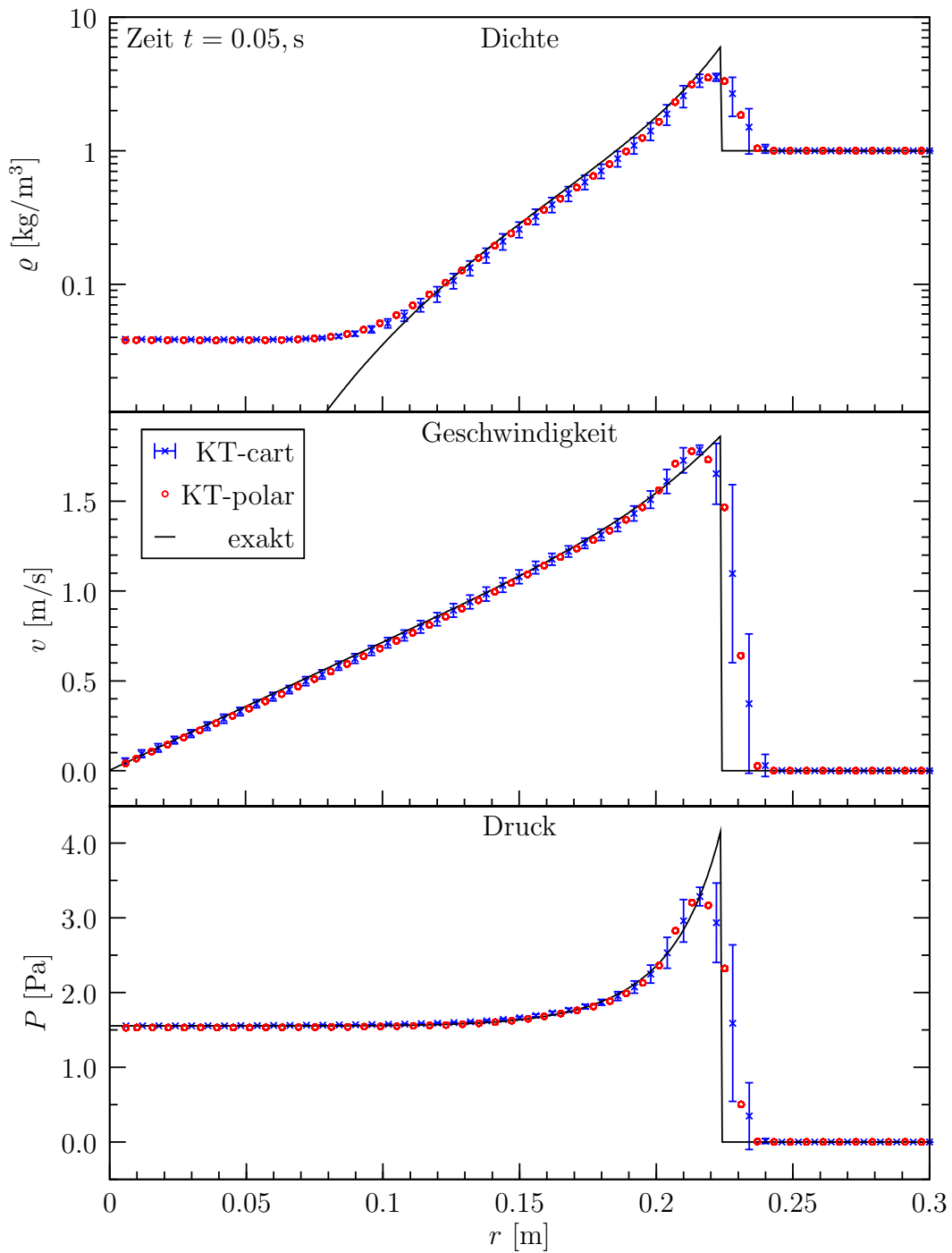


Abbildung 6.18: 2D-Sedov-Explosion zur Zeit $t = 0,05$ s für die *Trapezregel*: Vergleich der numerischen Simulationen in kartesischer (KT-cart) und polarer (KT-polar) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

dungen 6.17 und 6.18 Massendichte, Radialgeschwindigkeit und Druck über dem Abstand r vom Explosionszentrum aufgetragen. Es ist etwas problematisch, die kartesischen Daten mit denen der polaren Simulationen zu vergleichen, da die Abstände vom Zentrum nicht immer identisch sind. Damit das Diagramm nicht zu unübersichtlich wird, sind die kartesischen Daten in 50 Ringen zusammengefasst worden. Dabei wurde jeweils über einen Ring der Mittelwert gebildet. Die Fehlerbalken geben den statistischen Fehler dieser Mittelung an, sie sind also **nicht** als numerische Fehler der Simulation zu verstehen. Daher deuten die großen Fehlerbalken im Stoß lediglich auf eine große Streuung der Daten in diesem sehr schmalen Gebiet hin.

Im Großen und Ganzen stellt man eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsdaten mit der exakten Lösung fest. Lediglich in der Dichte sieht man für $r \rightarrow 0$ eine deutliche Abweichung vom exakten Wert, die allerdings nur in dieser logarithmischen Darstellung hervorsticht. Man kann die Ergebnisse an dieser Stelle etwas verbessern, indem man eine höhere Auflösung wählt und dann die Größe des anfänglichen Volumens der Explosion verringert. Da man aber in den Anfangsbedingungen nie einen wirklich unendlich schmalen Puls erzeugen kann, wird man das Verhalten der exakten Lösung, dass nämlich $\rho \rightarrow 0$ strebt für $r \rightarrow 0$, nicht reproduzieren können.

6.5.2 Zylinder- und Kugelkoordinaten

Die dreidimensionale Sedov-Explosion ist ein kugel- und damit auch rotationssymmetrisches Problem. Daher ist es möglich, mit einem zweidimensionalen numerischen Verfahren, wie es in dieser Arbeit beschrieben wird, Lösungen für dieses Problem zu ermitteln. Gelöst wird das System der gasdynamischen Gleichungen (3.28) ohne externe Kräfte für Zylinderkoordinaten $\{z, r, \varphi\}$ und Kugelkoordinaten $\{r, \vartheta, \varphi\}$. Die Skalierungsfaktoren sind daher gegeben durch

$$\begin{array}{lll} h_z = 1, & h_r = 1, & h_\varphi = r \\ h_r = 1, & h_\vartheta = r, & h_\varphi = r \sin(\vartheta). \end{array}$$

Damit lässt sich das System der Eulergleichungen in diesen beiden Standardkoordinatensystemen schreiben. Explizite Darstellungen finden sich in vielen Lehrbüchern der Hydrodynamik, z.B. bei Landau und Lifschitz (1991).

Für die Simulationen wurden wieder die im einführenden Abschnitt beschriebenen Anfangsbedingungen gewählt. Der Drehimpuls wurde überall auf null gesetzt. Er spielt für dieses Problem keine Rolle, muss aber dennoch initialisiert werden. Die Auflösungen betragen 100×50 Gitterzellen in z - und

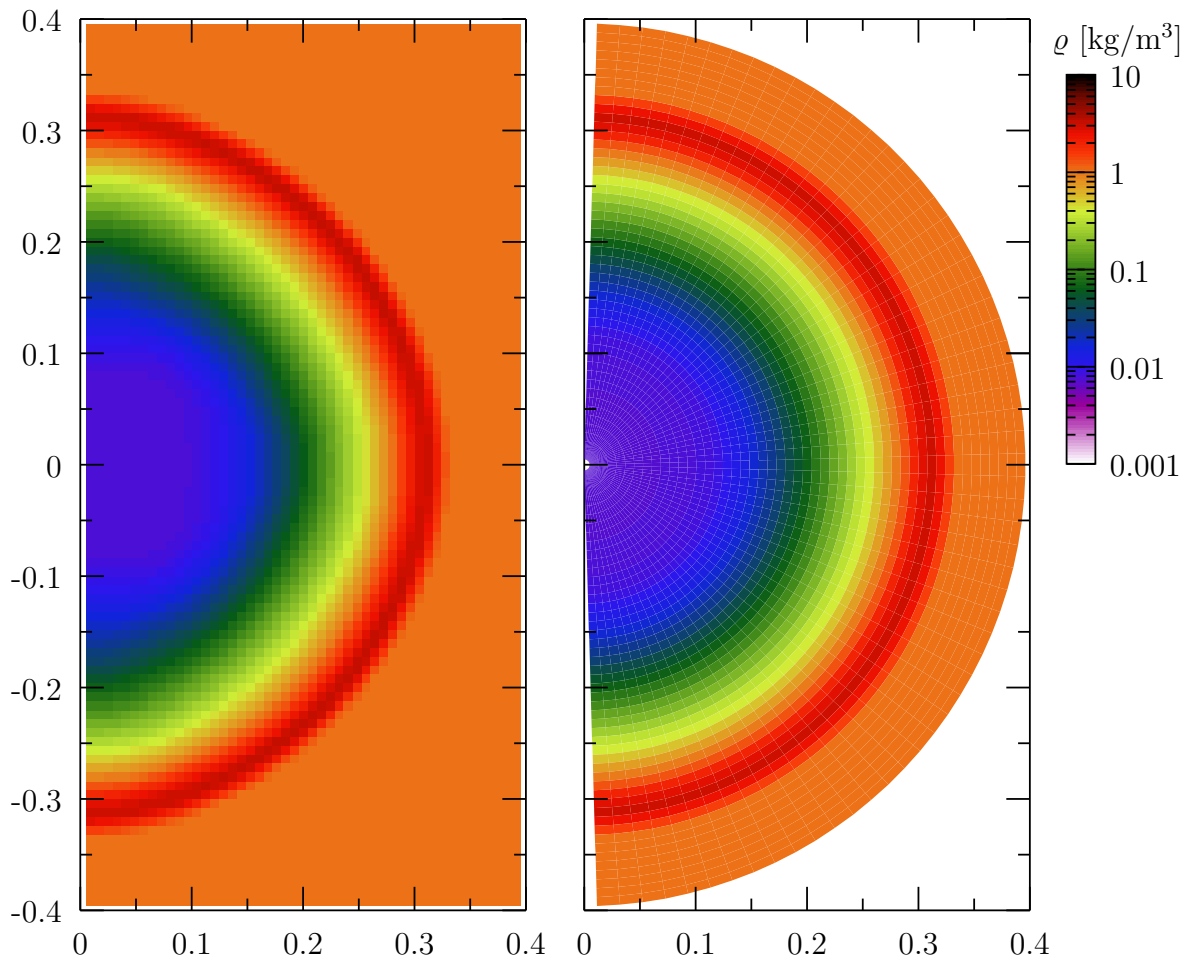


Abbildung 6.19: 3D-Sedov-Explosion, Massendichte zur Zeit $t = 0,05$ s: Vergleich von zylindrischer (links) und sphärischer (rechts) Geometrie bei Verwendung der Mittelpunktsregel; die Längeneinheit ist Meter.

r -Richtung bei den Zylinderkoordinaten und 50×60 in r - und ϑ -Richtung bei den Kugelkoordinaten. Das Rechengebiet (in Metern) erstreckt sich von $z_{\min} = -0.4$ bis $z_{\max} = 0.4$ bzw. $r_{\min} = 10^{-4}$ bis $r_{\max} = 0.4$ in Zylinderkoordinaten sowie $r_{\min} = 10^{-2}$ bis $r_{\max} = 0.4$ bzw. $\vartheta_{\min} = 10^{-3} \pi$ bis $\vartheta_{\max} = 0.999 \pi$ in Kugelkoordinaten.

In den Abbildungen 6.19 und 6.20 sind die Konturen der Massendichten in einer Falschfarbendarstellung für die dreidimensionale Sedov-Explosion in beiden Geometrien und für beide Arten der Flussberechnung zu sehen. Auch hier zeichnet sich wie im zweidimensionalen Fall die Stoßwelle sehr deutlich ab. Die sphärische Symmetrie wird in allen vier Diagrammen ebenfalls wie-

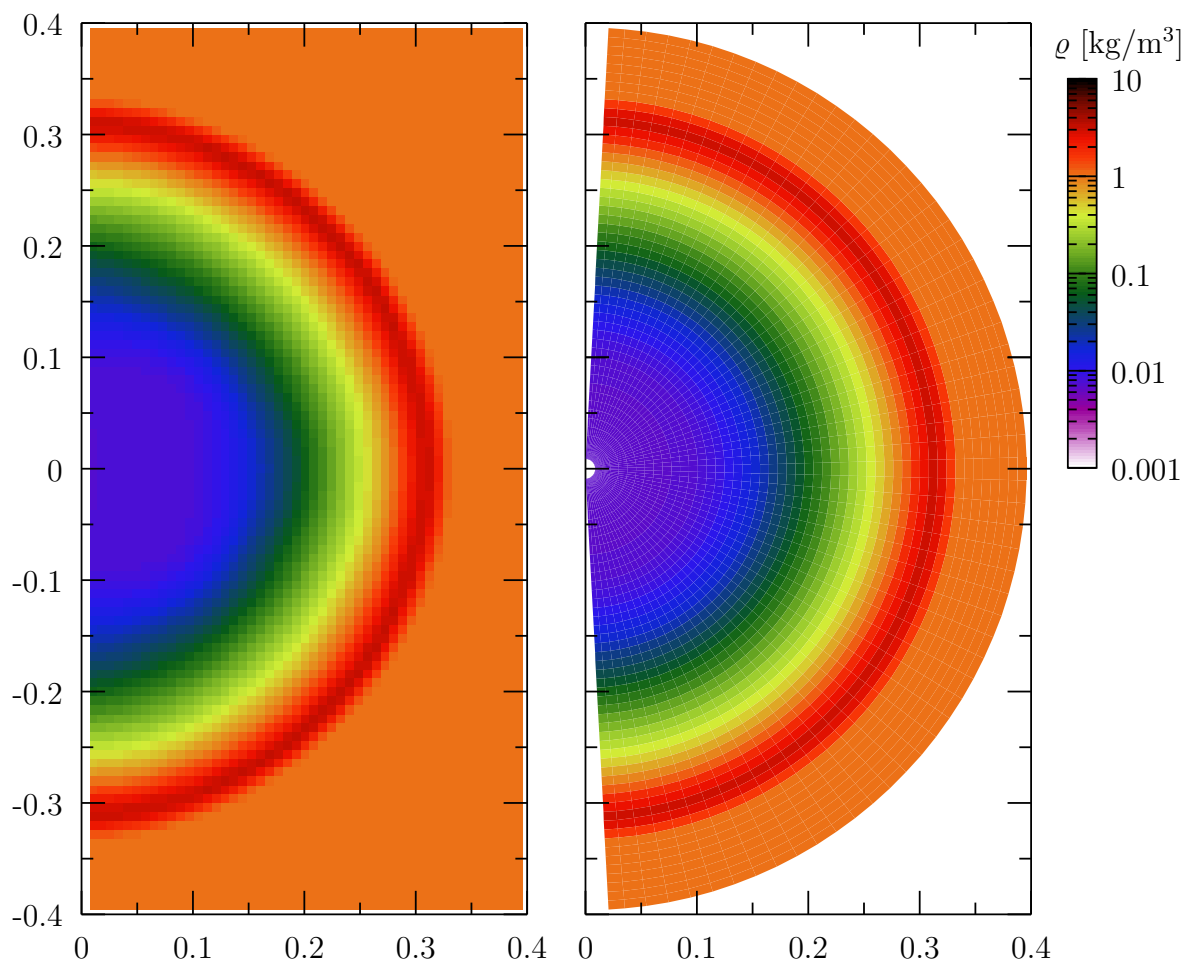


Abbildung 6.20: 3D-Sedov-Explosion, Massendichte zur Zeit $t = 0,05$ s: Vergleich von zylindrischer (links) und sphärischer (rechts) Geometrie bei Verwendung der Trapezregel; die Längeneinheit ist Meter.

dergegeben, wenn auch mit leichten Abweichungen bei den Simulationen in Zylinderkoordinaten.

Etwas deutlicher ist dies in den Abbildungen 6.21 und 6.22 für die Radialgeschwindigkeit zu sehen. Offenbar streuen die Daten in Zylinderkoordinaten für Radien zwischen $r \approx 0,1$ m und $r \approx 0,2$ m stärker als bei kleineren und größeren Radien (abgesehen vom Stoß). Das scheint ein grundsätzliches Problem zu sein, wenn man keine sphärisch-symmetrischen Gitter benutzt. In Ricker u. a. (1999) wurde die Lösung für das Sedov-Problem auf einem dreidimensionalen adaptiven kartesischen Gitter berechnet, und es zeigt sich genau dasselbe Verhalten in der Radialgeschwindigkeitskomponente.

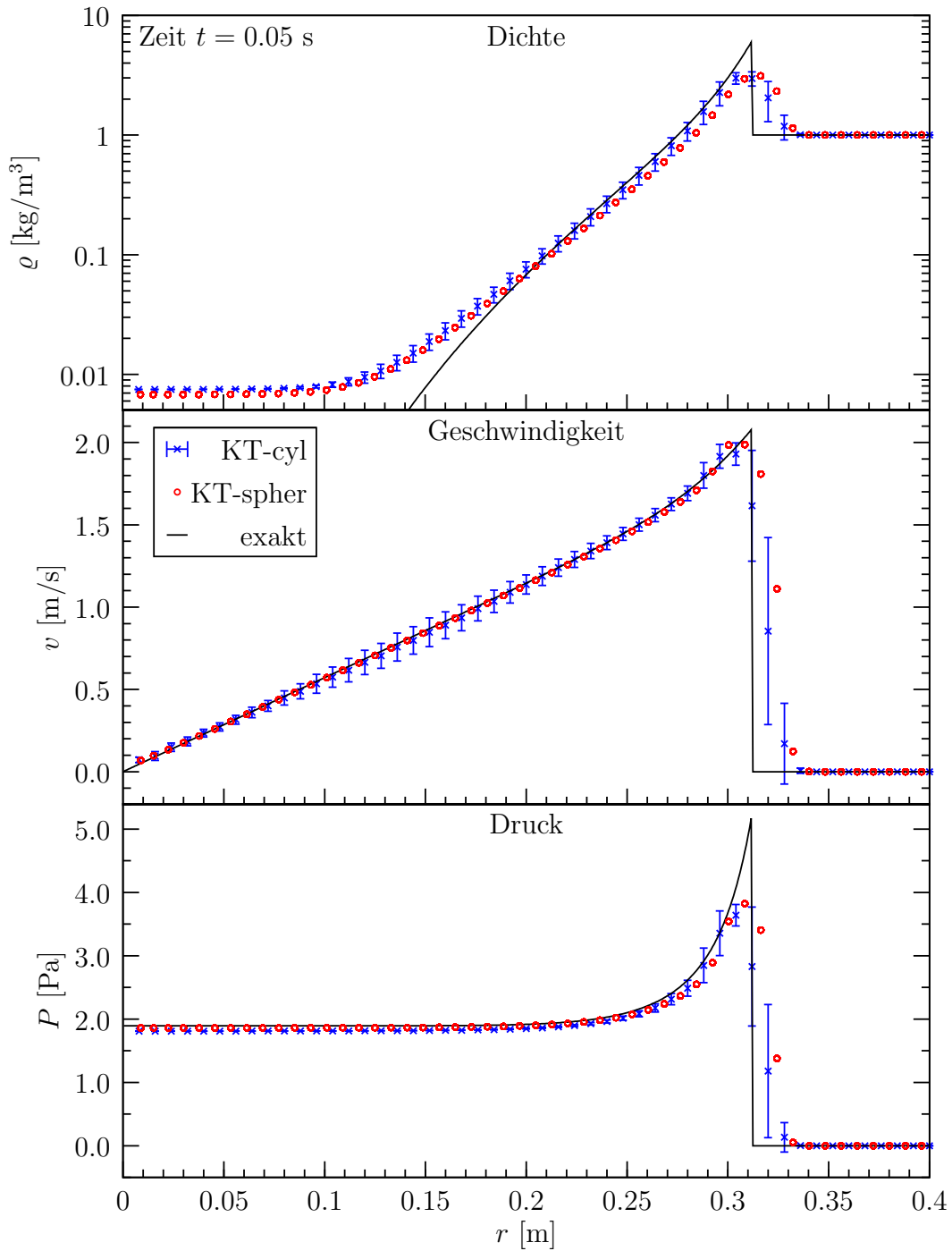


Abbildung 6.21: 3D-Sedov-Explosion zur Zeit $t = 0,05$ s für die *Mittelpunktsregel*: Vergleich der numerischen Simulationen in zylindrischer (KT-cyl) und sphärischer (KT-spher) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

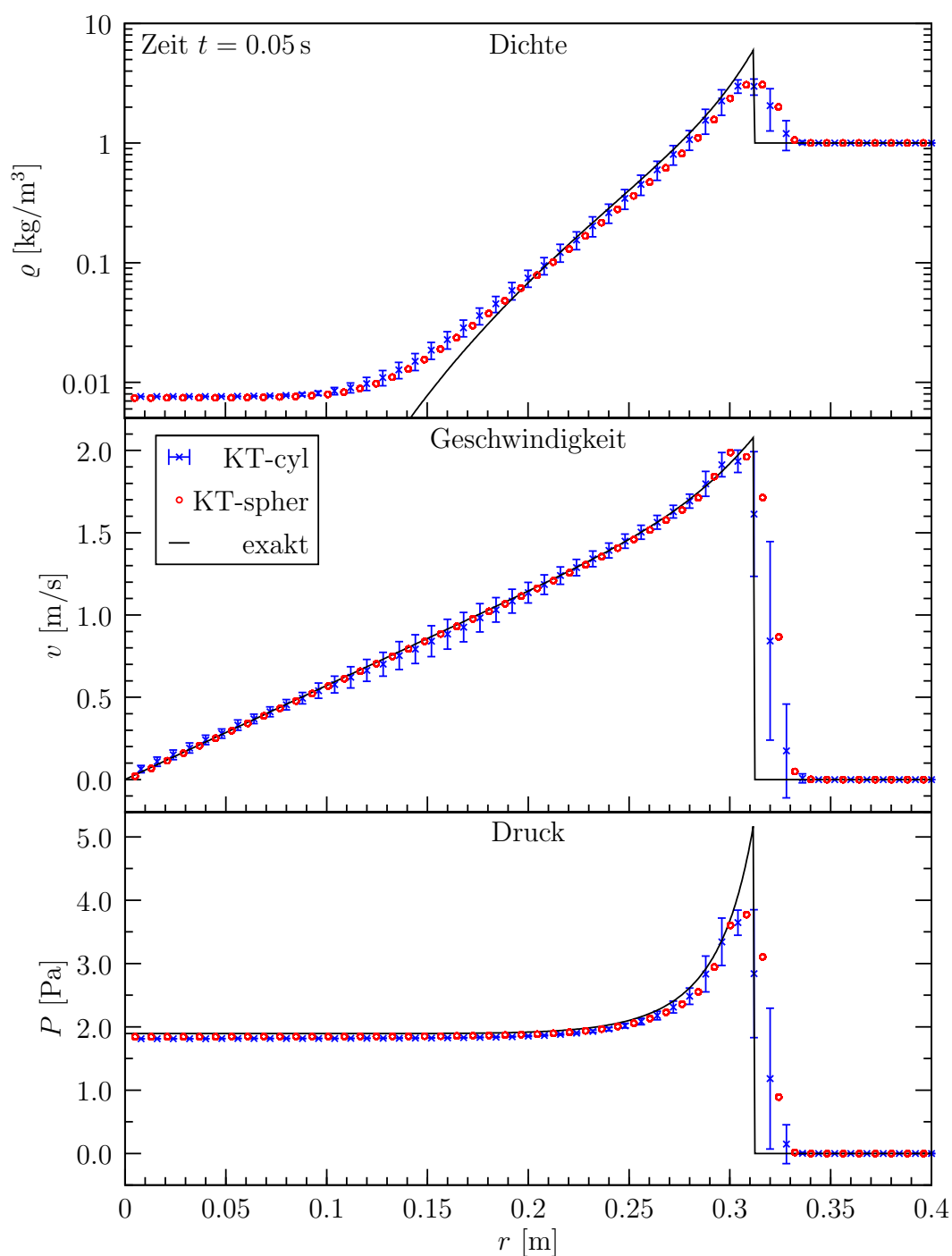


Abbildung 6.22: 3D-Sedov-Explosion zur Zeit $t = 0,05$ s für die *Trapezregel*: Vergleich der numerischen Simulationen in zylindrischer (KT-cyl) und sphärischer (KT-spher) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

Ähnlich wie bei der zweidimensionalen Sedov-Explosion in Abschnitt 6.5.1, findet sich eine Abweichung von der exakten Lösung in der Massendichte. Dies ist auch hier auf die endliche Breite des anfänglichen Druckpulses zurückzuführen und kann durch höhere Auflösungen etwas verbessert werden.

6.6 Bondi-Akkretion

Bislang wurden nur solche Probleme betrachtet, in denen keine externen Kräfte auf das Gas wirken. Das folgende Problem behandelt die Strömung eines dünnen Gases im Schwerfeld einer punktförmigen Masse. Das Gravitationsfeld soll dabei als zeitlich konstant angenommen werden, so dass also weder der Massenzuwachs durch die Akkretion der Gasmassen auf das zentrale Objekt noch die Eigengravitation des Gases einen nennenswerten Einfluss auf die Strömung haben sollen. Im Unendlichen soll das Gas ruhen und die Massendichte ϱ_∞ sowie den Druck P_∞ haben.

Bondi (1951) konnte als erster zeigen, dass für dieses Problem stationäre Lösungen der sphärisch-symmetrischen Eulergleichungen existieren. Für aktuellere Darstellungen des Bondi-Problems der sphärischen Akkretion sei auf Lehrbücher wie Chakrabarti (1990) und Shu (1992) verwiesen. Die exakten Lösungen können, wie schon beim Sedov-Problem, nur implizit angegeben werden, lassen sich aber mit einem einfachen Verfahren zur Nullstellensuche numerisch beliebig genau bestimmen.

In die Lösungen geht die Akkretionsrate als ein freier Parameter ein. Verlangt man jedoch von den Lösungen, dass sie transsonisch sind, also im Unendlichen ruhen und näher am akkretierenden Objekt mit Überschallgeschwindigkeit strömen, so existiert nur genau eine kritische Akkretionsrate.

Eine charakteristische Längenskala für dieses Problem ist der sog. Bondi-Radius

$$r_b = \frac{MG}{c_\infty^2}, \quad \text{mit} \quad c_\infty = \sqrt{\gamma \frac{P_\infty}{\varrho_\infty}}. \quad (6.4)$$

Dabei ist M die akkretierende Masse und G die Newtonsche Gravitationskonstante. Für alle Simulationen wurden die folgenden Parameter fest gewählt:

$$\begin{aligned} M &= 10^{38} \text{ kg} \approx 5 \cdot 10^7 M_\odot, & P_\infty &= 10^{-12} \text{ Pa}, \\ \gamma &= 1,4, & \varrho_\infty &= 10^{-20} \text{ kg/m}^3. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Daraus ergeben sich die Schallgeschwindigkeit im Unendlichen und der Bondi-Radius

$$c_\infty = 11,83 \text{ km/s}, \quad r_b = 4,77 \cdot 10^{19} \text{ m}.$$

Mit Hilfe der Zentralmasse berechnet man eine Freie-Fall-Zeitskala von

$$t_{\text{ff}} = \sqrt{\frac{r_{\text{b}}^3}{MG}} \approx 4,0 \cdot 10^{15} \text{ s} \approx 1,3 \cdot 10^8 \text{ a.} \quad (6.6)$$

Bei allen bisher durchgeführten numerischen Tests wurde auf Standardrandbedingungen wie verschwindende Gradienten oder reflektierende Ränder zurückgegriffen. Dies ist beim Bondi-Problem nicht möglich. Genau definierte Bedingungen an den Rändern sind zwingend erforderlich, will man stationäre Lösungen erhalten. Dies ist insbesondere in Geometrien, die an den Rändern nicht die sphärische Symmetrie widerspiegeln, ein Problem.

Damit man die numerischen Resultate mit den exakten Lösungen vergleichen kann, muss man am äußeren Rand – der bei einem endlichen Rechengebiet klarerweise nicht im Unendlichen liegen kann – genau die Werte der stationären Lösung an diesem Rand vorgeben. Da man es dort mit einer Unterschallströmung zu tun hat, läuft allerdings eine Charakteristik aus dem Rechengebiet hinaus. Daher sollte man *eine* Größe am Rand durch Extrapolation von Daten aus dem Inneren des Rechengebiets gewinnen.

Grundsätzlich ist es möglich, die Randbedingungen sowohl für die primitiven als auch für die konservativen Variablen zu stellen. Es hat sich allerdings gezeigt, dass es für das Bondi-Problem von Vorteil ist, dafür die konservativen Variablen zu wählen, da die Lösungen dann etwas schneller gegen die stationären Lösungen konvergieren. Es wurden also bei allen Simulationen Dichte, Gesamtenergie und die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zum Rand aus den exakten Lösungen vorgegeben, während die Tangentialgeschwindigkeit mit Hilfe von Daten aus dem Rechengebiet extrapoliert wurde.

