

Gravitoturbulenz und Fragmentation im frühen Universum

Zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
vorgelegt von

Jannes Klee
Kiel, 2022

Erster Gutachter:

Prof. Dr. W. J. Duschl

Zweiter Gutachter:

Prof. Dr. H. Kersten

Tag der mündlichen Prüfung:

19. September 2022

Zum Druck genehmigt:

19. September 2022

gez. Prof. Dr. Frank Kempken, Dekan

Zusammenfassung

Gravitoturbulenz spielt in vielen Bereichen der Akkretionsphysik eine wichtige Rolle. Ist das Gravitationspotential in Scheiben aus Gas wesentlich gegenüber jenem des Zentralobjektes, so kann der Prozess zum Treiber für eine Umverteilung oder einem lokalen Kollaps, auch genannt Fragmentation, führen. Physikalisch werden dadurch einerseits das Wachstum Schwarzer Löcher, andererseits die Entstehung von Planeten und Sternen beschrieben. Neben der Gravitation im Gas spielen die thermischen Gegebenheiten sowie die Dynamik für das Verhalten in der Scheibe eine wichtige Rolle.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit numerischen und physikalischen Einflüssen auf Gravitoturbulenz. So wird der Frage nachgegangen aus welchem Grund bei stetig höherer Auflösungen Fragmentation eintritt, also eine Konvergenz scheinbar nicht erfüllt wird. Zudem werden die chemischen Gegebenheiten im frühen Universum in Gravitoturbulenz untersucht. Hier wird insbesondere die Dissoziation von Wasserstoff und deren Einfluss durch die thermische Rückkopplung betrachtet.

Es wird das Hydrodynamik-Paket Fosite verwendet, um mit Hilfe numerischer Simulationen das turbulente Verhalten besser zu verstehen. Dafür werden Optimierungen vorgenommen, um einen hohen Vektorisierungsgrad auf der Zielarchitektur von NEC, der SX-Aurora Tsubasa, zu erreichen. Um die Lösung von chemischen Ratengleichungen zu ermöglichen wird das eigens geschriebene Verfahren OdeVec vorgestellt, welches sich für steife gewöhnliche Differentialgleichungen mit dünnbesetzter Jakobimatrix eignet. Hervorzuhebende Merkmale sind neben der vektorisierten Lösung für die genannte Architektur ein Präprozessor, welcher eine Optimierung vor Kompilierzeit für individuelle chemische Netzwerke ermöglicht und diese in Template-Dateien niederschreibt. Hinzu kommt die Einbindung in Fosite mit dem Chemie-Paket KROME. Die Simulationen werden letztendlich im Shearingsheet und logarithmisch-polarer zweidimensionaler Geometrie durchgeführt.

In Shearingsheet-Simulationen wird bei zunehmend höheren Auflösungen gezeigt, dass eine hohe horizontale Anzahl an Zellen nötig ist, um eine Konvergenz zu erreichen, ab der ein kritischer Kühlungsparameter β_{krit} als Fragmentationskriterium gefunden werden kann. Dies wird nicht durch die bisher hauptsächlich dazu hergenommene Entstehung von Fragmenten im Gas selber, sondern durch eine Betrachtung des Spektrums bis auf die für Gravitoturbulenz charakteristische kritische Länge L_{krit} erreicht. Gleichzeitig wird gezeigt, dass kleine numerische Fehler bei höheren Auflösungen schneller zu künstlicher Fragmentation neigen und ein $\beta_{\text{krit}} \approx 10$ gefunden.

Bezüglich der Wasserstoff-Dissoziation in Gravitoturbulenz wird gezeigt, dass sich bei geeigneter Parameterwahl ein Grenzyklus ausbildet, bei dem der Wasserstoff als Vermittler zwischen zwei Zuständen wirkt. Dies beinhaltet eine relativ kurze und explosive Phase der Dissoziation, welche mit Fragmentation einhergeht und bei der viel atomarer Wasserstoff entsteht. Anschließend kommt es zu einer langen und ruhigen Phase bei der der atomare Wasserstoff wieder in die molekulare Form zurückwechselt, der oppositionellen Kühlung entgegenwirkt und dadurch die Gravitoturbulenz abschwächt. Der Grenzyklus beginnt von neuem sobald der atomare Wasserstoff aufgebraucht ist. Schlussendlich werden die Folgen in Bezug auf Beobachtbarkeit und Akkretionsrate besprochen.

Abstract

Gravitoturbulence plays an important role in many areas of accretion physics. If the gravitational potential in disks of gas is substantial compared to the central object, the process can be a driver for a redistribution or a local collapse, also called fragmentation. Physically, this describes on the one hand the growth of black holes, on the other hand the formation of planets and stars. Beside the gravitation in the gas, the thermal conditions as well as the dynamics play an important role for the behavior in the disk.

This work deals with numerical and physical influences on gravitoturbulence. Thus, the question is examined for which reason fragmentation occurs with constantly higher resolutions. It means that a convergence is apparently not fulfilled. In addition, the chemical conditions in the early universe in gravitoturbulence are investigated. Here, in particular the dissociation of hydrogen and its influence by its thermal feedback is regarded.

The hydrodynamics package Fosite will be used to better understand the turbulent behavior by numerical simulations. For this purpose, optimizations are made, if not already available. Here, a focus is to achieve a high degree of vectorization on the target architecture of NEC, the SX-Aurora Tsubasa. To enable the solution of chemical rate equations, the method OdeVec is presented. It is suitable for stiff ordinary differential equations with sparse Jacobian matrices. Outstanding features are the vectorized solution for the mentioned architecture and a preprocessor, which allows an optimization before compile time. Thereby, individual chemical networks can be analyzed and written down to template files. In addition, there is the integration into Fosite with the chemistry package KROME. Finally, the simulations are performed in shearsheet and logarithmic-polar two-dimensional geometry.

In shearsheet simulations, at increasingly higher resolutions, it is shown that a high horizontal number of cells is needed to reach a convergence above which a critical cooling parameter β_{crit} can be found as a fragmentation criterion. This is achieved not by the formation of fragments in the gas itself, which has so far been mainly used for this purpose. Instead, the spectrum down to the critical length L_{crit} is taken into consideration. This is a characteristic length-scale for gravitoturbulence. At the same time, small numerical errors show a tendency to fragment artificially faster at increasing resolutions. A $\beta_{\text{crit}} \approx 10$ is found.

In addition, the influence of hydrogen dissociation on gravitoturbulence is investigated. It is shown that, with appropriate parameter selection, a limit cycle is formed in which the hydrogen acts as a mediator between two states. This involves a relatively short and explosive phase of dissociation, which is accompanied by fragmentation and in which much atomic hydrogen is produced. Afterwards, it is followed by a long and quiescent phase in which the atomic hydrogen reverts to molecular form. Here, it is counteracting the oppositional cooling and thereby weakening the gravitoturbulence. The limit cycle starts again as soon as the atomic hydrogen is depleted. Finally, the consequences in terms of observability and accretion rate are discussed.



Vom Autor um 2005 nachgemalte Version von "Die Sternennacht" (Vincent van Gogh)

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Physikalische Grundlagen	3
2.1. Selbstgravitierende Akkretionsscheiben	3
2.1.1. Selbstgravitation	4
2.1.2. Gravitoturbulenz	5
2.2. Hydrodynamik	7
2.2.1. Grundgleichungen	7
2.2.2. Advektion passiver Variablen	8
2.2.3. Zustandsgleichung	9
2.2.4. Vertikal integrierte Gleichungen	9
2.3. Chemischer Einfluss im frühen Universum	10
2.3.1. Kosmologischer Kontext	10
2.3.2. Chemische Netzwerke	12
2.3.3. Ratengleichungen	12
2.3.4. Lokales thermodynamisches Gleichgewicht	13
2.3.5. Kühlung primordialer Gase	14
3. Numerische Grundlagen	16
3.1. Das Hydrodynamikpaket Fosite	16
3.1.1. Zustandsvektor und Flüsse	19
3.1.2. Verwendete Geometrien	19
3.1.3. Limiter	23
3.1.4. Randbedingungen	25
3.1.5. Zeitschrittverfahren	26
3.1.6. Transport passiver Variablen	26
3.2. Vektorisiertes Lösen chemischer Ratengleichungen	28
3.2.1. OdeVec	29
3.3. Einbinden chemischer Netzwerke in Fosite mit KROME	39
3.3.1. Aufsetzen eines Netzwerkes	41
3.3.2. Wasserstoffdissoziation im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht	42
3.4. Numerische Tests	44
3.4.1. Robertson's Test	44
3.4.2. OREGO Test	46
3.4.3. Primordiales Netzwerk	47
3.4.4. Atmosphäre	48
3.4.5. Sod Tests	49

4. Numerische Einflüsse auf Fragmentation	55
4.1. Das Problem der Nichtkonvergenz	55
4.1.1. Übersteilung durch limitierende Funktionen	56
4.1.2. Konvergenzverhalten von Gravitoturbulenz	57
4.1.3. Untersuchung der Spektren	61
4.2. Zusammenfassung	64
5. Wasserstoffdissoziation in Gravitoturbulenz	65
5.1. Selbstgravitierende Scheiben im frühen Universum	65
5.2. Berechnungen in lokaler Näherung	66
5.2.1. Einfluss der Anfangstemperatur	68
5.2.2. Zeitliche Entwicklung	70
5.2.3. Weitere Einflüsse	79
5.3. Berechnungen in globalem Setup	83
5.3.1. Grundsätzliche Betrachtungen	85
5.3.2. Einfluss der Zentralmasse	87
5.3.3. Langzeitverhalten bei $M = 10^4 M_\odot$ und $R_{\text{in}} = 100 \text{ au}$	90
5.3.4. Akkretionsflüsse & Beobachtbarkeit	96
5.3.5. Parameterraum für Chemo-Gravitoturbulente Scheiben	100
5.4. Zusammenfassung und Diskussion	102
6. Fazit und Ausblick	104
Literatur	107
Glossar	120
A. Anhang	121
A.1. Präprozessorflags für OdeVec	121
A.2. Aufsetzen der Chemie	121
A.3. Übergangskoeffizienten Dreikörperstöße	123

1. Einleitung

Im Zentrum fast jeder Galaxie befindet sich ein supermassereiches Schwarzes Loch (engl. super massive black hole, SMBH), dessen Masse zwischen Millionen bis einigen zehn Milliarden Sonnenmassen erreichen kann (Kormendy und Ho 2013). Insbesondere weit entfernte und besonders massereiche SMBHs, welche eingebettet in ihrer Host-Galaxie im noch jungen Universum beobachtet werden (Wu u. a. 2015; Wang u. a. 2021), bringen die gängigen Entstehungsmodelle dabei an ihre Grenzen (Volonteri u. a. 2021; Duschl und Strittmatter 2011). Diese Schwarzen Löcher müssen einen Wachstumsprozess durchlaufen haben, der mit einer Akkretion (lat. *accretio*, “Anwachsen”) großer Mengen umliegender Gase innerhalb kurzer Zeit einhergehen.

Die zur Zeit am weitest entfernten und damit auch kosmologisch jüngsten Schwarzen Löcher (Wang u. a. 2021; Bañados u. a. 2018) verbrachten ihre Entstehungszeit in der bisher wenig verstandenen Reionisierungsepoche (engl. Epoch of Reionization, EoR), einer Übergangsphase in der kosmischen Geschichte, in der das Gas des noch jungen Universums vom neutralen zurück in den ionisierten Zustand wechselte. Sie zeichnet zudem aus, dass mit ihr die ersten Sterne entstanden. Insbesondere zu Beginn jener Epoche herrschten andere Rahmenbedingungen, da noch so gut wie keine Metalle¹, sowie aus Silikaten und Eis bestehender Staub existierten (Galli und Palla 1998), welche im heutigen Universum wichtige Eigenschaften wie die Kühlung der umliegenden Gase beeinflussen.

In einem sich stetig ausdehnenden und dabei abkühlenden Universum schließt sich die EoR an das dunkle Zeitalter und die zuvor stattfindende Rekombination an. Letztere beschreibt den Wechsel auf Grund der abfallenden Temperatur vom ionisierten hin zum neutralen Zustand, welche über die kosmische Hintergrundstrahlung (Penzias und Wilson 1965) besser beobachtet werden kann als die darauf folgenden Zeiten. Da das dunkle Zeitalter, wie dem Namen zu entnehmen, durch ein noch nicht erleuchtetes und neutrales Universum ausgezeichnet ist, gehen mit der Beobachtung dieser kosmologischen Epoche nicht nur auf Grund der Entfernung von über 13 Milliarden Lichtjahren besondere Schwierigkeiten einher. Auch die für die weit entfernten Objekte typischerweise verwendeten Linien von neutralem Wasserstoff werden absorbiert.

Akkretionsscheiben (engl. accretion disks, ADs) sind auf Grund der Drehimpulserhaltung allgegenwärtig anzutreffende astrophysikalische Erscheinungen (Weizsäcker 1944; Lüst 1952), deren inneren Prozesse und Morphologie maßgeblich darüber entscheiden, wie die Entwicklung des Schwarzen Lochs (engl. black hole, BH) voranschreitet. Diese Scheiben aus Gas, welche sich um ein kompaktes Zentralobjekt ausbilden sind zudem mitunter überaus massereich. Während in einem neutralen Universum, wie es zu Beginn der

¹In der Astronomie zählen alle höheren chemische Elemente nach Wasserstoff und Helium zu den Metallen.

EoR angenommen werden kann, Magnetfelder weniger starke Effekte als zu heutigen Zeiten spielen, ist die Gravitation dieser Scheiben in der Summe ihrer Wirkungen und Sekundäreffekte immerzu präsent. Dies macht eine Untersuchung der damit verbundenen Prozesse und Folgen zu jener Epoche besonders betrachtenswert.

Die Gravitoturbulenz (Paczynski 1978) ist hier als Treiber für eine Drehimpulsumverteilung und damit dem Wachstum der BHs (Duschl und Britsch 2006) sowie im Rahmen der Entstehung von Sternen und Planeten (Gammie 2001) ein wichtiger Baustein. Mit einer starken Abhängigkeit zu den thermischen Eigenschaften der Scheibe (Toomre 1964), welche in einem frühen Universum auf Grund einer abweichenden Komposition des Gases unweigerlich anders gewesen sein müssen, liegt die Vermutung nahe, dass dies auch einen Effekt auf Gravitoturbulenz hat.

Neben diesen physikalischen Einflüssen ist und bleibt die Berechnung von turbulentem Verhalten mit großen Unsicherheiten verknüpft. Für die zugrunde liegenden Gleichungen der Hydrodynamik gibt es bis heute keine geschlossene Lösung, geschweige denn einen mathematischen Nachweis von deren Existenz². Letztendlich bleiben numerische Betrachtungen um die Gleichungen näherungsweise zu lösen.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit gravitoturbulenten Scheiben und den chemischen Einflüssen im frühen Universum, wobei sie sich im Spannungsfeld dazugehöriger physikalischer und numerischer Fragestellungen bewegt. In Kap. 2 werden Akkretionsscheiben und Gravitoturbulenz, sowie die Chemie im frühen Universum beschrieben. Es werden die nötigen Gleichungen der Hydrodynamik, der newtonschen Gravitation und der chemischen Raten-gleichungen eingeführt und erläutert. Anschließend wird in Kap. 3 auf die numerischen Verfahren, welche zur Lösung der Gleichungen verwendet werden, eingegangen und das haus-eigene Paket Fosite vorgestellt (Illenseer und Duschl 2009). Ein weiterer Fokus wird auf das Lösen chemischer Ratengleichungen, optimiert für die Vektorprozessoren von NEC, gelegt. Dort wird ein neu entwickelter zell-vektorisierter Löser für steife gewöhnliche Differentialgleichungen präsentiert, welcher zusätzlich durch einen Python-Präprozessor Optimierungen vor Kompilierzeit durchführen kann. Kap. 4 beschäftigt sich anschließend mit numerischen Einflüssen (Klee u. a. 2017; Klee u. a. 2019), Kap. 5 mit den Wirkungen und Folgen von Wasserstoffdissoziation auf Gravitoturbulenz.

²Fortschritte in den Navier-Stokes-Gleichungen sind als eines der Millennium Prize Problems vom Clay Mathematics Institute ausgeschrieben und mit einem Preis von einer Million Dollar versehen.

2. Physikalische Grundlagen

Die physikalischen Grundlagen beschreiben die in dieser Arbeit betrachteten astrophysikalischen Objekte, selbstgravitierende Akkretionsscheiben im frühen Universum. Dies beinhaltet die Beschreibung der turbulenten Mechanismen in den Scheiben, insbesondere Gravitoturbulenz, welche für die Morphologie der Scheiben selber und das Wachstum der sich im Zentrum befindenden Schwarzen Löcher von großer Bedeutung ist. Zudem werden die besonderen Gegebenheiten während des frühen Universums besprochen. Hier wird die Reionisierungs-epoche beschrieben und der Aufbau und Einfluss primordialer Chemie auf gravitoturbulente Scheiben erläutert. Letztendlich werden die dazu verwendeten Gleichungen der Fluidodynamik, der newtonschen Gravitationstheorie, sowie der chemischen Ratengleichungen erörtert.

2.1. Selbstgravitierende Akkretionsscheiben

Akkretionsscheiben sind im Universum allgegenwärtig, da ihre Entstehung mit grundlegenden Erhaltungseigenschaften einhergehen. Sie entstehen notwendigerweise immer dann, wenn eine Gaswolke mit einem nicht zu vernachlässigendem Gesamtdrehimpuls gravitativ zusammenfällt und dabei abkühlt. Während einerseits die thermische Energie in Form von Strahlung zügig abtransportiert werden kann, ist die Umverteilung des Drehimpulses auf wesentlich längeren Zeitskalen angesiedelt. Die Scheiben, welche sich um ein kompaktes Zentralobjekt, ein SMBH oder einen Stern entstehen, entscheiden maßgeblich über die weitere Entwicklung desselben. So kann eine AD so geartet sein, dass eine Stern- und Planetenentstehung gefördert wird, zugleich entscheiden solche und weitere physikalische Effekte, wie Turbulenzen, maßgeblich über die Umverteilung des Gases innerhalb der Scheibe. Dies lässt sich direkt mit einem Massezuwachs des Zentralobjektes in Verbindung bringen, da dadurch eine Massen- und Drehimpulsverteilung einhergeht (Pringle 1981).