Am inneren Rand soll die Strömung mit Überschallgeschwindigkeit frei ausströmen können. In einem solchen Fall laufen alle Charakteristiken aus dem Rechengebiet hinaus, und daher müssen alle Daten durch Extrapolation aus dem Inneren des Rechengebiets gewonnen werden.

6.6.1 Polarkoordinaten

Wegen des zusätzlichen Kraftterms müssen die Gleichungssysteme (6.2) und (6.3) um einen Quellterm auf der rechten Seite ergänzt werden. Die externe Kraft ist in diesem Test allein die Gravitationskraft der zentralen akkretierenden Masse. Die dadurch bewirkte Beschleunigung ist durch Gl. (2.5) gegeben. Spezialisiert man auf die hier behandelten kartesischen und polaren

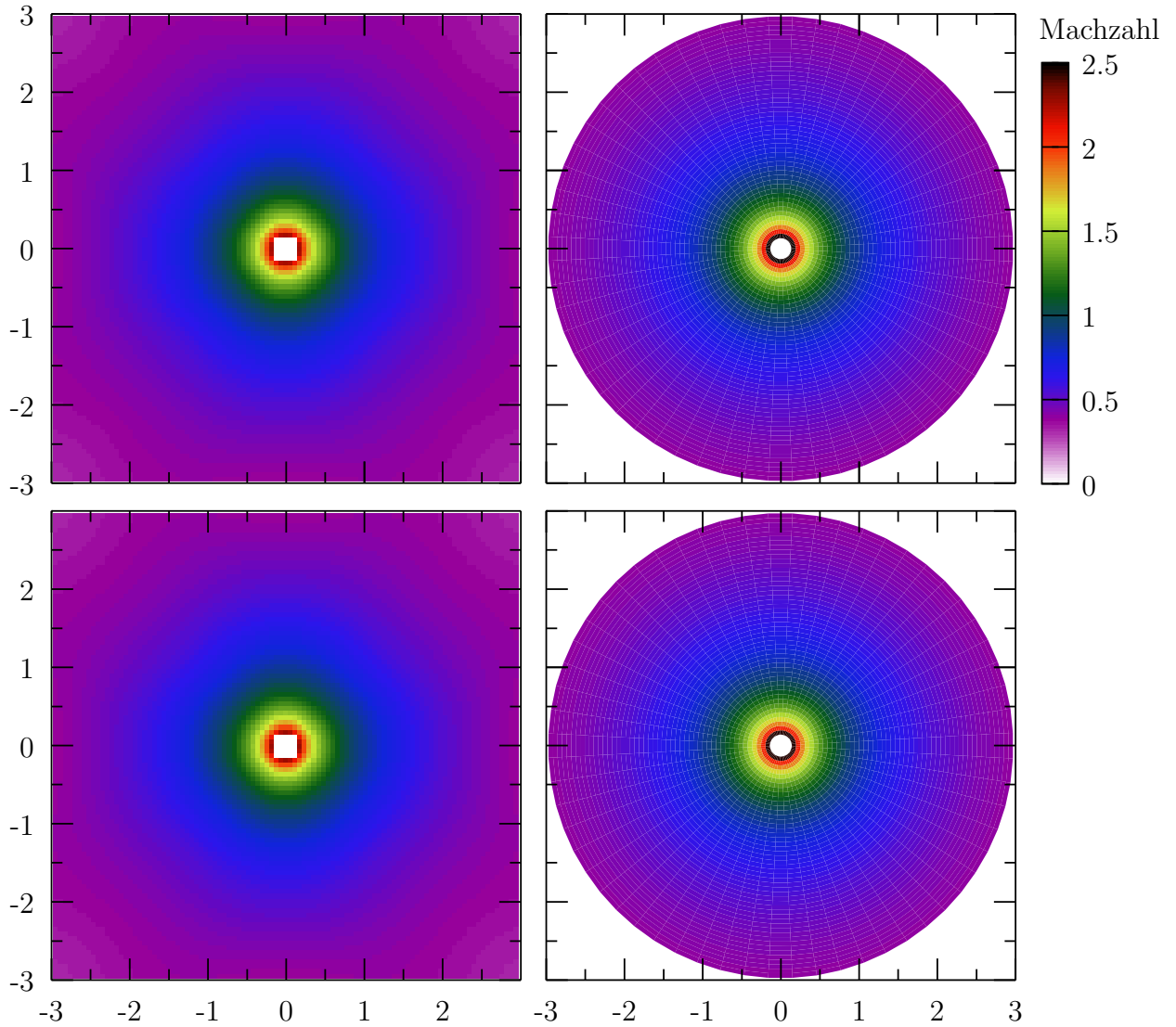


Abbildung 6.23: 2D-Bondi-Akkretion, Machzahl zur Zeit $t = 25 t_{\text{ff}}$: Vergleich von kartesischer (links) und polarer (rechts) Geometrie bei Verwendung der Mittelpunktsregel (oben) und Trapezregel (unten) für die Flussintegrale; die Längeneinheit ist der Bondi-Radius r_b .

Koordinatensysteme, so erhält man die Vektoren der Gravitationsbeschleunigungen

$$\mathbf{f}_{\text{grav, cart}} = -\frac{MG}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_{\text{grav, polar}} = -\frac{MG}{r^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

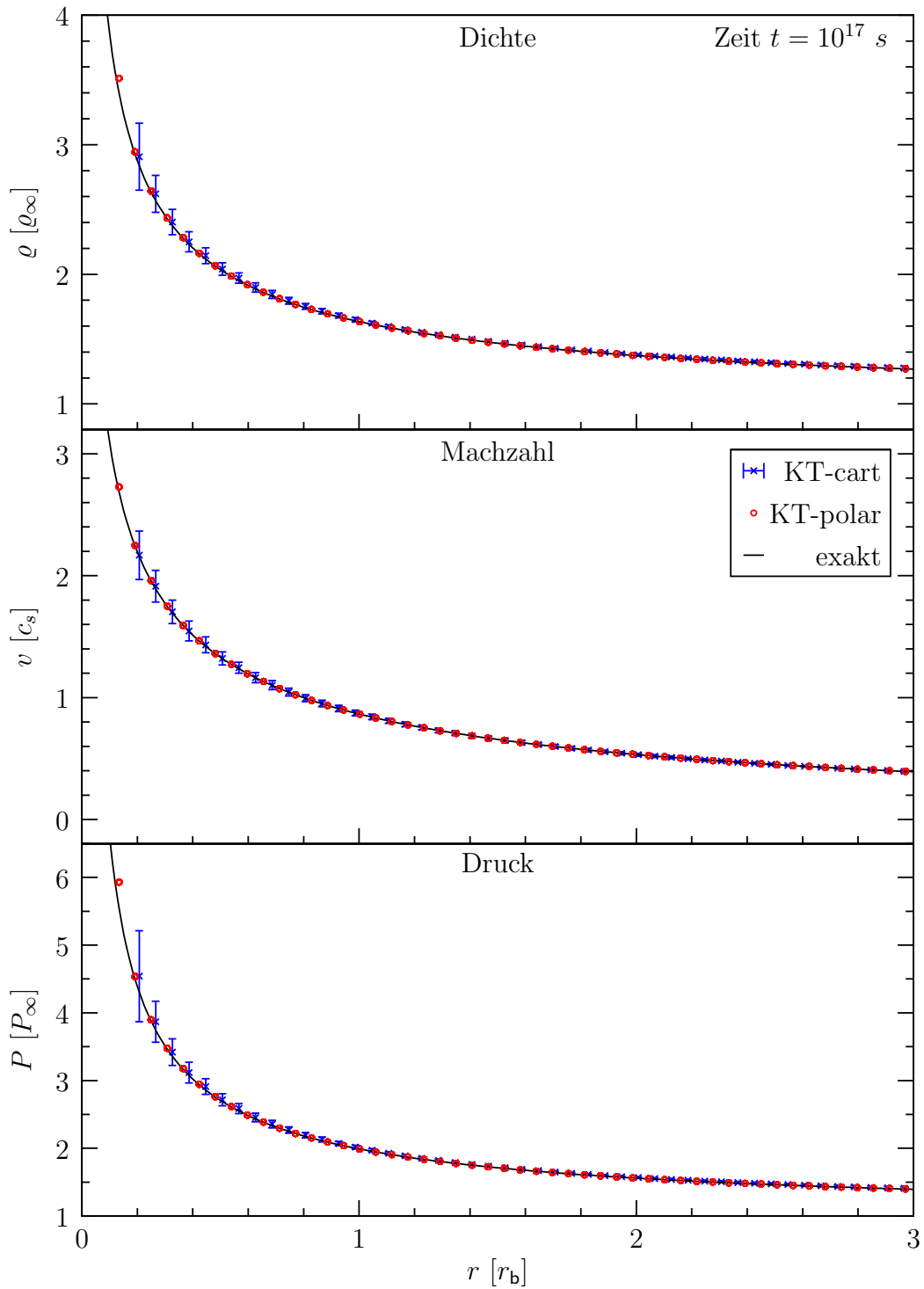


Abbildung 6.24: 2D-Bondi-Akkretion für die *Mittelpunktsregel* bei $t = 25 t_{\text{ff}}$: Vergleich der numerischen Simulationen in kartesischer (KT-cart) und polarer (KT-polar) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

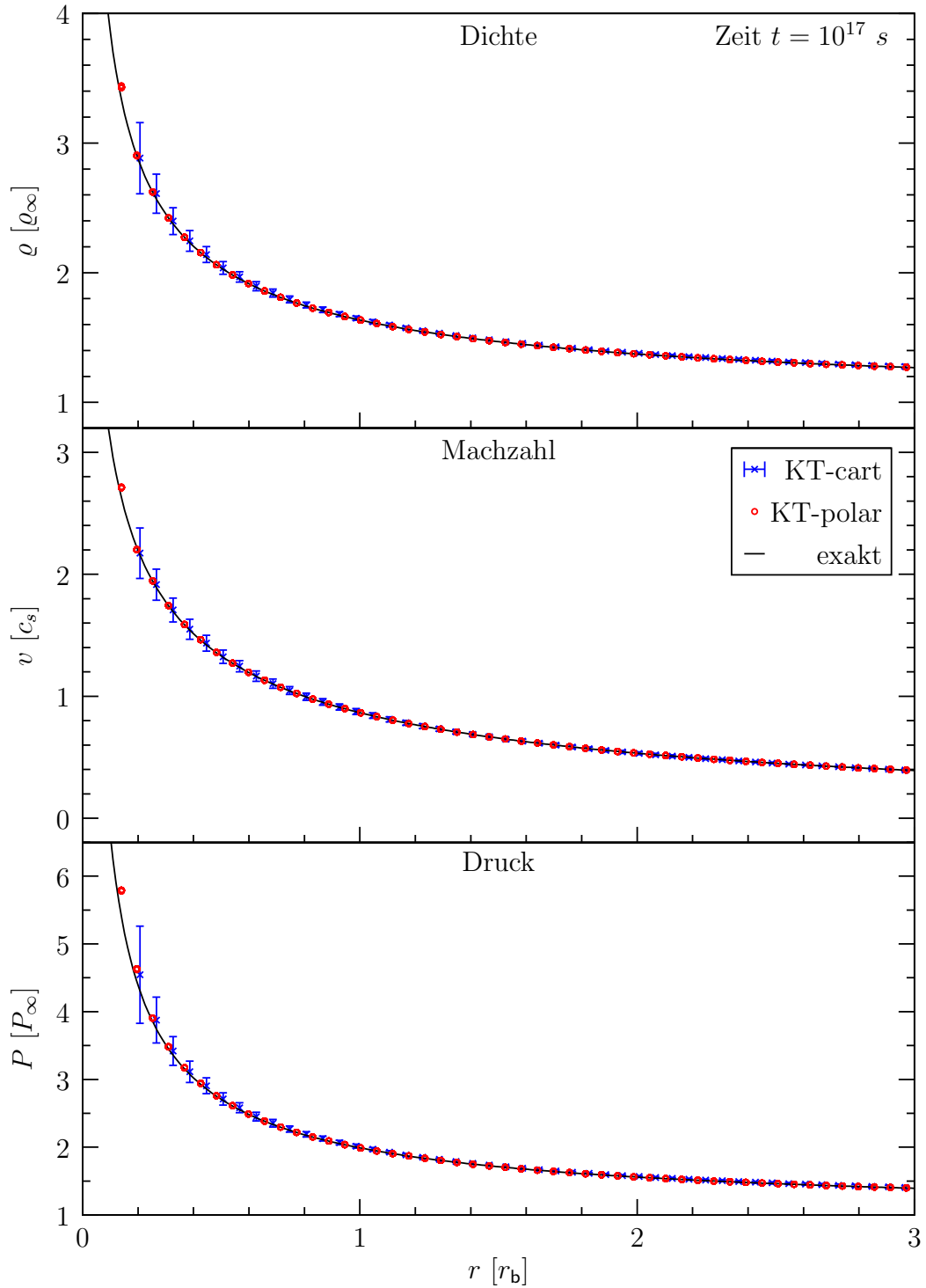


Abbildung 6.25: 2D-Bondi-Akkretion für die *Trapezregel* bei $t = 25 t_{\text{ff}}$: Vergleich der numerischen Simulationen in kartesischer (KT-cart) und polarer (KT-polar) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

und daher für die Quelltermvektoren

$$\mathbf{S}_{\text{cart}} = -\varrho \frac{MG}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ x \\ y \\ xu + yv \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{\text{polar}} = -\varrho \frac{MG}{r^2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ v_r \end{bmatrix}. \quad (6.8)$$

Als Anfangsbedingung wurde das Rechengebiet mit konstanter Dichte $\varrho_0 = 10^{-20} \text{ kg/m}^3$ und einem konstanten Druck von $P_0 = 10^{-12} \text{ Pa}$ initialisiert. Die Geschwindigkeiten wurden überall auf null gesetzt. Die Randbedingungen wurden so gestellt, wie es im einführenden Abschnitt geschildert wurde. Damit am inneren Rand das Gas mit Überschallgeschwindigkeit ausströmen kann, wurde ein kleiner Bereich um den Ursprung der Koordinatensysteme ausgespart. Die Daten auf dem Rand dieses Bereichs wurden durch Extrapolation aus dem Rechengebiet gewonnen.

Damit ergeben sich für das zweidimensionale Bondi-Problem nach etwa $10^{17} \text{ s} \approx 100 t_{\text{ff}}$ stationäre Lösungen. In Abbildung 6.23 ist die Radialgeschwindigkeit in Einheiten der Schallgeschwindigkeit in einem Falschfarbendiagramm für die Simulationsergebnisse in kartesischer und polarer Geometrie zu sehen. In den kartesischen Diagrammen sieht man, wie schon bei der Sedov-Explosion, leichte Abweichungen von der radialen Symmetrie. Bei diesem Test kommt noch erschwerend hinzu, dass sowohl der innere als auch der äußere Rand auf dem kartesischen Gitter die Symmetrie des Problems nicht widerspiegeln. Es spricht daher für die Wahl der Randbedingungen, dass sich dennoch eine weitestgehend radialsymmetrische Strömung einstellt.

Im direkten quantitativen Vergleich mit der exakten Lösung (Abbn. 6.24 und 6.25) finden sich ebenfalls gute Übereinstimmungen. Hier wurden, wie schon zuvor bei der Sedov-Explosion, die Daten der kartesischen Simulationen in Ringen zusammengefasst, um die Darstellung übersichtlicher zu gestalten. Der eingetragene Fehler ist wiederum rein statistisch, so dass die großen Fehlerbalken nahe dem Ursprung lediglich auf die geringe Anzahl an Gitterpunkten in diesem Bereich zurückzuführen sind.

6.6.2 Zylinder- und Kugelkoordinaten

Bei der dreidimensionalen Bondi-Akkretion werden, wie schon in Abschnitt 6.5.2 für die Sedov-Explosion beschrieben, die Eulergleichungen für ein rotationssymmetrisches Problem ohne Drehimpuls gelöst. Es sind lediglich die Gravitationsterme hinzuzufügen. Mit Gleichung (2.5) lauten diese Quellter-

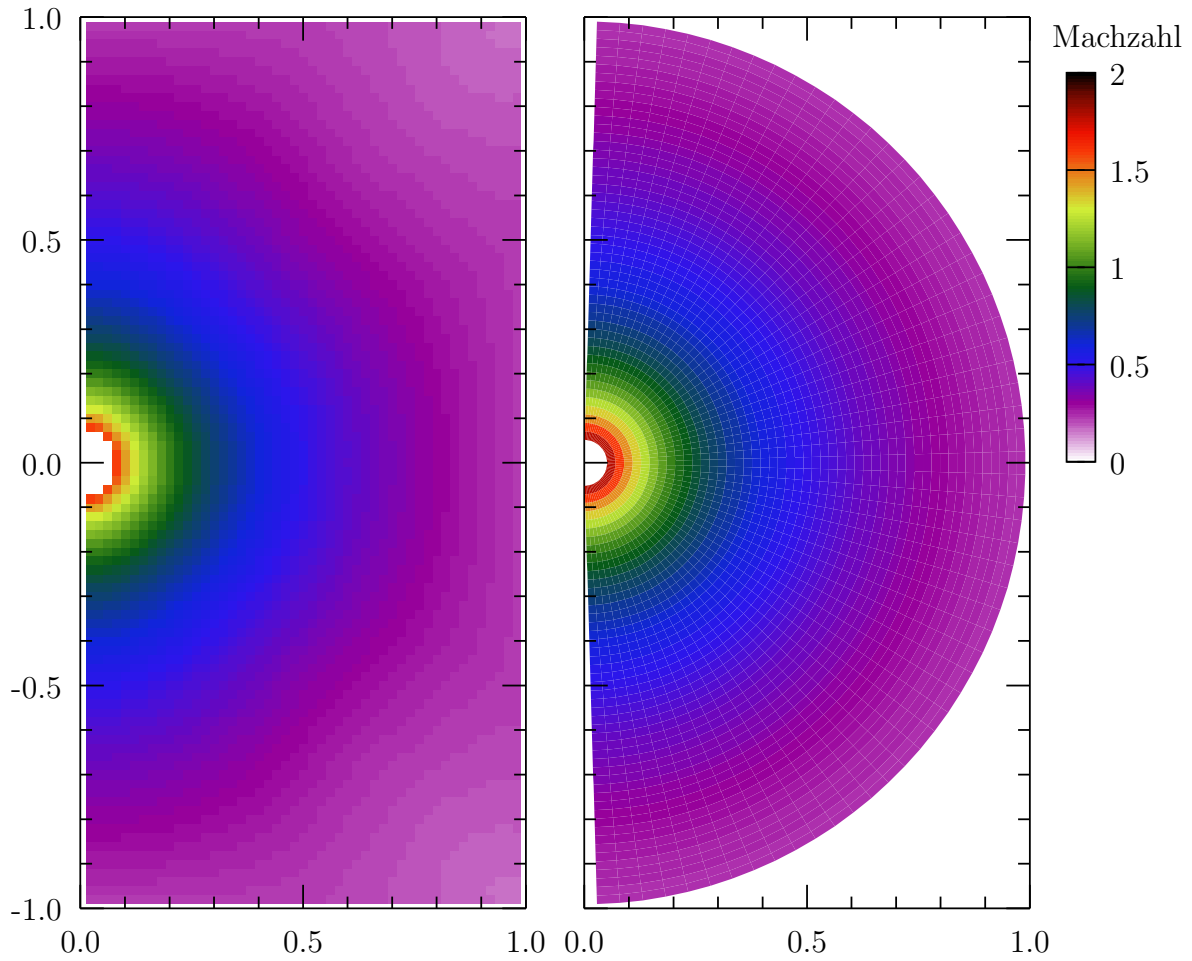


Abbildung 6.26: 3D-Bondi-Akkretion, Radialgeschwindigkeit in Einheiten von c_s zur Zeit $t = 6, 25 t_{\text{ff}}$: Vergleich von zylindrischer (links) und sphärischer (rechts) Geometrie bei Verwendung der Mittelpunktsregel; die Längeneinheit ist der Bondi-Radius r_b .

me für Zylinder- und Kugelkoordinaten

$$\mathbf{S}_{\text{cyl}} = -\varrho \frac{MG}{(z^2 + r^2)^{3/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ z \\ r \\ 0 \\ zv_z + rv_r \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{\text{spher}} = -\varrho \frac{MG}{r^2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ v_r \end{bmatrix}. \quad (6.9)$$

Die Anfangsbedingungen wurden genauso wie beim zweidimensionalen Bondi-Problem gesetzt. Bei der Wahl der Randbedingungen ist im Unterschied zu den zweidimensionalen Simulationen zu beachten, dass für Kugel- und Zy-

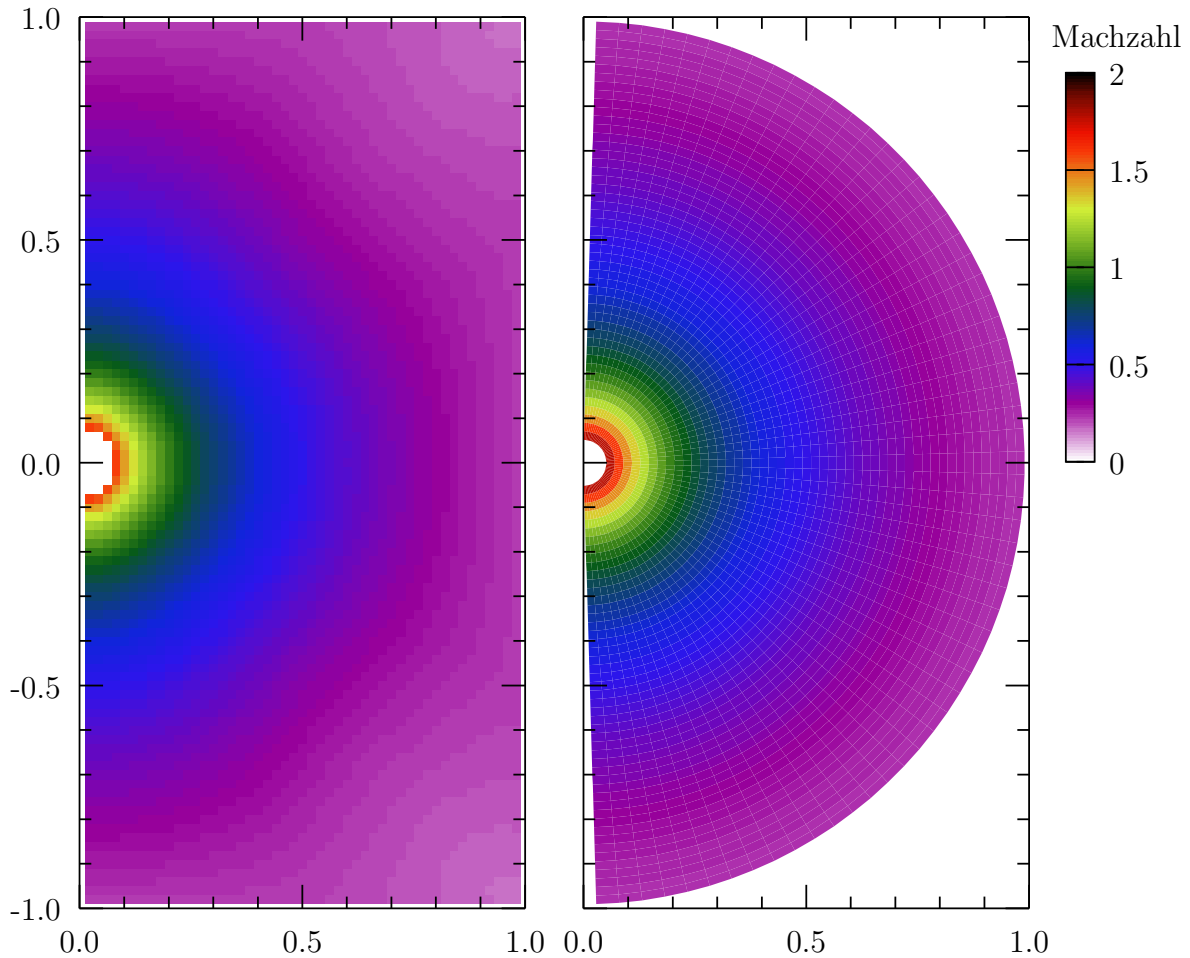


Abbildung 6.27: 3D-Bondi-Akkretion, Radialgeschwindigkeit in Einheiten von c_s zur Zeit $t = 6,25 t_{ff}$: Vergleich von zylindrischer (links) und sphärischer (rechts) Geometrie bei Verwendung der Trapezregel; die Längeneinheit ist der Bondi-Radius r_b .

linderkoordinaten an der Symmetrieachse des Koordinatensystems reflektierende Ränder implementiert werden müssen. Damit das Gas aus dem Rechengebiet ausströmen kann, ist um den Ursprung herum wieder ein Bereich ausgespart, an dessen Rand die Daten aus dem inneren des Rechengebiets extrapoliert wurden, um einen Überschall-Ausfluss zu realisieren.

Für das dreidimensionale Bondi-Problem finden sich mit diesen Anfangs- und Randbedingungen schon nach etwa $t = 6,25 t_{ff}$ stationäre Lösungen. In den Abbildungen 6.26 und 6.27 sind die Falschfarbendiagramme der Radialgeschwindigkeit in Einheiten der Schallgeschwindigkeit für vier verschiedene

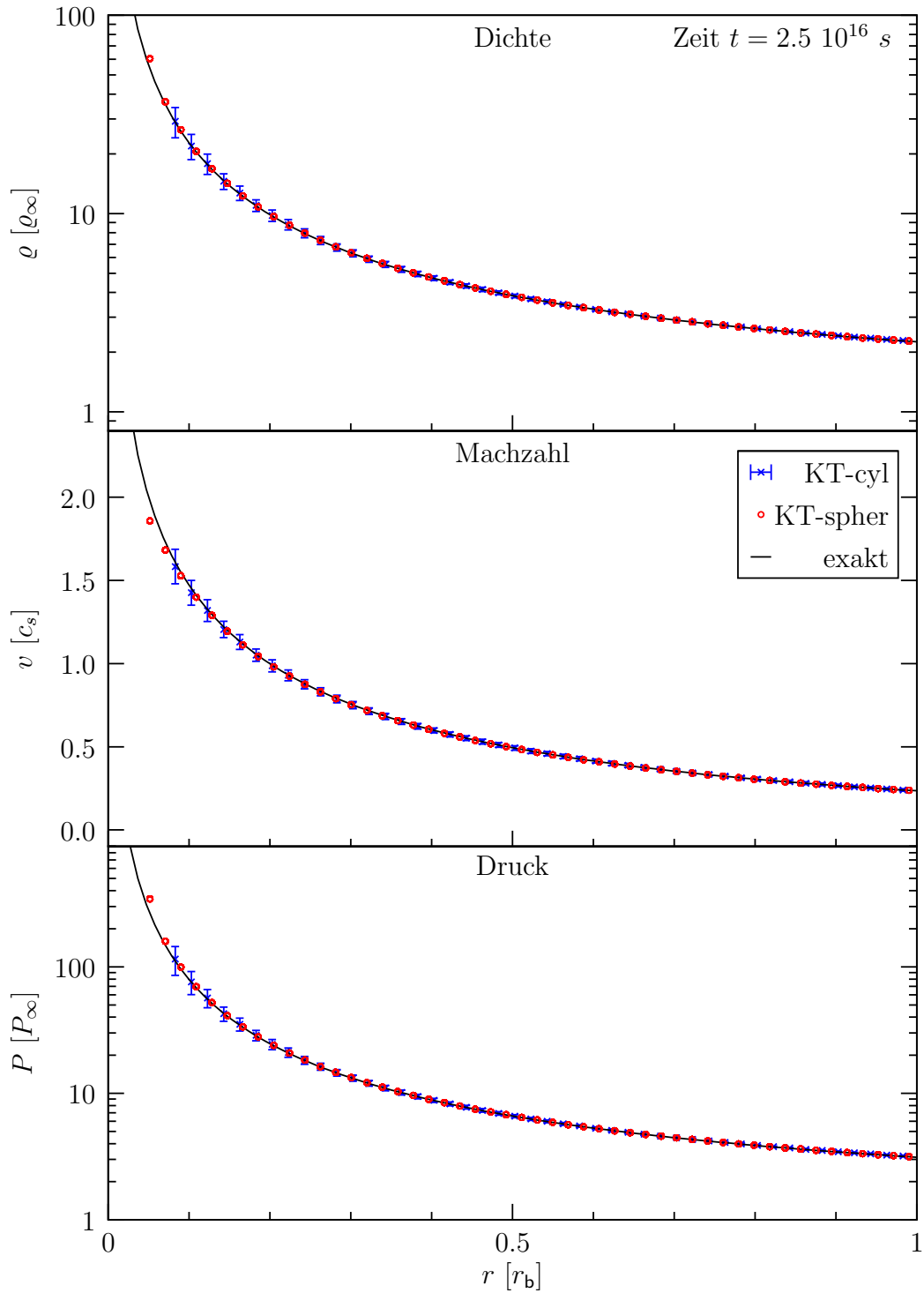


Abbildung 6.28: 3D-Bondi-Akkretion für die *Mittelpunktsregel* bei $t = 6,25 t_{\text{ff}}$: Vergleich der numerischen Simulationen in zylindrischer (KT-cyl) und sphärischer (KT-spher) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

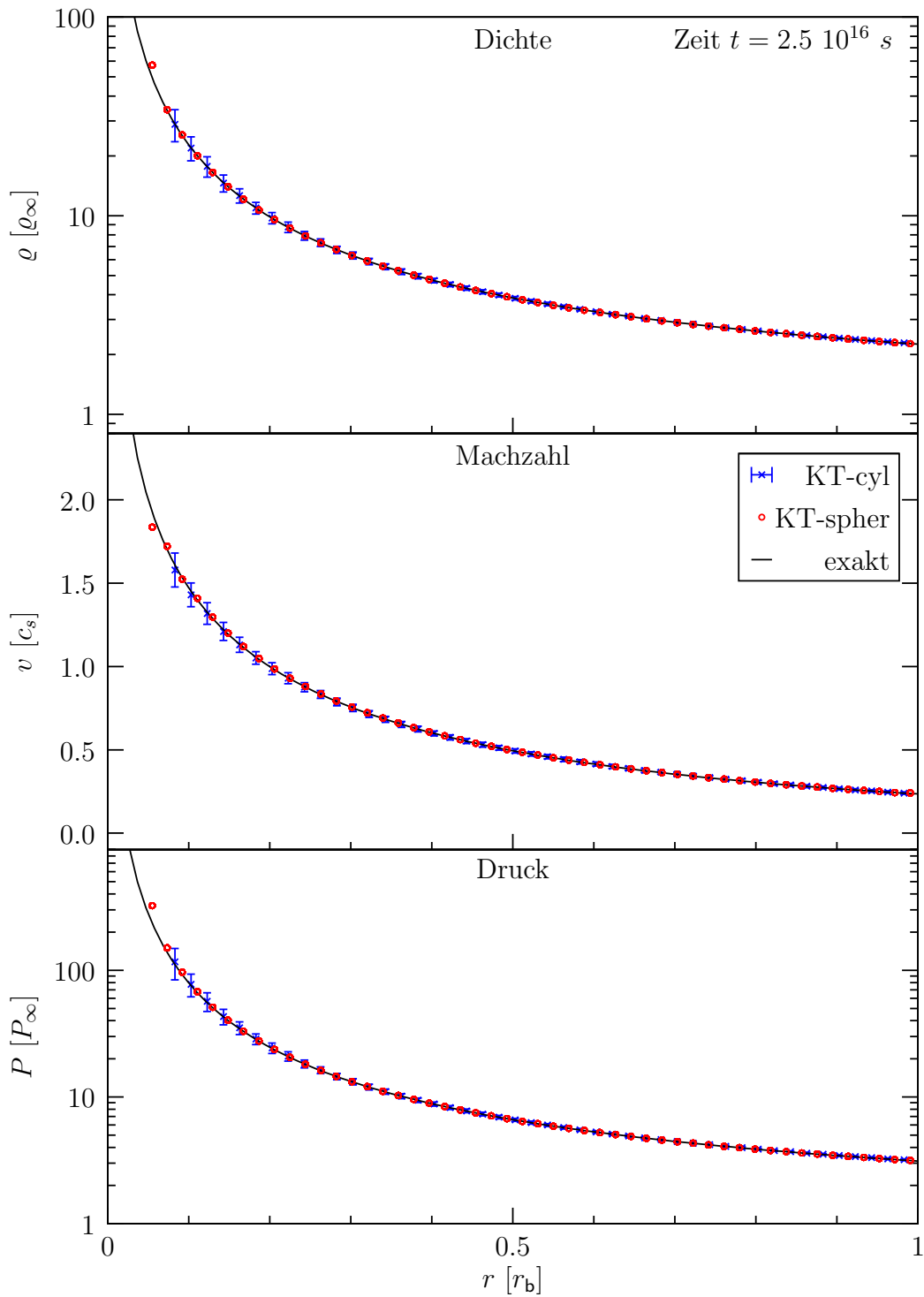


Abbildung 6.29: 3D-Bondi-Akkretion für die *Trapezregel* bei $t = 6, 25 t_{\text{ff}}$: Vergleich der numerischen Simulationen in zylindrischer (KT-cyl) und sphärischer (KT-spher) Geometrie mit der exakten Lösung; beide Simulationen mit primitiver Rekonstruktion.

Simulationen in Zylinder- und Kugelkoordinaten abgebildet. Am linken Rand der Diagramme befindet sich die Koordinatenachse.

Hier sieht man schon etwas deutlicher die Abweichungen von der Kugelsymmetrie in den Simulationen mit zylindrischer Geometrie. Dennoch werden die wesentlichen Eigenschaften der stationären Lösung richtig reproduziert, wie der Vergleich mit den exakten Lösungen in den Abbildungen 6.28 und 6.29 zeigt.

6.7 Kollaps einer rotierenden Gaskugel

In diesem letzten Test soll die lokale Erhaltung des Drehimpulses überprüft werden. Wie Norman u. a. (1980) gezeigt haben, kann eine zu große künstliche Viskosität in einem numerischen Verfahren zur Lösung von zweidimensionalen gasdynamischen Problemen dazu führen, dass Massen- und Drehimpulstransport entkoppeln. Dies ist ein rein numerisches Problem. Die Folge ist, dass die Drehimpulserhaltung verletzt wird.

Nun ist es nicht möglich, ein numerisches Verfahren zu entwickeln, das keinerlei künstliche Viskosität mit sich bringt. Man kann lediglich versuchen, diese Effekte so klein wie möglich zu halten. Der folgende Test findet sich in etwas anderer Form ebenfalls in Norman u. a. (1980). Deren Simulationen für den Kollaps einer rotierenden Gaswolke schließen allerdings deren Eigengravitation mit ein, was zur Zeit für das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren noch nicht möglich ist. Man kann diesen Test allerdings auch so abändern, dass man die rotierende Wolke dem Gravitationsfeld einer zentralen Punktmasse aussetzt und die Eigengravitation vernachlässigt. Auch dann gilt nämlich folgender Zusammenhang zwischen dem Massenspektrum eines rotierenden nicht-viskosen Gases und dessen spezifischem Drehimpuls:

$$M(\ell) = \int_0^{\ell} dM(\ell'). \quad (6.10)$$

Die Funktion $M(\ell)$ gibt also den Anteil an der gesamten Gasmasse an, der in Massenelementen mit spezifischem Drehimpuls kleiner oder gleich ℓ enthalten ist. Für eine homogene rotierende Gaskugel mit Radius R_0 , Masse M_0 und konstanter Rotationsfrequenz ω_0 kann man diese Funktion explizit angeben:

$$M(\ell) = M_0 \left(1 - \left(1 - \frac{\ell}{\omega_0 R_0^2} \right)^{3/2} \right). \quad (6.11)$$

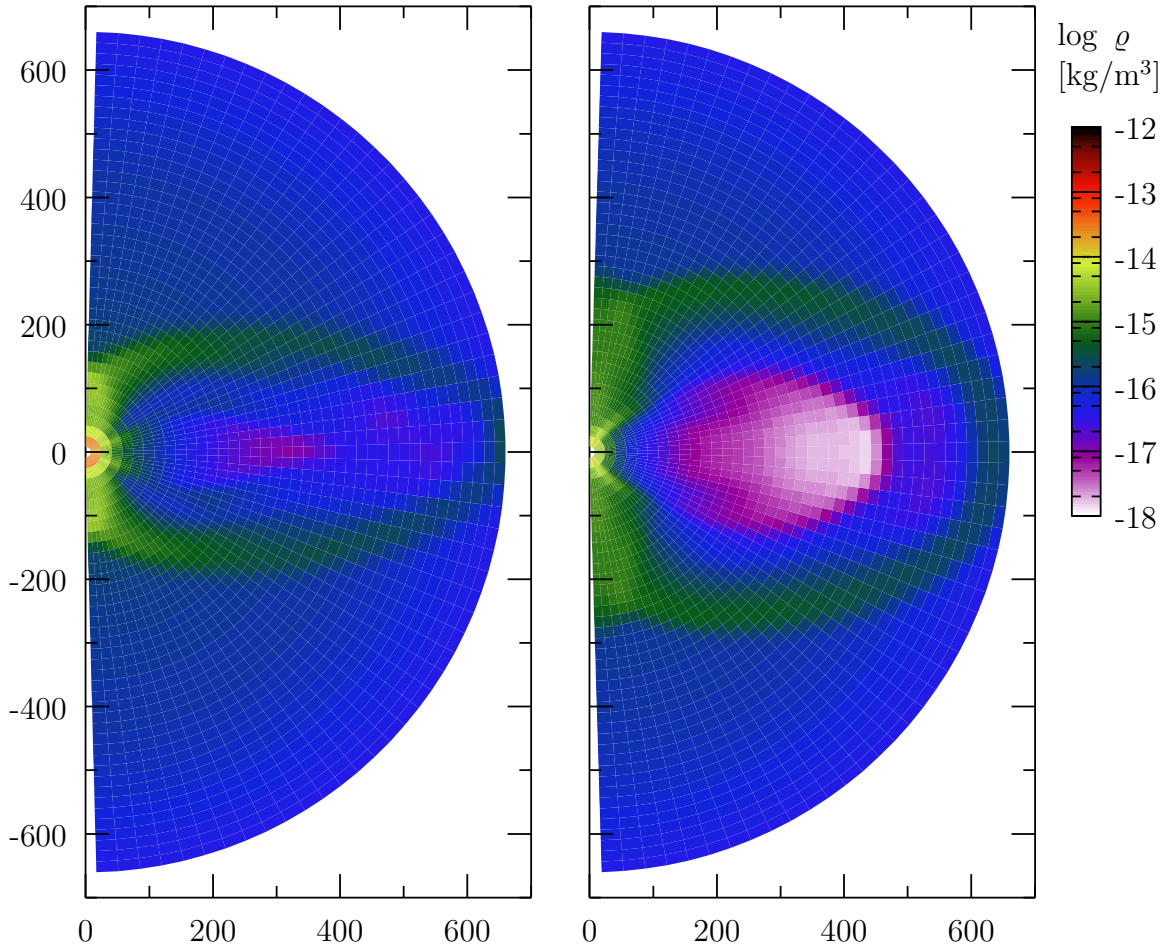


Abbildung 6.30: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, Massendichte zur Zeit $t = 0,44 t_{\text{ff}}$: Vergleich der Resultate von NIRVANA 2.0 (links) und dem KT-Verfahren (rechts) mit mc-Limiter ($\theta = 1,8$) und primitiver Rekonstruktion; die Längeneinheit ist AU.

Initialisiert man nun eine Simulation in einem abgeschlossenen Gebiet mit solch einer homogenen und starr rotierenden Gaskugel, so bedeutet die Aussage (6.10), dass unabhängig von der dynamischen Entwicklung für das Drehimpulsspektrum die Beziehung (6.11) gilt. Eine Abweichung von obigem Spektrum würde auf diffusiven Drehimpulstransport hindeuten.

Für alle Kollapsrechnungen wurden die Parameter Masse des Zentralobjekts M , Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten γ und mittleres Molekulargewicht μ fest gewählt:

$$M = 10^{30} \text{ kg} \approx 0,5 M_{\odot}, \quad \gamma = 1,4, \quad \mu = 0,602 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol.}$$

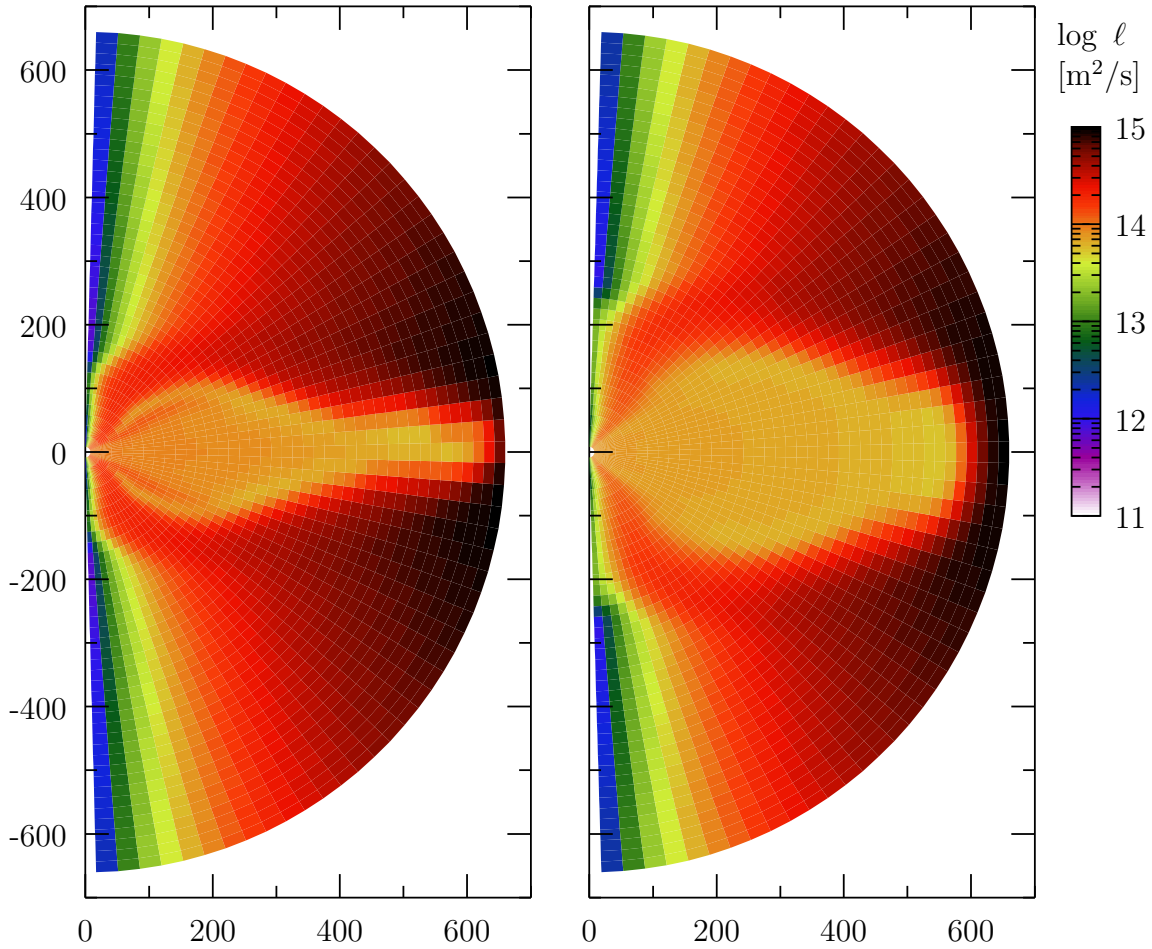


Abbildung 6.31: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, spezifischer Drehimpuls zur Zeit $t = 0,44 t_{\text{ff}}$: Vergleich der Resultate von NIRVANA 2.0 (links) und dem KT-Verfahren (rechts) mit mc-Limiter ($\theta = 1,8$) und primitiver Rekonstruktion; die Längeneinheit ist AU.

Außerdem wurde die Gaskugel mit folgenden Anfangsbedingungen für Dichte, Temperatur und Rotationsfrequenz initialisiert:

$$\varrho_0 = 10^{-16} \text{ kg/m}^3, \quad T_0 = 10 \text{ K}, \quad \omega_0 = 10^{-13} \text{ Hz.}$$

initialisiert. An allen Rändern wurden reflektierende Randbedingungen verwendet, und an der Achse zusätzlich die Azimutgeschwindigkeit auf null gesetzt. Äußerer und innerer Radius der Gaskugel sind

$$r_{\min} = 10^{10} \text{ m}, \quad r_{\max} = 10^{14} \text{ m.}$$

Damit ergibt sich eine Freie-Fall-Zeitskala für dieses Kollapsproblem von etwa

$$t_{\text{ff}} = \sqrt{\frac{r_{\text{max}}^3}{MG}} \approx 1,2 \cdot 10^{11} \text{ s} \approx 3800 \text{ a.} \quad (6.12)$$

Da kein stabiles numerisches Verfahren gänzlich ohne künstliche Viskosität auskommt, ist es wichtig, die mit dem KT-Verfahren gewonnenen Ergebnisse für den Kollaps mit denen anderer Verfahren zu vergleichen. Nur so kann man wirklich einschätzen, wie gut oder schlecht das jeweilige Verfahren ist. Die hier gezeigten Vergleichstests wurden mit dem Programmpaket NIRVANA in der Version 2.0 erzeugt. Das darin von Ziegler (2003) implementierte Verfahren basiert auf den in Norman u. a. (1980) beschriebenen und in Norman und Winkler (1986) verbesserten Methoden für den konsistenten Drehimpulstransport.

Die Abbildungen 6.30 und 6.31 zeigen die Massendichte und den spezifischen Drehimpuls nach einer Laufzeit von etwa $0,44 t_{\text{ff}}$. Die Auflösung beträgt bei beiden Simulationen 40 Zellen in radialer und 60 Zellen in azimuthaler Richtung. Für das KT-Verfahren wurde der mc-Limiter mit einem Parameter $\theta = 1,8$ verwendet, was eine verhältnismäßig geringe künstliche Viskosität bedeutet.

Wie man unschwer erkennt, sind die Ergebnisse weder für die Massendichte noch für den spezifischen Drehimpuls identisch. Die grobe Struktur wird aber von beiden Verfahren ähnlich reproduziert. Ein wichtiger Unterschied ist, dass beim KT-Verfahren in den Zellen nahe dem Ursprung offenbar weniger Masse vorhanden ist. Außerdem scheint es insgesamt weniger Zellen mit geringem spezifischen Drehimpuls zu geben. Beides könnte darauf hindeuten, dass der Drehimpuls beim KT-Verfahren lokal nicht so gut erhalten ist, wie man es mit dem konsistenten Transport erreichen kann.

Wirklich quantifizieren lässt sich dies aber erst, wenn man das Massenspektrum in Abhängigkeit vom spezifischen Drehimpuls in Abbildung 6.32 betrachtet. Zunächst fällt darin auf, dass beim KT-Verfahren tatsächlich weniger Massenelemente mit geringem spezifischen Drehimpuls vorhanden sind als bei NIRVANA. Alldings scheint NIRVANA die Massenfunktion $M(\ell)$ bei $\ell = 6 \cdot 10^{11}$ auch leicht zu überschätzen.

Insgesamt überraschen allerdings die über mehrere Zehnerpotenzen fast identischen Datenpunkte bei so gänzlich unterschiedlichen numerischen Verfahren. Sogar der leichte Einbruch des Spektrums zwischen $\ell \approx 10^{12}$ und $\ell \approx 10^{14}$ wird von beiden Verfahren annähernd gleich wiedergegeben.

Als nächstes soll die Abhängigkeit der lokalen Drehimpulserhaltung von der künstlichen Viskosität untersucht werden. Dazu wurde die gleiche Kollaps-

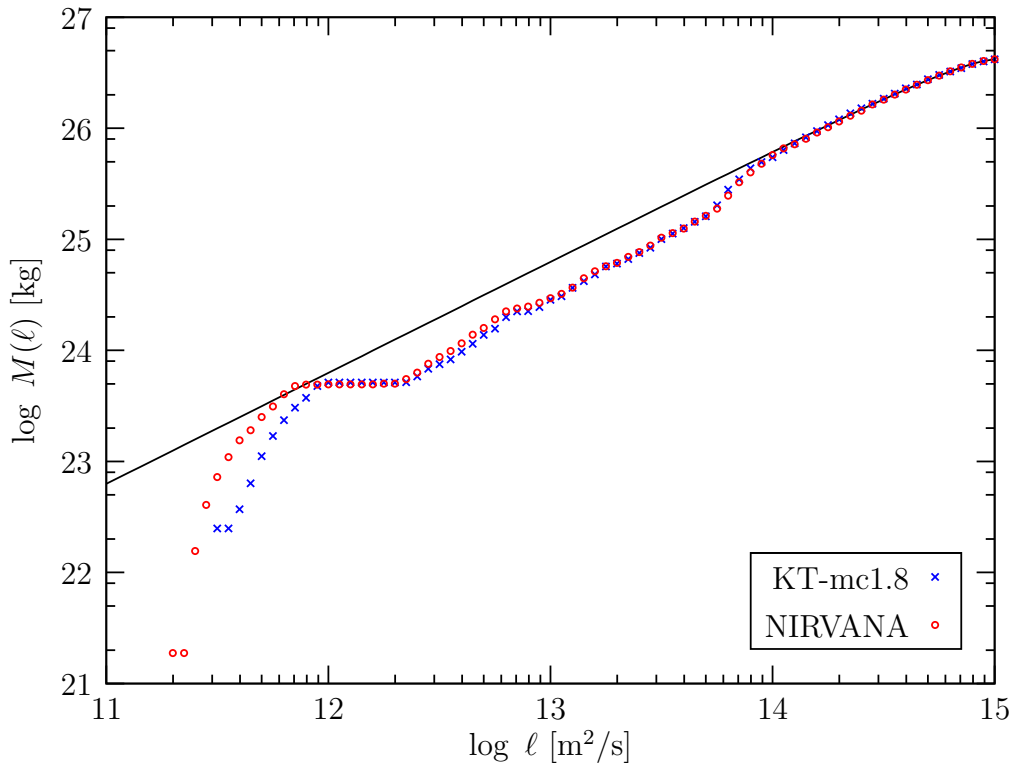


Abbildung 6.32: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, Massenspektrum des spez. Drehimpulses zur Zeit $t = 0,44 t_{\text{ff}}$: Vergleich der Resultate von NIRVANA 2.0 und dem KT-Verfahren mit mc-Limiter ($\theta = 1,8$) und primitiver Rekonstruktion.

mulation mit dem KT-Verfahren und unterschiedlichen Parametern für den mc-Limiter² durchgeführt (Abb. 6.33). Man kann deutlich einen Trend erkennen. Offenbar erhält ein Verfahren mit geringerer künstlicher Viskosität (größere Werte von θ) das Massenspektrum des spezifischen Drehimpulses besser.

Da offenbar die dissipativen Eigenschaften des numerischen Verfahrens einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die Ergebnisse haben, sollte man auch untersuchen, wie sich die Auflösung der Simulation auswirkt. Generell bedeutet nämlich eine höhere Auflösung geringere künstliche Viskosität. Die Resultate in Abbildung 6.34 (unten) zeigen das Massenspektrum des spezifischen Drehimpulses zum etwa gleichen Zeitpunkt³ wie in Abbildung 6.31 für

²für $\theta = 1$ ist der mc-Limiter identisch mit dem minmod-Limiter

³Die Zeitpunkte sind nicht ganz exakt gleich, weil es mit NIRVANA nicht möglich ist, Daten zu einem fest vorgegeben Zeitpunkt herauszuschreiben. Es hängt daher leicht von

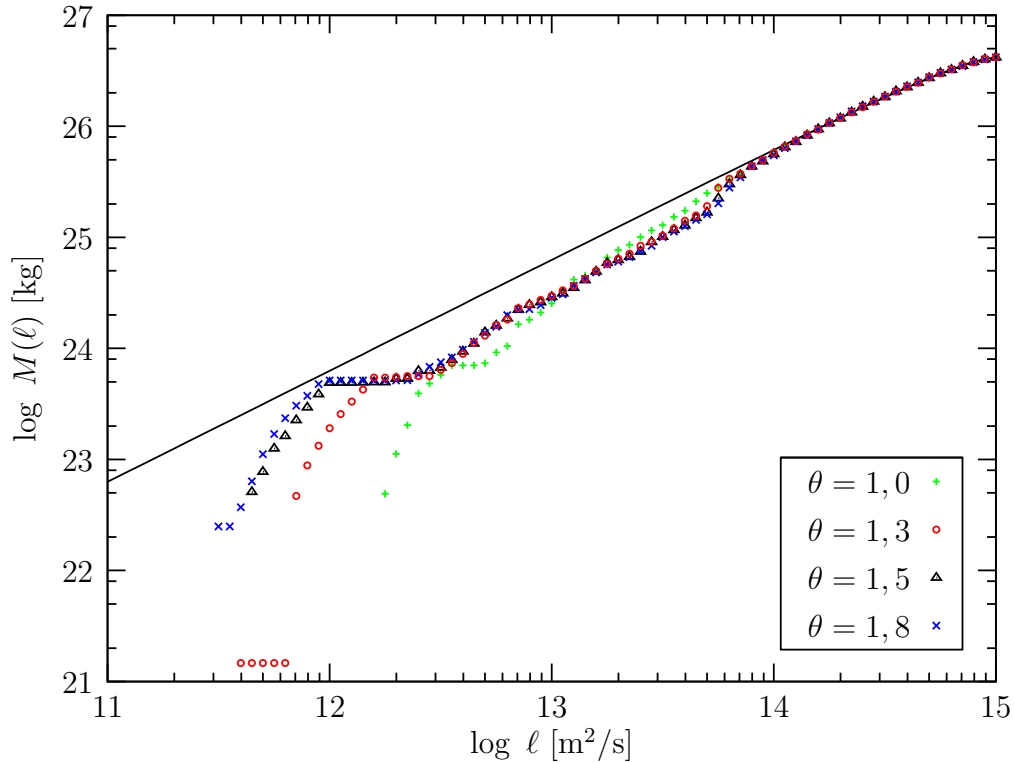


Abbildung 6.33: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, Massenspektrum des spez. Drehimpulses zur Zeit $t = 0,44 t_{\text{ff}}$ für unterschiedlich starke künstliche Viskosität des mc-Limiters; alle Simulationen mit Mittelpunktsregel und primitiver Rekonstruktion.

Simulationen mit einer Auflösung von 80×100 in radialer und azimuthaler Richtung.

Zunächst fällt auf, dass man am unteren Ende des Spektrums etwa eine Zehnerpotenz gewinnt. Der Knick im Spektrum liegt bei den Simulationen mit höherer Auflösung bei $\ell = 10^{11}$ m²/s während er bei denen mit niedriger Auflösung schon bei $\ell = 10^{12}$ m²/s ansetzt. Das deutet auf schwächere künstliche Viskosität hin. Interessant ist ferner, dass der leichte Einbruch am oberen Ende des Spektrums für NIRVANA unabhängig von der Auflösung bei etwa $\ell = 10^{14}$ m²/s liegt. Das KT-Schema liefert für die höhere Auflösung bessere Resultate.

Eine weitere wichtige Erkenntnis im Zusammenhang mit der Erhaltung des Drehimpulses ist, dass offenbar die Dauer der Simulation eine Rolle spielt.

der Simulation ab, zu welchen Zeitpunkten Daten ausgegeben werden.