Für das weitere Verständnis der Entwicklung der Scheibe und den damit einhergehenden Fragestellungen, müssen also deren innere Prozesse verstanden werden. Stabilitätsanalysen zeigen dabei, dass Keplersch rotierende ADs äußerst stabile Objekte sind. Dies wird durch das Rayleighsche Stabilitätskriterium

$$\frac{\partial(r^2\Omega)}{\partial r} > 0 \quad (2.1)$$

festgeschrieben, wobei r der Radius und Ω die Winkelgeschwindigkeit ist (Pringle 1981). Für die Keplersche Winkelgeschwindigkeit $\Omega \propto r^{-3/2}$ wäre dies somit immer sichergestellt. Nimmt man eine einfache molekulare Reibung im Gas (Viskosität) an, reicht diese bei weitem nicht aus, um die indirekt beobachteten Schwarzslochmassen erklären zu können

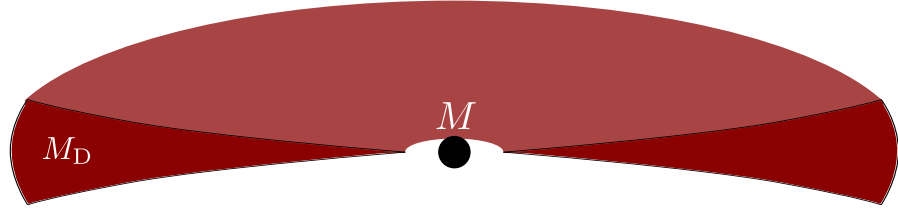


Abbildung 2.1.: *Illustration einer aufgeschnittenen Akkretionsscheibe. Die Scheibe bildet sich auf Grund der Drehimpulserhaltung um das Zentralobjekt, wie ein schwarzes Loch oder einen jungen Stern, aus. Gilt $M_D \sim M$ spielt das Gravitationspotential der Scheibe eine Rolle.*

oder überhaupt Akkretion über eine Scheibe in Betracht zu ziehen. Eine sehr große Reynoldszahl, einer in der Hydrodynamik bekannten und dimensionslosen Kennzahl (Landau und Lifshitz 1966), lässt jedoch auf ein turbulentes Gas in den Scheiben schließen, welches eine wesentlich höhere effektive Viskosität erlauben würde (Shakura und Sunyaev 1973; Duschl u. a. 2000). Dies spricht für starke Turbulenzen, welche zu einer ausreichend starken Umverteilung von Drehimpuls führen, sodass das Gas in kleineren Zeitskalen zum Zentralobjekt wandern kann. Die Instabilitäten, welche Turbulenzen erzeugen sind aktuelles Forschungsthema. Ein sehr aussichtsreicher Kandidat ist dabei Gravitoturbulenz, welche sich in massereichen, sich abkühlenden Scheiben ausbildet. Die oben gemachten Aussagen lassen sich auch in Zeitskalen nach

$$\tau_{\text{dynamisch}} < \tau_{\text{thermisch}} < \tau_{\text{viskos}} \quad (2.2)$$

einsortieren (Abramowicz und Straub 2014). Die dynamische Zeitskala $\tau_{\text{dynamisch}}$ ist dabei am kleinsten und mit der Dynamik in der Scheibe Ω^{-1} verknüpft, die thermische Zeitskala $\tau_{\text{thermisch}}$, welche Kühlung und Heizung beinhaltet, im mittleren Bereich und die viskose Zeitskala τ_{viskos} , welche für die Drehimpulsumverteilung sorgt und vor allem durch Turbulenzen bedingt ist, am größten. Das dies nicht zwangsläufig dauerhaft der Fall ist wird auch in Abramowicz und Straub (2014) dargelegt, wobei eine Änderung dieser Verhältnisse mitunter zu starken Verwerfungen in den Scheiben führen kann.

2.1.1. Selbstgravitation

Eine AD ist selbstgravitierend, wenn das Gravitationspotential, welches durch das Gas in der Scheibe hervorgerufen wird nicht mehr vernachlässigbar gegenüber jenem des Zentralobjektes ist. Das Gravitationspotential Φ in der Scheibe wird durch die Poissonsgleichung

$$\Delta\Phi = 4\pi G\rho \quad (2.3)$$

beschrieben, wobei G die Gravitationskonstante und ρ die Massendichte im Gas ist. Dies beinhaltet grundsätzlich auch ein mögliches Punktmassenpotential, welches sich im Zentrum einer Akkretionsscheibe mit einer Masse M befindet. Hier bietet es sich jedoch an die analytische Lösung

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{GM}{r} \quad (2.4)$$

zu verwenden und mit Hilfe des Superpositionsprinzips Scheibe und Zentralmasse getrennt zu betrachten. Dies ist möglich, solange eine newtonsche Gravitation angenommen werden kann und keine allgemein-relativistischen Effekte eine Rolle spielen.

Zudem ist in einer selbstgravitierenden Scheibe der Toomre Parameter (Toomre 1964)

$$Q = \frac{c_s \kappa}{\pi G \Sigma} \quad (2.5)$$

ein Maß für Instabilität und dafür, ob turbulentes Verhalten im Gas hervorgerufen wird. Dabei ist c_s die Schallgeschwindigkeit und Σ die über die vertikale Richtung integrierte Flächendichte. κ ist die Epizykelfrequenz und entspricht im Keplersch rotierenden Fall der entsprechenden Winkelgeschwindigkeit Ω_K (Binney u. a. 2009). Für $Q < 1$ wird die Scheibe instabil. Gl. 2.5 kann also auch so gelesen werden, dass massereiche ($\Sigma \uparrow$), kalte ($c_s \downarrow$) Scheiben mit geringer Winkelgeschwindigkeit ($\kappa \downarrow$) gravitativ instabil werden.

Das Toomre Kriterium 2.5 wird aus einer linearen Stabilitätsanalyse gewonnen und gilt für achsensymmetrische Potentiale (Toomre 1964; Binney u. a. 2009). Die Längenskalen L , welche dabei instabil werden sind durch

$$L_J \leq L \leq L_{\text{krit}} \quad (2.6)$$

gegeben (Toomre 1964; Lin und Pringle 1987). Dabei ist $L_{\text{krit}} = G\Sigma/\Omega^2$ die kritische Länge und $L_J = c_s^2/G\Sigma$ die Jeans-Länge. Letztere stammt aus dem klassischen Kriterium für Sternentstehung in einer ruhenden Gaswolke (Unsöld und Baschek 2013). Um Sternentstehung in einer Akkretionsscheibe zu beobachten ist also neben einer minimalen Länge, welche bei ausreichend Masse und Temperatur (Schallgeschwindigkeit) gegeben ist, auch eine maximale Länge vorhanden, welche durch die Scherung in der Scheibe vorgeschrieben wird. Die kritische Länge L_{krit} beschreibt den Sachverhalt, dass eine Dichteerhöhung bevor eine weitere Kontraktion stattfinden kann, auseinander getrieben wird und sich die Scheibe damit wieder stabilisiert. Eine gravitativ instabile Scheibe kann letztendlich in einen gravitoturbulenten Zustand treten oder fragmentieren.

2.1.2. Gravitoturbulenz

Der gravitoturbulente Zustand wurde erstmals von Paczynski (1978) beschrieben. Dabei wird eine Scheibe durch das Abkühlen nach Gl. 2.5 gravitativ instabil ($Q < 1$). Diese Instabilitäten führen zu Stoßheizung im Gas, wodurch die Scheibe wiederum an Stabilität gewinnt ($Q > 1$). In Abb. 2.2 ist dieses Wechselspiel illustriert. Dort wird auch verdeutlicht, dass die genaue Ausprägung der Kühlung und Heizung eine besonders wichtige Rolle für das Verhalten im Gas hat. Um Gravitoturbulenz zu verstehen, müssen alle direkten und indirekten Einflüsse auf die thermische Entwicklung in Betracht gezogen werden. Ist die Kühlung schnell im Vergleich zu der Orbitalzeitskala Ω^{-1} tritt Fragmentation auf.

Fragmentation

Fragmentation beschreibt das lokale Kollabieren innerhalb einer selbstgravitierenden Scheibe. Dieser häufig irreversible Prozess ist bedeutend für die weitere Entwicklung

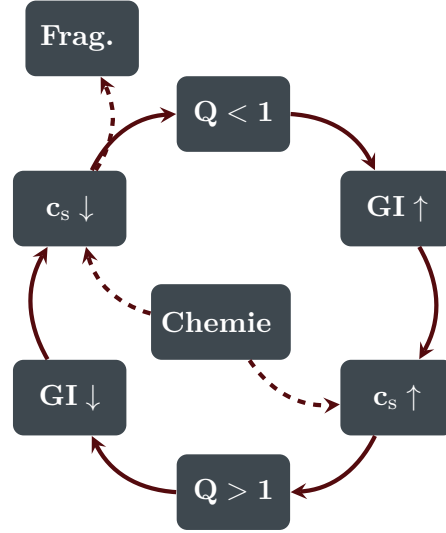


Abbildung 2.2.: Zur Verdeutlichung von Gravitoturbulenz. Sie tritt auf, wenn sich bei einer ausreichend kalten Scheibe die Heizprozesse (hervorgerufen durch die Instabilitäten) und Kühlprozesse die Waage halten. Die chemische Zusammensetzung hat einen Einfluss auf Kühlung und Heizung im Gas und damit ebenso auf den dargestellten Kreislauf. Bei zu schneller Kühlung tritt Fragmentation auf. Die Abbildung wurde in angepasster Form aus Klee (2016) übernommen. **GI** steht für gravitative Instabilitäten.

der Akkretionsscheibe. Das Verhalten kann auf Stern- und Planetenentstehung sowie die Entstehung Brauner Zwerge hindeuten (Boss 1998; Levin und Beloborodov 2003), zugleich würde sich der darauf folgende Akkretionsprozess verändern und wäre unter Umständen nicht mehr durch eine Turbulenzparametrisierung beschreibbar, wie sie häufig in eindimensionalen Modellen in Form einer effektiven Viskosität angenommen werden (Shakura und Sunyaev 1973; Duschl u. a. 2000).

In der vielbeachteten Veröffentlichung von Gammie (2001) wurde gezeigt, dass eine selbstgravitierende Scheibe fragmentiert, wenn die Kühlung des Gases ausreichend stark ist. Es zeigt sich, dass es einen kritischen Wert für den Parameter

$$\beta = \tau_k \Omega, \quad (2.7)$$

mit der Kühlzeitskala τ_k und der Orbitalzeitskala Ω^{-1} (Winkelgeschwindigkeit) gibt (vgl. Ungl. 2.2). Für

$$\beta_{\text{krit}} \lesssim 3 \quad (2.8)$$

tritt dabei Fragmentation ein, im gegenteiligen Fall erhält man Gravitoturbulenz. Für letztere nimmt die Stärke bei langsamerer Kühlung für größeres β stetig ab (Cossins u. a. 2009).

In den letzten Jahren ist dieses eindeutige Bild jedoch hinterfragt worden, da bei zunehmend höherer Auflösung und anderen Veränderung am numerischen Setup (auch für höhere $\beta \gtrsim 3$) einzelne Fragmente entstehen können (Meru und Bate 2011). Es ist nicht

abschließend geklärt, unter welchen Bedingungen dies möglich ist. Somit wird immer noch nach einem endgültigen Wert für β_{krit} gesucht. In Kapitel 4 werden dazu neue Erkenntnisse präsentiert, welche auf ein höheres $\beta_{\text{krit}} \approx 10$ hindeuten und zugleich die starke Abhängigkeit zur verwendeten Numerik illustrieren.

Wie aus Gl. 2.8 und Abb. 2.2 ersichtlich wird, spielen die energetischen Prozesse eine wesentliche Rolle für die Entwicklung gravitoturbulenter Scheiben. Diese hängen zum Großteil von der Zusammensetzung des Gases und den äußeren Gegebenheiten ab. Betrachtet man die Entwicklung der ersten Sterne und Schwarzen Löcher, so zeigt sich, dass die Gegebenheiten unter denen diese entstehen und anwachsen konnten, insbesondere in Bezug auf die Zusammensetzung des Gases, der enthaltenen Chemie, wesentlich von jenen im heutigen Universum abweichen. Die Einbindung einer primordialen Chemie wird in Kap. 5 und ihr Einfluss auf die Fragmentation im Gas betrachtet.

Um die tatsächlichen nichtlinearen Zusammenhänge beschreiben zu können, müssen die hier beschriebenen gravitativen Beiträge mit den hydrodynamischen Grundgleichungen verknüpft werden. Um nachfolgend die chemische Rückkopplung auf Gravitoturbulenz zu betrachten, ist zudem ein Verständnis der chemischen Entwicklung und ihrem energetischen Feedback notwendig.

2.2. Hydrodynamik

Die Bewegung von Gasen, wie jenen in Akkretionsscheiben, werden durch die hydrodynamischen Grundgleichungen beschrieben (Shu 1992). Sie stehen für die Erhaltung der physikalischen Größen Masse, Impuls und Energie in einem Fluid. Auf Grund ihrer Komplexität sind die Gleichungen in der Regel nur für bestimmte Ausnahmefälle, z.B. unter Hinzunahme bestimmter Symmetrien und Annahmen zum turbulenten Verhalten, analytisch lösbar. Aber auch bei Verwendung von Großcomputern müssen mitunter stark vereinfachende Annahmen gemacht werden, um sich mit den physikalisch interessanten Fragestellungen beschäftigen zu können. Trotz schwieriger Lösbarkeit, lassen sich die Gleichungen problemlos aufschreiben und grundsätzlich interpretieren.

2.2.1. Grundgleichungen

Kontinuitätsgleichung Die Kontinuitätsgleichung beschreibt den Massenerhalt und lautet

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.9)$$

mit der Gesamtdichte ϱ , der Zeit t und dem Geschwindigkeitsvektor \mathbf{v} . Eine zeitliche Veränderung der Dichte (erster Term) ist also nur durch einen Dichtestrom aus dem entsprechenden Gebiet (zweiter Term) möglich. Die rechte Seite würde potentielle Quellterme enthalten. Da sich die Gesamtmasse unter Ausschluss nuklearer Reaktionen jedoch nicht ändern kann, ist der Wert in dieser Arbeit durchgehend null. Insbesondere mit Bezug auf die chemische Zusammensetzung könnten jedoch einzelne Beiträge der Gesamtdichte, wie z.B. unterschiedlicher Ausprägungen von Wasserstoff, zu Umwandlungen untereinander führen. Die rechte Seite wäre für diese Teildichten dann nicht mehr zwangsläufig null.

Impulsgleichungen Sie beschreiben die Impulserhaltung im Gas und können mit

$$\frac{\partial(\mathbf{v}\varrho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p) = -\varrho \nabla \Phi + \varrho \mathbf{f} \quad (2.10)$$

geschrieben werden. Hier ist p der Druck und \mathbf{f} eine mögliche zusätzliche, äußere, auf das Gas wirkende Beschleunigungen. Geht man von einem Gas ohne äußere Einwirkungen aus, so ist eine Veränderung des Impulses $\mathbf{v}\varrho$ auch hier nur möglich, wenn ein entsprechender örtlicher Impulsstrom stattfindet. Dieser kann unter anderem auch durch Scherungen auftreten, was in differentiell rotierenden Scheiben von besonderem Interesse ist. Zugleich ist der quadratische und damit nicht-lineare Geschwindigkeitsterm für die Beschreibung von Turbulenzen verantwortlich. Beide dieser Punkte sind in dem $\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$ -Term enthalten.

Energiegleichung Sofern man nicht ein isothermes Gas annimmt, wird des Weiteren noch eine Gleichung zur Beschreibung der Energiedichte

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\mathbf{v}) = -\varrho \nabla \Phi \cdot \mathbf{v} + \varrho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} + Q_{\text{therm}}, \quad (2.11)$$

benötigt, wobei $E = E_{\text{kin}} + U$ die Gesamtenergiedichte mit kinetischem Anteil E_{kin} und innerer Energie U ist. Q_{therm} beschreibt mögliche Heiz- und Kühlterme.

Eine häufige und sehr einfache Kühlung wurde von Gammie (2001) eingeführt und verbindet die Kühlzeitskala τ_k über den dimensionslosen Parameter β (vgl. 2.7) mit der Orbitalzeitskala Ω^{-1}

$$Q_{\text{therm}} = -\frac{U}{\tau_k} = -\frac{U\Omega}{\beta}. \quad (2.12)$$

Auch komplexere Kühl- und Heizprozesse können an dieser Stelle einfließen. Dies benötigt allerdings ein tieferes Verständnis der zugrunde liegenden Physik, wie z.B. die konkrete Zusammensetzung der chemischen Komponenten des Gases.

2.2.2. Advektion passiver Variablen

Um die chemischen Komponenten an der Gesamtdichte beschreiben zu können, müssen diese auch advektiert werden. Eine Möglichkeit wäre, für alle chemischen Spezies den bisherigen Satz an Gleichungen zu lösen. Dies wäre jedoch nur sinnvoll, wenn diese auch tatsächlich unterschiedliche Impulse und Temperaturen aufweisen. Ist dies nicht der Fall, können die chemischen Spezies als passive Variablen betrachtet und durch die Gleichung

$$\frac{\partial \varrho X_i}{\partial t} + \nabla \cdot \varrho X_i \mathbf{v} = 0 \quad (2.13)$$

beschrieben werden (Oran und Boris 2000). Hierbei ist X_i der relative Anteil einer Spezies an der Dichte. Alle passiven Variablen zusammen müssen daher

$$\sum_{i=1}^N X_i = 1 \quad (2.14)$$

erfüllen. Dies stellt sicher, dass sich die Gesamtheit aller Teildichten zur Massendichte ϱ aufsummieren.

2.2.3. Zustandsgleichung

Um das Gleichungssystem zu schließen wird noch eine Zustandsgleichung benötigt. Für das ideale Gas lautet diese

$$p = (1 - \gamma)\varrho\epsilon. \quad (2.15)$$

Dabei ist γ der Adiabatenindex und $\epsilon = U/\varrho$ die spezifische innere Energie. Diese Gleichung kann, je nach vorhandenen Größen, in vielen unterschiedlichen Darstellungen erscheinen. Beinhaltet die Betrachtung chemische Komponenten wird häufig die Teilchenanzahldichte n und Temperatur T verwendet, was z.B. eine Darstellung nach

$$p = nk_B T \quad (2.16)$$

ermöglicht.