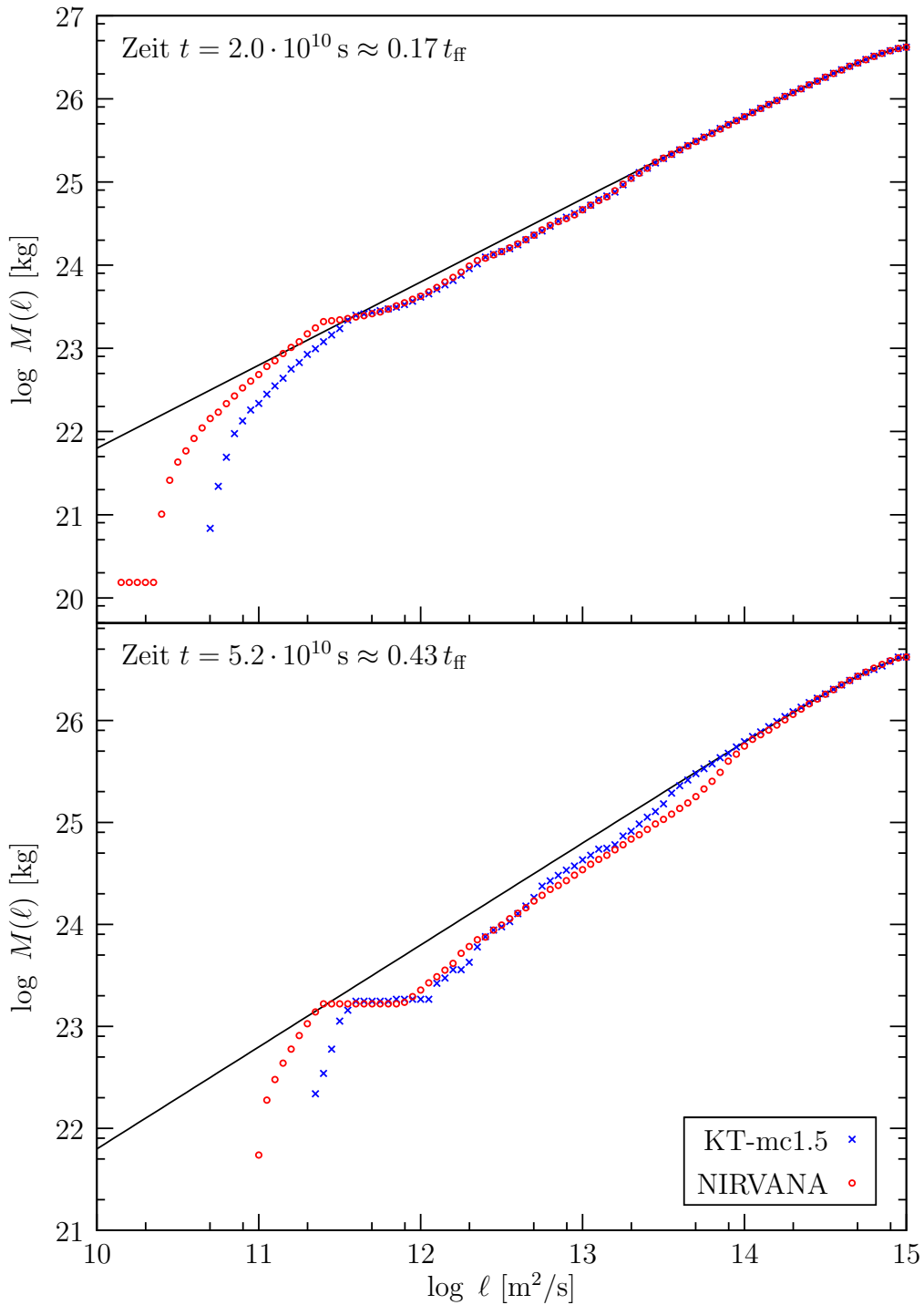


Abbildung 6.34: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, Massenspektrum des spez. Drehimpulses zu verschiedenen Zeiten mit einer Auflösung von 80×100 Zellen: Vergleich der Resultate von NIRVANA 2.0 und dem KT-Verfahren mit mc-Limiter ($\theta = 1, 5$) und primitiver Rekonstruktion.

Man vergleiche dazu die Simulationsergebnisse in Abbildung 6.34 (unten) mit denen im oberen Diagramm, die zu einem früheren Zeitpunkt gewonnen wurden. Es sind deutliche Unterschiede am unteren Ende des Spektrums und auch im mittleren Bereich zu erkennen. Außerdem weisen die Spektren von NIRVANA und dem KT-Verfahren zum früheren Zeitpunkt eine größere Übereinstimmung auf. Diese Zeitabhängigkeit muss nicht verwundern, wenn man sich vorstellt, dass die künstliche Viskosität eine ähnliche Wirkung hat wie eine natürliche Viskosität. Sie koppelt die mit unterschiedlicher Geschwindigkeit rotierenden Gasmassen über diffusive Prozesse miteinander, so dass langsam rotierende Bereiche beschleunigt und schnell rotierende Bereiche abgebremst werden. Dabei findet kein Massenaustausch statt, was zu der erwähnten Verletzung des Drehimpulssatzes führt. Es ist leicht einzusehen, dass die Dauer der Simulation diesem Prozess mehr Gelegenheit gibt seine Wirkung zu entfalten.

Es sei noch angemerkt, dass die dynamische Entwicklung beider Simulationen bis zur Zeit $t \approx 0,17 t_{\text{ff}}$ etwa gleich verläuft, dann aber immer stärkere Unterschiede aufweist. Vor allen Dingen findet man bei den Ergebnissen von NIRVANA mehr Masse im Zentrum und weniger spezifischen Drehimpuls entlang der Achse. Außerdem haben die Lösungen bei NIRVANA eine größere Ähnlichkeit mit denen bei niedriger Auflösung, während sich die KT-Lösungen deutlich von denen mit geringerer Auflösung unterscheiden.

Als letzter Drehimpulstest wurde die gleiche Simulation in Zylinderkoordinaten durchgeführt. Die Auflösung war 160×80 in vertikaler und horizontaler Richtung. Allerdings fehlen einige Zellen, da vom äußeren Rand ein kreisförmiger Abschnitt abgetrennt wurde (siehe Abb. 6.35), um das Rechengebiet kugelsymmetrisch anzulegen. Die Zellen außerhalb des Kreisbogens wurden nicht mitgerechnet, und an der Schnittlinie wurden reflektierende Randbedingungen implementiert. Auf diese Weise ist das Volumen, in dem sich die Strömung frei entfalten konnte, nahezu identisch mit dem in den sphärisch-symmetrischen Simulationen.

Vergleicht man die Falschfarbendiagramme der sphärischen (Abbn. 6.30, 6.31) mit denen der zylindrischen Simulationen (Abb. 6.35), so stellt man große Unterschiede in der Struktur fest. Ähnlich starke Abweichungen wurden auch bei zylindersymmetrischen Rechnungen mit NIRVANA gefunden. Über die Ursachen kann an dieser Stelle nur spekuliert werden, da eine nähere Untersuchung noch nicht stattgefunden hat. Ein kleiner, aber möglicherweise entscheidender Unterschied liegt in der Randbedingung am Ursprung. Während bei den zylindersymmetrischen Berechnungen der Rand auf der Achse liegt, wurde bei den Simulationen in Kugelkoordinaten ein kleiner halbkugelförmiger Ausschnitt um den Ursprung gelegt und dort ein reflek-

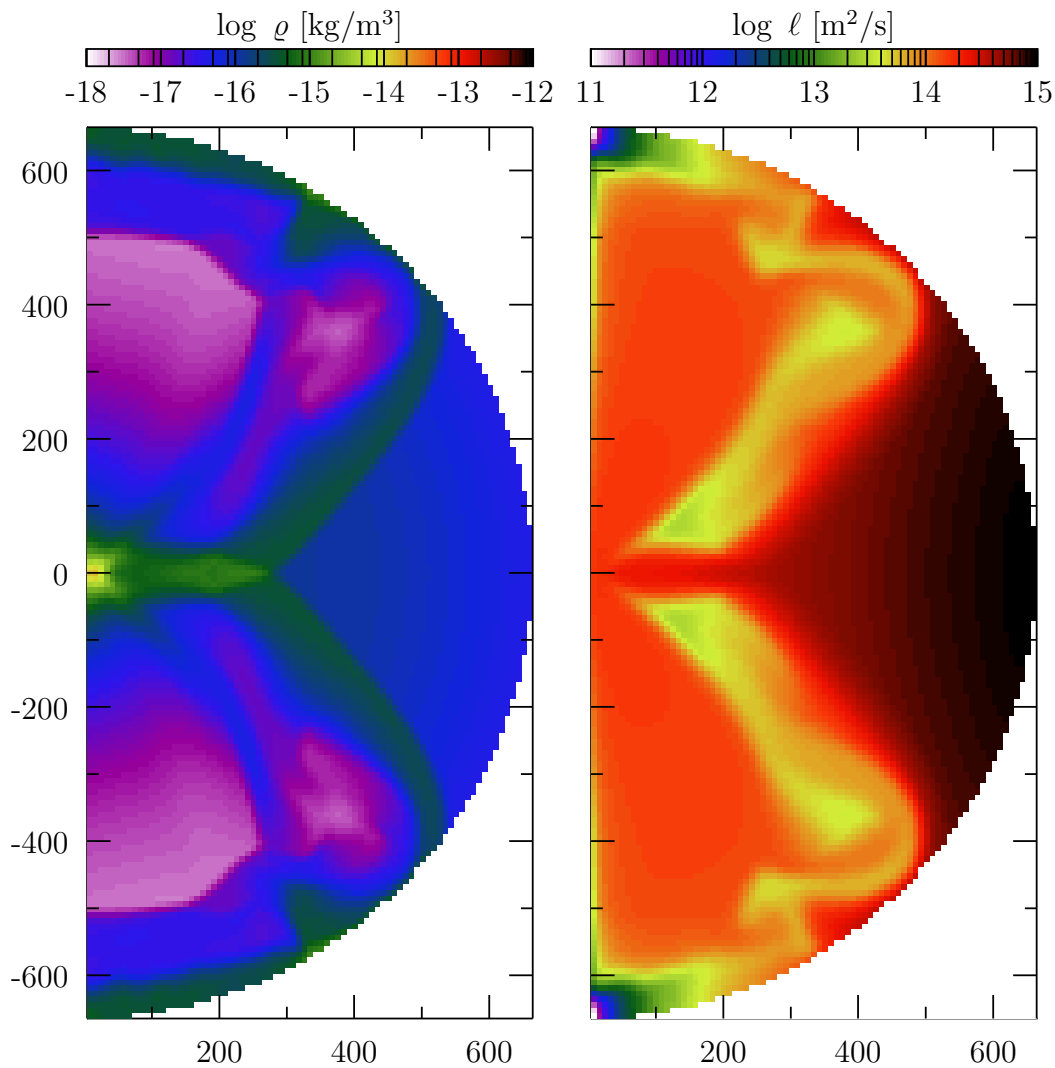


Abbildung 6.35: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, Massendichte und spezifischer Drehimpuls zur Zeit $t = 0,43 t_{\text{ff}}$: Simulation in Zylinderkoordinaten; KT-Verfahren mit mc-Limiter ($\theta = 1,5$) und primitiver Rekonstruktion; die Längeneinheit ist AU.

tierender Rand implementiert. Es ist aber auch denkbar, dass die in der sphärischen Geometrie stark entarteten Zellen in der Nähe des Ursprungs einen Einfluss haben. Dadurch wird im Zentrum eine viel höhere Auflösung erreicht als in Zylinderkoordinaten. Vergleichsrechnungen mit extrem hoher Auflösung in Zylinderkoordinaten stehen noch aus und könnten dies klären.

Betrachtet man das Massenspektrum des Drehimpulses (Abb. 6.36) in Zylinderkoordinaten, so finden sich auch dort kleine, aber vielleicht entscheidende

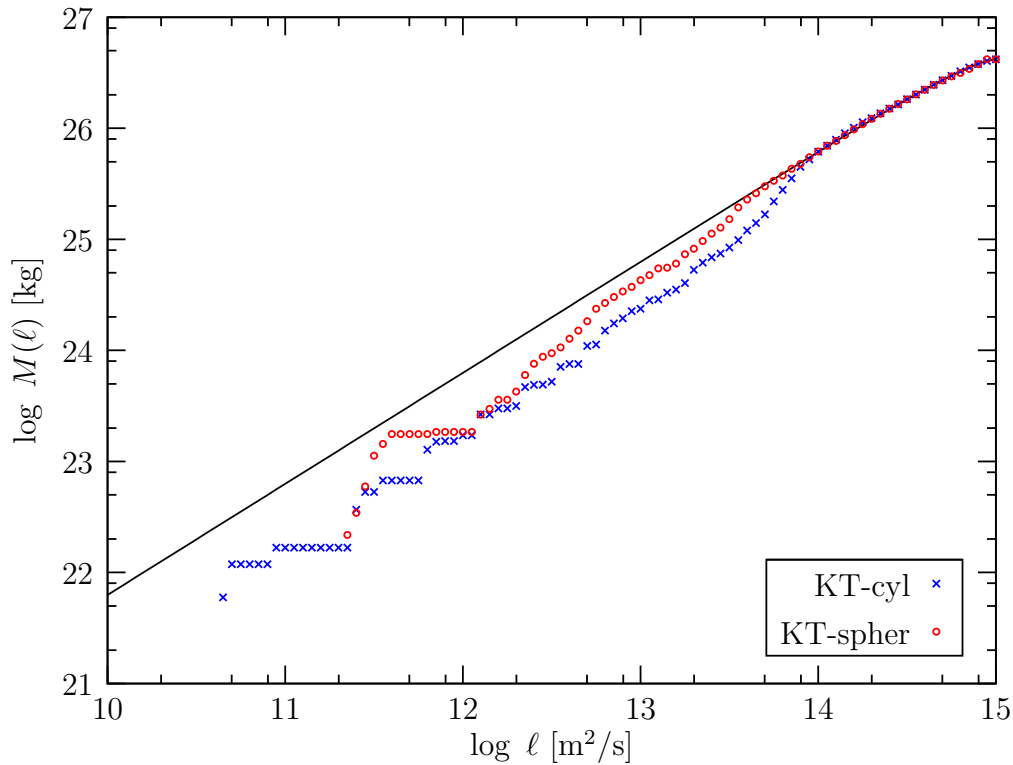


Abbildung 6.36: Kollaps einer rotierenden Gaskugel, Massenspektrum des spezifischen Drehimpulses zur Zeit $t = 0,43 t_{\text{ff}}$: Vergleich der Simulation in Zylinder- (KT-cyl) und Kugelkoordinaten (KT-spher) für das KT-Verfahren mit mc-Limiter ($\theta = 1,5$) und primitiver Rekonstruktion.

Unterschiede. Offenbar erhält die Simulation in Kugelkoordinaten das Spektrum im oberen Bereich besser während in Zylinderkoordinaten am unteren Ende des Spektrums weniger Massenelemente mit geringem Drehimpuls verloren gehen.

Kapitel 7

Modellrechnungen

7.1 Simulationsumgebung

Die im Kapitel 6 mit dem KT-Verfahren gelösten Probleme haben zwar zum Teil auch einen astrophysikalischen Hintergrund, jedoch sind sie bewusst sehr einfach gehalten, damit sie einer analytischen Lösung zugänglich bleiben und sich so als Testprobleme eignen. So kann man das Bondi-Problem durchaus als Musterbeispiel für einen Akkretionsprozess ansehen, und das Sedov-Problem wurde vielfach als Grundmodell für Supernovae verwendet. Wirklich nützlich ist ein numerisches Verfahren aber nur dann, wenn es nicht nur diese etwas akademisch anmutenden Beispiele löst, sondern ein Werkzeug liefert, um sehr viel komplexere physikalische Probleme anzugehen.

Daher soll in diesem Kapitel gezeigt werden, dass sich das in dieser Arbeit entwickelte numerische Verfahren für krummlinig-orthogonale Gitter dazu eignet, Lösungen für das in Kapitel 2 beschriebene Modell eines strahlungsgetriebenen Scheibenwinds zu berechnen. Das Lösungsverfahren für die dort angegebenen hydrodynamischen Gleichungen ist im Detail erläutert worden. Allerdings ist es noch nötig, die numerische Behandlung der Quellterme etwas genauer darzulegen. Für die Gravitationsbeschleunigung ist dies bereits in Kapitel 6.6.2, in dem das Bondi-Problem gelöst wurde, geschehen. Die Beschleunigungsterme durch das Strahlungsfeld (Gln. 2.9, 2.16) müssen aber noch auf bestimmte Koordinaten spezialisiert werden, um sie einer numerischen Berechnung zugänglich zu machen.

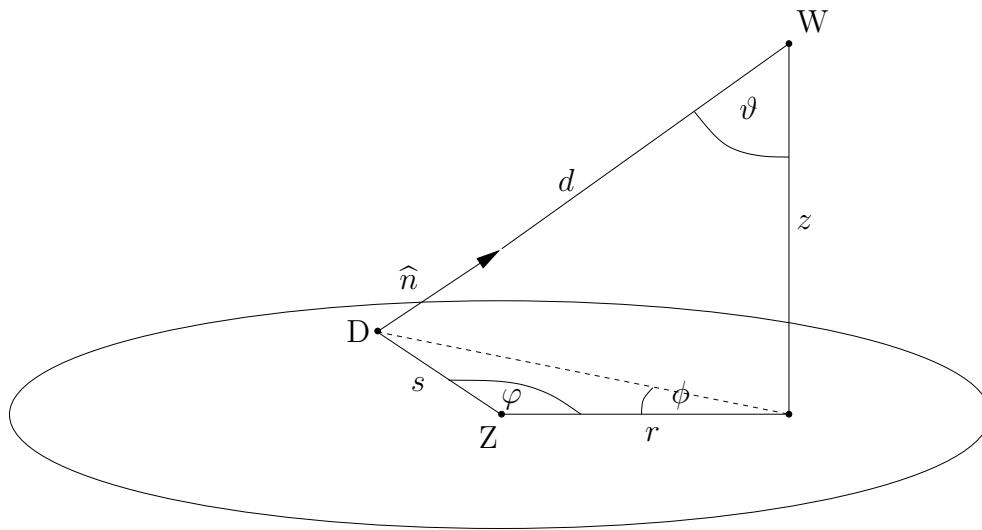


Abbildung 7.1: Koordinatentransformation für die Berechnung des Beschleunigungsintegrals

7.1.1 Numerische Berechnung der Quellterme

Die Integrationen in den Gleichungen für die Strahlungsbeschleunigung (2.9) und (2.16) werden über das Raumwinkelement $d\Omega$ ausgeführt. Da die Intensität des Strahlungsfeldes an der Oberfläche der Akkretionsscheibe in den polaren Koordinaten der Scheibe angegeben ist (Gl. 2.10), erweist es sich als zweckmäßig, die Integrationsvariablen ebenfalls in dieses System zu transformieren.

Dazu betrachte man die Darstellung in Abbildung 7.1. Mit W sei der Punkt bezeichnet, an dem die Beschleunigung berechnet werden soll. Er hat in einem Zylinderkoordinatensystem mit Ursprung in Z die Koordinaten (r, z) . Z markiert das Zentrum der Akkretionsscheibe, die in der Äquatorialebene des Zylinderkoordinatensystems liegt. In der Scheibe gelten die Polarkoordinaten (s, φ) . Außerdem gibt es noch ein drittes Koordinatensystem. Es wird durch die Winkel (ϕ, ϑ) um den Punkt W aufgespannt, wobei ϕ von der Richtung zur Achse aus gemessen wird. In diesem System wird die Raumwinkelintegration in Gl. (2.9) durchgeführt. Dabei gilt die folgende Beziehung zwischen dem Raumwinkelement und den Differentialen der Koordinaten

$$d\Omega = \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\phi = d(-\cos \vartheta) \, d\phi.$$

Wie man aus der Zeichnung ablesen kann, transformiert man die Koordinaten

(ϕ, ϑ) folgendermaßen ins Polarkoordinatensystem der Scheibe:

$$\cos \vartheta = \frac{z}{d} \quad \text{und} \quad \sin \phi = \frac{s \sin \varphi}{\sqrt{d^2 - z^2}}. \quad (7.1)$$

Dabei ist der Abstand zwischen den Punkten D in der Scheibe und W im Wind gegeben durch

$$d(s, \varphi) = \sqrt{r^2 + s^2 + z^2 - 2rs \cos \varphi}. \quad (7.2)$$

Wichtig ist in diesem Zusammenhang nur die Abhängigkeit von (s, φ) , da bei der Raumwinkelintegration der Punkt W und damit die Koordinaten (r, z) festgehalten werden. Für den Übergang zu neuen Koordinaten bei der Integration benötigt man die Funktionaldeterminante der Koordinatentransformation

$$\left| \frac{\partial(\vartheta, \phi)}{\partial(s, \varphi)} \right| = \frac{zs}{d^3}.$$

Damit schreibt sich dann das Raumwinkelement in den neuen Koordinaten

$$d\Omega = \frac{zs}{d^3} ds d\varphi.$$

Mit der Gl. (2.9), wobei $I(r_p, \hat{n})$ gegeben ist durch Gl. (2.10), ergibt sich daher die Beschleunigung durch Elektronenstreuung im Punkt W

$$\mathbf{f}_e(r, z) = \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} \int_0^{2\pi} I(s) \hat{n} \frac{z}{d^3} s ds d\varphi. \quad (7.3)$$

Analog errechnet man für die Beschleunigung durch Linienabsorption in der CAK-Approximation (Gl. 2.16)

$$\mathbf{f}_l(r, z) = \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} \int_0^{2\pi} I(s) k \left(\frac{cK_l}{\nu_0 \sigma_e v_{\text{th}} \tau_l} \right)^\alpha \hat{n} \frac{z}{d^3} s ds d\varphi. \quad (7.4)$$

Dabei ist die Integrationsgrenze s_{\max} der äußere Radius der Akkretionsscheibe. In diesen Gleichungen ist für den Ort W, an dem die Beschleunigung berechnet werden soll, schon auf ein Zylinderkoordinatensystem spezialisiert worden. Im Prinzip ist dies nicht nötig, man kann die obigen Betrachtungen auch für beliebige orthonormale Systeme, wie sie in Kapitel 3 beschrieben werden, durchführen. Allerdings wird die Rechnung dann etwas unübersichtlicher.

Damit man die Beschleunigungsterme aber auch in anderen Koordinatensystemen verwenden kann, wurde hier ein etwas anderer Weg beschritten. Dazu berechnet man zunächst die Beschleunigungsterme im Zylinderkoordinatensystem¹ (r, z) und transformiert sie dann durch eine Rotation in der r - z -Ebene in ein anderes Orthonormalsystem.

Die Komponenten dieser Strahlungsbeschleunigungen im Zylinderkoordinatensystem erhält man, indem man das Skalarprodukt mit den Basisvektoren bildet und die Skalarprodukte mit dem Richtungseinheitsvektor \hat{n} unter dem Integral auswertet. Aus der Abbildung 7.1 entnimmt man, dass

$$\hat{e}_z \cdot \hat{n} = \cos \vartheta \quad \text{und} \quad \hat{e}_r \cdot \hat{n} = \sin \vartheta \cos \phi$$

und mit den Transformationen (Gl. 7.1)

$$\hat{e}_z \cdot \hat{n} = \frac{z}{d} \quad \text{und} \quad \hat{e}_r \cdot \hat{n} = \frac{r - s \cos \varphi}{d}$$

gilt. Auf diese Weise berechnet man die Komponenten der Beschleunigung durch elastische Elektronenstreuung

$$\begin{aligned} f_{e,\hat{z}}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} \int_0^{2\pi} I(s) \frac{z^2}{d^4} s \, ds \, d\varphi \\ f_{e,\hat{r}}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} \int_0^{2\pi} I(s) \frac{z(r - s \cos \varphi)}{d^4} s \, ds \, d\varphi \end{aligned} \quad (7.5)$$

und Linienabsorption in der CAK-Approximation

$$\begin{aligned} f_{l,\hat{z}}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} \int_0^{2\pi} I(s) k \left(\frac{ck_l}{\nu_0 \sigma_e v_{\text{th}} \tau_l} \right)^\alpha \frac{z^2}{d^4} s \, ds \, d\varphi \\ f_{l,\hat{r}}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} \int_0^{2\pi} I(s) k \left(\frac{ck_l}{\nu_0 \sigma_e v_{\text{th}} \tau_l} \right)^\alpha \frac{z(r - s \cos \varphi)}{d^4} s \, ds \, d\varphi, \end{aligned} \quad (7.6)$$

wobei $d(r, z, s, \varphi)$ durch Gl. (7.2) und das Strahlungsfeld der Scheibe $I(s)$ durch Gl. (2.10) gegeben ist. Man beachte, dass im Allgemeinen die optische

¹Der Polarwinkel kann hier unterdrückt werden, da wegen der Voraussetzung der Rotationssymmetrie die Beschleunigungsterme nur von den Koordinaten in der Ebene senkrecht zur Akkretionsscheibe abhängen.

Dicke τ_l ebenfalls eine Funktion von \hat{n} und damit über die Transformationen (7.1) von s und φ ist.

Man kann an dieser Stelle für die optische Dicke noch eine Approximation angeben, die die Berechnung der letzten beiden Integrale weiter vereinfacht. Dazu vernachlässigt man die horizontalen Beiträge des Geschwindigkeitsgradienten in der optischen Dicke

$$|\hat{n} \cdot \nabla(\hat{n} \cdot \mathbf{v})| \approx \left| \hat{n} \cdot \hat{e}_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right| = \left| \cos \vartheta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right| = \left| \frac{z}{d} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right|$$

und setzt dies in die optische Dicke (Gl. 2.12) ein:

$$\tau_l \approx \frac{c}{\nu_0} \frac{\rho \kappa_l}{\left| \frac{z}{d} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right|}.$$

Daraus folgt dann für die Beschleunigung durch Linienabsorption

$$\begin{aligned} f_{1,z}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} k \left(\frac{1}{\rho \sigma_e v_{\text{th}}} \left| \frac{\partial v_z}{\partial z} \right| \right)^\alpha \int_{s_0}^{s_{\text{max}}} \int_0^{2\pi} I(s) \frac{z^{2+\alpha}}{d^{4+\alpha}} s \, ds \, d\varphi \\ f_{1,r}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} k \left(\frac{1}{\rho \sigma_e v_{\text{th}}} \left| \frac{\partial v_z}{\partial z} \right| \right)^\alpha \int_{s_0}^{s_{\text{max}}} \int_0^{2\pi} I(s) \frac{z^{1+\alpha} (r - s \cos \varphi)}{d^{4+\alpha}} s \, ds \, d\varphi \end{aligned} \quad (7.7)$$

in Übereinstimmung mit den Resultaten von Pereyra u. a. (2000).

Die verbleibenden Doppelintegrale kann man für die Linienbeschleunigung nur noch numerisch lösen. Man kann dieses Problem mit den bekannten Kubaturverfahren angehen oder – wie in diesem Fall möglich – geschachtelte Quadraturverfahren verwenden. Letzteres bietet sich an, weil man für das Winkelintegral das Romberg-Verfahren benutzen kann, das bei periodischen Integranden schnell gegen die gesuchte Lösung konvergiert. Das verbleibende Integral über s wurde mit einem adaptiven Gaussverfahren gelöst.

Bei der Beschleunigung durch Elektronenstreuung (Gl. 7.5) kann man im Prinzip ebenso vorgehen. Es stellt sich allerdings heraus, dass die Winkelintegrale in diesem Fall analytisch gelöst werden können (vgl. Illenseer 2002, Kap. 8.1). Dabei verwendet man, dass

$$\frac{r - s \cos \varphi}{d^4} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{2d^2} \right)$$

für den Integranden im zweiten Integral gilt, und erhält nach Ausführung der Winkelintegration für die Komponenten der Beschleunigung durch elastische

Elektronenstreuung

$$\begin{aligned}
 f_{e,z}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} I(s) \frac{2\pi z^2(r^2 + s^2 + z^2)}{\left[(r^2 + s^2 + z^2)^2 - 4r^2 s^2\right]^{3/2}} s \, ds \\
 f_{e,\hat{r}}(r, z) &= \frac{\sigma_e}{c} \int_{s_0}^{s_{\max}} I(s) \frac{2\pi r z(r^2 - s^2 + z^2)}{\left[(r^2 + s^2 + z^2)^2 - 4r^2 s^2\right]^{3/2}} s \, ds.
 \end{aligned} \tag{7.8}$$

Das verbleibende Integral kann wiederum nur numerisch gelöst werden. Bei der numerischen Integration ist darauf zu achten, dass für $r = s$ und $z \rightarrow 0$ im Integranden eine Singularität besteht, die allerdings integrierbar ist. Aus diesem Grund integriert man über die Teilintervalle $[s_0, r]$ und $[r, s_{\max}]$.

Wichtig im Zusammenhang mit den Quelltermintegralen ist, dass die Integranden in allen Fällen unabhängig von den hydrodynamischen Variablen sind. Dadurch ist man in der Lage, die Integrale vor der eigentlichen numerischen Simulation zu berechnen. Dies reduziert die Laufzeit der Simulationen erheblich, da die numerische Quadratur – auch wenn man, wie hier geschehen, ein adaptives Verfahren benutzt – insbesondere bei den Doppelintegralen aufwendig ist.

In Abbildung 7.2 sieht man die Beschleunigung durch Elektronenstreuung für eine typische Akkretionsscheibe mit einem Schwarzen Loch der Masse $M = 10^8 M_\odot$ und einer Akkretionsrate von $\dot{M}_0 = 0,5 M_\odot/\text{a}$. Man beachte, dass diese nach außen gerichtete Beschleunigung um mehr als den Faktor 10 kleiner ist als die Gravitationsbeschleunigung des Schwarzen Lochs. Dies ändert sich auch bei größeren Distanzen nicht, weil $f_e \propto r^{-2}$ für $r \rightarrow \infty$ gilt und daher die Strahlungsbeschleunigung durch Elektronenstreuung mit der gleichen Potenz von r wie die Gravitationsbeschleunigung abklingt. Es ist also unbedingt eine weitere nach außen gerichtete Kraft erforderlich, will man einen kontinuierlich strömenden Wind erzeugen.