2.2.4. Vertikal integrierte Gleichungen

Um die nötigen Rechenkapazitäten für die aufwändigen Simulationen zu reduzieren, werden die hydrodynamischen Grundgleichungen aus Abschnitt 2.2.1 für die Simulationen von drei auf zwei Dimensionen reduziert. Dies ist möglich, da Akkretionsscheiben häufig eine flache Geometrie aufweisen, also $H \ll r$ gilt, wobei H die Skalenhöhe in der Scheibe ist. Die hydrodynamischen Gleichungen und ihre physikalischen Größen werden dann über die vertikale Richtung integriert, was

$$\Sigma = \int_{-H}^H \varrho(z) dz \quad (2.17)$$

$$P = \int_{-H}^H p(z) dz \quad (2.18)$$

liefert (vgl. z.B. Illenseer und Duschl 2009). Σ und P sind dabei die vertikal integrierten Größen von Dichte und Druck.

Zudem können die Größen in der Zentralebene von Interesse sein. Letztere sind dabei die dreidimensionalen Werte, welche im Zentrum der Scheibe bei einer gegebenen Schichtung bestimmt werden können, wie es in Illenseer und Duschl (2015) beschrieben wird. So ist z.B. ϱ_c die in der Zentralebene vorherrschende Massendichte, welche bei einer gegebenen isotropen Schichtung über

$$\varrho(z) = \varrho_c \left(1 - \left(\frac{z}{H} \right)^2 \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (2.19)$$

bestimmt werden kann. Integriert man den Ausdruck so erhält man

$$\Sigma = \int_{-H}^H \varrho(z) dz = H \varrho_c {}_2F_1\left(\frac{1}{2}; -\frac{1}{\gamma-1}; \frac{3}{2}; 1\right). \quad (2.20)$$

wobei ${}_2F_1$ die Gaußsche hypergeometrische Funktion ist. Der Faktor nach ϱ_c ist dabei für typische Werte von γ von der Größenordnung eins.

2.3. Chemischer Einfluss im frühen Universum

Wie bereits in vorherigen Abschnitten verdeutlicht (vgl. Abb. 2.2), muss die Zusammensetzung des Gases einen Einfluss auf Gravitoturbulenz haben, da sie das thermische Verhalten im Gas durch Kühlung und Heizung beeinflusst. Das genaue Zusammenwirken ist jedoch nicht leicht vorhersagbar, da ein turbulentes Gas zusammen mit einer chemischen Rückkopplung viele nicht-lineare Effekte beinhalten kann. Im Folgenden wird dazu in zwei Schritten zunächst der kosmologische Kontext in Abschnitt 2.3.1 beschrieben, um ein Bild davon zu bekommen, welche Einflüsse für die hier betrachteten Scheiben, insbesondere in Bezug auf die chemischen Gegebenheiten von Interesse sind und nachfolgend die zeitliche Entwicklung der Chemie selber, der Reaktionskinetik, angerissen.

2.3.1. Kosmologischer Kontext

In den vorangegangenen Abschnitten wurden einerseits selbstgravitierende Akkretions-scheiben und andererseits die zugrundeliegenden Grundgleichung der Hydrodynamik beschrieben. Zudem wurde auf den Einfluss der Zusammensetzung des Gases zur Gravitoturbulenz, und somit auch der Chemie, hingewiesen (vgl. Abb. 2.2). Sowohl in der näheren Umgebung der Erde in z.B. protoplanetaren Scheiben, als auch in weit entfernten Galaxien, kann dabei bereits eine angereicherte Chemie mit verschiedenen Metallen und Staub beobachtet werden (siehe z.B. Donevski u. a. 2020). Durch die Beobachtung der kosmische Hintergrundstrahlung (CMB) zu Zeiten der Rekombinationsepoche und zugrundeliegenden kosmologischen Modellen, weiß man jedoch, dass sich diese chemischen Gegebenheiten erst entwickeln (Voigt 2012).

In der kosmologischen Entwicklung hin zum heutigen Zustand, wurden kurz nach dem Urknall in der primordialen Nukleosynthese die ersten Atomkerne erzeugt (Alpher u. a. 1948), welche zu einer Verteilung von $\sim 0,75$ Wasserstoff und $\sim 0,25$ Helium an baryonischer Materie geführt haben, sowie etwas Lithium (Galli und Palla 1998; Galli und Palla 2013). Anfangs noch als Plasma wird dieses Verhältnis gewahrt und zu Zeiten der Rekombination von Elektronen und Protonen, ca. 380 000 a nach dem Urknall, bei einer Rotverschiebung von $z \sim 1100$ ¹ (Schneider 2006) in Form des CMB sichtbar (Penzias und Wilson 1965). Die darauf folgende Epoche wird Dunkles Zeitalter genannt, da das kosmische Gas nach der Rekombinationsepoche bei einer Temperatur von $T \leq 3000$ K in den neutralen Zustand wechselt und dort keine im sichtbaren Wellenlängen-Bereich detektierbaren Objekte beobachtet werden können (Miralda-Escudé 2003). Die EoR löste dieses so gut wie nicht erforschte Zeitalter letztendlich mit der Entstehung der ersten Sterne auf Grund eines abkühlenden Gases ab (Bromm und Larson 2004). Diese Population III Sterne hatten für ihre Entstehung und Entwicklung, ausgenommen von etwas Lithium somit keine Metalle oder Staub zur Verfügung, ebenso wenig wie die sich darum ausbildenden Akkretionsscheiben. Die Sterne werden dabei durch ihre chemische Komposition deklariert. Dabei sind Population I sonnenähnliche, Population II metallarme und Population III primordiale Sterne (Voigt 2012). Für die ersten Sterne führt dies zu einer höheren

¹Für den Zusammenhang zwischen Rotverschiebung und Alter des Universums wird das Standardmodell der Kosmologie (Λ CDM-Modell) angenommen.

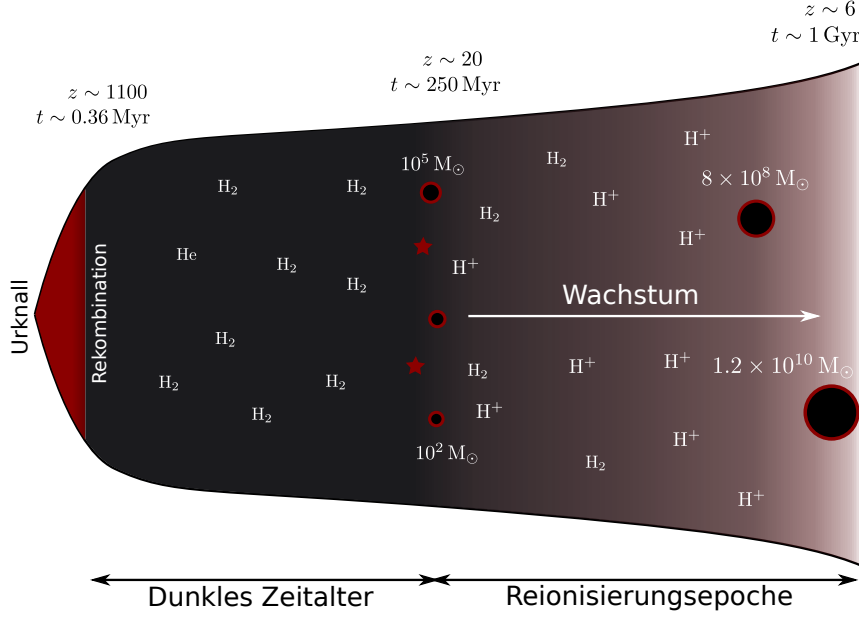


Abbildung 2.3.: Illustration zur Entwicklung des Universums vom Urknall bis zum Ende der Reionisierungsepoche. Die ersten Sterne werden bei $z \sim 20$ vermutet. Die am weitest entfernten SMBH können am Ende der Reionisierungsepoche mit bereits erheblicher Masse beobachtet werden.

Jeans-Masse

$$M_J \approx \sqrt{\frac{1}{\rho} \left(\frac{k_B T}{G \mu} \right)^3} \quad (2.21)$$

(Jeans 1902), der Masse, welche unter Gleichsetzen des thermischen und gravitativen Drucks berechnet werden kann und beschreibt, ab wann eine Gaswolke in sich zusammenfällt. Kann eine kollabierende Gaswolke zu niedrigeren Temperaturen bei sonst gleichen Gegebenheiten und mit einer kleineren Kühlzeitskala als der Freifallzeitskala kühlen, so wird auch die Jeans-Masse kontinuierlich kleiner und ein Gas fragmentiert in kleinere Teile. Das Ende ist erreicht, wenn die Wolke optisch dick wird und nicht weiter kühlen kann (Low und Lynden-Bell 1976; Rees 1976). Im primordialen Setup bei dem Großteils nur Wasserstoff zur Kühlung zur Verfügung steht, führt dies zu insgesamt höheren Temperatur in Gl. 2.21 bei der die ersten Sterne entstehen und somit zu einer höheren Masse für Pop III Sterne (Bromm und Larson 2004; Bromm 2013).

Sowohl der genaue Zeitraum, als auch die Quellen, welche hochenergetische Strahlung zur Verfügung stellten, um das Gas im Universum zu reionisieren sind Teil aktueller Forschung (Zaroubi 2013). Hier kommen neben jungen Sternen und Zwerggalaxien (Robertson u. a. 2010) auch sogenannte (Mini-)Quasare, Schwarzen Löchern deren Strahlung in einem Akkretionsprozess mit einer AD erzeugt wird (Mirabel und Rodríguez 1999; Douna u. a. 2018), als Erklärungsversuche zum Einsatz. Durch die hochenergetischen Prozesse wird das Universum erleuchtet und mit höheren Elementen angereichert, aus welchen sich der für die Kühlung bei moderaten Temperaturen wichtige Staub entwickeln konnte.

Der Beginn der EoR wird bei $z \sim 20$ ($150 \cdot 10^6$ a) geschätzt und ihr Ende bei $z \sim 6$ (10^9 a) (Bowman u. a. 2018). Es werden große Anstrengungen unternommen diesen Zeitraum durch Beobachtungen mit Teleskopen enger einzugrenzen, was jedoch mit vielen Schwierigkeiten verbunden ist. Da im sichtbaren Bereich das Universum bei neutralem Wasserstoff größtenteils opak, während jenes von ionisiertem Wasserstoff relativ durchsichtig ist, liegen aktuelle Beobachtungen mit den größten Teleskopen am Ende der EoR ($z \sim 6 - 7$), in Ausnahmefällen etwas weiter in diesen Bereich hinein (Bañados u. a. 2018; Wang u. a. 2021). Aktuelle Beobachtungen zum Ende der EoR zeigen dabei eine bereits durch Staub angereicherte Umgebung (Venemans u. a. 2017). Die Beobachtungen reichen bis $6 \cdot 10^8$ a nach dem Urknall zurück, jedoch nicht weit genug, um die ersten Sterne oder weitere Objekte zu Beginn der EoR zu betrachten. Zudem sind die Beobachtungsgrundlagen auf einzelne Objekte beschränkt und kein ganzheitliches Entstehungsbild vorhanden, wobei hier in den kommenden Jahren mit Hilfe der 21 cm-Linie neue Erkenntnisse zu erhoffen sind (Liu und Shaw 2020). Schlussendlich bleiben zum aktuellen Zeitpunkt nur theoretische und numerische Modelle, um astrophysikalische Objekte aus dieser Zeit, der kosmischen Morgendämmerung, zu verstehen. Aktuelle Simulationen zeigen dabei, dass z.B. in primordialen Gaskollapsen selbstgravitierende Scheiben um die Zentralobjekte entstehen (Greif 2015; Bromm 2013). Auch die Rückkopplung isolierter selbstgravitierender ADs mit primordialer Chemie wird untersucht (Schleicher u. a. 2016). Letztere deuten darauf hin, dass es Bereiche gibt, in denen selbstgravitierende Scheiben zur Dissoziation von Wasserstoff führen können.

2.3.2. Chemische Netzwerke

Um die chemischen Gegebenheiten mathematisch beschreiben zu können, müssen die Umwandlungen zwischen den primordialen chemischen Komponenten, Wasserstoff und Helium, beispielsweise zwischen atomarer oder molekularer Form bekannt sein und mitgerechnet werden. Im Nicht-Gleichgewichtsfall, welcher bei interstellaren Gasen bei niedrigen Dichten der Fall ist, wird dies durch Ratengleichungen beschrieben.

2.3.3. Ratengleichungen

Die zeitliche Entwicklung der Konzentrationen unterschiedlicher chemischer Spezies lassen sich durch die Ratengleichungen

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j \in B_i} \left(k_j(T, n) \prod_{r \in R_j} n_{r(j)} \right) - \sum_{j \in V_i} \left(k_j(T, n) \prod_{r \in R_j} n_{r(j)} \right) \quad (2.22)$$

beschreiben (Paula 2006; Grassi u. a. 2014). B_i ist dabei die Menge der sich zur Spezies i bildenden Reaktionen und V_i die entsprechend vernichtende Menge. k_j sind die jeweiligen Übergangskoeffizienten mit der Menge R_j , welche der teilnehmenden Reaktanten $n_{r(j)}$ entspricht. Die Einheit der Koeffizienten variiert dabei passend zu der betrachteten Reaktion. Wichtig ist, dass die Übergangskoeffizienten über viele Größenordnungen unterschiedlich sein können. Es handelt sich also um ein steifes, gewöhnliches Differentialgleichungssystem. Insbesondere der erste Punkt führt zu besonderen Anforderungen an die numerischen Methoden, dessen Thematik in Kapitel 3 behandelt wird.

Hinzu kommt eine Gleichung für die Temperatur T

$$\frac{dT}{dt} = (\gamma - 1) \frac{\Gamma(n, T) - \Lambda(n, T)}{k_B \Sigma_i n_i}, \quad (2.23)$$

welche über die Übergangskoeffizienten oben rückkoppelt (Grassi u. a. 2014). Dabei sind Γ und Λ Heiz- und Kühlterm.

Letztendlich lassen sich die Ratengleichungen 2.22 zusammen mit der Gl. 2.23 somit auf ein Anfangswertproblem der Form

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = f(t, \mathbf{n}(t)), \quad \mathbf{n}(0) = \mathbf{n}_0 \quad (2.24)$$

reduzieren. Die allgemeine Lösung dieses Problems ist insbesondere auf Grund deren Steifheit numerisch anspruchsvoll und wird in Abschnitt 3.2.1 besprochen.

2.3.4. Lokales thermodynamisches Gleichgewicht

Bei hohen Dichten, wie sie in selbstgravitierenden Scheiben vorkommen können, werden die Zeitskalen der chemischen Ratengleichungen in primordialen Netzen um ein vielfaches kleiner als jene der Hydrodynamik, welche somit quasi instantan stattfinden (Yoshida u. a. 2008).

In massereichen ADs ist dies für Dreikörperstöße



der Fall, deren Reaktionswahrscheinlichkeit kubisch mit der Anzahlldichte ansteigt (Greif 2015). In diesem Fall ist es sinnvoll anstatt der Ratengleichungen 2.22 ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE) anzunehmen, wie es zum Beispiel in Greif u. a. (2012) und Yoshida u. a. (2008) Verwendung findet. Mathematisch bedeutet dies, dass

$$\frac{dn}{dt} \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.26)$$

gilt. Die Annahme eines LTE ist vor allem auch deswegen notwendig, da die numerischen Verfahren aus Kapitel 3.2.1 nicht mehr in der Lage sind die Lösung über die notwendig großen Zeitskalen performant berechnen zu können. Die Verhältnisse zwischen den Spezies können im LTE durch die Saha-Gleichung beschrieben werden (siehe z.B. Voigt 2012). In primordialen, selbstgravitierenden ADs ist insbesondere das Verhältnis von molekularem zu atomarem Wasserstoff interessant, welches

$$\frac{n_{\text{H}_2}}{n_{\text{H}}^2} = \frac{z_{\text{H}}^2}{z_{\text{H}_2}} \left(\frac{\pi k_B m_{\text{H}}}{h^2} \right)^{3/2} T^{3/2} \exp \left(-\frac{\chi_{\text{H}_2}}{k_B T} \right) \quad (2.27)$$

entspricht (Yoshida u. a. 2008). Hier sind $z_{\text{H}}^2, z_{\text{H}_2}$ die Zustandssummen der dazugehörigen Wasserstoffsorte. Die Zustandssummen hängen mit den Ratenkoeffizienten in Gl. 2.22 zusammen und sind für die Dreikörperstöße in Gl. 2.25 nicht abschließend bekannt (Greif 2015).

In Turk u. a. (2011) und Denbigh (1981) wird jedoch darauf eingegangen, dass für die Dreikörperreaktion Gl. 2.25 zusammen mit der Voraussetzung für LTE Gl. 2.26

$$\frac{n_{\text{H}_2}}{n_{\text{H}}^2} = \frac{k_r(T)}{k_d(T)} \quad (2.28)$$

gilt, wobei k_r und k_d die von der Temperatur abhängigen Ratenkoeffizienten aus Gl. 2.22 sind. Typischerweise und die in dieser Arbeit später verwendeten Übergangskoeffizienten für Gl. 2.28 sind jene von Martin u. a. (1996), und Forrey (2013), wobei letztere die Erzeugung von molekularem Wasserstoff in Gl. 2.25 beschreibt. Es gibt noch weitere Dreikörperstöße mit z.B. einem zusätzlichen molekularem Wasserstoffteilchen, Heliumatom oder sogar ionisiertem Wasserstoff. In diesem Fall wird der Ausdruck 2.28 jedoch wesentlich komplizierter. Zudem muss sichergestellt werden, dass im LTE die Dreikörperstöße wirklich so dominant sind, dass andere Reaktionen für die Entwicklung von H und H_2 vernachlässigbar sind. Dies muss jedoch, ebenso wie die betrachteten Übergangskoeffizienten, individuell für das betrachtete Netzwerk und deren Anwendungen untersucht werden.

2.3.5. Kühlung primordialer Gase

Wie in Abschnitt 2.1 erwähnt, ist die Betrachtung einer primordialen Chemie vor allem deswegen interessant, da selbstgravitierende Scheiben und Gravitoturbulenz direkt mit der Temperatur und damit auch den relevanten Heiz- und Kühlprozessen zusammenhängen. Je nach Zusammensetzung kann ein Gas über verschiedenste Mechanismen kühlen. Diese Prozesse sind in der Regel überaus komplex und werden daher versucht mit sinnvollen Annahmen so zu reduzieren, dass sie mit den heutigen Rechenkapazitäten bewältigt werden können.

Wie zu Beginn dieses Kapitels 2.3.1 erwähnt spielt im frühen Universum vor allem der Wasserstoff zur Kühlung eine große Rolle. In der Energiegleichung 2.11 hat die Chemie einen Einfluss über den Quellterm oder kann durch direkte Manipulation der Energie zurückgespielt werden und damit auf die Hydrodynamik Einfluss nehmen.

Eine aktuelle Übersicht über die angenommenen Kühlungen von Gasen im frühen Universum befinden sich in Bovino und Galli (2019). Dort werden mögliche entsprechende Mechanismen genauer besprochen, bei denen die folgenden für neutralen Wasserstoff am wichtigsten sind:

Molekulare Kühlung Die Linien, welche eine Abstrahlung erlauben sind hauptsächlich Rotations-Vibrations-Übergänge des Wasserstoffmoleküls H_2 . Bei einer Teilchendichte von $n_{\text{H}} \sim 10^9 \text{ cm}^{-3}$ wird das Gas gegenüber dieser Strahlung optisch dick. Diese Form der Kühlung spielt insbesondere bei verhältnismäßig niedrigen Teilchendichten n und Temperaturen eine Rolle.

Collisionally induced emission (CIE) (Kontinuierlich) Die CIE-Kühlung spiegelt den dominanten (wenn auch nicht alleinigen) Anteil aller kontinuierlicher Beiträge zur Kühlung wider. Sie ist insbesondere bei hohen Dichten und nicht zu hohen Temperaturen relevant. Bei den hohen Dichten können inelastische Stöße zwischen

molekularem Wasserstoff auftreten, wodurch über eine supramolekulare Verbindung Energie abgestrahlt werden kann. Bei einer Teilchendichte von $n_H \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ wird das Gas auch unter diesem Prozess optisch dick.

Reaktionskühlung und -heizung Im Falle endo- oder exothermer Reaktionen wird eine entsprechende Energiedifferenz fällig. Im primordialen Gas ist vor allem die Dissoziation von H_2 interessant, welche durch die Dreikörperstöße aus Gl. 2.25 bei relativ hohen Temperaturen auftreten können. Wann genau diese stattfinden hängt unter Beschreibung der Übergangskoeffizienten von der Temperatur und Dichte, also dem Zustand des Gases, ab.

Für selbstgravitierende Scheiben wäre neben der Reaktionskühlung und -heizung vor allem die CIE Kühlung von Interesse, da sie bei hohen Dichten und verhältnismäßig niedrigen Temperaturen dominiert. Zudem können noch weitere Kühlungen in primordialen Gasen eine Rolle spielen. Hier kommt HD-Kühlung mit Deuterium, welches bei sehr niedrigen Dichten und Temperaturen relevant werden kann in Frage. Atomare Kühlung kann bei sehr hohen Temperaturen und Dichten dominieren. In Mayer und Duschl (2005) wird zudem gezeigt, dass auch ein geringes Vorkommen von Lithium eine wichtige Rolle spielen kann.

Möchte man die Kühlungen und Heizungen der CIE- und H_2 -Kühlung korrekt simulieren, muss die Strahlungstransportgleichung

$$\frac{dI(\nu)}{dz} = -\kappa(\nu)I(\nu) + \epsilon(\nu) \quad (2.29)$$

gelöst werden (Voigt 2012), wobei z der betrachtete Weg, I_ν die Intensität, κ_ν der kombinierte Absorptions- und Streukoeffizient, sowie ϵ_ν die Emissionsleistung darstellen. Die Gleichung enthält mit der Wellenlängenabhängigkeit (ν) und der Abhängigkeit der Koeffizienten vom Material sehr viele physikalische Abhängigkeiten, wie der chemischen Komposition, welche für praktische Anwendungen eine große zusätzliche Komplexität mit sich ziehen.

Solange das betrachtete Gas optisch dünn ist, findet man für die Kühlterme noch verhältnismäßig einfache funktionale Zusammenhänge. Optisch dünn bedeutet dabei, dass die optische Tiefe

$$\tau = \int_0^{z_0} \kappa(\nu) dz \quad (2.30)$$

sehr viel kleiner als eins, also $\tau \ll 1$ gilt. Gilt dies nicht mehr spricht man vom optisch dicken Fall ($\tau \gg 1$) und die Lösung von Gl. 2.29 wird um ein vielfaches komplizierter, da nun auch die Geometrie, bzw. Verteilung des Gases eine Rolle spielt. Häufig werden hier einfache Annahmen wie eine sphärische Symmetrie angenommen (Ripamonti und Abel 2004), was allerdings bei Ausbildung einer Akkretionsscheibe nicht mehr vorbehaltlos angenommen werden kann.

3. Numerische Grundlagen

Dieses Kapitel beschreibt die numerischen Grundlagen zur Simulation von Akkretionsflüssen. Es werden die numerischen Verfahren, insbesondere das Hydrodynamik-Paket Fosite und die während der Arbeit vorgenommenen Implementierungen beschrieben. Dies beinhaltet die Verwendung von passiven Variablen zur Betrachtung chemischer Komponenten. Für die Entwicklung letzterer in Form chemischer Ratengleichungen, wird ein eigens geschriebener zellvektorisierter Löser namens OdeVec vorgestellt. Der Löser basiert auf den BDF-Verfahren (engl. backward differentiation formulas) und wird durch einen Python Präprozessor vervollständigt, um möglichst viele Optimierungen bereits vor Kompilierzeit vornehmen zu können. Zudem wird das verwendete Chemiepaket KROME und die Verknüpfung zu oben genannten Paketen beschrieben sowie auf weitere Optimierungen, welche insbesondere die Vektorisierung auf der NEC SX-Aurora Tsubasa betreffen eingegangen. Der Quellcode von OdeVec ist unter <https://github.com/jannesklee/odevec> frei zugänglich.

3.1. Das Hydrodynamikpaket Fosite

Fosite ist ein Software-Paket zur numerischen Berechnung von kompressiblen Fluiden unter Verwendung von ein-, zwei- oder dreidimensionalen krummlinig-orthogonalen Gittern (Illenseer und Duschl 2009)¹. Die Berechnung der Flüsse basiert auf dem Verfahren von Kurganov und Tadmor (2000). Es gehört damit zu den Finite-Volumen-Verfahren (FVM) und stellt sicher, dass Erhaltungsgrößen bis auf Maschinengenauigkeit erhalten werden. Der Code ist in der aktuellen Version in Fortran 2008 Standard und objektorientiertem Design geschrieben, wodurch ein hoher Grad an Modularität erreicht wird. Zudem ist Fosite vollständig parallelisiert und vektorisiert, letzteres insbesondere für die Berechnung auf dem NEC-SX Aurora Tsubasa Vektorrechnersystem² (NEC Corp. 2022).

Die bisherigen Module sind auf die Berechnung von rotationssymmetrischen Objekten mit flachen Geometrien, wie bei vielen Arten von Akkretionsscheiben der Fall, ausgelegt. So können z. B. die dortigen physikalisch wichtigen Erhaltungsgrößen, Drehimpuls und Enstrophie in der Numerik bis auf Maschinengenauigkeit erhalten werden (Jung 2016). Zudem können für differentielle Flüsse und bekannter Hintergrundgeschwindigkeit mit Hilfe des Fargo Schemas (Masset 2000; Jung 2016) größere Zeitschritte erreicht werden, was die nötige Simulationszeit erheblich verkürzt. Des weiteren können lokal genäherte Simulationen von Akkretionsscheiben, auch Shearingbox Simulationen, durchgeführt werden (Klee u. a. 2017; Hawley u. a. 1995). Diese Darstellung eignet sich insbesondere, um detailliert (Gravito-)Turbulenzen darzustellen.

¹Die aktuellste Version kann unter www.astrophysik.uni-kiel.de/fosite/ gefunden werden.

²Eine ältere zweidimensionale Version von Fosite ist für die NEC-SX Ace optimiert.

Neben diesen hat Fosite bereits eine große Liste an Features. Bei Verwendung der entsprechenden Module wird auf die jeweilige Literatur verwiesen. Einige der relevanten Features sind in Tab. 3.1 aufgelistet. Die Einbindung chemischer Netzwerke und dazugehöriger passiver Advektion sind neben diversen Optimierungen wesentliche Teile die während der Doktorarbeit beigetragen wurden. Dies beinhaltet auch ein Zeitschrittverfahren, welches für steife gewöhnliche Differentialgleichungen (engl. ordinary differential equations, ODEs) geeignet ist. Das Verfahren wurde dabei in einem eigenständigen Löser OdeVec realisiert, welcher in Fosite eingebunden ist, jedoch auch für Drittanwender zugänglich bleibt.

Tabelle 3.1.: *Übersicht einiger Features von Fosite.*

Physik	1D, 2D, 3D kompressible Hydrodynamik
Flüsse	KT- oder HLLC-Verfahren (2. Ordnung)
Limiter	Vanleer, Superbee, Minmod, Limiter für passive Skalare
Zeitschrittverfahren	modifizierte Euler- & Runge-Kutta-Verfahren (1.-5. Ordnung)
Erhaltungsgrößen	Dichte, Impuls, Energie, Drehimpuls, Enstrophie
Geometrien	kartesisch, (log-)zylindrisch, (log-)sphärisch
Optimierungen	Fargo Algorithmus Shearingsheet
Randbedingungen	no-gradients, absorbierend, periodisch, reflektierend, outflow, keplersch (für globale Scheiben), shearing (für Shearingsheet)
Gravitation	Fouriermethoden in polaren Gittern & in Shearingsheet, Punktmassenpotential, Binärpotential
Höhenberechnung	Konsistente Berechnung für dünne, selbstgravitierende Akkretionsscheiben
Heizung/Kühlung	β -Kühlung, Staubkühlung, chemische Kühlung/Heizung
Viskosität	α , β und molekular
Chemie	Chemische Netzwerke mit KROME und OdeVec
Parallelisierung	MPI, Vektorisierung für SX-Architektur
Testumgebungen	TAP, CTest, Gitlab-Testpipeline
Ausgabe	Reine Binärausgabe, XDMF und VTK

Im Folgenden werden die für diese Arbeit wichtigen Teile kurz beschrieben und erläutert sowie auf die Beiträge im Rahmen der Doktorarbeit hingewiesen. Allgemein erwähnenswerte Beiträge zu Fosite sind hier insbesondere Illenseer (2006), Illenseer und Duschl (2009), Sperling (2013), Jung (2016), Jung u. a. (2018) und Klee (2016). Der zuvor angesprochene Löser OdeVec wird ab Abschnitt 3.2 beschrieben.

Optimierung von Fosite für die Vektorarchitektur von NEC

Fosite ist mit dem Message Passing Interface (MPI) parallelisiert was es grundsätzlich ermöglicht das Paket auf verschiedensten Architekturen verteilt-parallel auszuführen. Gleichzeitig ist Fosite auf vektorisierte Berechnungen spezialisiert, woraus ein Großteil

seiner Performanz resultiert. Die aktuellste Version von Fosite ist auf das NEC-SX Aurora Tsubasa System zugeschnitten. Um die Unterschiede zu verdeutlichen sollen in knapper Form verschiedene Architekturen beschrieben werden.

Die Rechnerarchitektur hat einen großen Einfluss auf die Effizienz. In der sogenannten Flynnschen Klassifikation (Flynn 1972) sind SISD-Architekturen (engl. single instruction, single data), unter die (unter Vorbehalt) auch die klassischen central processing units (CPUs) fallen besonders gut geeignet, um unterschiedliche Operationen schnell auf ebenso unterschiedliche Daten anzuwenden. Möchte man den Durchsatz erhöhen und mehr Daten pro Zeit verarbeiten, muss die Taktrate erhöht oder viele CPUs in Cluster-Verbänden gleichzeitig verwendet werden. Im Gegensatz dazu werden bei SIMD-Architekturen (engl. single instruction, multiple data) die gleichen Operationen auf viele Daten auf einmal angewandt. Darunter fallen Vektorrechner und Grafikkarten. Diese haben einen maßgeblich höheren Durchsatz, jedoch auch eine geringere Flexibilität in Bezug auf Programmierung und die Wahl von Algorithmen, da immer ausreichend Daten im richtigen Format vorhanden sein müssen, auf die die gleichen, voneinander unabhängigen Operationen angewendet werden können. Letzteres bedeutet, dass innerhalb eines Berechnungsschritts bei dem mehrere Datenfelder geändert werden, das Ergebnis eines Datenfeldes nicht von dem Ergebnis eines anderen abhängen darf. Wichtig für eine gute Vektorisierung sind also vor allem zwei Voraussetzungen:

1. Auf viele Daten können die gleichen und unabhängigen Operationen angewandt werden.
2. Die Daten liegen linear im Speicher.

Die für die Programmierung wichtigste Größe ist dabei die Vektorlänge. Sie entscheidet wie groß der Datensatz ist der in einem Schritt verarbeitet werden kann. Vektorrechner haben nach ihren anfänglichen Erfolgen³ zunächst zugunsten CPU Cluster-Verbänden mit hoher Parallelisierung und Taktfrequenz an Bedeutung verloren. Da diese jedoch mittlerweile an ihre Grenzen stoßen, gewinnt Vektorisierung in Prozessoren auch durch die Verwendung von Beschleunigern in Form von Grafikkarten/Vektorkarten wieder zunehmend an Bedeutung. Zudem sind auch die klassischen Intel CPUs heutzutage mit dem AVX-512 Befehlssatz erweitert, welcher eine Vektorlänge von 512 Bits aufweist und somit 8 floats in doppelter Genauigkeit auf einmal abarbeiten kann und folglich keine reine SISD-Architektur mehr darstellt.

Im Vergleich dazu hat das SX Tsubasa System mit einer Registerlänge von 256 floats in doppelter Genauigkeit nochmal einen vielfach höheren Vektorlänge. Sie gibt an, wie viele Daten mit der gleichen Operation in einem Schritt abgearbeitet werden können. Insgesamt erreicht das Tsubasa System damit in doppelter Genauigkeit auf einem einzelnen vector core (VC) eine Peak-Performance von 268 GFlops, wobei jeweils 8 dergleichen mit einem gemeinsamen Speicher von 48 GB zu einer vector engine (VE) zusammengefasst werden⁴.

³Die Cray-1 von 1976 war eine der ersten kommerziell vertriebenen Supercomputer, ein Vektorrechner mit einer Länge von 512 Registern.

⁴Der hier beschriebene Typ entspricht 10B, vgl. (NEC Corp. 2022).

Eine Besonderheit ist zudem die hohe Bandbreite von 1,22 TB/s, welche bei Grafikkarten nicht selten den Flaschenhals in der Geschwindigkeit der Berechnung darstellen. In den folgenden Abschnitten wird immer wieder Bezug auf Vektorisierung und Parallelisierung genommen, da diese häufig in der Designentscheidung und Wahl von Algorithmen eine entscheidende Rolle einnimmt.

3.1.1. Zustandsvektor und Flüsse

Das Verfahren aus Illenseer und Duschl (2009), auf dem Fosite basiert, löst im Allgemeinen hyperbolische Gleichungen der Form

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{T}(\mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

zu denen auch die hydrodynamischen Gleichungen aus Abschnitt 2.2.1 gehören. Dabei hängt die konkrete Ausprägung vom Zustandsvektor \mathbf{u} und dem Tensor \mathbf{T} ab, welche die vom Verfahren erhaltenen Variablen und die betrachtete Physik beschreiben.

Für \mathbf{u} erhält man für die hydrodynamischen Grundgleichungen im zweidimensionalen Fall beispielsweise

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \Sigma \\ \Sigma v_\xi \\ \Sigma v_\eta \\ \epsilon \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

wobei v_η , v_ξ die Geschwindigkeit in erster und zweiter Dimension sind. \mathbf{u} enthält die Erhaltungsgrößen, auch genannt konservativen Variablen des Systems, welche von Fosite wie in Abschnitt 3.1 erwähnt vom Verfahren erhalten bleiben. Dies ist insbesondere interessant, wenn spezielle Größen wie der Drehimpuls erhalten werden soll. Dann ergibt sich ein Zustandsvektor

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \Sigma \\ \Sigma v_\xi \\ \Sigma l \\ I \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

wie in Jung (2016) ausgeführt, mit dem spezifischen Inertialdrehimpuls l und der Rothalpie I .

Der Term $\nabla \cdot \mathbf{T}$ kann in unterschiedliche Beiträge von Flussvektoren aufgeteilt werden und enthält auch mögliche geometrische Quellterme. Für einige konkrete Darstellungen können Illenseer und Duschl (2009), Sperling (2013) und Jung (2016) betrachtet werden. Weitere externe Quellterme können zusammen mit den geometrischen Quelltermen verarbeitet werden.

3.1.2. Verwendete Geometrien

Lokale Simulationen

Um das turbulente Verhalten von gravitativen Instabilitäten genauer untersuchen zu können, bietet es sich an einen detaillierten Ausschnitt einer Akkretionsscheibe abzu-

bilden. Der Shearingsheet ist eine lokale, linearisierte Approximation einer differentiell rotierenden Scheibe und bewegt sich im mitrotierten Bezugssystem um ein Zentralobjekt (Goldreich und Lynden-Bell 1965; Hawley u. a. 1995). Dadurch, dass nur ein Teil der Akkretionsscheibe simuliert wird, können wesentlich höhere Auflösungen erreicht werden als in globalen Simulationen. Hinzu kommt, dass das mitrotierte Bezugssystem sehr große Zeitschritte erlaubt, womit über lange Zeitskalen gerechnet werden kann. Um Gravitoturbulenz numerisch zu untersuchen verwendete erstmals Gammie (2001) dieses Hilfsmittel.