7.1.2 Anfangsbedingungen

Zu Beginn der Simulation wird das Rechengebiet mit einer hydrostatischen Gassphäre initialisiert. Die Gleichung für das hydrostatische Gleichgewicht in Kugelkoordinaten lautet in diesem Fall

$$\frac{1}{\rho} \frac{dP}{dr} = -\frac{MG}{r^2} + f_{e,\hat{r}} \tag{7.9}$$

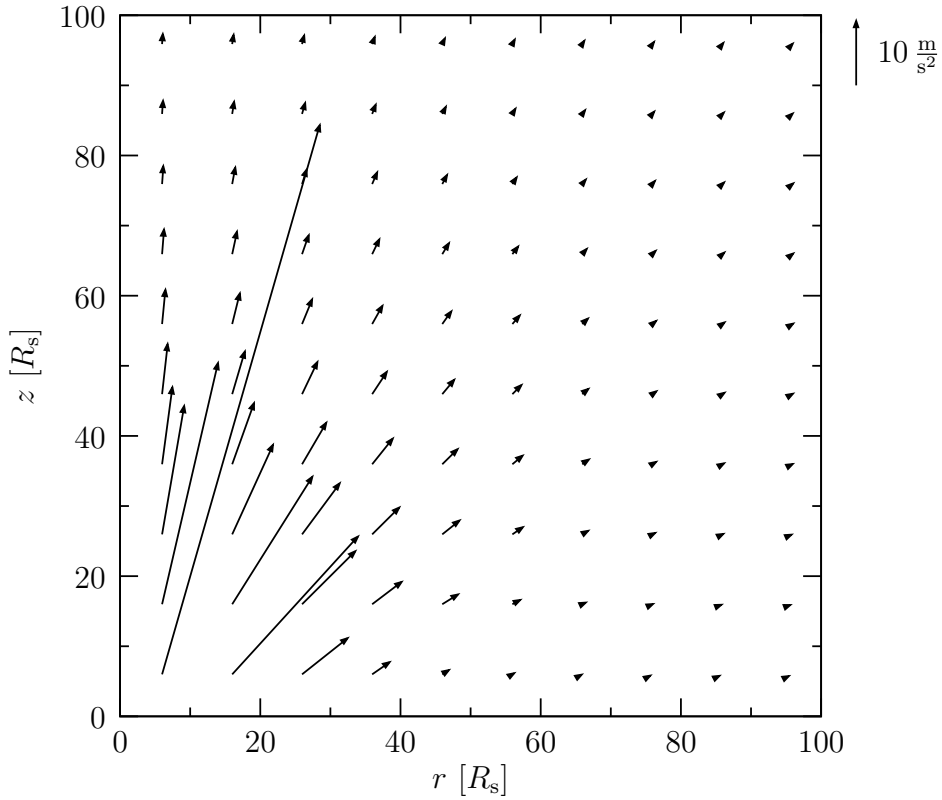


Abbildung 7.2: Beschleunigung durch Elektronenstreuung in unmittelbarer Umgebung des Schwarzen Lochs ($M = 10^8 M_\odot$, $\dot{M}_0 = 0,5 M_\odot/\text{a}$); die Längeneinheit sind Schwarzschildradien.

mit der Radialkomponente der Strahlungsbeschleunigung für elastische Elektronenstreuung

$$f_{e,\hat{r}} \approx \frac{\sigma_e L_D}{4\pi r^2 c}.$$

An dieser Stelle genügt die Approximation für große Radien, da für die Anfangsbedingungen keine große Genauigkeit verlangt werden muss. Führt man die Eddington-Leuchtkraft durch

$$L_{\text{Edd}} = \frac{4\pi MGc}{\sigma_e} \quad (7.10)$$

ein, so kann man die Beschleunigungsterme zusammenfassen zu

$$-\frac{MG}{r^2} + f_{e,\hat{r}} = -\frac{MG}{r^2} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}}\right). \quad (7.11)$$

Damit man das hydrostatische Problem in Gl. (7.9) lösen kann, benötigt man noch einen Zusammenhang zwischen Dichte ρ und Druck P . Eine einfache

Möglichkeit besteht darin, von der Gaskugel zu verlangen, dass die spezifische Entropie s überall konstant ist. Dann ergibt sich mit dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik und $ds = 0$:

$$d\varepsilon = T ds - P d\varrho^{-1} = -P d\varrho^{-1}. \quad (7.12)$$

Mit der spezifischen Enthalpie

$$w = \varepsilon + \frac{P}{\varrho} \quad (7.13)$$

erhält man dann

$$dw = d\varepsilon + P d\varrho^{-1} + \varrho^{-1} dP = \varrho^{-1} dP$$

und daher folgende Gleichung für eine hydrostatische isentrope Gaskugel unter dem Einfluss der Gravitation einer Punktmasse und dem Strahlungsfeld einer Akkretionsscheibe:

$$\frac{dw}{dr} = -\frac{MG}{r^2} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}}\right). \quad (7.14)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung für die spezifische Enthalpie lautet

$$w(r) = w(r_0) + \frac{MG}{r} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right) \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}}\right). \quad (7.15)$$

Mit Gl. (7.13), der Zustandsgleichung für das ideale Gas (2.4) und der Schallgeschwindigkeit (3.34) findet man den Zusammenhang

$$w = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{P}{\varrho} = \frac{c_s^2}{\gamma - 1}.$$

Lässt man nun in Gl. (7.15) $r_0 \rightarrow \infty$ gehen und ersetzt die spezifische Enthalpie durch die Schallgeschwindigkeit, so ergibt sich

$$c_s^2(r) = c_\infty^2 + (\gamma - 1) \frac{MG}{r} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}}\right) \quad (7.16)$$

mit der Schallgeschwindigkeit c_∞ im Unendlichen. Nun kann man über die Definition der Schallgeschwindigkeit bei Kenntnis der Dichteverteilung die Druckschichtung bestimmen. Für eine vollständige Lösung bedarf es aber noch einer weiteren Beziehung zwischen Dichte und Druck. Dazu betrachte man noch einmal Gl. (7.12) für ein ideales Gas. Es folgt

$$d\varepsilon = \frac{1}{\gamma - 1} d\left(\frac{P}{\varrho}\right) = -P d\varrho^{-1} \Leftrightarrow \frac{dP}{P} = \gamma \frac{d\varrho}{\varrho}$$

und somit

$$\frac{P}{\varrho^\gamma} = \frac{P_\infty}{\varrho_\infty^\gamma}.$$

Damit berechnet sich die Dichteverteilung

$$\varrho(r) = \varrho_\infty \left(1 + (\gamma - 1) c_\infty^2 \frac{MG}{r} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}} \right) \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (7.17)$$

und die Druckschichtung

$$P(r) = P_\infty \left(1 + (\gamma - 1) c_\infty^2 \frac{MG}{r} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}} \right) \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (7.18)$$

für die hydrostatische isentrope Gaskugel.

Ganz analog berechnet man bei einer isothermen Gaskugel mit

$$P = c_s^2 \varrho \quad \text{wobei} \quad c_s = \text{const},$$

für den Druckgradienten

$$\frac{1}{\varrho} \frac{dP}{dr} = \frac{1}{c_s^2} \frac{d}{dr} \ln P = -\frac{MG}{r^2} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}} \right).$$

Die Lösungen lauten dann

$$\varrho(r) = \varrho_\infty \exp \left(c_s^2 \frac{MG}{r} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}} \right) \right) \quad (7.19)$$

$$P(r) = P_\infty \exp \left(c_s^2 \frac{MG}{r} \left(1 - \frac{L_D}{L_{\text{Edd}}} \right) \right). \quad (7.20)$$

Beide Anfangsbedingungen wurden zur Initialisierung des Rechengebiets verwendet. Abgesehen von den ersten Zeitschritten konnte für die zeitliche Entwicklung der Simulationen keine signifikante Abhängigkeit von der Wahl der Anfangsbedingung beobachtet werden.

7.1.3 Randbedingungen

Die korrekte Wahl der Randbedingungen ist für dieses Windproblem von entscheidender Bedeutung, wie schon von Pereyra u. a. (1997, 2000) angemerkt wurde. Unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems gibt es im Wesentlichen drei Arten von Rändern für das Problem des Scheibenwindes, wobei insbesondere die Punkte 1 und 3 problematisch sind:

1. Unterschall-Einfluss an der Photosphäre der Scheibe;
2. Reflektierender bzw. axialer Rand entlang der Symmetrieachse des Koordinatensystems;
3. (Überschall-) Ausflüsse an den übrigen Rändern.

Da die Photosphäre der Scheibe in den Simulationen nicht mitgerechnet wird, gibt es keine verlässlichen Daten für diesen Rand. Man ist darauf angewiesen, an dieser Stelle etwas mit den Randbedingungen zu experimentieren. Im Prinzip wurde in dieser Arbeit die in Pereyra u. a. (2000) beschriebene Methode verwendet. Dabei setzt man Dichte und Geschwindigkeitskomponenten auf feste Werte und extrapoliert den Druck mit Hilfe von Daten aus dem Inneren des Rechengebiets. Dies entspricht einer Unterschalleinfluss-Randbedingung.

Die photosphärische Dichte erhält man aus Scheibenmodellen. Die Werte bewegen sich hier etwa in der Größenordnung von 10^{-10} bis 10^{-11} kg/m³. Damit die Randbedingungen nicht zu kompliziert sind, wurde hier der Einfachheit halber angenommen, dass diese Dichte für alle Radien konstant ist.

Für die Horizontalkomponente der Geschwindigkeit kann in guter Näherung null eingesetzt werden, weil die radiale Driftgeschwindigkeit in der Scheibe sehr klein gegenüber allen anderen Geschwindigkeiten ist. Ferner wird angenommen, dass die Gasmassen in der Scheibenphotosphäre annähernd mit keplerscher Geschwindigkeit rotieren. Auf diese Weise gelangt Drehimpuls ins Rechengebiet. Für die Vertikalkomponente der Geschwindigkeit wählen Pereyra u. a. (2000) Werte von 10 km/s und begründen dies damit, dass das in etwa dem Wert der thermischen Geschwindigkeit der Gasteilchen in der Scheibenphotosphäre entspricht. Mit der Abschätzung (7.21) und der Effektivtemperatur der Scheibe (Gl. 2.6) erhält man das Geschwindigkeitsprofil in Abbildung 7.3 für eine typische AGN-Scheibe mit einer Masse von $10^8 M_{\odot}$ und einer Akkretionsrate von $\dot{M}_0 = 0,5 M_{\odot}/a$. Mit einem Wert von 10 km/s liegt man also für den betrachteten Bereich unterhalb der thermischen Geschwindigkeit. Wichtig ist in diesem Zusammenhang, dass die Geschwindigkeit auf jeden Fall kleiner als die Schallgeschwindigkeit sein sollte, damit man am Fußpunkt des Windes im Unterschallbereich bleibt.

An der Achse des Koordinatensystems werden axiale Randbedingungen gestellt. Das bedeutet, dass Dichte, Tangentialgeschwindigkeit und Druck aus den innersten Zellen des Rechengebiets in die sog. Geisterzellen, die direkt an die Randzellen des Rechengebiets anschließen, kopiert werden, was verschwindenden Gradienten gleichkommt. Normalgeschwindigkeit und Rotationsgeschwindigkeit kopiert man ebenfalls, jedoch mit umgekehrtem Vorzeichen. Das KT-Verfahren verlangt, dass man neben den Zellmittelwerten

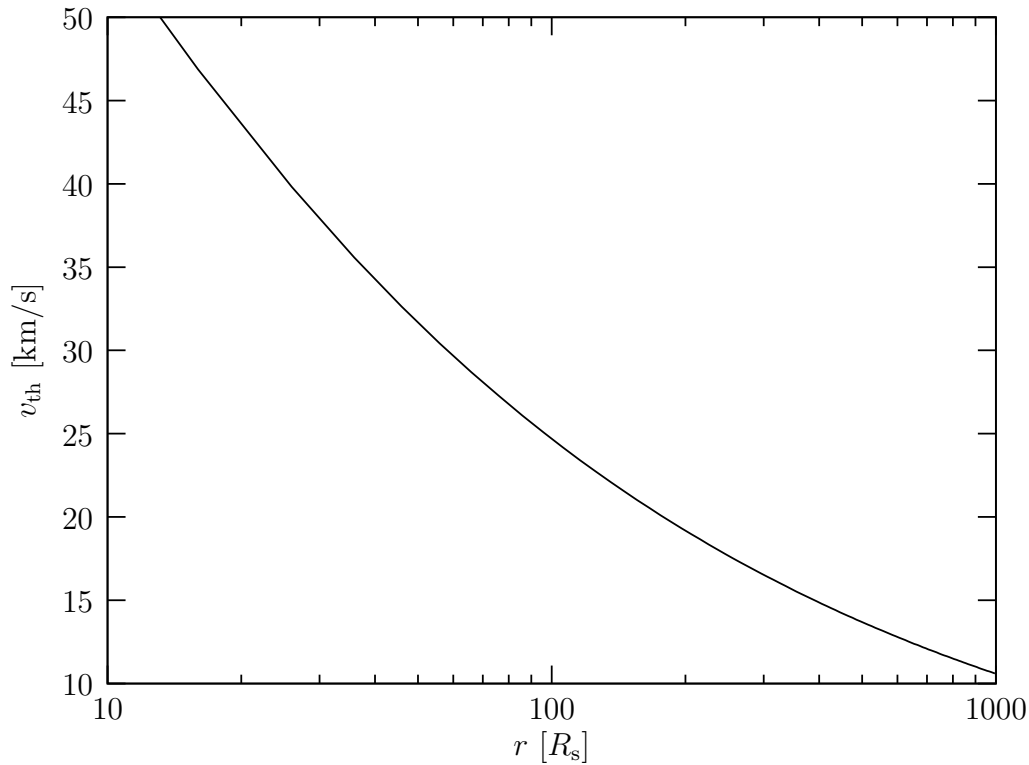


Abbildung 7.3: Profil der thermischen Geschwindigkeit in der Scheibenphotosphäre

in den Geisterzellen auch Daten auf den dem Rechengebiet zugewandten Zellrändern der Geisterzellen festlegt. In der Regel kann man einfach die Randdaten aus den direkt benachbarten Zellen innerhalb des Rechengebiets kopieren. Bei reflektierenden Randbedingungen ist es allerdings besser, diese Randwerte für die Normal- und die Rotationsgeschwindigkeit sowohl in den Randzellen des Rechengebiets als auch in den Geisterzellen außerhalb des Rechengebiets auf null zu setzen. Nur so sind die Flüsse über den reflektierenden Rand wirklich identisch null.

Die dritte Randbedingung gilt für alle verbleibenden Ränder. Es hat sich als nicht so vorteilhaft erwiesen, einfache Ausflussrandbedingungen also verschwindende räumliche Ableitungen bei allen Größen anzunehmen. Das Problem dabei ist, dass nicht für den gesamten äußeren Rand angenommen werden kann, dass die Strömung auswärts gerichtet ist. In manchen Bereichen beobachtet man sogar statt eines Winds einen Akkretionsprozess. Ist dies der Fall, so sind verschwindende Ableitungen keine gute Wahl, da bei Unterschalleinströmung vier der fünf Charakteristiken ins Rechengebiet einlaufen

und somit unbedingt Werte am Rand vorgegeben werden müssen, damit die Randbedingungen wohldefiniert sind.

Aus diesem Grund werden an allen äußeren Rändern die Dichte und die Temperatur fest vorgegeben, während sämtliche Ableitungen der Geschwindigkeiten überall auf null gesetzt werden. Man sollte dabei darauf achten, dass die Dichte nicht zu groß ist, da sonst ein sehr starker Akkretionsprozess angestoßen wird, der ein Ausströmen unmöglich macht. Dort, wo der Wind mit Überschallgeschwindigkeit ausströmt, macht diese Art von Randbedingung keine Probleme, da wegen der *upwind*-Eigenschaften des KT-Verfahrens die Randwerte in diesen Bereichen keinen Einfluss auf die Strömung haben (vgl. Kapitel 4.4.2).

7.1.4 Modellparameter

Die Modellparameter legen fest, wie die externen Kräfte in den Quelltermen auf die Strömung wirken sollen. Der wohl wichtigste Parameter ist hier die Masse M des Schwarzen Lochs. Sie geht sowohl in die Berechnung der Gravitationsbeschleunigung als auch über die Leuchtkraft der Akkretions-scheibe (Gl. 2.7) in die Strahlungsbeschleunigungen ein. Grundsätzlich kann man mit dem Modell auch Winde bei anderen Objekten wie etwa Cataclysmic Variables (CVs) untersuchen. Die Massenskalen sind dann andere als für die hier betrachteten AGN. In dieser Arbeit soll der Parameterraum für die Zentralmassen auf den Bereich von $10^7 M_\odot$ bis $10^8 M_\odot$ eingeschränkt werden.

Gleiches gilt für die Akkretionsrate \dot{M}_0 . Auch sie hängt vom betrachteten Objekt ab. Da die Akkretionsscheibe selbst in diesem Modell nicht mitgerechnet wird, ist sie ein Parameter der Simulation. Typische Werte für AGN bewegen sich zwischen $10^{-4} M_\odot/\text{a}$ und $1 M_\odot/\text{a}$.

In die Berechnung der Beschleunigung durch Strahlung geht neben diesen Scheibenparametern – und zwar sowohl über die Leuchtkraft L_D als auch durch die Integrationsgrenzen – die Ausdehnung der Akkretions-scheibe ein. Dabei spielt der genaue Wert für den äußeren Rand – sofern er bei deutlich über $100 R_s$ liegt – keine allzu große Rolle, da die Funktion in den Strahlungsintegralen für große Radien mit s^{-6} abnimmt (vgl. Gl. (7.8)).

Außerdem gibt es noch einige Parameter, die das Verhalten der Strahlungsbeschleunigung durch Linienabsorption steuern. Da wären zunächst die CAK-Parameter k und α . Sie hängen zum einen von der Temperatur in der Photosphäre der Scheibe ab. Zum anderen hat aber auch die Ionisationsstruktur im Wind einen bedeutenden Einfluss (vgl. Pereyra und Kallman 2003). Es ist also etwas problematisch, sie als im ganzen Wind konstant anzusehen. Da zur

Zeit die Ionisationsstruktur noch nicht im Modell mitgerechnet wird, bleibt einem allerdings erstmal kein anderer Ausweg. Werte für k und α liegen im Intervall $[0; 1]$ und können aus Tabellen, wie man sie z.B. in Abbott (1982) findet, entnommen werden.

Neben diesen beiden Parametern geht in die Berechnung der Linienbeschleunigung noch die thermische Geschwindigkeit der Gasteilchen ein. Für ein einatomiges ideales Gas gilt die Abschätzung

$$v_{\text{th}} \approx \sqrt{\frac{3\mathcal{R} T}{\mu}} \approx 200 \text{ m/s} \sqrt{T/[\text{K}]} \quad (7.21)$$

mit der allgemeinen Gaskonstante $\mathcal{R} = 8,3145 \text{ kg/mol K}^{-1}$ und dem mittleren molekularen Gewicht der Gasteilchen $\mu = 0,602 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$. Letzteres ist strenggenommen auch ein Simulationsparameter. Er spielt aber nur bei der Umrechnung von Druck und Massendichte in Temperatur eine Rolle und hat keinen Einfluss auf die Berechnungen. Strenggenommen ist auch die thermische Geschwindigkeit eine ortsabhängige Größe. Ihr Einfluss ist allerdings gering, sofern man in der Größenordnung von etwa 10^6 - 10^7 m/s bleibt. Dies entspricht Temperaturen von 10^7 - 10^8 K . Geringere Temperaturen werden in den Simulationen nicht erreicht, wohingegen jedoch deutlich höhere Temperaturen durchaus vorkommen können. Man muss aber davon ausgehen, dass die Beschleunigung durch Linienabsorption für Temperaturen über 10^8 K keine effektive Kraft mehr darstellt, weil die Gasatome vollständig ionisiert sind (siehe dazu auch die Diskussion der Simulationsergebnisse).

Für das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten γ wurde bislang meistens der Wert für zweiatomige Moleküle verwendet. Für den thermodynamischen Zustand des Gases in den Windberechnungen kann dies nicht mehr gelten, weil in diesem Temperaturbereich keine Molekülverbindungen möglich sind. Daher ist ein Wert von $\gamma = 5/3$ für ein einatomige ideales Gas vorzuziehen.

Alle bislang eingeführten Parameter verändern die Gestalt der Gleichungen, weil sie entweder die Quellterme verändern oder, wie im zuletzt genannten Fall, die Zustandsgleichung modifizieren. Demgegenüber gibt es noch eine ganze Reihe von Parametern, die die Randbedingungen betreffen. Da wären zunächst die photosphärische Dichte ρ_p und die Einströmgeschwindigkeit v_p . Ferner die Dichte ρ_∞ und die Temperatur T_∞ am äußeren Rand.

7.2 Simulationsergebnisse

Das folgende Kapitel beschreibt exemplarisch die für das Windmodell erzielten Resultate. Es sollte nicht als eine umfassende Analyse des Windproblems gelesen werden. Dafür ist der mögliche Parameterraum beim jetzigen Stand der Arbeit noch längst nicht genau genug untersucht worden. Es lassen sich aber dennoch aus den bislang gemachten Modellrechnungen einige wichtige Erkenntnisse über die grundlegenden Eigenschaften von strahlungsgetriebenen Scheibenwinden gewinnen. Insbesondere im Hinblick auf die in der Literatur viel diskutierte Stationarität der Lösungen lassen sich dezidierte Aussagen machen.

Bei der Analyse der Simulationsdaten soll im Folgenden so vorgegangen werden, dass zunächst die Resultate für einen Standardparametersatz gezeigt werden. Davon ausgehend werden dann die Auswirkungen der Variationen einzelner Parameter diskutiert. Die Standardparameter lauten:

$$\begin{aligned}
 M &= 10^8 M_\odot & \dot{M}_0 &= 0,5 M_\odot/\text{a} \\
 s_0 &= 3 R_s \approx 9 \cdot 10^{11} \text{ m} & s_{\text{max}} &= 10^4 R_s \\
 k &= 0, \quad \alpha = 0,7 & v_{\text{th}} &= 3000 \text{ km/s} \\
 \varrho_p &= 10^{-10} \text{ kg/m}^3 & v_p &= 10 \text{ km/s} \\
 \varrho_\infty &= 10^{-15} \text{ kg/m}^3 & T_\infty &= 10^7 \text{ K.}
 \end{aligned} \tag{7.22}$$

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Wahl für den Parameter k dazu führt, dass die Beschleunigung durch Linienabsorption zunächst abgeschaltet ist. Damit wird eine wichtige Erkenntnis aus den Modellrechnungen quasi vorweggenommen. Es hat sich nämlich gezeigt, dass eine Beschleunigung durch elastische Elektronenstreuung vollkommen ausreichend ist, um den Wind anzutreiben. Dies ist insbesondere im Hinblick auf die Bemerkungen gegen Ende von Kapitel 7.1.1 erstaunlich. Dort wurde festgestellt, dass diese Art der Beschleunigung um etwa den Faktor 10 schwächer ist als die entgegengerichtete Anziehung durch das Schwarze Loch. Es stellt sich die Frage, welche zusätzliche Kraft beschleunigend auf den Wind wirkt. In den Simulationen beobachtet man, dass Material in horizontaler Richtung an der Scheibenoberfläche entlang zum Zentrum hin transportiert wird. Dort baut sich dann ein starker Druckgradient auf, der auch in der Vertikalen eine beschleunigende Wirkung hat.

Alle Simulationen wurden mit primitiver Rekonstruktion und dem mc-Limiter durchgeführt. Mit Ausnahme des Tests, in dem die künstliche Viskosität variiert wurde, war der Parameter für den mc-Limiter überall $\theta = 1, 5$. So erreicht man Stabilität des Verfahrens bei gleichzeitig geringer künstlicher Viskosität

und damit wenig diffusiven Drehimpulstransport (vgl. Kap. 6.7). Da beide Arten der Flussberechnung, wie in den Tests gezeigt, annähernd äquivalent sind, kam wegen der kürzeren Rechenzeiten bei den Windsimulationen die Mittelpunktsregel zum Einsatz.

7.2.1 Zeitliche Entwicklung

Die folgende Simulation wurde auf einem zylindrischen Gitter durchgeführt. Der Ursprung mit dem Zentrum der Akkretionsscheibe liegt in jedem Diagramm in der Ecke links unten. Die Ausdehnung des Rechengebiets beträgt 1000 Schwarzschildradien in vertikaler und horizontaler Richtung. Bei einer Zentralmasse von $10^8 M_\odot$ ergibt sich daher eine Längenskala von etwa $3 \cdot 10^{11}$ km. Daraus errechnet man mit einer mittleren Schallgeschwindigkeit von etwa 10^4 km/s eine dynamische Zeitskala von $t_{\text{dyn}} = 3 \cdot 10^7$ s \approx 1 a. Interessanterweise ist die Freie-Fall-Zeitskala für dieses Problem etwa gleich groß. Mit der Abschätzung aus Gl. (6.6) erhält man $t_{\text{ff}} = 4,4 \cdot 10^7$ s \approx $1,5 t_{\text{dyn}}$. Die Auflösung des Gitters beträgt 100×100 Zellen. Damit ist die kleinste auflösbare Struktur von der Größenordnung 10^9 km.

Für die typische zeitliche Entwicklung der Windsimulationen betrachte man die Abbildung 7.4. Man kann sehr gut erkennen, wie von unten aus der Scheibe langsam Materie in ein weitgehend ruhendes Medium eindringt, während insbesondere an der Achse zunächst ein Akkretionsprozess beobachtet werden kann. Dieser führt zu einer instabilen Zwischenphase (Bild 2 bis 4), in der die aus der Scheibe aufsteigenden mit absinkenden Gasmassen kollidieren. Die aufwärts gerichtete Strömung setzt sich aber nach etwa $20 t_{\text{dyn}}$ durch und bewirkt im axialen Bereich einen starken Einbruch in der Massendichte, so dass von unten aufsteigendes Gas ungehindert auf Überschallgeschwindigkeit beschleunigt werden kann. Das Gas strömt dann nach einer Zeit von etwa $25 t_{\text{dyn}}$ am oberen Rand mit einer maximalen Geschwindigkeit von Mach 4,5 aus (siehe Abb. 7.5).

Die Strömung ist nach $t = 30 t_{\text{dyn}}$ bis zu einem Radius von etwa $r = 400 R_s$ weitgehend stationär. Allerdings kommt es am äußeren Rand bei $r = 1000 R_s$ hin und wieder zu leichten Dichteschwankungen. Diese Störungen sieht man am besten in Abbildung 7.5. Dort findet man schlauchartige Strukturen in der Machzahl. Betrachtet man das Geschwindigkeitsfeld in diesem Bereich etwas genauer, so sieht man, dass an dieser Stelle das Material mit Unterschallgeschwindigkeit zirkuliert.

In der Druckschichtung (Abb. 7.6 links) zeigen sich in der stationären Lösung wie erwartet hohe Gradienten. Insbesondere an der Achse nimmt der Druck

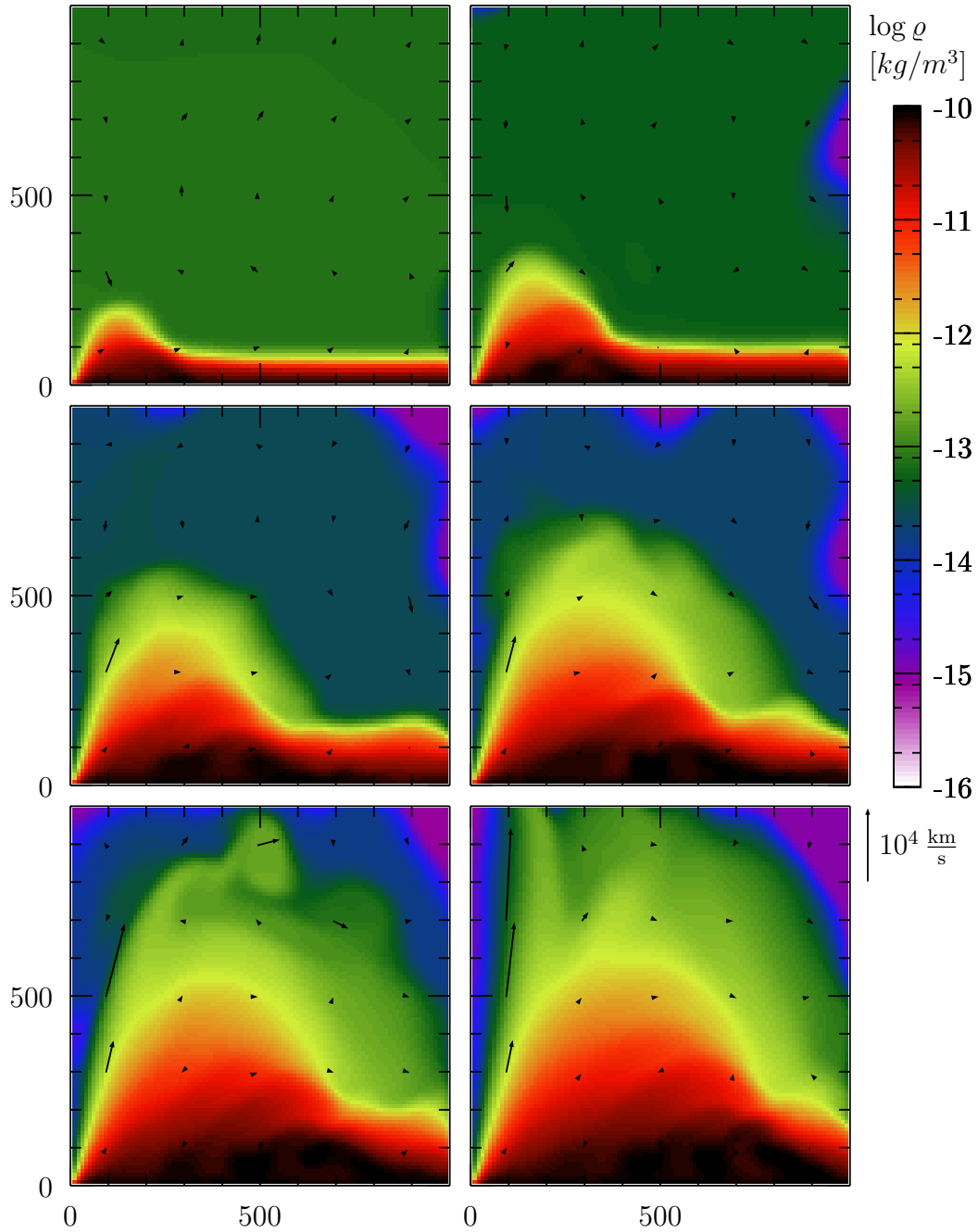


Abbildung 7.4: Windsimulation für die Standardparameter: Dichtekonturen und Geschwindigkeitsfeld zu sechs verschiedenen Zeitpunkten (zeilenweise von links oben nach rechts unten): $t = 3, 6, 12, 18, 24, 30 t_{\text{dyn}}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

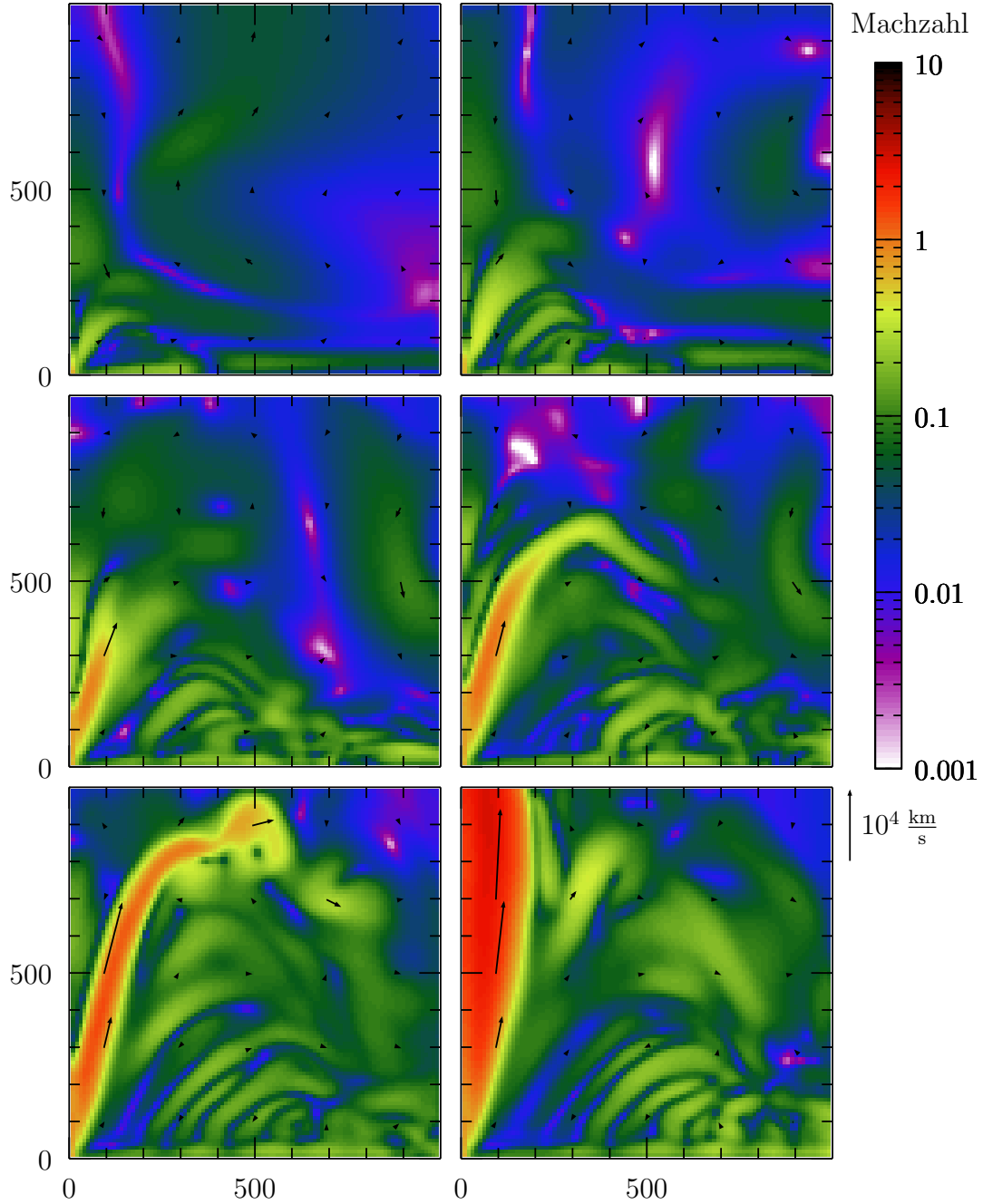


Abbildung 7.5: Windsimulation für die Standardparameter: Machzahl und Geschwindigkeitsfeld zu sechs verschiedenen Zeitpunkten (zeilenweise von links oben nach rechts unten): $t = 3, 6, 12, 18, 24, 30 t_{\text{dyn}}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

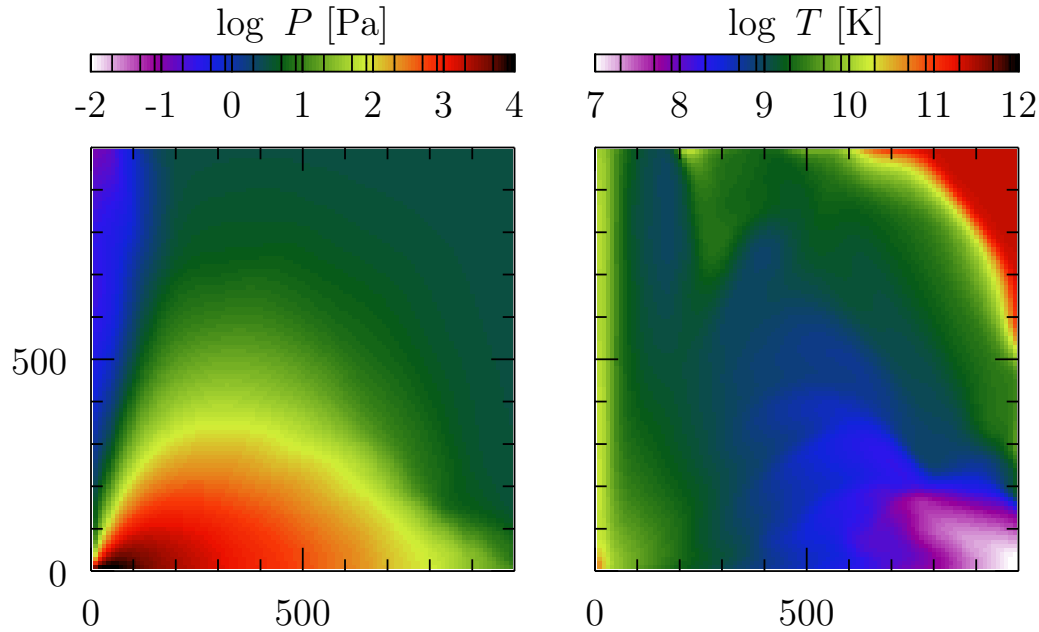


Abbildung 7.6: Windsimulation für die Standardparameter: Druck und Temperaturverteilung zum Zeitpunkt $t = 30 t_{\text{dyn}}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

zum oberen Rand hin auf einer Distanz von $3 \cdot 10^{11}$ km um etwa 6 Größenordnungen ab. Das heißt, es wirken dort enorme Kräfte auf ein Gas von geringer Massendichte, was eine große vertikal nach außen gerichtete Beschleunigung zur Folge hat.

Für die Temperaturverteilung (Abb. 7.6 rechts) finden sich entlang der Achse und für große z und r in der oberen rechten Ecke sehr hohe Werte. Das ist deswegen problematisch, weil die Zustandsgleichung des idealen Gases, die hier Verwendung findet, in diesem Regime überhaupt keine Gültigkeit mehr besitzt. Temperaturen von über 10^{10} K entsprechen der doppelten Elektronenruheenergie. Dadurch kann es zur Elektron-Positron-Paarerzeugung kommen, was eine erhebliche Veränderung des thermodynamischen Zustands zur Folge hätte. Die hohen Temperaturen am äußeren Rand sind gelegentliche Erscheinungen, die durch Einbrüche in der Massendichte hervorgerufen werden. Wahrscheinlich sind sie auf die noch nicht ganz optimale Wahl der Randbedingungen in diesem Gebiet zurückzuführen. Insgesamt fällt auf, dass die Temperaturverteilung im Gegensatz zur Massendichte und zum Druck eine eher axiale Struktur hat.

7.2.2 Veränderung der Randbedingungen

Es wurde schon weiter oben angemerkt, dass die Wahl der Randbedingungen einen Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat. Dies deckt sich mit den Beobachtungen von Pereyra u. a. (2000) für CV-Winde. So haben die Einströmgeschwindigkeit und die Massendichte am unteren Rand Auswirkungen auf die Stabilität der Lösungen. Auch beobachtet man, dass für gewisse Randbedingungen die Lösungen schneller gegen die stationäre Lösung konvergieren

Aus Abbildung 7.7 (linke Spalte) lässt sich entnehmen, dass die Dichteverteilung im Rechengebiet offenbar von der photosphärischen Dichte abhängt. In der mittleren Simulation wurde am unteren Rand $\varrho_p = 10^{-10} \text{ kg/m}^3$ gesetzt, was das Dichteniveau gegenüber den anderen Simulationen mit $\varrho_p = 10^{-11} \text{ kg/m}^3$ um insgesamt den Faktor 10 angehoben hat.

Im Gegensatz dazu scheint die Einströmgeschwindigkeit keinen so großen Einfluss zu haben. Hier beobachtet man allerdings, dass in der Simulation mit $v_p = 1 \text{ km/s}$ und $\varrho_p = 10^{-11} \text{ kg/m}^3$ schneller eine stationäre Strömung entsteht als für die Standardparameter in den Abbildungen 7.4 und 7.5.

Die Randbedingung an der Akkretionsscheibe ist insofern von Bedeutung, als sie festlegt wie viel Materie auf dem Weg ins Schwarze Loch an den Wind verloren geht. Für die Standardparameter berechnet man einen Massenfluss pro Quadratmeter von

$$\dot{m}_w = \varrho_p v_p \approx 10^{-6} \text{ kg/m}^2 \text{ s}^{-1}.$$

Multipliziert man dies mit der Fläche, durch die am unteren Rand Materie in den Wind fließt, so erhält man die totale Massenverlustrate durch den Wind:

$$\dot{M}_w \approx 1 M_\odot/\text{a}.$$

Damit ergibt sich also ein Wert, der in etwa in der Größenordnung der Akkretionsrate liegt. Wie die zuletzt gezeigten Ergebnisse belegen, kann man aber mit geringeren photosphärischen Dichten und Einströmgeschwindigkeiten ebenfalls stationäre Lösungen bekommen. Eine genaue Aussage darüber, wieviel Masse nun tatsächlich an den Wind verloren geht, kann man daher an dieser Stelle noch nicht machen.

Bei den Randbedingungen an den äußeren Rändern wurde ebenfalls ein Einfluss auf die Dynamik der Simulation festgestellt, allerdings äußert er sich lediglich darin, dass es bei ungünstiger Wahl der Werte für T_∞ und ρ_∞ zu zeitweise sehr niedrigen Drücken und Dichten kommt, die zu einem Programmabbruch führen. Die stationären Lösungen ändern sich dadurch nicht merklich.

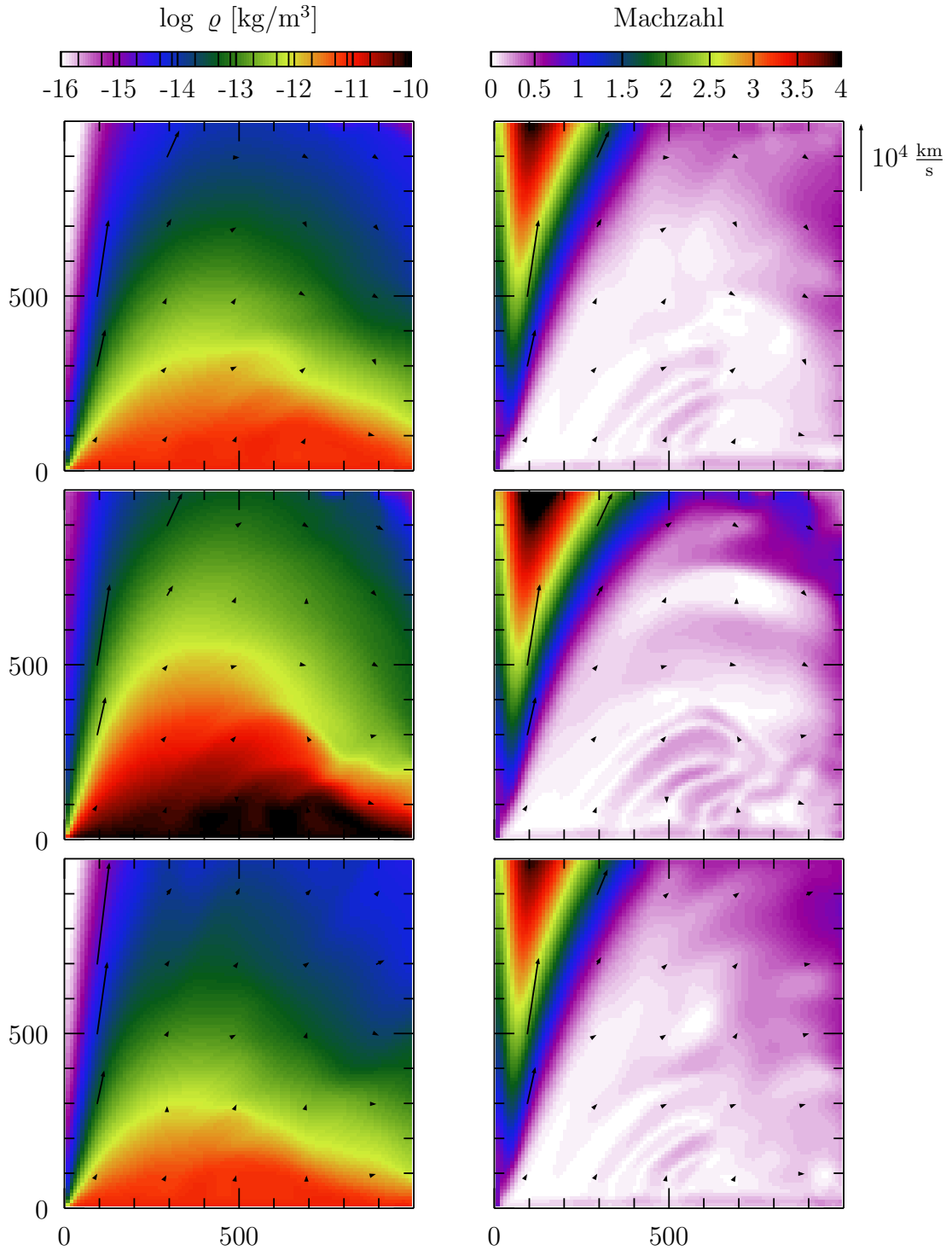


Abbildung 7.7: Windsimulationen für unterschiedliche Randbedingungen, Massendichte (links) und Machzahl (rechts) zur Zeit $t = 30 t_{\text{dyn}}$; Randbedingungen (von oben nach unten): 1. $\rho_p = 10^{-11} \text{ kg/m}^3$, $v_p = 10 \text{ km/s}$, 2. $\rho_p = 10^{-10} \text{ kg/m}^3$, $v_p = 1 \text{ km/s}$, 3. $\rho_p = 10^{-11} \text{ kg/m}^3$, $v_p = 1 \text{ km/s}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

7.2.3 Einfluss des Koordinatensystems

In den letzten Jahren sind zahlreiche Arbeiten zum Thema der numerischen Simulation strahlungsgetriebener Scheibenwinde erschienen. Es sind im Wesentlichen zwei Arbeitsgruppen, die sich zur Zeit damit beschäftigen. Die Gruppe um Daniel Proga verwendet für ihre Berechnungen das ZEUS-2D-Programm von Stone und Norman (1992) und rechnet in Kugelkoordinaten, während die Gruppe um Nicolas Antonio Pereyra ihre Berechnungen auf zylindrischen Gittern durchführt und dabei eine Version des Piecewise Parabolic Method (PPM)-Verfahrens von Colella und Woodward (1984) nutzen. Beide Gruppen kommen zu sehr unterschiedlichen Resultaten, obwohl die zugrunde gelegten physikalischen Modelle recht ähnlich sind. Es stellt sich also die Frage, ob dies vielleicht auf Unterschiede in der numerischen Methode zurückzuführen ist.

Das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren ist in der Lage, verschiedene krummlinige Gitter für die Berechnungen zu nutzen. Dabei werden alle Koordinatensysteme numerisch vollkommen identisch behandelt. Wie die Tests in Kapitel 6 gezeigt haben, ist die Koordinatenabhängigkeit der Resultate, abgesehen vom Kollapstest, minimal. Die Frage lautet also, ob dies auch für die Windsimulationen gilt.

In Abbildung 7.8 sind die Ergebnisse für Simulationen in Kugelkoordinaten für zwei verschiedene Randbedingungen bei r_{\min} aufgetragen. Abgesehen davon wurden die Simulationen mit den gleichen Parametern (siehe Gl. 7.22) initialisiert. Die Auflösung beträgt in beiden Fällen 50×60 Gitterzellen in radialer und azimuthaler Richtung. Vergleicht man die Resultate in Abbildung 7.8 mit denen in den Abbildungen 7.4, 7.5 und 7.6, so kann man im Großen und Ganzen insbesondere bei denen in der rechten Spalte eine recht gute Übereinstimmung feststellen. Die Überschallströmungen sind auch auf dem sphärisch-symmetrischen Gitter weitestgehend stationär. Allerdings sind die Austrittsgeschwindigkeiten beim Überschallausfluss etwa doppelt so hoch wie auf dem zylindrischen Gitter. Ferner scheint nicht ganz so viel Material mit hoher Massendichte in Rechengebiet zu gelangen. Dafür ist das Gebiet mit der Überschallströmung deutlich größer. Es ist noch unklar, was die Ursache für diese Unterschiede ist. Möglicherweise lassen sich Verbesserungen erzielen, wenn man den inneren Radius verkleinert. Jedoch muss man dann viel längere Laufzeiten für das Programm in Kauf nehmen, weil die Gitterzellen in Kugelkoordinaten kleiner werden, wenn man sich dem Ursprung nähert. Daher verringert sich aufgrund der CFL-Bedingung die maximale Zeitschrittweite, was die Laufzeit erhöht.

Was die beiden unterschiedlichen Randbedingungen für r_{\min} angeht, gibt es

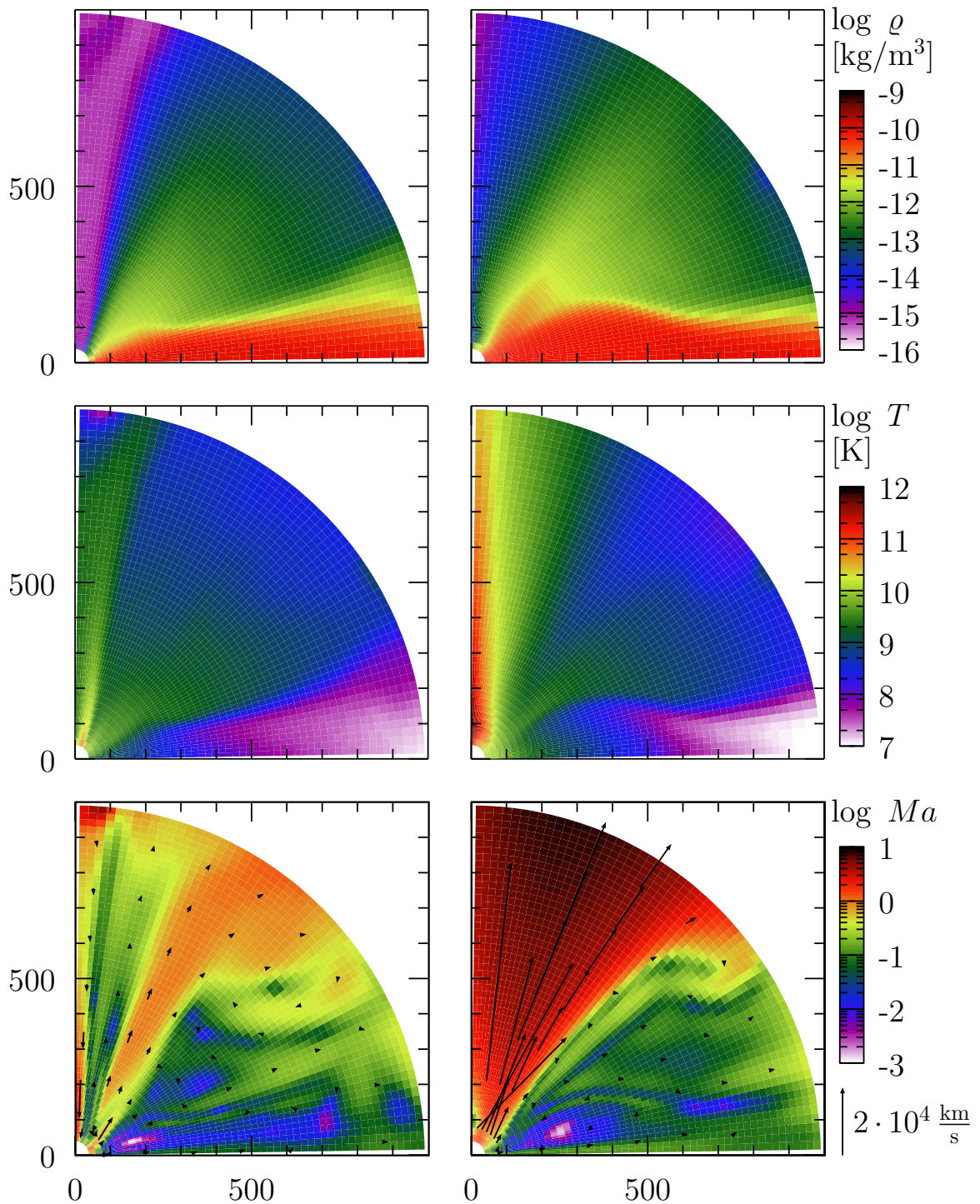


Abbildung 7.8: Windsimulation für Kugelkoordinaten: Massendichte (oben), Temperatur (Mitte) und Machzahl (unten) für reflektierende Randbedingungen (links) und für Unterschall-Einströmung (rechts) bei r_{\min} zur Zeit $t = 20 t_{\text{dyn}}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

einen bemerkenswerten Unterschied. Für den Fall des reflektierenden Randes findet man längs der Achse eine absinkende Strömung. Sie führt im Zusammenspiel mit der entgegengerichteten Überschallströmung zu Instabilitäten, die sich in Dichte- und Druckfluktuationen sowie einem variablen Geschwindigkeitsfeld äußern. Zeitweise kann man hier beobachten, dass die Akkretionsgeschwindigkeit in manchen Bereichen unter die Schallgeschwindigkeit sinkt. Mit Überschallgeschwindigkeit nachströmendes Gas erzeugt dann einen Stoß.

Ein gänzlich anderes Bild findet man bei den Diagrammen in der rechten Spalte von Abbildung 7.8. Hier sorgt das bei r_{\min} einströmende Gas für eine stationäre nach oben gerichtete Strömung entlang der Achse. Offenbar beeinflusst dieses Verhalten auch die Temperaturverteilung. Während im linken Diagramm (Abb. 7.8 Mitte) die Temperatur zur Achse hin wieder leicht abnimmt, steigt sie im rechten Diagramm weiter an, so dass sich insgesamt eine stark axiale Struktur bildet, wie sie auch für die Zylinderkoordinaten beobachtet werden konnte (vgl. Abb. 7.6 rechts).

7.2.4 Künstliche Viskosität und Drehimpuls

Als nächstes soll der Zusammenhang von künstlicher Viskosität und Drehimpuls transport für den Wind untersucht werden. Damit die Unterschiede deutlicher hervortreten, wurde beim Standardparametersatz die photosphärische Dichte auf $\varrho_p = 10^{-10} \text{ kg/m}^3$ gesetzt. Bei diesen Simulationen wurde der Parameter θ für den mc-Limiter variiert (vgl. Kapitel 6.7). Kleinere Werte für θ bedeuten für das numerische Verfahren eine höhere künstliche Viskosität.

Die Auswirkungen auf die Simulation sind auf keinen Fall zu vernachlässigen, wie man unschwer der Abbildung 7.9 entnimmt. In der Simulation mit der höheren künstlichen Viskosität (linke Spalte) wird das achsennahe Material durch diffusive Prozesse auf sehr hohe Rotationsgeschwindigkeiten in der Größenordnung 10^5 km/s beschleunigt. Die Rechnungen brechen bei $2,7 \cdot 10^8 \text{ s}$ ab. Vermutlich ist die Ursache in den sehr hohen Zentrifugalkräften zu suchen. Sie führen zu enormen Radialgeschwindigkeiten von ebenfalls etwa 10^5 km/s entlang der Achse. Dadurch dominieren die kinetischen Terme die Gesamtenergie, was eine korrekte Berechnung der inneren Energie und damit des Drucks erschwert, so dass negative Drücke auftreten.