Wendet man die lokale Näherung $y = r - r_0$ und $x = r_0 (\varphi - \Omega t)$ auf die Grundgleichungen der Hydrodynamik mit Selbstgravitation aus Abschnitt 2.2.1 an, reduzieren sich diese in zwei Dimensionen auf

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\Sigma \mathbf{v}) - q \Omega y \frac{\partial \Sigma}{\partial x} = 0, \quad (3.4a)$$

$$\frac{\partial \Sigma \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\Sigma \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + P \mathbf{1}) - q \Omega y \frac{\partial \Sigma \mathbf{v}}{\partial x} = \Omega \Sigma \begin{pmatrix} (2-q)v_y \\ -2v_x \end{pmatrix} - \Sigma \nabla \Phi_{\text{sg}}, \quad (3.4b)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + P) \mathbf{v}) - q \Omega y \frac{\partial E}{\partial x} = -q \Omega \Sigma v_x v_y - \Sigma \nabla \Phi_{\text{sg}} \cdot \mathbf{v} - Q_{\text{cool}}, \quad (3.4c)$$

$$\Delta \Phi_{\text{sg}} = 4\pi G \Sigma \delta(z), \quad (3.4d)$$

wobei $q = -\frac{d \ln \Omega}{d \ln r}$ gilt und damit $q \approx 3/2$ für keplersch-selbstgravitierende Scheiben angenommen werden kann (Hawley u. a. 1995). Zudem ist zu beachten, dass $\mathbf{v} = (v_x v_y)^T$ der Residualgeschwindigkeit entspricht, bei der die konstante Hintergrundgeschwindigkeit $q \Omega y \mathbf{e}_x$ abgezogen wurde. Des Weiteren ist $\delta(z)$ die Delta-Distribution, welche den gravitativen Anteil in einer hauchdünnen Scheibe (engl. razor-thin disk) beschreibt und Q_{cool} die Gammie-Kühlung aus Gl. 2.12.

Gerade im Fall von selbstgravitierenden Scheiben muss die Annahme der Lokalität, welche im Shearingsheet vonnöten ist, nicht immer gegeben sein. Dies wurde eindrücklich von Balbus und Papaloizou (1999) gezeigt. Durch Selbstgravitation erzeugte Dichtewellen können durch die Scheibe wandern und an anderer Stelle die Energie dissipieren. Balbus und Papaloizou (1999) zeigen zudem, dass die lokale Approximation gilt, wenn die Scheibe ausreichend kalt und nicht zu massereich ist. In Gammie (2001) werden grundsätzliche Analysen gemacht, um die Verwendung der lokalen Näherung für Gravitoturbulenz zu rechtfertigen. Lodato und Rice (2004) zeigen für protoplanetare Scheiben numerisch, dass das Verhältnis zwischen den Massen von Scheibe M_D und Zentralobjekt M entscheidend dafür ist, ob eine lokale Approximation gerechtfertigt ist und kommen zum Ergebnis, dass dies bis $M_D/M \lesssim 0.5$ noch erfüllt ist.

Vektorisierung & Parallelisierung Um das Potential im Shearingsheet für die Selbstgravitation in Gl. 2.3 zu lösen werden Fast Fourier Transforms (FFTs) verwendet. Beim Überführen in den Fourierraum ergibt sich eine algebraische Gleichung, welche komponentenweise durch

$$\Phi_{\text{sg}}(\mathbf{k}(t)) = \frac{2\pi G \Sigma(\mathbf{k}(t))}{|\mathbf{k}(t)|} \quad (3.5)$$

gelöst werden kann (Gammie 2001; Klee u. a. 2017). Bei der Größe $\Phi_{\text{sg}}(\mathbf{k}(t))$ handelt es sich um die Fouriertransformierte, ebenso bei $\Sigma(\mathbf{k}(t))$. Die abhängige Variable ist dabei nicht mehr der Ortsvektor sondern der Wellenvektor $\mathbf{k}(t)$. Die Abhängigkeit zur Zeit t kommt dadurch zustande, dass für die Fouriertransformierte periodische Randbedingungen benötigt werden und damit eine Verschiebung zum nächsten periodischen Punkt nötig ist (Hawley u. a. 1995).

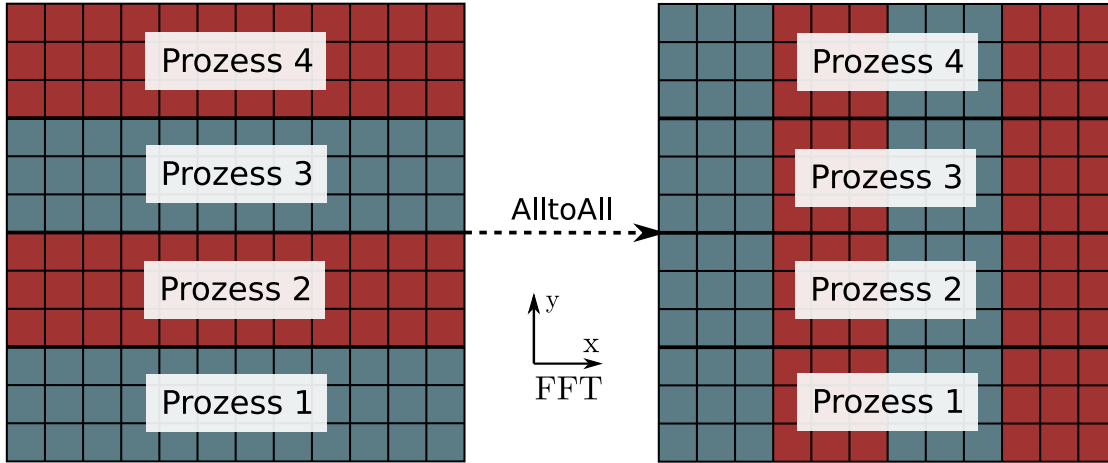


Abbildung 3.1.: MPI-Kommunikation zur Parallelisierung des Shearingsheets. Um die zweidimensionale Fouriertransformation zu ermöglichen, wird diese zunächst nur entlang einer Dimension (x) durchgeführt. Danach werden die Daten in einer all-to-all-Kommunikation umverteilt, um eine korrekte Verteilung der Daten entlang der zweiten Dimension zu erhalten. In der Abbildung werden die Daten entlang der Diagonalen von unten links nach oben rechts gespiegelt.

Um höchste Auflösungen im Shearingsheet zu erlauben muss sowohl eine effiziente Parallelisierung als auch Vektorisierung gewährleistet sein. Dabei benötigt der Gravitationslöser für die Anwendbarkeit der Fouriermethoden periodische Randbedingungen und erlaubt damit keine beliebige Zerteilung des Rechengebietes. Um dennoch eine Parallelisierung zu ermöglichen kann das Feld in Streifen zerteilt werden, was auch Pencil-Dekomposition genannt wird. Entlang einer Richtung kann nun eine Fouriertransformation vorgenommen werden. Um entlang der zweiten Dimension ebenfalls transformieren zu können, muss das gesamte Feld transponiert werden. Dies entspricht einer *Alltoall*-Kommunikation im MPI, ist sehr kostspielig, da alle Kerne miteinander kommunizieren müssen und ist in Abb. 3.1 verbildlicht. In Abb. 3.2 sind die nötigen Schritte dargestellt. Damit bei gegebener Parallelisierung eine gleichzeitig gute Vektorisierung garantiert werden kann, sollte die erste Dimension jene sein, welche vollständig in einem Rechengebiet zur Verfügung steht und entlang der nicht verschoben wird. Daher wurden alle betroffenen Module im Vergleich zu Klee u. a. (2017) und vielen Implementierungen wie z.B. in Gammie (2001) um 90° gedreht.

Es existieren verschiedene Implementierungen in Fosite für die oben erläuterte Parallelisierung. Neben einer auf FFTW (Frigo und Johnson 2012) basierenden Lösung, gibt es

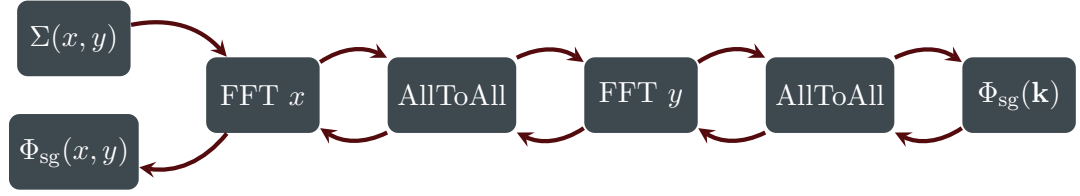


Abbildung 3.2.: Darstellung der Vorgehensweise zur parallelen Berechnung des Potentials $\Phi_{sg}(x, y)$. Die Dichte wird in zwei Schritten Fouriertransformiert, um eine algebraische Lösung $\Phi_{sg}(k)$ nach Gl. 3.5 zu berechnen. Anschließend wird die Rücktransformation durchgeführt um in den Ursprungsraum zu gelangen.

eine in der die Kommunikation eigenständig vorgenommen wurde (für die Architektur SX-ACE), sowie eine dritte, welche die ASL-Bibliothek auf der SX-Aurora Tsubasa verwendet. Letztere bietet dabei ein FFTW Interface an, welches auf die zugrunde liegenden, vektorisierten Bibliotheken verweist.

Globale Simulationen

Möchte man ADs in ihrer gesamten radialen Ausdehnung auflösen und dabei nicht-achsensymmetrische Effekte abbilden, bietet es sich an eine zweidimensionale, zylindrische Geometrie mit Radius r und Azimut φ zu verwenden. Insbesondere bei Simulationen über große radiale Bereiche hinweg können zudem logarithmisch-zylindrische Gitter, bei denen die Zellen in radialer Richtung entsprechend größer werden, sinnvoll sein. Des Weiteren ermöglicht ein Wechsel in das mitrotierte Bezugssystem und das Umformen der Impulsgleichungen 2.10 zu Drehimpulsgleichungen eine Optimierung der Simulationszeiten (vgl. Fargo Masset 2000) und wesentliche Verbesserungen in den Erhaltungseigenschaften des numerischen Verfahrens (Kley 1998; Mignone u. a. 2012; Jung 2016). Die detaillierte Implementierung der Drehimpuls- sowie Enstrophieerhaltung innerhalb Fosites werden in Jung (2016) und Jung u. a. (2018) beschrieben.

Um die Poissongleichung 2.3 in zylindrischen Geometrien zu lösen sind in Fosite Fourierlöser implementiert, welche auf Chan u. a. (2006) und Li u. a. (2009) basieren und deren genauere Implementierung in Fosite ebenfalls in Jung (2016) erläutert sind. Hier findet in azimutaler Richtung eine Fouriertransformation statt und in radialer Richtung werden auftretende Integrale mit Hilfe der Mittelpunktsregel gelöst und damit das Gravitationspotential bestimmt.

Vektorisierung & Parallelisierung Um eine bessere Vektorisierung & Parallelisierung insbesondere für die Vektorarchitektur von NEC zu erreichen, wurden alle oben erwähnten Module zur globalen Simulation auf ein alternatives logarithmisch-zylindrisches Gitter erweitert. Dazu wurde die Reihenfolge der Koordinaten nach

$$(r, \varphi, z) \rightarrow (\varphi, r, -z) \quad (3.6)$$

geändert. Diese unscheinbare Vertauschung der ersten beiden Komponenten hat weitreichende Folgen für die Skalierbarkeit durch Parallelisierung und Vektorisierung. Dies liegt darin begründet, dass der implementierte Gravitationslöser eine Parallelisierung in

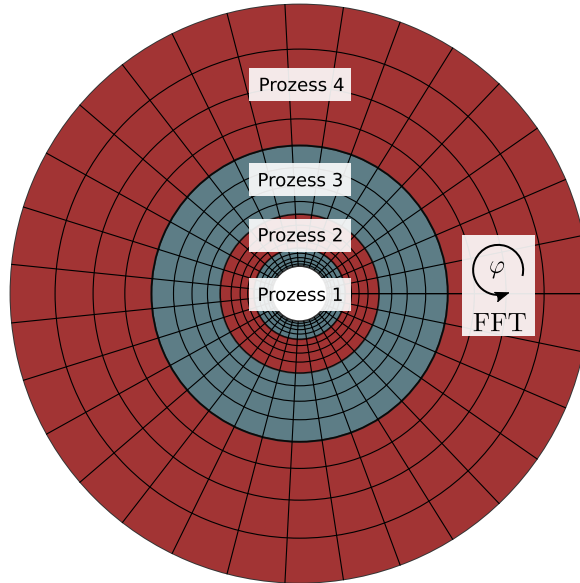


Abbildung 3.3.: *Optimierung in globalen Simulationen. Die Parallelisierung muss auf Grund des Gravitationslösers entlang der radialen Richtung stattfinden. Daher ist es sinnvoll die φ -Richtung als erste Variable zu wählen, um gleichzeitige eine gute Vektorisierung zu erlauben.*

Ringen vorsieht und somit das Rechengebiet entlang der radialen Richtung zerteilen muss. Betrachtet man z.B. ein Gitter mit einer Auflösung $256 \times 256 \times 1$ wird dieses entlang r zu zwei Rechengebieten mit jeweils $128 \times 256 \times 1$ aufgeteilt. Der Vektorrechner kann nur entlang der ersten Dimension vektorisieren, was dazu führt, dass eine mit der Anzahl der Prozesse immer schlechtere Vektorisierung stattfindet und schlussendlich in schlechter Skalierbarkeit resultiert. Hinzu kommt, dass bei der Simulationen von ADs meist eine höhere Auflösung in φ gewählt wird, um möglichst quadratische Zellen zu erhalten. Daher ist es dort ohnehin einfacher auf Vielfache der Vektorlänge von 256 doubles zu kommen. In Abb. 3.3 ist dieser Zusammenhang illustriert. Die Änderung der dritten Komponente von z zu $-z$ ist nötig um Rechtshändigkeit zwischen den Variablen zu gewährleisten, spielt im Falle von 2D Simulationen jedoch eine untergeordnete Rolle. Allerdings verändern sich abhängig von der Implementierung der Quellterme die Rotationsrichtungen. Die beiden Geometrien werden durch die Namen LOGCYLINDRICAL (r zuerst) und LOGCYLINDRICAL2 (φ zuerst) unterschieden.

3.1.3. Limiter

Limiter spielen in der numerischen Berechnung kompressibler Fluide eine wichtige Rolle. Die limitierenden Funktionen sind nötig, um in hochauflösenden Verfahren numerische Stabilität beim Auftreten von Stoßwellen zu gewährleisten. Die Notwendigkeit dieser nichtlinearen Helfer wird durch Godunov's Theorem (Godunov 1959) festgeschrieben, welches besagt, dass stabile lineare Verfahren maximal erster Ordnung sein können. Ein

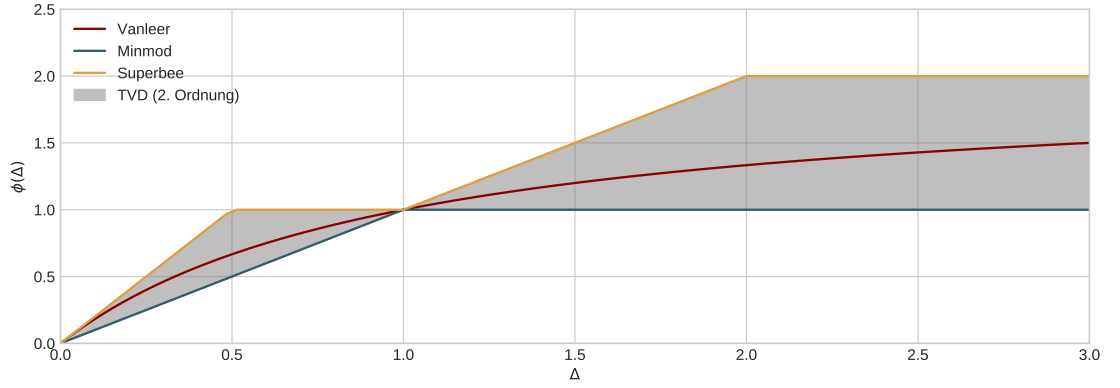


Abbildung 3.4.: Die Limiter-Funktionen Vanleer, Minmod und Superbee zusammen mit der TVD-Region dargestellt.

idealer Limiter greift nur in unmittelbarer Nähe von Stoßfronten ein und hat einen minimalen Einfluss in Bereichen flacher Gradienten. Eine wichtige Eigenschaft, welche dazu erfüllt sein muss wird als total variation diminishing (TVD) bezeichnet (Harten 1983) und garantiert die Monotonie des Verfahrens. So muss für die totale Variation

$$TV(u(t_k)) = \sum_j |u_{j+1}(t_k) - u_j(t_k)| \quad (3.7)$$

die Bedingung

$$TV(u(t_{k+1})) \leq TV(u(t_k)) \quad (3.8)$$

sichergestellt sein. Dabei ist j ein Ortsindex, und u eine Variable aus Gl. 3.1. Das Einführen der Limiter muss also bestimmte Bedingungen erfüllen und ist dabei zugleich heuristischer Natur. Sie bilden immer einen Kompromiss der oben gemachten Grenzbereiche zwischen flachen und steilen Gradienten im Lösungsverfahren.

Je nach Wahl können Limiter auf Flüsse oder direkt auf die Zustände angewandt werden. Bei Fosite ist letzteres der Fall. Konkret greift der Limiter durch den Vergleich der Differenzen

$$\Delta_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{u_{j+1} - u_j}, \quad (3.9)$$

in die Steigungen der Zustände auf den Zellrändern ein. Diese werden dann über

$$\tilde{\Delta}_j = \phi(\Delta_j) \quad (3.10)$$

korrigiert und danach für die Berechnung der Flüsse über ebendiese Ränder verwendet. Erwähnenswerte Limiter innerhalb dieser Arbeit sind unten aufgelistet. In Abb. 3.4 werden diese zusammen mit der TVD-Region für Verfahren 2. Ordnung dargestellt (Sweby 1984).