Offenbar wird aber nicht nur mehr spezifischer Drehimpuls auf achsennahe Regionen transportiert, sondern insgesamt mehr Drehimpuls von der Scheibe auf das Rechengelände übertragen. Dies hat auch Auswirkungen auf die dynamische Entwicklung, wie man dem Geschwindigkeitsfeld entnehmen kann. Bei höherer künstlicher Viskosität kommt der axiale Akkretionsprozess sehr

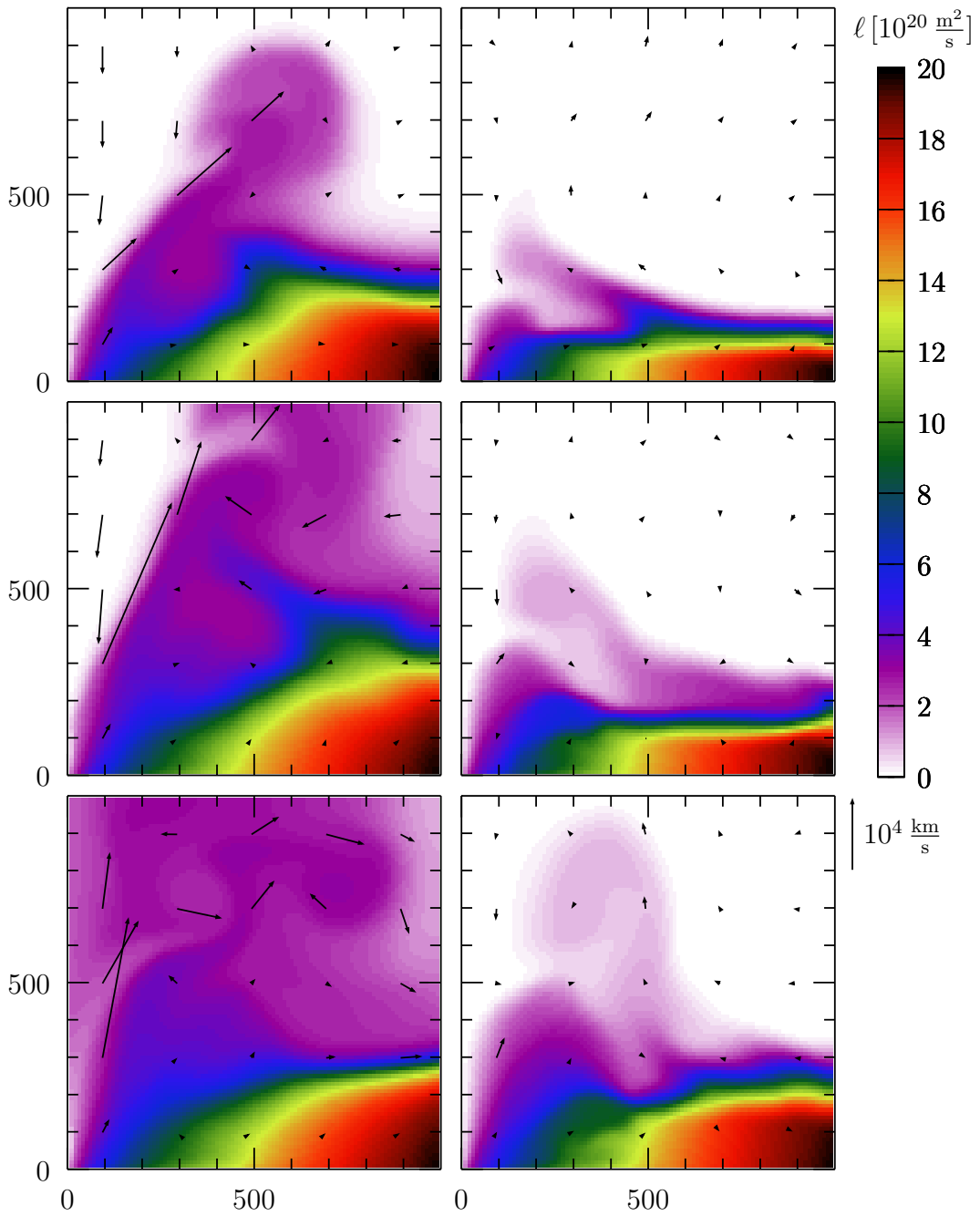


Abbildung 7.9: Windsimulation für unterschiedlich starke künstliche Viskosität: Spezifischer Drehimpuls und Geschwindigkeitsfeld; Simulation mit mc-Limiter und Parameter $\theta = 1,0$ (linke Spalte) sowie $\theta = 1,5$ (rechte Spalte) zu drei verschiedenen Zeitpunkten (zeilenweise): $t = 3; 6; 9 t_{\text{dyn}}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

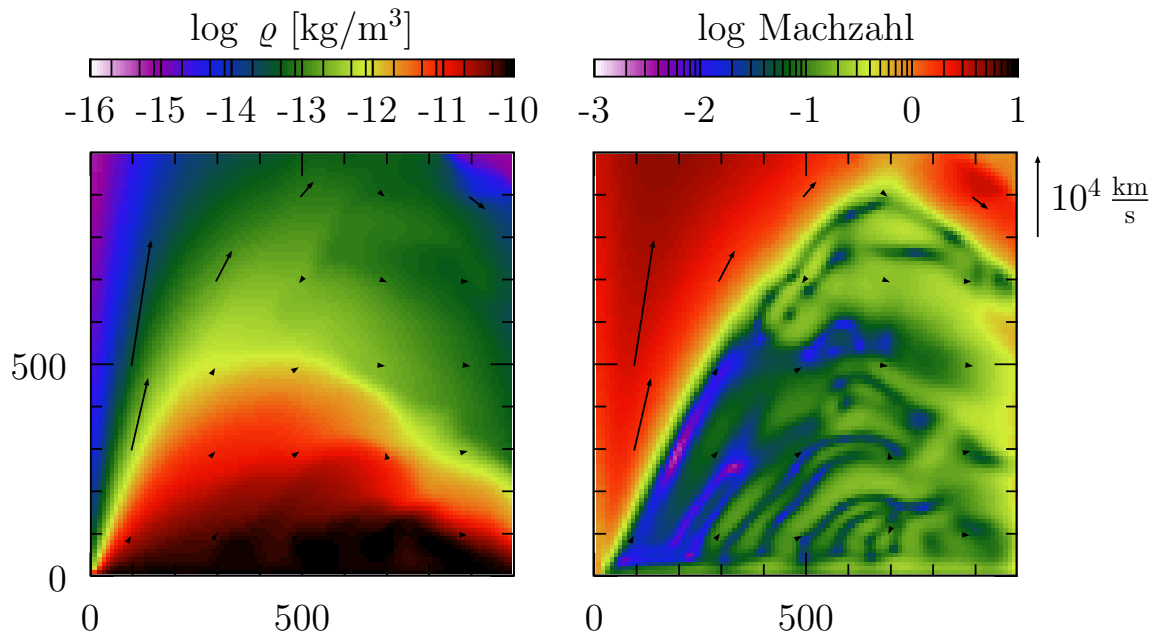


Abbildung 7.10: Windsimulation mit Beschleunigung durch Linienabsorption zur Zeit $t = 30 t_{\text{dyn}}$: Massendichte und Machzahl bei einer Einströmgeschwindigkeit von $v_p = 10 \text{ km/s}$; die Längeneinheit ist Schwarzschildradius.

viel früher zum Erliegen, so dass schon bei $9 t_{\text{dyn}}$ eine aufwärts gerichtete vertikale Strömung mit Geschwindigkeiten von deutlich mehr als 10^4 km/s entsteht.

7.2.5 Beschleunigung durch Linienabsorption

Die bislang erhaltenen Resultate schließen aufgrund der hohen Temperaturen eigentlich aus, dass Wechselwirkungsprozesse mit Hüllenelektronen der Ionen eine Rolle für die Beschleunigung spielen können. Man muss davon ausgehen, dass bei Temperaturen von weit über 10^8 K alle Gasatome vollständig ionisiert sind. Dennoch seien an dieser Stelle auch Simulationen gezeigt, die eine Beschleunigung in der CAK-Parametrisierung mit einschließen. Man sollte sich aber bewusst sein, dass für diese Modelle die physikalische Relevanz eher gering ist. Statt dessen sollten sie als Beleg dafür angesehen werden, dass der Mechanismus im Prinzip funktioniert.

Es wurden wieder die Standardparameter aus den Gl. (7.22) verwendet. Allerdings musste am äußeren Rand eine Temperatur von $T_\infty = 10^8 \text{ K}$ eingesetzt werden, weil die Simulation andernfalls nach $20 t_{\text{dyn}}$ abbricht. Der CAK-

Parameter k hängt von der Effektivtemperatur der Scheibe ab. Ein Wert von etwa $1/3$ ist hier angemessen (vgl. Pereyra u. a. 2000). Für die Dichteverteilung und die Machzahl findet man in diesem Fall nahezu identische Resultate im Vergleich mit den Ergebnissen ohne Linienbeschleunigung. Lediglich die Austrittsgeschwindigkeiten im Überschallbereich sind minimal höher. Der geringe Einfluss der Linieneffekte in dieser Simulation hängt wahrscheinlich damit zusammen, dass die auswärts gerichtete Beschleunigung durch den Druckgradienten dominiert wird.

7.2.6 Grenzen der Modelle

Ein großes Problem bei allen Simulationen sind die sehr hohen Temperaturen, die entlang der Achse von der Größenordnung 10^{11} K sein können. Es gibt zwei Gründe, warum dies die physikalische Relevanz der Simulationsergebnisse einschränkt. Zum einen spielen bei Temperaturen von unter 10^8 K Strahlungsprozesse, die eine Kühlung des Gases bewirken, eine sehr wichtige Rolle. Sie führen in der Energiegleichung zu einem Verlust an innerer Energie und können einen großen Einfluss auf den thermodynamischen Zustand des Gases haben².

Zum anderen kann bei Temperaturen von mehr als 10^{10} K nicht mehr davon ausgegangen werden, dass sich die Ionen näherungsweise durch ein ideales Gas beschreiben lassen. Man müsste hier zu einer relativistischen Beschreibung der Zustandsgleichung übergehen, in der auch Elementarteilchenprozesse wie die Elektronen-Positronen-Paarbildung berücksichtigt werden.

Ein gänzlich anderes Problem sind die Randbedingungen an der Akkretions-scheibe. Es ist noch vollkommen unklar, welcher Mechanismus tatsächlich dazu führt, dass Material in die Windzone einströmt. Auch kann noch keine verlässliche Aussage darüber gemacht werden, wieviel Materie die Akkretions-scheibe an den Wind verliert.

Auch muss man sich fragen, ob die Randbedingungen, wie sie bislang formuliert wurden, für den innersten Bereich bei kleinen Radien in der Nähe der Scheibenphotosphäre überhaupt richtig sind. Tatsächlich müsste man hier eine Ausflussrandbedingung stellen, damit Material über den Schwarzschildradius in das Schwarze Loch abfließen kann. Dies könnte die Ergebnisse stark beeinflussen, weil dadurch die Akkretionsströmung, die zu Beginn der Simulationen entlang der Achse entsteht, einen Möglichkeit hätte nach innen

²Ein entsprechender Quellterm ist bereits im Programm integriert. Er konnte jedoch nicht mehr ausreichend getestet werden, so dass von einer Verwendung abgesehen wurde.

abzuffließen. Versuche mit derartigen Randbedingungen haben bislang noch zu keinen brauchbaren Resultaten geführt.

7.3 Vergleich mit anderen Modellrechnungen

Es gibt nur wenige Arbeiten, die mit Hilfe von strahlungsgetriebenen Winden die Ausflüsse von Akkretionsscheiben zu erklären versuchen. Darunter behandeln nur die von Proga u. a. (2000) sowie Proga und Kallman (2004) AGN-Winde, wie sie hier betrachtet wurden. Grundsätzlich ist es aber möglich, die gewonnenen Resultate auch im Zusammenhang mit numerischen Windsimulationen bei Objekten mit stellaren Dimensionen wie bei CVs zu diskutieren. Die Problematik der Randbedingungen und die der Stationarität der Lösungen dürften von allgemeiner Natur sein.

Anders als bei den Modellen von Proga und Kallman (2004) und Pereyra und Kallman (2003) wurde in dieser Arbeit nicht so viel Gewicht auf die korrekte Beschreibung der Linienabsorption gelegt. Tatsächlich müsste man zum einen eine Kühlfunktion in die Energiegleichung aufnehmen, um eine realistische Temperaturverteilung zu erhalten, und zum anderen die Ionisationsstruktur mit Hilfe dieser Temperatur berechnen. Sie hat einen maßgeblichen Einfluss auf die CAK-Parameter und damit auf die Beschleunigung durch Linienabsorption.

7.3.1 Stationarität der Lösungen

Es hat sich gezeigt, dass man nur dann stationäre Lösungen für Scheibenwinde erhält, wenn eine transsonische Strömung in axialer Richtung entsteht. Eine wichtige Rolle spielen in diesem Zusammenhang die Randbedingungen an der Akkretionsscheibe. Diese Beobachtung deckt sich mit der in Pereyra u. a. (2000). Die dort angegebenen Strömungsdiagramme für Winde von CVs weisen eine große qualitative Ähnlichkeit mit den hier beschriebenen Resultaten auf. Ein Unterschied ist allerdings der jeweils verwendete Ausschnitt für das Rechengebiet. Bei Pereyra u. a. (2000) wird lediglich der Teil mit der Überschallausströmung in der Nähe der Achse berechnet, so dass Randeffekte bei größeren Radien diese Simulationen nicht beeinflussen können und eine nahezu ausschließlich vertikale Strömung entsteht.

Die hier gezeigten Resultate belegen, dass es in diesen äußeren Bereichen oberhalb der Akkretionsscheibe langsame zirkuläre Strömungen gibt, die allerdings keinen Einfluss auf den Wind haben. Dieser wird hauptsächlich in

den inneren Bereichen bei Radien kleiner als $100 R_s$ erzeugt und schon innerhalb einiger hundert Schwarzschildradien in vertikaler Richtung auf Überschallgeschwindigkeit beschleunigt. Dies geschieht jedoch nur dann, wenn am unteren Rand ausreichend Masse aus der Akkretionsscheibe nachfließen kann. Vermutlich liegt darin die Ursache dafür, dass in Proga u. a. (2000) keine stationären Winde gefunden werden. Erstens wird dort das Gebiet für Radien kleiner als $100 R_s$ aus den Rechnungen ausgeschlossen, und zweitens werden sowohl an diesem Rand als auch an der Grenze zur Akkretionsscheibe reflektierende Randbedingungen gestellt. Bei den in Proga und Kallman (2004) beschriebenen Simulationen liegt der innere Rand zwar bei etwa $10 R_s$, was aber dennoch die Akkretionsströmung entlang der Achse nicht verhindert. Die Autoren geben selbst an, dass sie dies als ein Artefakt ansehen und führen es auf die äußere Randbedingung zurück. Die hier gewonnenen Resultate lassen eher den Schluss zu, dass die reflektierende Randbedingung bei r_{\min} die Ursache ist (vgl. Abb. 7.8).

Die axiale Akkretionsströmung muss aber nicht zwangsläufig einen stationären Wind verhindern. Wie die Resultate in der hier vorgelegten Arbeit belegen, kommt es im Anfangsstadium der Simulation immer zu diesen Strömungen, die dann aber nach etwa $20 t_{\text{dyn}} \approx 20 \text{ a}$ zum Erliegen kommen und von einem auch im axialen Bereich aufsteigenden Wind abgelöst werden. Proga und Kallman (2004) beenden ihre Simulation schon nach $6,5 \text{ a}$, so dass ein stationärer Zustand noch gar nicht erreicht werden konnte.

Auf Grund der in dieser Arbeit vorgelegten Ergebnisse kann ausgeschlossen werden, dass die Geometrie des numerischen Gitters die Simulationsergebnisse maßgeblich beeinflusst. Mit der richtigen Wahl der Randbedingungen können auch auf sphärischen Gittern, wie sie Proga und Kallman (2004) verwenden, ähnliche Resultate wie auf zylindrischen Gittern gewonnen werden. Die Unterschiede lassen sich möglicherweise durch die etwas andere Form der Ränder für kleine Radien erklären.

Hingegen spielt die künstliche Viskosität des numerischen Verfahrens im Hinblick auf den Drehimpulstransport und die damit verbundene dynamische Entwicklung der Modelle eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Leider finden sich in keiner der bislang veröffentlichten Arbeiten zu strahlungsgetriebenen Scheibenwinden Daten, die die Verteilung des Drehimpulses zeigen. Auch wird in keiner der Arbeiten darauf hingewiesen, welche Art der künstlichen Viskosität für die jeweiligen Simulationen verwendet wurde. Auch hier können die Ursachen dafür liegen, dass die Resultate der Windberechnungen in machen Fällen keine stationären Lösungen aufweisen.

7.3.2 Instabilitäten

Ähnlich wie bei den Modellrechnungen von Proga u. a. (2000) konnte für Kugelkoordinaten mit einem reflektierenden Rand bei r_{\min} und einer Unterschall-Einströmung an der Scheibenoberfläche bei ϑ_{\max} eine Strömung erzeugt werden, die im achsennahen Bereich absinkt. Sie führt im Zusammenspiel mit dem in der entgegengesetzten Richtung mit Überschallgeschwindigkeit ausströmenden Wind zu Verwirbelungen in diesem Bereich. Es ist bekannt, dass solche Scherströmungen zu Instabilitäten führen, die die stationäre Strömung zerstören können. Auch dieses Phänomen kann als mögliche Ursache dafür angesehen werden, dass Proga, Stone und Kallman keine stationären Windlösungen gefunden haben.

Außerdem ist es im Fall einer Strömung, die vom oberen Rand in das Rechengebiet einfließt, unbedingt erforderlich, dass man korrekte Einflussrandbedingungen stellt. Nicht-reflektierende Randbedingungen, wie in Proga u. a. (2000) und Proga und Kallman (2004), sind in solch einem Fall keine gute Wahl.

Eine genauere Analyse der entstehenden Instabilitäten und der Wirkung auf den Wind steht noch aus. Es ist aber auch ein Szenario denkbar, in dem der Wind nur leicht gestört wird, während es gleichzeitig im axialen Bereich immer wieder zu kleineren Ausbrüchen kommt. Stöße, die dort entstehen und in mehr oder weniger regelmäßigen Abständen nach oben aus dem Rechengebiet hinauswandern, könnten eine Ursache für die noch unklare Herkunft der auf sehr viel größeren räumlichen Skalen beobachteten Variabilitäten in Jets sein.

Kapitel 8

Resümee

Allein die Entwicklung immer neuer Modelle für die Beschreibung astrophysikalischer Prozesse führt nicht zwangsläufig zu neuen Erkenntnissen, wenn man nicht in der Lage ist, konkrete und auf ihre Korrektheit hin überprüfbare Lösungen anzugeben. Manchmal ist es daher hilfreich, die Modelle wieder auf das Wesentliche zu reduzieren und eine neue Lösungsmethode zu entwickeln. Es zeigt sich immer wieder, dass die Numerik der hyperbolischen Erhaltungsgleichungen ihre Tücken hat und man darauf gefasst sein sollte, dass die Lösungen durch die Art des Verfahrens beeinflusst werden. Es ist daher wichtig, alte Methoden zu hinterfragen und deren Ergebnisse mit denen neuerer Verfahren zu vergleichen. Wie die Tests in Kapitel 6 und Modellrechnungen in Kapitel 7 gezeigt haben, können numerische Effekte, wie z.B. die Wirkungsweise der künstlichen Viskosität, einen entscheidenden Einfluss auf die Resultate haben und möglicherweise verhindern, dass die gesuchten Lösungen tatsächlich gefunden werden.

Es konnte gezeigt werden, dass das KT-Verfahren in der in dieser Arbeit entwickelten Form für krummlinige Gitter den bislang gebräuchlichen Methoden in Bezug auf die Erhaltungseigenschaften mindestens ebenbürtig ist. Es bietet darüberhinaus zwei entscheidende Vorteile: Erstens ist es vergleichsweise einfach – sieht man einmal von der etwas aufwendigen Herleitung ab –, und zweitens ist es äußerst flexibel. Dadurch, dass es ein zentrales Verfahren ist, können alle Größen als Zellmittelwerte, die an den Volumenzentren verankert sind, definiert werden. Eine Unterscheidung zwischen Vektorgrößen und skalaren Größen, wie sie auf gestaffelten Gittern z.B. beim Verfahren von Norman und Winkler (1986) nötig ist, entfällt. Als einzige Information über das zu lösende Transportproblem werden die minimalen und maximalen Eigenwerte der Jacobimatrizen benötigt. Es ist nicht einmal zwingend erforderlich, dass diese analytisch berechnet werden können, auch wenn davon

in dieser Arbeit Gebrauch gemacht wurde. Das ermöglicht die Betrachtung von anderen Zustandsgleichungen neben der des idealen Gases. Durch die semidiskrete Formulierung ist es außerdem sehr einfach, neue Quellterme und damit neue physikalische Effekte in dem Verfahren zu berücksichtigen. Man braucht lediglich eine geeignete Approximation für die Zellmittelwerte der Quellterme und kann sie dann als neue Summanden in der Zeitentwicklungsgleichung hinzufügen. Auch was die Methode für die Zeitintegration angeht, ist das Verfahren sehr flexibel. Im Prinzip kann auf ein beliebiges Schema aus der Vielzahl der bekannten Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen zurückgegriffen werden. Sollte es nötig sein, können hier auch implizite Löser zum Einsatz kommen. Die Formulierung in allgemeinen krummlinig-orthogonalen Koordinaten gestattet es ferner, auf anderen krummlinigen Gittern als den in dieser Arbeit verwendeten polaren, zylindrischen und sphärischen Gittern zu rechnen.

Neben dieser Flexibilität erweist sich das KT-Verfahren in der Praxis außerdem als äußerst effizient. Eine genauere quantitative Analyse steht zwar noch aus, aber zumindest für das Beispiel der Kollapsrechnungen waren die Simulationen zum Teil um etwa einen Faktor zehn schneller als die mit dem NIRVANA-Code! Es ist nicht ganz auszuschließen, dass dies auch auf die Art der Implementierung, die Programmiersprache sowie den verwendeten Compiler zurückzuführen ist. Da NIRVANA in der Programmiersprache C implementiert wurde, ist ein echter quantitativer Vergleich der Performance der jeweils angewandten numerischen Methode schwierig, wenn nicht gar unmöglich.

Auch wenn letztendlich nicht alle offenen Fragen für das Problem der Scheibenwinde beantwortet werden konnten, so hat sich doch gezeigt, dass sich das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren dazu eignet, komplizierte hydrodynamische Probleme zu lösen. Außerdem konnte nachgewiesen werden, dass stationäre Lösungen für diese physikalischen Systeme existieren, sofern geeignete Randbedingungen gestellt werden. Es wurde eine leichte Koordinatenabhängigkeit der stationären Lösungen festgestellt. Wahrscheinlich ist aber davon auszugehen, dass dies auf die etwas andere Form der Ränder, insbesondere in der Nähe des Ursprungs, zurückzuführen ist.

Die in den Simulationen gewonnen Temperaturverteilungen scheinen es nötig zu machen, die Verwendung einer anderen Zustandsgleichung für das Problem der Scheibenwinde in Aktiven Galaxienkernen in Erwägung zu ziehen. Ferner sollte unbedingt, wie bei Pereyra und Kallman (2003) sowie Proga und Kallman (2004) beschrieben, eine Kühlfunktion in der Energiegleichung berücksichtigt werden. Sollte dies zu einer signifikant anderen Temperaturverteilung mit deutlich niedrigeren Temperaturen führen, so kann man neben

der Beschleunigung durch elastische Elektronenstreuung auch den Mechanismus der Beschleunigung durch Linienabsorption integrieren.

Daneben erscheint es trotz der Resultate dieser Arbeit unerlässlich, der Frage nach den korrekten Randbedingungen für die Scheibenwinde weiter nachzugehen. Hilfreich wären hier Lösungen für die Vertikalstruktur von Akkretionsscheiben. Auf diese Weise gewonnene Dichte- und Temperaturprofile an der Scheibenoberfläche könnten dabei helfen, den Parameterraum für die Scheibenwinde weiter einzugrenzen.

Trotz der recht ermutigenden Ergebnisse kann das Problem der Scheibenwinde in aktiven galaktischen Kernen noch nicht als gelöst betrachtet werden. Die theoretische Astrophysik arbeitet hier bislang auf einem Gebiet, das der Beobachtung nicht direkt zugänglich ist, weil die Objekte zu klein und zu weit entfernt sind. Allerdings wird sich dieses Gebiet in nicht allzu ferner Zukunft durch die Entwicklung neuer Instrumente den Beobachtern öffnen. Spätestens dann sollte die Theorie überprüfbare Aussagen machen können.

Anhang A

Divergenzen von Vektor- und Tensorfeldern

Die Beziehung (3.3) erlaubt es einem mit Hilfe der affinen Verbindungen (3.7) die kovarianten Ableitungen der Basisvektoren in Richtung der Basisvektoren aufzulisten.

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\hat{e}_\xi} \hat{e}_\xi &= \Gamma_{\xi\xi}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = -c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} \hat{e}_{\hat{\eta}} \\
 \nabla_{\hat{e}_\xi} \hat{e}_{\hat{\eta}} &= \Gamma_{\hat{\eta}\xi}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} \hat{e}_{\hat{\xi}} \\
 \nabla_{\hat{e}_\xi} \hat{e}_{\hat{\phi}} &= \Gamma_{\hat{\phi}\xi}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = 0 \\
 \nabla_{\hat{e}_{\hat{\eta}}} \hat{e}_\xi &= \Gamma_{\xi\hat{\eta}}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \hat{e}_{\hat{\eta}} \\
 \nabla_{\hat{e}_{\hat{\eta}}} \hat{e}_{\hat{\eta}} &= \Gamma_{\hat{\eta}\hat{\eta}}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = -c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \hat{e}_{\hat{\xi}} \\
 \nabla_{\hat{e}_{\hat{\eta}}} \hat{e}_{\hat{\phi}} &= \Gamma_{\hat{\phi}\hat{\eta}}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = 0 \\
 \nabla_{\hat{e}_{\hat{\phi}}} \hat{e}_\xi &= \Gamma_{\xi\hat{\phi}}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} \hat{e}_{\hat{\phi}} \\
 \nabla_{\hat{e}_{\hat{\phi}}} \hat{e}_{\hat{\eta}} &= \Gamma_{\hat{\eta}\hat{\phi}}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} \hat{e}_{\hat{\phi}} \\
 \nabla_{\hat{e}_{\hat{\phi}}} \hat{e}_{\hat{\phi}} &= \Gamma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}} = -c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} \hat{e}_{\hat{\xi}} - c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} \hat{e}_{\hat{\eta}}
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Für die Darstellung der Divergenz von Vektoren in krummlinigen Koordinaten entwickelt man zunächst nach der in Kapitel 3.1.1 angegebenen Orthonormalbasis und bildet dann die Kontraktion der kovarianten Ableitung mit Hilfe der dualen Einsformbasis.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot (v^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}}) = \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{l}}, \nabla_{\hat{e}_{\hat{l}}} (v^{\hat{k}} \hat{e}_{\hat{k}}) \right\rangle = \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{l}}, (\partial_{\hat{l}} v^{\hat{k}}) \hat{e}_{\hat{k}} + v^{\hat{k}} \nabla_{\hat{e}_{\hat{l}}} \hat{e}_{\hat{k}} \right\rangle$$

Dabei bezeichnet $\partial_{\hat{l}} v^{\hat{k}}$ die partielle Ableitung der Vektorkomponente $v^{\hat{k}}$ nach der Koordinaten $x^{\hat{l}}$ im Orthogonalsystem, also z.B.

$$\partial_{\xi} v^{\hat{k}} = \frac{1}{h_{\xi}} \frac{\partial v^{\hat{k}}}{\partial \xi}. \quad (\text{A.2})$$

Nun kann man die Orthogonalität der Basisvektoren und dualen Einsformen ausnutzen. Es gilt nämlich

$$\langle \tilde{\omega}^{\hat{l}}, \hat{e}_{\hat{k}} \rangle = \delta^{\hat{l}}_{\hat{k}}. \quad (\text{A.3})$$

Mit den obigen Beziehungen für die kovarianten Ableitungen der Basisvektoren (Gl. A.1) erhält man die einfache Darstellung

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \partial_{\hat{k}} v^{\hat{k}} + v^{\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + v^{\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \quad (\text{A.4})$$

oder mit Hilfe von Gl. (3.6)

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{h_{\xi} h_{\eta} h_{\phi}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (h_{\eta} h_{\phi} v_{\hat{\xi}}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_{\xi} h_{\phi} v_{\hat{\eta}}) \right) + \frac{1}{h_{\phi}} \frac{\partial v_{\hat{\phi}}}{\partial \phi}. \quad (\text{A.5})$$

Die Divergenz eines Tensors zweiter Stufe berechnet sich analog, allerdings ist zu beachten, dass man zunächst definieren muss auf welchen der beiden Indizes die Kontraktion wirken soll. Überlicherweise wählt man den zweiten Index¹.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{T} &= \nabla \cdot \left(T^{\hat{k}\hat{l}} \hat{e}_{\hat{k}} \otimes \hat{e}_{\hat{l}} \right) = \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{n}}, \nabla_{\hat{e}_{\hat{n}}} \left(T^{\hat{k}\hat{l}} \hat{e}_{\hat{k}} \otimes \hat{e}_{\hat{l}} \right) \right\rangle \\ &= \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{n}}, \hat{e}_{\hat{l}} \right\rangle \left(\partial_{\hat{n}} T^{\hat{k}\hat{l}} \right) \hat{e}_{\hat{k}} + \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{n}}, \hat{e}_{\hat{l}} \right\rangle T^{\hat{k}\hat{l}} \left(\nabla_{\hat{e}_{\hat{n}}} \hat{e}_{\hat{k}} \right) + \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{n}}, \nabla_{\hat{e}_{\hat{n}}} \hat{e}_{\hat{l}} \right\rangle T^{\hat{k}\hat{l}} \hat{e}_{\hat{k}} \\ &= \left(\partial_{\hat{l}} T^{\hat{k}\hat{l}} \right) \hat{e}_{\hat{k}} + T^{\hat{k}\hat{l}} \left(\nabla_{\hat{e}_{\hat{l}}} \hat{e}_{\hat{k}} \right) + \left\langle \tilde{\omega}^{\hat{n}}, \nabla_{\hat{e}_{\hat{n}}} \hat{e}_{\hat{l}} \right\rangle T^{\hat{k}\hat{l}} \hat{e}_{\hat{k}} \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Gleichungen (A.1) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{T} &= \left(\partial_{\hat{l}} T^{\hat{\xi}\hat{l}} + T^{\hat{\xi}\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + T^{\hat{\xi}\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \right. \\ &\quad \left. + T^{\hat{\eta}\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} - T^{\hat{\eta}\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} - T^{\hat{\phi}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} \right) \hat{e}_{\hat{\xi}} \\ &+ \left(\partial_{\hat{l}} T^{\hat{\eta}\hat{l}} + T^{\hat{\eta}\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) + T^{\hat{\eta}\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) \right. \\ &\quad \left. + T^{\hat{\xi}\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} - T^{\hat{\xi}\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} - T^{\hat{\phi}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} \right) \hat{e}_{\hat{\eta}} \\ &+ \left(\partial_{\hat{l}} T^{\hat{\phi}\hat{l}} + T^{\hat{\phi}\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + T^{\hat{\phi}\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \right. \\ &\quad \left. + T^{\hat{\xi}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} + T^{\hat{\eta}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} \right) \hat{e}_{\hat{\phi}}. \end{aligned}$$