Minmod

$$\phi(r) = \max(0, \min(1, r)) \quad (3.11)$$

Der Minmod-Limiter (Roe 1986) ist maximal dissipativ, fügt also dem System besonders viel künstliche Viskosität zu. Man verhindert hier unerwünschte numerische Effekte hat jedoch zugleich das Problem, dass man bei zunehmend höheren Auflösungen langsam konvergiert. Insbesondere Stoßfronten sind hier verhältnismäßig schlecht dargestellt.

Superbee

$$\phi(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2)) \quad (3.12)$$

Dieser ist der am wenigsten dissipative Limiter (Roe 1986), welcher noch die TVD-Eigenschaft erfüllt. Er zeichnet sich insbesondere dadurch aus, dass er Stoßfronten hervorragend auflöst, hat jedoch Probleme bei flachen Gradienten, da er hier dazu neigt diese steiler darzustellen als sie tatsächlich sind (Hirsch 2007; Toro 2013). Dieser Effekt der Übersteilung (engl. oversteepening) kann weitreichende Folgen für Simulationen haben und zu großen Fehlern führen, was in Kapitel 4 demonstriert wird.

Vanleer

$$\phi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} \quad (3.13)$$

Dieser Limiter von Van Leer (1974) ist ein häufig gewählter Mittelweg zwischen den zuvor besprochenen Superbee- und Minmod-Limitern. Er zeigt einerseits gute Eigenschaften was die Auflösung von Stoßfronten angeht und andererseits führt er in Bezug auf Superbee zu vergleichbar kleineren Fehlern in flachen Regionen. Zudem behält er verhältnismäßig gute Konvergenzeigenschaften. Wichtig ist auch, dass im Gegensatz zu den beiden Vorgängern keine Unstetigkeiten in den Ableitungen des Limiters vorkommen. In Hirsch (2007) wird darauf eingegangen, dass dies ebenfalls ein besseres Konvergenzverhalten für zunehmende Auflösungen erwarten lässt.

Wird kein FVM verwendet kann es sein, dass andere Methoden als Limiter zum Einsatz kommen. Hier kommen künstliche Viskositäten in Frage, welche in SPH-Verfahren (engl. smooth particle hydrodynamics) und Finite-Differenzen-Verfahren (FDM) Verwendung finden. Die Helfer dienen dabei dem gleichen Zweck und sind ebenfalls heuristischer Natur, werden jedoch anders implementiert.

3.1.4. Randbedingungen

Gitterbasierte numerische Simulationen sind auf ein vorgegebenes Rechengebiet beschränkt, bei denen zusätzliche Informationen an den äußeren Rändern nötig sind, um die dortige Verhaltensweise festzuschreiben. Idealerweise bleiben die Ergebnisse innerhalb des Rechengebietes dadurch weitestgehend unbeeinflusst. Fosite enthält neben bekannten Randbedingungen wie verschwindenden Gradienten (NOGRADIENTS), reflektierenden (REFLECTING) oder periodischen Rändern (PERIODIC) auch viele auf Akkretions-scheiben zugeschnittene spezialisierte Randbedingungen.

Für diese Arbeit sind insbesondere die Randbedingung im Shearingsheet (SHEARING) erwähnenswert, welche sich mit der differentiellen Rotation mitbewegen (Klee 2016;

Hawley u. a. 1995), sowie die OUTFLOW Randbedingung, welche in globalen Simulationen aktiv verhindert, dass Masse über die Ränder in das Rechenggebiet gezogen wird. Dies tritt bei selbstgravitierenden Scheiben auf, wenn sonst offene Ränder wie z.B. verschwindende Gradienten verwendet werden. Für einen detaillierteren Einblick zum Thema Randbedingungen in Fosite wird auf Illenseer (2006), Jung (2016) und Sperling (2013) verwiesen.

3.1.5. Zeitschrittverfahren

Fosite kommt bereits mit vielen expliziten Zeitschrittverfahren und automatischer Schrittweitensteuerung, welche großteils den Runge-Kutta-Verfahren zugeordnet werden können (Kutta 1901; Runge 1895). Diese Einschrittverfahren berechnen die Lösung des nächsten Schrittes eines Anfangswertproblems (vgl. Gl. 2.24) nach

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \sum_{l=1}^p b_l k_l, \quad (3.14)$$

wobei Δt die Schrittweite, k_l die mehrfache Auswertungen der rechten Seite $f(t, y(t))$ (vgl. Gl. 2.24) an unterschiedlichen Stützstellen und b_l die dazugehörige Gewichtung sind (Hairer u. a. 1993). k_l hängt dabei von weiteren Koeffizienten ab und p ist die Ordnung des Verfahrens. Durch die Parameter wird das konkrete Runge-Kutta-Verfahren definiert. Fosite bietet dabei die Möglichkeit dieses über ein sogenanntes Butcher-tableau in generischer Form hinzuzufügen (Butcher 1964). In dieser Arbeit werden vor allem die SSPRK-Methode (Gottlieb u. a. 2011; Jung 2016) sowie die Methode von Dormand-Prince verwendet (Dormand und Prince 1978).

Die Verfahren sind gut geeignet, um das hyperbolische Gleichungssystem 3.1 zeitlich zu integrieren, sie eignen sich jedoch nicht zum Lösen steifer Differentialgleichungssysteme, wie es bei chemischen Ratengleichungen (vgl. Gl. 2.22) der Fall ist. Daher wird ein gemeinsames Lösen in einem Gleichungssystem in der Regel nicht in Betracht gezogen, sondern ein getrenntes Lösen in zwei Schritten.

3.1.6. Transport passiver Variablen

Um in den hydrodynamischen Simulationen einerseits die Advektion der passiven Variablen und zugleich die Entwicklung in Form von Übergängen in chemischen Ratengleichungen zu betrachten, wird Operator-Teilung gemäß

$$\tilde{\mathbf{X}}_{k+1} = \mathcal{R}(\mathbf{X}_k) \quad (3.15)$$

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathcal{A}(\tilde{\mathbf{X}}_{k+1}) \quad (3.16)$$

verwendet. Dabei ist \mathcal{R} der Operator für die zeitliche Entwicklung der Ratengleichungen 2.22 und \mathcal{A} der Operator für die Advektion nach Gl. 2.13. Bei letzterem kommen die Zeitschrittverfahren des vorangegangenen Abschnittes 3.1.5 zum Einsatz, für \mathcal{R} wird ein neuer zell-vektorisierter Löser für steife ODE bereitgestellt, welcher in Abschnitt 3.2 beschrieben wird.

Die Advektion kann durch einfache Erweiterung des Zustandsvektors \mathbf{u} mit Dichte ϱ , Geschwindigkeiten \mathbf{v} und Energie ϵ , um N Einträge X_1, \dots, X_N erreicht werden, wobei auf die bereits vorhandene Numerik zurückgegriffen wird, die Flüsse also mit den gleichen Verfahren berechnet werden wie in (Illenseer und Duschl 2009; Kurganov und Tadmor 2000). Der Zustandsvektor aus Gl. 3.1 hat dann die Form

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \Sigma \\ \Sigma v_\xi \\ \Sigma v_\eta \\ \epsilon \\ \Sigma X_1 \\ \Sigma X_2 \\ \dots \\ \Sigma X_N \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Für den advektiven Teil \mathcal{A} erhält Fosite die konservativen Variablen des Verfahrens, und so auch die chemischen Anteildichten $X_i \Sigma$, jeweils auf dem gesamten Rechengebiet. Soll zusätzlich Gl. 2.14 erfüllt sein, ist eine Erweiterung des Verfahrens nötig, denn Gl. 2.14 verlangt, dass sich die Summe aller Spezies in jeder Zelle zur Gesamtdichte Σ aufaddiert, was nicht durch das Verfahren garantiert wird.

Die konsistente multi-fluid Advektionmethode (CMA) aus Plewa und Müller (1999) erfüllt ebendiese zusätzliche Anforderung. Dazu wird die Bedingung

$$\sum_i^N \varrho u X_i = \varrho u. \quad (3.18)$$

an die Flüsse auf den Rändern gestellt. Letztendlich führt dies zu einem einfachen Ausdruck, welcher die passiven Variablen nach

$$X_i = \zeta \tilde{X}_i, \quad (3.19)$$

modifiziert, wobei

$$\zeta = \left(\sum_i^N \tilde{X}_i \right)^{-1} \quad (3.20)$$

gelten muss.

Im Falle von starken Stößen im Gas kann dies zu Problemen führen, denn die Anpassung kann die Monotonie und somit die Stabilität des Löser beeinträchtigen. An den Stoßfronten überschießen die passiven Variablen in den am häufigst vorkommenden Spezies, was wiederum zu einer Unterschätzung selten vorkommender Spezies führt, da Gl. 2.14 erfüllt wird (Plewa und Müller 1999). Das Problem kann durch eine zusätzliche Limitierung der passiven Variablen verringert, jedoch nicht vollständig vermieden werden (Plewa und Müller 1999). In Fosite wird auf die Lösung von Ziegler (2016) zurückgegriffen, welcher die räumlichen Steigungen in den einzelnen Spezies Δ_i (vgl. Gl. 3.9) zu

$$\tilde{\Delta}_i = \eta \Delta_i \quad (3.21)$$

abwandelt. Dabei ist

$$\eta = 1 - \max \left(0, \min \left(1, \frac{(\Delta_\Sigma - \Delta_\varrho) |\operatorname{sgn} \Delta_i + \operatorname{sgn} \Delta_\Sigma|}{\sum \Delta_i |\operatorname{sgn} \Delta_i + \operatorname{sgn} \Delta_\Sigma|} \right) \right), \quad (3.22)$$

mit $\Delta_\Sigma = \sum \Delta_i$ und Δ_ϱ die entsprechende Steigung der Gesamtdichte.

Es gibt zwei weitere Stellen, welche zu einer Verletzung von Gl. 2.14 trotz des an und für sich erhaltenen Verfahrens führen. Zum einen werden im ODE-Löser (Abschnitt 3.2), welcher in jedem Zeitschritt in jeder Zelle die chemische Ratengleichungen 2.22 löst, Fehler in der Größenordnung der eingestellten Toleranzen erzeugt (vgl. 3.2). Zum anderen wird ebenfalls ein Fehler durch einen zusätzlichen Advektionsschritt durch das in Fosite implementierte Fargoverfahren (Masset 2000) erzeugt. Das Verfahren wird in nahezu allen Simulationen verwendet, da es wesentlich größere Zeitschritte und somit geringere Rechenzeiten erlaubt (vgl. Jung 2016). Beide Fehlerquellen werden dadurch korrigiert, dass jeweils nach deren Auftreten eine Reskalierung mit einem konstanten Faktor nahe eins stattfindet, welcher die Einzeldichten der Spezies wieder korrekt zur Gesamtdichte aufsummiert.

3.2. Vektorisiertes Lösen chemischer Ratengleichungen

Um die Ratengleichungen 2.22, welche die chemische Entwicklung innerhalb einer Zelle beschreiben effizient zu lösen, muss zunächst erkannt werden, um welchen Typ Gleichungen es sich handelt und wie diese in Bezug zu Vektorarchitekturen stehen. Die Schwierigkeit des linearen Differentialgleichungssystems erster Ordnung liegt in dessen Steifheit, welche durch die Ratenkoeffizienten k_j in Abschnitt 2.3.3 zustande kommt. Die Koeffizienten können dabei über viele Größenordnungen unterschiedlich sein. Hinzu kommt, dass nicht alle Übergänge zwischen zwei Spezies möglich sind. Dies wird sich später in Form einer dünnbesetzten Matrix niederschlagen, mit zum großen Teil verschwindenden Einträgen, die innerhalb des Verfahrens invertiert werden muss.

Mit den NEC-Vektorsystemen wurde die verwendete Architektur in Abschnitt 3.1 eingeführt. Diese kann einen hohen Durchsatz erzielen, sofern gleiche Operationsvorschriften auf große Datensätze, also möglichst viele Zellen zugleich, angewandt werden können. Ein Großteil dieses Kapitels ist der Tatsache geschuldet, dass chemische Ratengleichungen in Chemiepaketen wie KROME (Grassi u. a. 2014) Zelle für Zelle hochoptimiert gelöst werden, also immer ungleiche Operationsvorschriften in jeder Zelle angewandt werden. Diese Vorgehensweise ist auf SISD Architekturen performant, auf SIMD Architekturen führt es jedoch zu einem Leistungsverlust, der die Berechnung von sinnvollen physikalischen Problem nicht mehr möglich macht. Ziel ist es daher ein Lösungsverfahren zu entwickeln, welches die Vorteile von SIMD Architekturen ausnutzt. Im Folgenden werden die grundlegenden Anforderungen an einen vektorisierten Löser, welcher chemische Ratengleichungen effizient auf SIMD-Architekturen lösen kann, beschrieben.

3.2.1. OdeVec

Auf Grund der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Ausgangslage wurde ein neuer ODE-Löser geschrieben, welcher darauf ausgelegt sein soll eine möglichst hohe Performanz durch Durchsatz bei weniger kleinteiliger Optimierung zu erreichen. Innerhalb dieser Arbeit wird er verwendet, um den Kern des Chemiepaketes KROME (Grassi u. a. 2014) zu ersetzen. Dieser besteht bisher aus dem seriellen Löser DLSODES des ODEPACKs (Radhakrishnan und Hindmarsh 1993; Hindmarsh 1983).

Die zu lösende Gleichung ist das Anfangswertproblem

$$\frac{d\mathbf{n}_i}{dt} = f(t, \mathbf{n}_i(t)), \quad \mathbf{n}_i(0) = \mathbf{n}_{i,0} \quad (3.23)$$

wie es auch in Gl. 2.24 zu sehen ist, wobei ein zusätzlicher Index i eingeführt wurde. Dieser spiegelt dabei die Indizierung über die Zellen wider, über welche vektorisiert werden soll.

Ohne zunächst Details des numerischen Verfahrens zu besprechen, lässt sich der rechenintensive Teil schlussendlich auf ein zu lösendes lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{P}_i \mathbf{x}_i = \mathbf{y}_i \quad (3.24)$$

zurückführen, bei dem viele quadratische Matrizen \mathbf{P}_i mit ähnlicher Struktur invertiert werden müssen.

Um sowohl dem physikalischen Problem als auch der verwendeten Architektur Rechnung zu tragen, sollen folgende Punkte bei dem neuen Löser beachtet werden:

Steifheit Die Zeitskalen zwischen denen sich die chemischen Spezies ineinander umwandeln, können um viele Größenordnungen voneinander abweichen. Dies schlägt sich in Gl. 2.22 innerhalb der Koeffizienten k nieder. Das Lösen steifer Differentialgleichungen führt zu besonderen numerischen Problemen und schließt viele klassische Verfahren aus.

⇒ Die Einträge der Matrizen \mathbf{P}_i können um viele Größenordnungen auseinanderliegen.

Dünnbesetzte, klein- bis mittelgroße Matrizen Nicht alle Spezies haben Übergänge untereinander. Dies führt zu einer Jakobimatrix innerhalb des Verfahrens, welche viele Nulleinträge haben kann. Trotz dessen sind die betrachteten Matrizen in der Regel nicht allzu groß. Dies liegt daran, dass die chemische Entwicklung auf Grund der Operatorteilung in jeder Zelle unabhängig betrachtet wird. Dafür muss die Berechnung in vielen Zellen durchgeführt werden.

⇒ Die Matrix \mathbf{P}_i hat unter Umständen viele Nulleinträge und kann mit einer Größe $\lesssim 100^2$ angenommen werden.

Vektorisierung Der Löser soll möglichst gut vektorisieren können. Da die einzelnen Zellen durch passive Variablen beschrieben werden (Abschnitt 3.1.6), können diese unabhängig voneinander gelöst werden. Möchte man über die Zellen vektorisieren

führt dies jedoch zu dem Problem, dass Optimierungen in einzelnen Zellen nicht mehr möglich sind. Stattdessen können nur noch Eigenschaften, welche alle Zellen und damit jede Matrix \mathbf{P}_i gleichermaßen betreffen ausgenutzt werden.

⇒ Es gibt viele Matrizen \mathbf{P}_i , welche an gleicher Stelle unterschiedliche Einträge haben können.

Flexibilität & Optimierung Einerseits soll es leicht sein, verschiedene Netzwerke mit relativ geringem Aufwand austauschen zu können, andererseits sollen dem Netzwerk zugrunde liegende Eigenschaften so früh wie möglich, am besten schon vor Kompilierzeit, optimiert werden.

⇒ Die Matrizen \mathbf{P}_i haben über alle Zellen i gemeinsame Eigenschaften, welche schon vor Kompilierzeit bekannt sind.

Mit Jacobson und Turco (1994) gibt es bereits einen Löser der die ersten drei dieser Vorgaben erfüllt. Der dort beschriebene Löser wurde jedoch zur Berechnung chemischer Raten in Erdatmosphärenmodellen geschrieben. Er ist nicht unter einer freien Lizenz verfügbar und die Programmierparadigmen machen einen Austausch der zugrundeliegenden Netzwerke schwierig. Hinzu kommt, dass zur damaligen Zeit Tools, welche eine Voruntersuchung der Netzwerke bereits vor Kompilierzeit ermöglichen nicht oder nur sehr begrenzt existierten. Dies ist insbesondere bei Architekturen wie Vektorrechnern interessant, welche durch kleinteilige Optimierungen zur Laufzeit ausgebremst werden. Ein Teil dieses Verlustes kann dann durch vorherige Optimierung verbessert werden.

Im Folgenden werden die oben genannten Punkte diskutiert und fließen in die Wahl des neuen Löses ein. So wird ein BDF-Verfahren zum Einsatz kommen, um der Steifheit der Gleichungen genüge zu tragen, es wird das CSC-Format (engl. compressed sparse column) erläutert, welches dünnbesetzte Matrizen effizienter abspeichern kann und die Vektorisierung wird über die Erweiterung der verwendeten Verfahren um einen weiteren Zellindex i realisiert. Die Flexibilität und Optimierung vor Kompilierzeit wird durch das Chemie-Paket KROME und einen zum neuen Löser vorgeschalteten Python-Präprozessor gewährleistet, welcher in der Lage ist ein definiertes Gleichungssystem zu untersuchen, symbolisch die Jakobimatrix zu berechnen, verschiedene Optimierungen vorzunehmen und das Resultat in Fortran-Syntax abzulegen. Anschließend kann dieses für weitere Berechnung in Fosite mit eingebunden und kompiliert werden.

BDF Verfahren

Steife ODEs führen bei vielen und insbesondere expliziten Lösern zu sehr kleinen Zeitschritten. Alle bisher in Fosite vorhanden Verfahren sind expliziter Natur, wobei Einschritt- und das Adams-Bashfort-Mehrschrittverfahren eingebaut wurden. Diese sind nicht geeignet zur Lösung steifer ODEs. Um ein geeignetes Verfahren finden zu können ist eine wichtige Eigenschaft, welche für steife Systeme erfüllt sein muss sogenannte A -Stabilität (Dahlquist 1963; Hairer und Wanner 1996). Diese stellt sicher, dass bei beliebiger rechter Gleichungsseite (RHS) ein stabiles Verfahren vorliegt. Eine abgeschwächte Version, genannt $A(\alpha)$ -Stabilität hat ähnliche Eigenschaften, wenn das Problem geeignet geartet

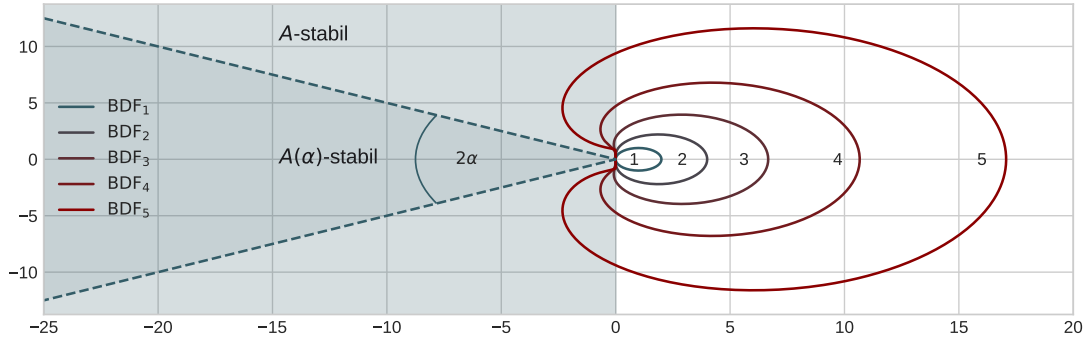


Abbildung 3.5.: *Stabilitätsregion der BDF Methode. Die Bereiche außerhalb der ringförmigen Strukturen sind stabil. Die hinterlegten Bereiche verdeutlichen die für steife Differentialgleichungen wichtige A-Stabilität, bzw. die abgeschwächte Definition der $A(\alpha)$ -Stabilität.*

ist. Für gewisse Probleme kann es auch hilfreich sein, ein Verfahren zu wählen, welches zur A-Stabilität zusätzlich L-Stabilität gewährleistet. Diese dämpft real existierende Oszillationen von hoher Frequenz durch die Numerik (Hairer und Wanner 1996).

Vollständige A-Stabilität ist in Mehrschrittverfahren nur für Verfahren niedriger Ordnung möglich. Ziel bei Verfahren höherer Ordnung, welche schneller konvergieren, ist also einen möglichst hohen Stabilitätsbereich zu erreichen, welcher dem der A-Stabilität ähnelt. Ein bekanntes Verfahren, welches diese Auflagen erfüllt, ist das BDF-Verfahren (Curtiss und Hirschfelder 1952), auch als Gear-Verfahren bekannt (Gear 1971). Das BDF-Verfahren ist ein Mehrschrittverfahren, welches sich dadurch auszeichnet, dass die gewöhnliche Differentialgleichung 2.24 auf der linken Seite durch ein Polynom interpoliert wird. Dies ergibt nach Umstellen

$$\mathbf{n}_{i,m} = \sum_{j=1}^q \alpha_j \mathbf{n}_{i,m-j} + \Delta t_m \beta \mathbf{f}_{i,m}, \quad (3.25)$$

wobei Δt_m der Zeitschritt und α_j sowie β die Interpolationskoeffizienten darstellen, welche bei gegebener Ordnung q vollständig bekannt sind. Das Verfahren ist impliziter Natur, da die Lösung $\mathbf{n}_{i,m}$ vom gleichen Zeitschritt der RHS $\mathbf{f}_{i,m}$ abhängt. i ist der Index über den später vektorisiert wird. Die dazugehörigen Stabilitätsregionen sind zusammen mit dem A-stabilen Bereich in Abb. 3.5 dargestellt. Es kann gezeigt werden, dass die maximal noch stabile Ordnung $q = 6$ beträgt (Gear 1971).

Da es schon viel Erfahrung mit BDF-Lösern, besonders zur Verwendung mit chemischen Ratengleichungen gibt, ist diese Wahl grundsätzlich erfolgversprechend. Es wird daher auf das Verfahren in LSODE (Hindmarsh 1983) zurückgegriffen, wobei die vollständig neue Implementierung auf aktuellere Programmierparadigmen setzt⁵ und auf für chemische Netzwerke weniger wichtige Teile verzichtet. Das Verfahren, welches in Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) detailliert erläutert wird, erlaubt die Verwendung eines variablen

⁵LSODE wurde im Fortran77 Standard verfasst.

Zeitschritts und einer variablen Ordnung. Im Folgenden werden die wichtigsten Punkte für das Verständnis dieses Verfahrens beschrieben und Unterschiede zu LSODE erläutert. Neu hinzu kommt, dass alle Methoden über eine unabhängige Dimension mit dem Index i erweitert werden, was eine spätere Vektorisierung über Zellen der Anzahl n_{vec} ermöglicht und dazu führt, dass die Bestimmung des Zeitschritts modifiziert werden muss (vgl. Jacobson und Turco 1994). Dies wird in Gl. 3.25 auch durch den Index i deutlich, welcher bei Δt_m fehlt. Weitere Unterschiede, welche vor allem die zu invertierende Matrix \mathbf{P}_i betreffen, werden an gegebener Stelle erläutert.

Prädiktor-Korrektor-Verfahren

Da Gl. 3.25 impliziter Natur ist, kann die Lösung nicht direkt ausgerechnet werden. Stattdessen wird ein iteratives Verfahren verwendet. In Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) wird das folgende Prädiktor-Korrektor Verfahren beschrieben und hergeleitet, welches im Prädiktor zunächst eine explizite Näherung bestimmt und darauf folgend im Korrektor zum richtigen Wert hin optimiert. Der Korrektor wird dabei so häufig angewandt, bis die Lösung konvergiert ist oder erkannt wird, dass keine Konvergenz möglich ist. In diesem Fall wird das Verfahren erneut mit kleinerem Zeitschritt gestartet. Konkret besteht der Prädiktor-Schritt aus

$$\mathbf{N}_{i,m}^{[0]} = \mathbf{N}_{i,m-1} \mathbf{A} \quad (3.26a)$$

$$\mathbf{d}_{i,m}^{[0]} = 0, \quad (3.26b)$$

wobei \mathbf{N} die Geschichtsmatrix in der Nordsieck-Darstellung (Nordsieck 1962; Gear 1971)

$$\mathbf{N}_{i,m-1} = \left(\mathbf{n}_{i,m-1}, \Delta t_m \frac{d\mathbf{n}_{i,m-1}}{dt}, \frac{\Delta t_m^2}{2!} \frac{d^2\mathbf{n}_{i,m-1}}{dt^2}, \dots, \frac{\Delta t_m^q}{q!} \frac{d^q\mathbf{n}_{i,m-1}}{dt^q} \right). \quad (3.27)$$

ist. Hier werden die Schritte der Vergangenheit bis zur Ordnung q des Mehrschrittverfahrens abgespeichert. \mathbf{A} ist die untere Pascal Matrix (Gear 1971; Radhakrishnan und Hindmarsh 1993). Zudem ist \mathbf{d} der Korrekturvektor, mit dem die vorherige Lösung iterativ verbessert wird und im Prädiktor auf 0 gesetzt wird. Der auffälligste Unterschied zum gängigen abspeichern der Historie in Mehrschrittverfahren liegt in der Nordsieck Darstellung, welche nicht die vergangenen Zeitschritte, sondern die Ableitungen bis zur Ordnung q abspeichert. Dies führt dazu, dass die Geschichtsmatrix einfacher bei einer Änderung des Zeitschrittes aktualisiert werden kann.

Darauf folgend wird der Korrektor-Schritt

$$\mathbf{g}(\mathbf{n}_{i,m}^{[l]}) = \Delta t_m \mathbf{f}(\mathbf{n}_{i,m}^{[l]}) - \Delta t_m \dot{\mathbf{n}}_{i,m}^{[0]} - \mathbf{d}_{i,m}^{[l]} \quad (3.28a)$$

$$\mathbf{d}_{i,m}^{[l+1]} = \mathbf{d}_{i,m}^{[l]} + \mathbf{P}_i^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{n}_{i,m}^{[l]}) \quad (3.28b)$$

$$\mathbf{n}_{i,m}^{[l+1]} = \mathbf{n}_{i,m}^{[0]} + \beta \mathbf{d}_{i,m}^{[l+1]} \quad (3.28c)$$

potentiell mehrfach durchgeführt, wobei l der Iterationsindex ist. \mathbf{g} ist das Residuum, also der von null abweichende numerische Fehler, wenn in Gl. 3.25 alle Terme auf eine

Seite gebracht werden. Dieses sollte bei Konvergenz gegen null streben. Im Korrektor wird somit ein Nullstellenverfahren verwendet, wobei die Matrix

$$\mathbf{P}_i = \mathbb{1} - \Delta t_m \beta_0 \mathbf{J}_i \quad (3.29)$$

über die Wahl des Nullstellenverfahrens bestimmt ist. In OdeVec wird das ebenfalls in Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) beschriebene und bekannte Newton-Raphson-Verfahren verwendet, wobei $J_{kl} = \frac{\partial f_k}{\partial n_l}$ die Jakobimatrix ist. Die Berechnung und Invertierung von \mathbf{P} ist besonders rechenaufwendig und vom betrachteten Problem abhängig. Diese ist in Gl. 3.28b zu beobachten und entspricht der zu Beginn von Abschnitt 3.2.1 beschriebenen und zu lösende Gleichung, welche für den Einstieg in die Problemstellung verwendet wurde. In Bezug auf die Berechnung chemischer Ratengleichungen stehen dort die Übergänge zwischen den Spezies, welche häufig zu einer dünnbesetzten Matrix führen, da nur Übergänge zwischen bestimmten Spezies möglich sind. Insbesondere unter Hinzunahme der Vektorisierung benötigt dies einer besonderen Behandlung. An dieser Stelle wurde nur für den Fall der numerischen Berechnung der Jakobimatrix auf die Verfahren aus Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) zurückgegriffen. Die analytische Bestimmung und Implementierung des Problems weicht hier deutlich ab und wird in Abschnitt 3.2.1 besprochen.

Tabelle 3.2.: Die Koeffizienten für das Prädiktor-Korrektor-Verfahren mit Nordsieck Geschichtsmatrix in Gl. 3.28.

Ordnung	$\zeta_0 = \beta$	ζ_1	ζ_2	ζ_3	ζ_4	ζ_5	ζ_6
1	1	1					
2	2/3	1	1/3				
3	6/11	1	6/11	1/11			
4	12/25	1	7/10	1/5	1/50		
5	60/137	1	225/274	85/274	15/274	1/274	
6	60/147	1	1624/1764	735/1764	175/1764	21/1764	1/1764

Ist der Korrektor konvergiert und hat die Lösung einen ausreichend kleinen Fehler beim letzten Iterationsschritt $l = L$, wird das Ergebnis über die Nordsieck-Matrix mit

$$\mathbf{d}_{i,m} = \mathbf{d}_{i,m}^{[L]} \quad (3.30a)$$

$$\mathbf{N}_{i,m} = \mathbf{N}_{i,m}^{[0]} + \mathbf{d}_{i,m} \boldsymbol{\zeta}(\alpha, \beta). \quad (3.30b)$$

aktualisiert. Die Koeffizienten $\boldsymbol{\zeta}(\alpha, \beta)$ hängen von den ursprünglich in Gl. 3.25 eingeführten Variablen α und β ab und sind in Tab. 3.2 zusammengefasst, sowie auch in (Radhakrishnan und Hindmarsh 1993) zu finden. Für die detaillierten Regeln, nach denen Konvergenz, Fehler und Zeitschritt bestimmt und damit ein Erfolg des Verfahrens definiert wird, soll ebenfalls auf Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) verwiesen werden. Die zur Berechnung dieser Größen wichtige Fehlernorm wird auf Grund der Vektorisierung abgewandelt und im kommenden Abschnitt erläutert.

Fehlernorm und Zeitschritt

Ein wesentlicher Unterschied, welcher durch die Vektorisierung im Vergleich zu dem Verfahren in Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) auftritt ist die Veränderung des Zeitschrittes. Damit Stabilität gewährleistet werden kann, muss der kleinste aller Zeitschritte entlang der Vektorlänge verwendet werden. Damit dies immer der Fall ist wird die gewichtete Fehlernorm aus Radhakrishnan und Hindmarsh (1993) entlang eines Vektors maximiert. Dies ergibt

$$\|\mathbf{e}_m\| = \max_{1 \leq i \leq n_{\text{vec}}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left(\frac{d_{i,j,m}^2}{r_{\text{tol}} |n_{i,j,m-1}| + a_{\text{tol}}} \right)^2}, \quad (3.31)$$

wobei r_{tol} die relative Fehlertoleranz, a_{tol} die absolute Fehlertoleranz und \mathbf{e}_m ein Fehlervektor zum Zeitpunkt t_m ist. N ist die Anzahl an Gleichungen und kann mit der Menge an chemischen Spezies, plus eventuellen zusätzlichen Größen wie der Temperatur, welche ebenfalls im System gelöst wird, identifiziert werden. Die Maximierung führt zwangsläufig zu einem kleineren Zeitschritt als im ursprünglichen Verfahren, sofern $n_{\text{vec}} > 1$. Dies verringert die Geschwindigkeit des Löser und muss durch den Architekturvorteil aufgefangen werden. Außerdem kann man daraus schließen, dass die Vektorlänge nach dem Prinzip so kurz wie möglich, so lang wie nötig gewählt werden sollte. Es bietet sich daher an die Vektorlänge immer mit der Rechner-Architektur abzustimmen und nicht beliebig lang zu wählen. Bei der SX-Aurora würde dies einer Länge von 256 doubles entsprechen, auf aktuellen Intel-Architekturen einem Wert von 8. So erreicht man eine möglichst hohen Zeitschritt bei gleichzeitig hohem Vektorisierungsgrad.

Berechnung der Inversionsmatrix

Es wurde darauf eingegangen, dass die Berechnung von \mathbf{P}^{-1} aus Gl. 3.28b in Abschnitt 3.2.1 besonders rechenaufwendig ist. Daher versprechen Optimierungen, welche an dieser Stelle gemacht werden können, besonders vorteilhaft für die Rechenzeit zu sein. Gleichzeitig ist ein wichtiger Erfahrungswert für das BDF-Verfahren, dass \mathbf{P}^{-1} erfahrungsgemäß nicht überaus exakt sein muss, damit es gut konvergiert. Das bedeutet, dass eine in unregelmäßigen Abständen verwendete Aktualisierung der Matrix ausreicht, um das BDF-Verfahren erfolgreich konvergieren zu lassen.

Anstatt einer direkten Inversion wird eine klassische LU-Zerlegung durchgeführt, welche sich zunutze macht, dass sich Gl. 3.24, bzw. der rechte Term in Gl. 3.28b durch

$$\mathbf{P}_i \mathbf{x}_i = \mathbf{L}_i \mathbf{U}_i \mathbf{x}_i = \mathbf{y}_i, \quad (3.32)$$

darstellen lässt (Press u. a. 2007), wobei \mathbf{L}_i und \mathbf{U}_i untere und obere Dreiecksmatrix sind. Liegt die Lösung in der Form $\mathbf{L}_i \mathbf{U}_i$ erst einmal vor, kann \mathbf{x}_i durch das Produkt der oberen und unteren Dreiecksmatrix durch einfache Rechenoperationen berechnet werden. Auffällig an Gl. 3.32 ist, dass keine zusätzliche Pivotisierungsmatrix auf der linken Seite dargestellt wird. Diese ist im Allgemeinen vonnöten um numerische Probleme zu vermeiden, wird jedoch hier nicht beachtet, da diese Pivotisierung immer entlang einer

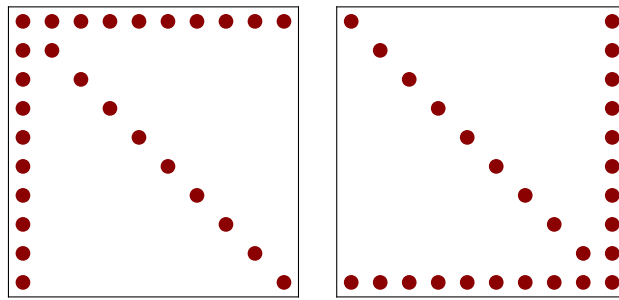


Abbildung 3.6.: *Beispielhafte Darstellung zweier dünnbesetzter Matrizen (jeder rote Punkt entspricht einem von null abweichenden Eintrag), welche unterschiedliche Füllfaktoren nach LU-Zerlegung aufweisen. Die linke Matrix führt zu einer vollständig besetzten LU-Matrix, die rechte führt zu keinen zusätzlichen fill-ins.*

kompletten Vektorlänge vorgenommen werden müsste. Die Probleme treten vor allem auf, wenn Werte auf der Hauptdiagonalen der zu invertierenden Matrix sehr klein werden, was unter Betrachtung von Gl. 3.29 bei nicht zu großen Zeitschritten selten der Fall ist. Grundsätzlich sollte auch daran erinnert werden, dass numerische Probleme an dieser Stelle letztendlich dazu führen würden, dass der Korrektor in Gl. 3.28 seine Berechnung abbrechen und mit verändertem Zeitschritt zum Prädiktor in Gl. 3.26 zurückspringen würde. Dadurch würde sich \mathbf{P}_i ändern bis Konvergenz eintritt, das Problem würde also nicht zu falschen Ergebnissen, sondern zu einer Verlangsamung führen. In der Praxis scheint diese Möglichkeit jedoch zumindest in Bezug auf chemische Ratengleichungen selten einzutreten und wenig relevant zu sein, was auch in Jacobson und Turco (1994) erwähnt wird.