¹Bei symmetrischen Tensoren spielt dies keine Rolle

Mit den Gleichungen (3.6) für die Kommutatorkoeffizienten findet man für die einzelnen Komponenten:

$$\begin{aligned} \left[\nabla \cdot \mathbf{T} \right]_{\hat{\xi}} &= \frac{1}{h_{\xi} h_{\eta} h_{\phi}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_{\eta} h_{\phi} T^{\hat{\xi}\hat{\xi}} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_{\xi} h_{\phi} T^{\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) \right) \\ &\quad + \frac{1}{h_{\phi}} \frac{\partial}{\partial \phi} T^{\hat{\xi}\hat{\phi}} + T^{\hat{\eta}\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} - T^{\hat{\eta}\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} - T^{\hat{\phi}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \left[\nabla \cdot \mathbf{T} \right]_{\hat{\eta}} &= \frac{1}{h_{\xi} h_{\eta} h_{\phi}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_{\eta} h_{\phi} T^{\hat{\eta}\hat{\xi}} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_{\xi} h_{\phi} T^{\hat{\eta}\hat{\eta}} \right) \right) \\ &\quad + \frac{1}{h_{\phi}} \frac{\partial}{\partial \phi} T^{\hat{\eta}\hat{\phi}} + T^{\hat{\xi}\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} - T^{\hat{\xi}\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} - T^{\hat{\phi}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} \left[\nabla \cdot \mathbf{T} \right]_{\hat{\phi}} &= \frac{1}{h_{\xi} h_{\eta} h_{\phi}} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_{\eta} h_{\phi} T^{\hat{\phi}\hat{\xi}} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(h_{\xi} h_{\phi} T^{\hat{\phi}\hat{\eta}} \right) \right) \\ &\quad + \frac{1}{h_{\phi}} \frac{\partial}{\partial \phi} T^{\hat{\phi}\hat{\phi}} + T^{\hat{\xi}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}} + T^{\hat{\eta}\hat{\phi}} c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Anhang B

Eigenvektoren der Jacobimatrizen

Linkshändige Eigenvektoren von \mathbf{F} :

$$\mathbf{l}_F^{(1)} = \frac{\gamma - 1}{c_s^2} \begin{pmatrix} \frac{c_s^2}{\gamma - 1} - \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) \\ v_{\hat{\xi}} \\ v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{l}_F^{(2)} = \begin{pmatrix} -v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{l}_F^{(3)} = \frac{\gamma - 1}{c_s^2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2)\ell \\ \ell v_{\hat{\xi}} \\ \ell v_{\hat{\eta}} \\ \frac{c_s^2}{\gamma - 1} \\ -\ell \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{l}_F^{(4)} = \frac{\gamma - 1}{2c_s^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) + \frac{c_s}{\gamma - 1}v_{\hat{\xi}} \\ -v_{\hat{\xi}} - \frac{c_s}{\gamma - 1} \\ -v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{l}_F^{(5)} = \frac{\gamma - 1}{2c_s^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) - \frac{c_s}{\gamma - 1}v_{\hat{\xi}} \\ -v_{\hat{\xi}} + \frac{c_s}{\gamma - 1} \\ -v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und rechtshändige Eigenvektoren von \mathbf{F} :

$$\mathbf{r}_F^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\hat{\xi}} \\ v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_F^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ v_{\hat{\eta}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_F^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{r}_F^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\hat{\xi}} - c_s \\ v_{\hat{\eta}} \\ \ell \\ h - c_s v_{\hat{\xi}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_F^{(5)} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\hat{\xi}} + c_s \\ v_{\hat{\eta}} \\ \ell \\ h + c_s v_{\hat{\xi}} \end{pmatrix}$$

Linkshändige Eigenvektoren von \mathbf{G} :

$$\mathbf{l}_G^{(1)} = \frac{\gamma - 1}{c_s^2} \begin{pmatrix} \frac{c_s^2}{\gamma - 1} - \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) \\ v_{\hat{\xi}} \\ v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{l}_G^{(2)} = \begin{pmatrix} -v_{\hat{\xi}} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{l}_G^{(3)} = \frac{\gamma - 1}{c_s^2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2)\ell \\ \ell v_{\hat{\xi}} \\ \ell v_{\hat{\eta}} \\ \frac{c_s^2}{\gamma - 1} \\ -\ell \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{l}_G^{(4)} = \frac{\gamma - 1}{2c_s^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) + \frac{c_s}{\gamma - 1}v_{\hat{\eta}} \\ -v_{\hat{\xi}} \\ -v_{\hat{\eta}} - \frac{c_s}{\gamma - 1} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{l}_G^{(5)} = \frac{\gamma - 1}{2c_s^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) - \frac{c_s}{\gamma - 1}v_{\hat{\eta}} \\ -v_{\hat{\xi}} \\ -v_{\hat{\eta}} + \frac{c_s}{\gamma - 1} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und rechtshändige Eigenvektoren von \mathbf{G} :

$$\mathbf{r}_G^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\hat{\xi}} \\ v_{\hat{\eta}} \\ 0 \\ \frac{1}{2}(v_{\hat{\xi}}^2 + v_{\hat{\eta}}^2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_G^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ v_{\hat{\xi}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_G^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{r}_G^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\hat{\xi}} \\ v_{\hat{\eta}} - c_s \\ \ell \\ h - c_s v_{\hat{\eta}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_G^{(5)} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\hat{\xi}} \\ v_{\hat{\eta}} + c_s \\ \ell \\ h + c_s v_{\hat{\eta}} \end{pmatrix}$$

Anhang C

Charakteristische Gleichungen

Für das in Kapitel 4 entwickelte numerische Schema, ist es nicht erforderlich, dass man die Gestalt der charakteristischen Gleichungen kennt. Dort gehen lediglich die minimalen und maximalen Eigenwerte ein. Der Vollständigkeit halber seien sie hier dennoch angegeben, da sie bei der Formulierung der Randbedingungen durchaus hilfreich sein können. Auch diese Herleitung ist etwas länglich, daher sei hier nur der Lösungsweg skizziert wie er in vielen Lehrbüchern zu finden ist (siehe z.B. Hirsch 1988a).

Wie schon in Kapitel 3.2.1 angemerkt wurde, ist es bei zwei- oder mehrdimensionalen Systemen in der Regel nicht möglich, alle Jacobimatrizen der Flüsse simultan zu diagonalisieren. Das hat zur Folge, dass eine vollständige Dekomposition der Flussgleichung nach den Charakteristiken im Allgemeinen nicht möglich ist. Man kann aber für jede Raumrichtung getrennt charakteristische Variablen finden. Dazu multipliziert man die Erhaltungsgleichung (3.28) einmal mit \mathbf{L}_F^{-1} und ein anderes Mal mit \mathbf{L}_G^{-1} , nutzt die Beziehungen (3.30) und (3.31) und fügt die Einheitsmatrix $\mathbf{L}_F\mathbf{L}_F^{-1}$ bzw. $\mathbf{L}_G\mathbf{L}_G^{-1}$ ein:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_F^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{L}_F^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_F \mathbf{L}_F^{-1} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi \mathbf{u}) \\ + \mathbf{L}_F^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_F \mathbf{L}_F^{-1} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi \mathbf{u}) = \mathbf{L}_F^{-1} \mathbf{S} \\ \mathbf{L}_G^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{L}_G^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_G \mathbf{L}_G^{-1} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta h_\phi \mathbf{u}) \\ + \mathbf{L}_G^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_G \mathbf{L}_G^{-1} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi h_\phi \mathbf{u}) = \mathbf{L}_G^{-1} \mathbf{S} \end{aligned}$$

Die Quellterme wurden hier in einem Vektor \mathbf{S} zusammengefasst. Mit der Diagonalisierung (3.35) und den Matrizen

$$\mathbf{L}_F^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_F = \begin{pmatrix} v_{\hat{\eta}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_{\hat{\eta}} & 0 & c_s^2 & c_s^2 \\ 0 & 0 & v_{\hat{\eta}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & v_{\hat{\eta}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & v_{\hat{\eta}} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{L}_G^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{L}_G = \begin{pmatrix} v_{\hat{\xi}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_{\hat{\xi}} & 0 & c_s^2 & c_s^2 \\ 0 & 0 & v_{\hat{\xi}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & v_{\hat{\xi}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & v_{\hat{\xi}} \end{pmatrix}$$

erhält man das charakteristische System für die jeweilige Raumrichtung¹.

$$\left(\frac{\delta}{\delta t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\hat{\xi}}} \frac{\delta}{\delta \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\delta}{\delta \eta} \right) w_1^{(\xi)} = 0 \quad (\text{C.1})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\hat{\xi}}} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) w_2^{(\xi)} = v_{\hat{\xi}} \left(v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} - v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{1}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\partial P}{\partial \eta} + f_{\hat{\eta}} + f_{z,\hat{\eta}} \quad (\text{C.2})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\hat{\xi}}} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) w_3^{(\xi)} = 0 \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta}{\delta t} + (v_{\hat{\xi}} - c_s) \frac{1}{h_{\hat{\xi}}} \frac{\delta}{\delta \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\delta}{\delta \eta} \right) w_4^{(\xi)} &= v_{\hat{\eta}} \left(v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) \\ &- c_s \left(v_{\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + v_{\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \right) - \frac{c_s}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\partial v_{\hat{\eta}}}{\partial \eta} - f_{\hat{\xi}} - f_{z,\hat{\xi}} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta}{\delta t} + (v_{\hat{\xi}} + c_s) \frac{1}{h_{\hat{\xi}}} \frac{\delta}{\delta \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\delta}{\delta \eta} \right) w_5^{(\xi)} &= -v_{\hat{\eta}} \left(v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) \\ &- c_s \left(v_{\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + v_{\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \right) - \frac{c_s}{h_{\hat{\eta}}} \frac{\partial v_{\hat{\eta}}}{\partial \eta} - f_{\hat{\xi}} - f_{z,\hat{\xi}} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

¹Der in Klammern hochgeschriebene Index bei den charakteristischen Variablen w_i soll dies andeuten.

$$\left(\frac{\delta}{\delta t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\xi}} \frac{\delta}{\delta \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\eta}} \frac{\delta}{\delta \eta}\right) w_1^{(\eta)} = 0 \quad (\text{C.6})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\xi}} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\eta}} \frac{\partial}{\partial \eta}\right) w_2^{(\eta)} = v_{\hat{\eta}} \left(v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} - v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{1}{h_{\xi}} \frac{\partial P}{\partial \xi} + f_{\hat{\xi}} + f_{z,\hat{\xi}} \quad (\text{C.7})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\xi}} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{v_{\hat{\eta}}}{h_{\eta}} \frac{\partial}{\partial \eta}\right) w_3^{(\eta)} = 0 \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta}{\delta t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\xi}} \frac{\delta}{\delta \xi} + (v_{\hat{\eta}} - c_s) \frac{1}{h_{\eta}} \frac{\delta}{\delta \eta}\right) w_4^{(\eta)} &= v_{\hat{\xi}} \left(v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) \\ &- c_s \left(v_{\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + v_{\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \right) - \frac{c_s}{h_{\xi}} \frac{\partial v_{\hat{\xi}}}{\partial \xi} - f_{\hat{\eta}} - f_{z,\hat{\eta}} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta}{\delta t} + \frac{v_{\hat{\xi}}}{h_{\xi}} \frac{\delta}{\delta \xi} + (v_{\hat{\eta}} + c_s) \frac{1}{h_{\eta}} \frac{\delta}{\delta \eta}\right) w_5^{(\eta)} &= -v_{\hat{\xi}} \left(v_{\hat{\xi}} c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + v_{\hat{\eta}} c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} \right) \\ &- c_s \left(v_{\hat{\xi}} (c_{\hat{\eta}\hat{\xi}\hat{\eta}} + c_{\hat{\phi}\hat{\xi}\hat{\phi}}) + v_{\hat{\eta}} (c_{\hat{\xi}\hat{\eta}\hat{\xi}} + c_{\hat{\phi}\hat{\eta}\hat{\phi}}) \right) - \frac{c_s}{h_{\xi}} \frac{\partial v_{\hat{\xi}}}{\partial \xi} - f_{\hat{\eta}} - f_{z,\hat{\eta}} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Dabei definiert man die charakteristischen (Pseudo-)Variablen durch

$$\frac{\delta w_1^{(\xi)}}{\delta \times} = \frac{\delta w_1^{(\eta)}}{\delta \times} = \frac{\partial \rho}{\partial \times} - \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial P}{\partial \times} \quad (\text{C.11})$$

$$w_2^{(\xi)} = v_{\hat{\eta}}, \quad w_2^{(\eta)} = v_{\hat{\xi}} \quad (\text{C.12})$$

$$w_3^{(\xi)} = w_3^{(\eta)} = \ell \quad (\text{C.13})$$

$$\frac{\delta w_4^{(\xi)}}{\delta \times} = -\frac{\partial v_{\hat{\xi}}}{\partial \times} + \frac{1}{\rho c_s} \frac{\partial P}{\partial \times}, \quad \frac{\delta w_4^{(\eta)}}{\delta \times} = -\frac{\partial v_{\hat{\eta}}}{\partial \times} + \frac{1}{\rho c_s} \frac{\partial P}{\partial \times} \quad (\text{C.14})$$

$$\frac{\delta w_5^{(\xi)}}{\delta \times} = \frac{\partial v_{\hat{\xi}}}{\partial \times} + \frac{1}{\rho c_s} \frac{\partial P}{\partial \times}, \quad \frac{\delta w_5^{(\eta)}}{\delta \times} = \frac{\partial v_{\hat{\eta}}}{\partial \times} + \frac{1}{\rho c_s} \frac{\partial P}{\partial \times}, \quad (\text{C.15})$$

wobei \times für eine der Variablen ξ, η oder t steht.

Anhang D

Verzeichnis der Abkürzungen

AGN Active Galactic Nucleus

BLR broad line region

CAK Castor-Abbott-Klein

CFL Courant-Friedrichs-Levi

CV Cataclysmic Variable

FV Finite-Volumen

HLLE Harten-Lax-van Leer-Einfeldt

KT Kurganov-Tadmor

MUSCL Monotonic Upstream-Centred Scheme for Conservation Laws

NLR narrow line region

PC Personal Computer

PPM Piecewise Parabolic Method

TVD Total Variation Diminishing

Literaturverzeichnis

- Abbott 1982** ABBOTT, D.: The theory of radiatively driven stellar winds. II - The line acceleration. In: *The Astrophysical Journal* **259** (1982), S. 282–301
- Bondi 1951** BONDI, H.: On spherically symmetrical accretion. In: *Monthly Notices of the R. A. Soc.* **112** (1951), S. 195
- Boris und Book 1973** BORIS, J. P. ; BOOK, D. L.: Flux corrected transport: I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. In: *J. of Comp. Phys.* **11** (1973), S. 38–69
- Castor u. a. 1975** CASTOR, J. I. ; ABBOTT, D. C. ; KLEIN, R. I.: Radiation-driven winds in Of stars. In: *The Astrophysical Journal* **195** (1975), Januar, S. 157–174
- Castor 1974** CASTOR, J. L.: On the force associated with absorption of spectral line radiation. In: *Monthly Notices of the R. A. Soc.* **169** (1974), November, S. 279–306
- Chakrabarti 1990** CHAKRABARTI, S. K.: *Theory of transonic astrophysical flows*. Singapore : World Scientific Publication, 1990
- Colella und Woodward 1984** COLELLA, P. ; WOODWARD, P. R.: The Piecewise Parabolic Method (PPM) for gas-dynamical simulations. In: *J. of Comp. Phys.* **54** (1984), S. 174
- Einfeldt 1988** EINFELDT, B.: On godunov-type methods for gas dynamics. In: *J. of Comp. Phys.* **25** (1988), S. 294–318
- Emery 1968** EMERY, A. F.: An evaluation of several differencing methods for inviscid fluid flow problems. In: *J. of Comp. Phys.* **2** (1968), S. 306–331
- Frank u. a. 2002** FRANK, J. ; KING, A. ; RAINE, D.: *Accretion power in astrophysics*. Cambridge, UK : Cambridge University Press, Februar 2002

- Friedrichs 1954** FRIEDRICHS, K. O.: Symmetric hyperbolic linear differential equations. In: *Comm. Pure and Appl. Math.* **7** (1954), S. 345
- Godunov 1959** GODUNOV, S. K.: A finite difference method for the numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. In: *Math. Sb.* **47** (1959), S. 271
- Harten u. a. 1983** HARTEN, A. ; LAX, P. D. ; VAN LEER, B.: On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. In: *SIAM Review* **25** (1983), Nr. 1, S. 35–61
- Hirsch 1988a** HIRSCH, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Bd. 2: *Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. Chichester, UK : John Wiley & Sons, 1988
- Hirsch 1988b** HIRSCH, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Bd. 1: *Fundamentals of Numerical Discretization*. Chichester, UK : John Wiley & Sons, 1988
- Hämmerlin und Hoffmann 1989** HÄMMERLIN, G. ; HOFFMANN, K.-H.: *Grundwissen Mathematik*. Bd. 7: *Numerische Mathematik*. Berlin, Germany : Springer Verlag, 1989
- Illenseer 2002** ILLENSEER, T.: *Zur Theorie von Scheibenwinden*, Fakultät für Physik und Astronomie der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diplomarbeit, 2002
- Kurganov und Petrova 2001** KURGANOV, A. ; PETROVA, G.: A third-order semi-discrete genuinely multidimensional central scheme for hyperbolic conservation laws and related problems. In: *Numer. Math.* **88** (2001), S. 683–729
- Kurganov und Tadmor 2000** KURGANOV, A. ; TADMOR, E.: New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations. In: *J. of Comp. Phys.* **160** (2000), S. 241–282
- Kurganov und Tadmor 2002** KURGANOV, A. ; TADMOR, E.: Solution of Two-Dimensional Riemann Problems for Gas Dynamics without Riemann Problem Solvers. In: *Numer. Meth. for Part. Diff. Equations* **18** (2002), Nr. 5, S. 561–588
- Lamers und Cassinelli 1999** LAMERS, H. J. G. L. M. ; CASSINELLI, J. P.: *Introduction to stellar winds*. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1999

- Landau und Lifschitz 1991** LANDAU, L. D. ; LIFSCHITZ, E. M.: *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Bd. 6: *Hydrodynamik*. 5. Aufl. Berlin : Akademie-Verlag, 1991
- Lax 1954** LAX, P. D.: Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. In: *Comm. Pure and Appl. Math.* **7** (1954), S. 159
- Lax 1990** LAX, P. D.: *Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves*. 3. Aufl. Philadelphia : SIAM Publications, 1990
- Mihalas und Weibel Mihalas 1984** MIHALAS, D. ; WEIBEL MIHALAS, B.: *Foundations of radiation hydrodynamics*. New York : Oxford University Press, 1984
- Musil 1952** MUSIL, Robert: *Der Mann ohne Eigenschaften*. Kap. 62, Auch die Erde, namentlich aber Ulrich, huldigt der Utopie des Essayismus. Hamburg : Rowohlt, 1952
- Mönchmeyer und Müller 1989** MÖNCHMEYER, R. ; MÜLLER, E.: A Conservative Second-Order Difference Scheme for Curvilinear Coordinates - Part One - Assignment of Variables on a Staggered Grid. In: *Astronomy & Astrophysics* **217** (1989), Juni, S. 351–367
- Norman u. a. 1980** NORMAN, L. M. ; WILSON, J. R. ; BARTON, R. T.: A new calculation on rotating protostar collapse. In: *The Astrophysical Journal* **239** (1980), August, S. 968–981
- Norman und Winkler 1986** NORMAN, M. L. ; WINKLER, K.-H. A.: *Astrophysical Radiation Hydrodynamics*. Kap. 2-D Eulerian hydrodynamics with fluid interfaces, self-gravity and rotation, S. 187–221, D. Reidel, 1986
- OpenDX** OPENDX: *IBM Visualization Data Explorer*.
<http://www.opendx.org>
- Padmanabhan 2000** PADMANABHAN, T.: *Theoretical Astrophysics*. Bd. 1: *Astrophysical Processes*. Cambridge, U.K. : Cambridge University Press, 2000
- Pereyra u. a. 2006** PEREYRA, N. A. ; HILLER, D. J. ; TURNSHEK, D. A.: On the steady nature of line-driven disk winds: Application to cataclysmic variables. In: *The Astrophysical Journal* **636** (2006), Januar, S. 411–425

- Pereyra und Kallman 2003** PEREYRA, N. A. ; KALLMAN, T. R.: Hydrodynamical models of line-driven accretion disk winds III. Local ionization equilibrium. In: *The Astrophysical Journal* **582** (2003), Januar, S. 984–1000
- Pereyra u. a. 1997** PEREYRA, N. A. ; KALLMAN, T. R. ; BLONDIN, J. M.: Hydrodynamical Models of Line-driven Accretion Disk Winds. In: *The Astrophysical Journal* **477** (1997), März, S. 368–378
- Pereyra u. a. 2000** PEREYRA, N. A. ; KALLMAN, T. R. ; BLONDIN, J. M.: Hydrodynamical models of line-driven accretion disk winds II. Adiabatic winds from nonisothermal disks. In: *The Astrophysical Journal* **532** (2000), März, S. 563–580
- Pringle 1981** PRINGLE, J. E.: Accretion discs in astrophysics. In: *Annual Review of A. & A.* **19** (1981), S. 137–162
- Proga und Kallman 2004** PROGA, D. ; KALLMAN, T. R.: Dynamics of line-driven disk winds in active galactic nuclei. II. Effects of disk radiation. In: *The Astrophysical Journal* **616** (2004), August, S. 688–695
- Proga u. a. 1998** PROGA, D. ; STONE, J. M. ; DREW, J. E.: Radiation-driven winds from luminous accretion discs. In: *Monthly Notices of the R. A. Soc.* **295** (1998), April, S. 595–617
- Proga u. a. 2000** PROGA, D. ; STONE, J. M. ; KALLMAN, T. R.: Dynamics of Line-driven Disk Winds in Active Galactic Nuclei. In: *The Astrophysical Journal* **543** (2000), November, S. 686–696
- Ricker u. a. 1999** RICKER, P. M. ; FRYXELL, B. ; OLSON, K. ; TIMMES, F. X. ; ZINGALE, M. ; LAMB, D. Q. ; MACNEICE, P. ; ROSNER, R. ; TUFO, H.: FLASH: A Multidimensional Hydrodynamics Code for Modeling Astrophysical Thermonuclear Flashes. In: *Bulletin of the American Astronomical Society* **31** (1999), Dezember, S. 1431–+
- Roe 1981** ROE, P. L.: Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes. In: *J. of Comp. Phys.* **43** (1981), S. 357–372
- Roller 2004** ROLLER, S.: *Euler2D Programmcode.*
http://www.hlrs.de/organization/par/par_prog_ws/practical/Euler2D-Musterloesung.tar.gz. 2004
- Schulz-Rinne u. a. 1993** SCHULZ-RINNE, C. W. ; COLLINS, J. P. ; GLAZ, H. M.: Numerical solution of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics. In: *SIAM J. Sci. Comp.* **14** (1993), S. 1394–1414

- Sedov 1946** SEDOV, L. I.: In: *Prikl. Mat. Mekh.* **10** (1946), 241 S
- Sedov 1959** SEDOV, L. I.: *Similarity and Dimensional Methods in Mechanics*. New York : Academic Press Ltd., 1959
- Shakura und Sunyaev 1973** SHAKURA, N. I. ; SUNYAEV, R. A.: Black holes in binary systems. Observational appearance. In: *Astronomy & Astrophysics* **24** (1973), S. 337–355
- Shu 1988** SHU, C. W.: Total-variation-diminishing time discretizations. In: *SIAM J. Sci. Stat. Comp.* **6** (1988), S. 1073
- Shu und Osher 1988** SHU, C. W. ; OSHER, S.: Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. In: *J. of Comp. Phys.* **77** (1988), S. 439
- Shu 1991** SHU, F. H.: *Physics of Astrophysics*. Bd. 1: *Radiation*. New York : University Science Books, 1991
- Shu 1992** SHU, F. H.: *Physics of Astrophysics*. Bd. 2: *Gas dynamics*. New York : University Science Books, 1992
- Sobolev 1960** SOBOLEV, V. V.: *Moving envelopes of stars*. Cambridge, US : Harvard University Press, 1960
- Sod 1978** SOD, G. A.: A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. In: *J. of Comp. Phys.* **27** (1978), S. 1–31
- Stone und Norman 1992** STONE, J. M. ; NORMAN, M. L.: ZEUS-2D: A radiation magnetohydrodynamics code for astrophysical flows in two space dimensions. I. The hydrodynamic algorithms and tests. In: *The Astrophysical J. Suppl. Series* **80** (1992), Juni, S. 753–790
- Toro 1997** TORO, E. F.: *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*. Berlin : Springer Verlag, 1997
- van Leer 1973** VAN LEER, B.: Toward the ultimate conservative difference scheme. I. The quest of monotonicity. In: *Lect. Not. in Physics* **19** (1973), S. 163–168
- van Leer 1976** VAN LEER, B.: MUSCL, A New Approach to Numerical Gas Dynamics. In: *Computing in plasma physics and astrophysics*. Garching, Germany : Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, April 1976, S. E1

- von Neumann 1947** VON NEUMANN, J.: Blast Waves. In: *Los Alamos Sci. Lab. Tech. Ser. 7, Part II* **6** (1947), S. 219. – Nachdruck in *Collected Works*, Hrsg. A. H. Taub, Pergamon, NY, 1963
- Woodward und Colella 1984** WOODWARD, P. R. ; COLELLA, P.: The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. In: *J. of Comp. Phys.* **54** (1984), S. 115–173
- Ziegler 1998** ZIEGLER, U.: NIRVANA+: An adaptive mesh refinement code for gas dynamics and MHD. In: *Comput. Phys. Comm.* **109** (1998), S. 111–134
- Ziegler 1999** ZIEGLER, U.: A three-dimensional Cartesian adaptive mesh code for compressible magnetohydrodynamics. In: *J. of Comp. Phys.* **116** (1999), S. 65–77
- Ziegler 2003** ZIEGLER, U.: *NIRVANA 2.0*.
<http://nirvana-code.aip.de/NIRVANA2.0.tar.gz>. 2003

Danksagung

Ganz besonderer Dank gilt meinem Betreuer *Prof. Dr. Wolfgang J. Duschl*, der stets ein offenes Ohr hatte, um wichtige Fragen im Zusammenhang mit dieser Arbeit zu erörtern. Er hat es verstanden, meine Anregungen aufzugreifen und mir von Zeit zu Zeit die entscheidenden Impulse zu geben.

Ich möchte mich bei meinem Zweitgutachter *Prof. Dr. Iring Bender* bedanken. Er hat mich während meines ganzen Studiums begleitet und mein Interesse an der Physik immer wieder neu geweckt.

Bei *Prof. Dr. Werner M. Tscharnuter* möchte ich mich für die vielen interessanten Diskussionen und wertvollen Tipps insbesondere im Zusammenhang mit hydrodynamischen Fragestellungen bedanken.

Auch *Prof. Dr. Rainer Wehrse* hat mit seinen Diskussionsbeiträgen auf dem Gebiet des Strahlungstransports vor allen Dingen in der Anfangsphase der Arbeit wichtige Anregungen geliefert.

Mein Dank gilt allen Mitarbeitern des *Instituts für Theoretische Astrophysik*, ganz besonders aber meinen Kollegen *Markward Britsch* und *Farid Gamgami* für die vielen Diskussionen und die sehr gute Arbeitsatmosphäre.

Bei *Dr. Michael Mayer*, *Emanuel Ziegler* und *Dominikus Heinzeller* möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit bei der Betreuung der Institutsrechner bedanken.

Auch meine Kommilitonen *Martin Trefzer*, *Torsten Alt* und *Hans Mathée* sollen nicht unerwähnt bleiben. Sie waren eine große Motivationshilfe, weil sie zur gleichen Zeit an ihren Dissertationen gearbeitet haben wie ich.

Bedanken möchte ich mich auch bei *Bastian Strauch*, der mich in allen Fragen zur englischen Sprache beraten hat.

Ich möchte mich bei meiner *Familie* bedanken, die mir mein Studium erst ermöglicht hat und mich auch während meiner Doktorarbeit tatkräftig unterstützt hat. Besonders sei hier hervorgehoben, dass mein Vater *Johannes Illenseer* die Arbeit auf ihre orthographische Korrektheit hin überprüft hat und mir auch in Fragen des Stils eine wertvolle Hilfe war.

Herzlichst bedanken möchte ich mich auch bei meiner Freundin *Alex*, die mir während der mehr als drei Jahre immer wieder Mut gemacht hat. Außerdem hat sie es so manches Mal verstanden, mich mit einfachen Fragen auf Probleme aufmerksam zu machen, die ich sonst nie gesehen hätte.

Die Arbeit wurde finanziert aus Mitteln des Sonderforschungsbereiches 439 *Galaxien im frühen Universum* der Deutschen Forschungsgemeinschaft.