Dünnbesetzte Matrizen

Dadurch dass viele Übergänge in den Ratengleichungen 2.22 nicht erlaubt sind, können sich in der Matrix \mathbf{P}_i und der zugrundeliegenden Jakobimatrix viele Nullen befinden. Im Zuge der LU-Zerlegung und der darauf folgenden Lösung mit unterer und oberer Dreiecksgleichung sollte diese Eigenschaft ausgenutzt werden und unnötige Rechenoperationen vermieden sowie die Nullen erst gar nicht mit abgespeichert werden. Problematisch ist, dass die \mathbf{L}_i und \mathbf{U}_i Matrix in der Regel nicht die gleiche Dünnbesetztheit aufweisen wie die ursprüngliche Matrix \mathbf{P}_i . Als typisches Beispiel sind hier die in Abb. 3.6 gezeigten Eingangsmatrizen dargestellt. Während die linke der beiden Matrizen zu vollständig dichten Lösungsmatrizen \mathbf{L}_i und \mathbf{U}_i führen, erhält die rechte Darstellung ihre Dünnbesetztheit vollständig (Duff 2017). Das bedeutet auch, dass im Fall von Abb. 3.6 die Dünnbesetztheit einfach hergestellt werden kann, indem der erste Eintrag auf der Hauptdiagonalen mit dem letzten permutiert wird. Zwischen diesen beiden Extrembeispielen gibt es viele Abstufungen, welche zu unterschiedlich vielen zusätzlichen Einträgen nach LU-Dekomposition, auch genannt fill-ins, führen können.

Um einen Vorteil aus der Dünnbesetztheit zu ziehen, müssen also zwei Dinge erreicht werden.

1. Es muss ein Speicherformat gefunden werden, welches Nullen nicht verschwenderisch mit abspeichert und die LU-Zerlegung sowie die Dreiecksberechnungen performant löst.
2. Die Eingangsmatrix \mathbf{P}_i muss in eine geeignete Form gebracht werden, um fill-ins möglichst zu vermeiden.

Compressed Sparse Column Format

Für beide Punkte gibt es eine große Menge an möglichen Lösungen, dessen Vor- und Nachteile je nach Problem, verwendetem Algorithmus und Architektur stark variieren können. Ein wichtiger architekturbedingter Punkt ist, dass versucht wird, Packungsformate zu finden, bei denen die zu verwendenden Einträge linear im Speicher liegen, da die Zugriffsgeschwindigkeit auf die Zwischenspeicher schnell zum Flaschenhals in den Berechnungen werden kann (Duff 2017). Dadurch, dass in der hiesigen Implementierung in der ersten Dimension über die Zellen vektorisiert werden kann, verliert dieser Punkt jedoch etwas an Bedeutung. Daher wird auf eines der gängigsten Formate, das CSC-Format, zurückgegriffen. In diesem Fall werden die Daten spaltenweise abgespeichert und für die Positionierung der Einträge zwei zusätzliche Arrays bereitgehalten. Eines gibt an wie viele Einträge in der jeweiligen Spalte existieren, bevor die nächste Spalte anfängt (Spaltenstart), ein anderes spezifiziert die Zeile in der aktuellen Spalte für den Eintrag (Zeilenzeiger). In Abb. 3.7 ist dies anschaulich dargestellt. Dort ist zudem noch ein weiteres Ganzzahlarray hinzugefügt, welches die Position der Diagonalen in der Matrix definiert. Dies gehört nicht zwangsläufig zum CSC-Format ist aber hilfreich, um in einer gemeinsamen LU-Matrix die Einträge unterscheiden zu können, was in OdeVec Verwendung findet.

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 7 \\ 0 & 4 & 0 & 9 \\ 7 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}$	Index	1	2	3	4	5	6	7	8
	Datenarray	1	7	4	3	1	7	9	6
	Spaltenstart	1	3	5	6	9			
	Diagonalstart	1	3	5	8				
	Zeilenzeiger	1	3	2	3	3	1	2	4

Abbildung 3.7.: Links: *Matrix in herkömmlicher Darstellung.* Rechts: *Darstellung in CSC-Format.* Die Zeile *Diagonalstart* ist nicht unbedingt erforderlich, wird hier aber verwendet um \mathbf{L} und \mathbf{U} in einer gemeinsamen Matrix \mathbf{LU} darstellen zu können.

Ebenfalls interessant zu sehen an dem Beispiel in Abb. 3.7 ist, dass ein komprimiertes Format nicht immer weniger Speicher verbraucht. In dem Beispiel sind $4^2 = 16$ Einträge für die unkomprimierte Matrix nötig, während es für das reine CSC-Format $8 * 2 + 5 = 21$ sind. Vergleicht man hingegen zwei getrennte Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{U} mit dann 32 (und mehr Nullen) erhält man für die erweiterte CSC-Darstellung 25 Einträge. Es verdeutlicht, dass ein solches Format bei dichten Matrizen auch zu Nachteilen führen kann.

Vermeidung von Fill-Ins bei LU-Zerlegung

Wie in Abschnitt 3.2.1 erwähnt führt eine dünnbesetzte Matrix in Gl. 3.24 nicht automatisch auch zu einer dünnbesetzten LU-Matrix. Um dies zu erreichen, müssen die Einträge von \mathbf{P}_i entsprechend umsortiert werden. Die Pivotisierungsstrategien sind hier vielfältig. Eine Übersicht bei direkten Methoden kann in Duff (2017) gefunden werden, wobei die Verfahren grundsätzlich heuristischer Natur sind. So wurde von Rose und Tarjan (1978) gezeigt, dass lokale Pivotisierungsstrategien NP-vollständig sind und damit zu den Problemen gehören die besonders schwer mit heutigen Computern zu lösen sind (Duff 2017).

Da eine Umordnung im Speicher besonders ungünstig auf Vektorrechnern ist, sollen hier Pivotisierungsstrategien in Betracht gezogen werden, welche symbolisch vorgehen und die numerischen Einträge außer acht lassen. Dies ist wichtig, da bei zwei Matrizen \mathbf{P}_i mit unterschiedlichem i zum einen keine unterschiedlichen Operationen erlaubt sind (i indiziert über die Vektorlänge), zum anderen sind rein symbolische Änderungen durch das betrachtete Netzwerk bereits vor Kompilierzeit bekannt. Die Pivotisierungen können damit vollständig auf den Python Präprozessor ausgelagert werden. In der momentanen Implementierung existieren folgende Vertauschungen:

Jacobson Jacobson und Turco (1994) sortieren die Spezies in absteigender Ordnung nach der Anzahl der Einträge in den jeweiligen Spalten und Zeilen. Dadurch wird erreicht, dass Spezies mit vielen Übergängen nach unten rechts in der zu zerlegenden Matrix wandern (vgl. Abb. 3.6).

Cuthill-McKee (umgekehrt) Der Cuthill-McKee Algorithmus (Cuthill und McKee 1969) versucht die Anzahl an fill-ins zu verringern indem alle Einträge möglichst dicht zur Hauptdiagonalen gebracht werden. Es gibt hierzu eine Abwandlung, welche die Reihenfolge umdreht (George und Liu 1981). Letztere zeigt in der Regel noch etwas bessere Ergebnisse in Bezug auf die Vermeidung von fill-ins und wird daher hier verwendet.

Es sollte noch erwähnt werden, dass viele Sortierungsalgorithmen auch die numerischen Werte in Betracht ziehen. Hierzu zählt insbesondere die erfolgreiche Methode von Markowitz (Duff 2017). Numerische Werte sind jedoch durch die Behandlung noch vor der Kompilierzeit nicht vorhanden. Auch ein Vorhandensein würde keine Vorteile versprechen, da die Werte in jeder Zelle des Vektors unterschiedlich sein können und die Vektoren in gleicher Weise abgearbeitet werden müssen.

Python Präprozessor

Grundsätzlich ist die Idee einen Python Präprozessor zu verwenden der Motivation aus Abschnitt 3.2.1 geschuldet eine geringere Flexibilität kleinteiliger Optimierungen, welche durch eine SIMD-Architektur unweigerlich einhergehen, bereits vor Kompilierzeit soweit wie möglich aufzufangen. Zudem kann ein Präprozessor an anderer Stelle mit mehr Flexibilität einhergehen, was auch im Chemie-Paket KROME demonstriert wird (Grassi

u. a. 2014). Dort können verschiedenste Netzwerke mit unterschiedlichen chemischen Spezies und den dazugehörigen Kühl- und Heizeffekten zusammengestellt werden.

Der Präprozessor in OdeVec bietet nach der gleichen Philosophie ebenfalls die Möglichkeit Netzwerke vorbereiten zu lassen und die Ergebnisse automatisiert in Fortran-Templates niederzuschreiben, befasst sich aber nur mit Optimierungen, welche für den ODE-Löser von Interesse sind. Die resultierenden Module können dann in größeren Paketen (wie Fosite) eingebunden werden und bei voller Performanz im HPC-Umfeld (engl. high performance computing) zum Einsatz kommen.

Bei gegebener RHS, welche das betrachtete Problem vollständig definiert (ohne Betrachtung der Anfangsbedingung), wird so auf Grundlage des Paketes SymPy (Meurer u. a. 2017), welches symbolische Berechnung ermöglicht, die Jakobimatrix automatisch berechnet und prozessiert. So können die Sortierungen aus Abschnitt 3.2.1 auf der zuvor berechneten Matrix \mathbf{P} (vgl. Gl. 3.29) durchgeführt werden. Das Gleichungssystem wird dann nicht in ursprünglicher Form verwendet, sondern direkt umgewandelt und zusammen mit den optimierten Sortierungen hart-kodiert in die Template-Files geschrieben. Variablen wie der Zeitschritt, aber auch alle chemischen Spezies, sowie Temperatur werden dabei symbolisch verrechnet und Optimierungen soweit wie möglich durchgeführt.

Wird ein dünnbesetztes Format gewählt kann der Präprozessor herausfinden wie die LU-Matrix besetzt sein wird, indem er einen Trockenlauf durchführt. Auch hier wird die Struktur der resultierenden Matrix im CSC-Format an einen durch eine Präprozessordirektive markierten Ort abgelegt. Die Idee eines Trockenlaufes ist dabei nicht neu, wird aber bisher erst zur Laufzeit bestimmt und muss gegebenenfalls mehrfach aufgerufen werden. Der Präprozessor hingegen kann alle Optimierungen schon vor Kompilierzeit durchführen und z.B. auch das Speicherlayout definieren.

Schlussendlich ist es auch möglich die vollständige LU-Dekomposition im Präprozessor mit Hilfe des SymPy-Paketes abzuhandeln. In der Praxis hat sich hier jedoch gezeigt, dass die Vorgehensweise schnell an ihre Grenzen kommt. Sind die betrachteten Gleichungssysteme klein, kann das Verfahren noch erfolgversprechend sein. Werden sie jedoch größer und die RHS komplexer, nehmen die symbolischen Ausdrücke in ihrer Länge stark zu, was ein Niederschreiben der Lösung erschwert. Diese zunehmende Länge liegt auch an der iterativen Natur der LU-Dekomposition (vgl. z.B. Press u. a. 2007).

Ein beispielhafter Aufruf für den Präprozessor ist

```
./pre_odevec.py --packaging="CSC" --ordering="FF" \  
--nvector=8 --example="ROBER"
```

bei dem das ROBER-Testbeispiel (vgl. 3.4.1) vorbereitet wird. Die Vektorlänge wird auf 8 gesetzt, was für eine Vorbereitung für eine Intel-Architektur sprechen würde und das Packungsformat wird auf CSC mit dem Sortierungsalgorithmus von Jacobson und Turco (1994) verwendet. Eine detaillierte Liste an Optionen kann über

```
./pre_odevec.py --help
```

zurückgegeben werden.

Zusammenfassende Eigenschaften

Der Löser OdeVec ist ein alleinstehender ODE-Löser und hat zusammengefasst folgenden Funktionsumfang:

- BDF-Verfahren nach Hindmarsh (1983) mit variabler Ordnung und variablem Zeitschritt
- Simultanes, zellvektorisertes Lösen vieler Gleichungen auf einmal (Jacobson und Turco 1994)
- Python-Präprozessor zur Optimierung des verwendeten Gleichungssystems
- Symbolische (mit SymPy) oder numerische (Hindmarsh 1983) Berechnung von Jakobimatrix
- Aufsetzen verschiedener Packungsformate: Dicht & CSC
- Sortierungen: Keine, nach Jacobson und Turco (1994) & nach Cuthill und McKee (1969)
- Symbolische Erstellung der LU-Matrix (experimenteller Status)
- Ausgabe in Template-Files zum Einbinden in Fortran-Pakete (wie Fosite)
- Verschiedene Testbeispiele (ROBER, OREGO, PRIMORDIAL)
- Maskieren von nicht zu berechnenden Bereichen (vgl. Abschnitt 3.3.2)
- Verknüpfung zu KROME (vgl. Abschnitt 3.3, Grassi u. a. 2014)

Die letzten beiden Punkte werden dabei genauer in den kommenden Abschnitten erläutert, da sie als Hilfsmittel nicht nur den alleinstehenden Löser betreffen, sondern mit der Verwendung weiterer Verfahren einhergehen. So kann eine Maske übergeben werden, um auf individueller Basis zu entscheiden, ob der ODE-Löser eine Berechnung durchführen soll oder nicht. Zudem ist eine Verknüpfung zu dem Chemie-Paket KROME möglich, welches es ermöglicht Zugriff auf eine große Menge an Setups im astrophysikalischen Kontext zu erhalten, insbesondere in Bezug auf primordiale Netzwerke.

3.3. Einbinden chemischer Netzwerke in Fosite mit KROME

Das in Grassi u. a. (2014) beschriebene Paket KROME dient zum Zusammenstellen chemischer Netzwerke, mit diversen Kühl- und Heizprozessen, Staubwachstum, sowie Photochemie. In der Standardversion wird das Lösen der Ratengleichungen 2.22 mit dem ODE-Löser DLSODES ermöglicht, welcher dem Verfahren von Hindmarsh (1983) zugrunde liegt und dabei dünnbesetzte Matrizen numerisch betrachtet. Die grundsätzliche Funktionsweise ist, dass an den KROME Python-Präprozessor das gewünschte Netzwerk sowie Kühl- und Heizprozessen übergeben werden und dieser dann Fortran-Templates

zur Verfügung stellt. Letztere werden im darauf folgenden Schritt innerhalb mit Fosite kompiliert und als Submodul eingebunden.

KROME und die zugrundeliegenden Pakete sind nicht vektorisiert. Um dies zu erreichen wurden große Teile des Paketes entsprechend erweitert und mit dem neuen Löser OdeVec verknüpft. Im Wesentlichen wurde dazu eine weitere erste Dimension von der verwendeten Vektorlänge n_{vec} eingeführt, welche über den Präprozessor bestimmt wird und zur Kompilierzeit bekannt ist. Dadurch verändern sich auch die Schnittstellen. Besonders deutlich wird dies beim Hauptaufruf von KROME. Dieser wird durch

```
call krome(x(:),Temp,dt) -> call krome(x(:, :),Temp(:),dt)
```

ersetzt, wobei \mathbf{x} die chemischen Spezies, \mathbf{Temp} die Temperatur und \mathbf{dt} der zu berechnende Zeitschritt sind. Hinzu kommt, dass bei der Initialisierung die Größe des Gesamtfeldes mit übergeben werden muss. KROME nimmt somit das gesamte Feld entgegen und reicht dieses anschließend in n_{chunks} Portionen der Vektorlänge n_{vec} an OdeVec weiter. OdeVec löst das Problem dann immer auf der Länge n_{vec} .

Um OdeVec statt DLSODES zu verwenden muss der Schalter `-useOdevec` an den KROME-Präprozessor weitergegeben werden. Dabei wird im Präprozessorschritt das in KROME verwendete Netzwerk an OdeVec weitergereicht. OdeVec wiederum optimiert das Netzwerk und schreibt die Resultate an die nötigen Stellen. Damit wird der entsprechende Schritt in KROME ersetzt. Dieser enthält ebenfalls das Niederschreiben der RHS und einer Jakobimatrix, wobei jedoch Strings verarbeitet werden und dadurch nur begrenzt Optimierungen möglich sind. In OdeVec können mit Hilfe von Sympy wie zuvor beschrieben tatsächliche algebraische Vorberechnungen vorgenommen werden, welcher der Laufzeit des Löser zu Gute kommen können. Es sollte beachtet werden, dass durch die eingeführten Änderungen die erweiterte Version von KROME nicht mehr abwärtskompatibel ist, was bereits durch die Änderung der Schnittstellen oben bedingt ist.

In Abb. 3.8 ist die Einbindung von OdeVec und KROME in Fosite illustriert. Dort wird auch ersichtlich, dass der Aufruf von KROME selber im Quelltermmodul `sources_chemistry.f90` untergebracht ist. Dies ermöglicht es die von KROME zurückgegebene Temperatur in Form der Differenz als Quellterm in der Energiegleichung 2.11 einzubinden. Das Modul wird jedoch anders als reguläre Quellterme abgehandelt, da die Chemie nicht wie für die anderen Quellterme üblichen expliziten Zeitschrittverfahren verrechnet wird, sondern die Operator-Teilung aus Gl. 3.15 zum Einsatz kommt. Die Temperatur wird dabei, wie durch den Aufruf oben zu sehen explizit an KROME weitergegeben und im Folgenden in einem gemeinsamen Gleichungssystem mit den Spezies des Netzwerkes gelöst (vgl. Grassi u. a. 2014). Dabei werden die Temperaturänderungen für gegebene Kühlungen und Heizungen von KROME definiert. Die Temperaturdifferenz ΔT wird als Quellterm von Fosite aufgenommen, um Einfluss auf die Hydrodynamik zu nehmen. Ebenfalls in Abb. 3.8 ersichtlich ist, dass KROME anschließend OdeVec zum Lösen des Gleichungssystems aufruft.

Zugleich bekommt KROME beim Aufsetzen des Netzwerkes durch den Präprozessor von OdeVec aktive Unterstützung indem das Gleichungssystem vorprozessiert wird. Im Gegensatz zur ursprünglichen Version schreibt dann OdeVec die optimierte Jakobimatrix

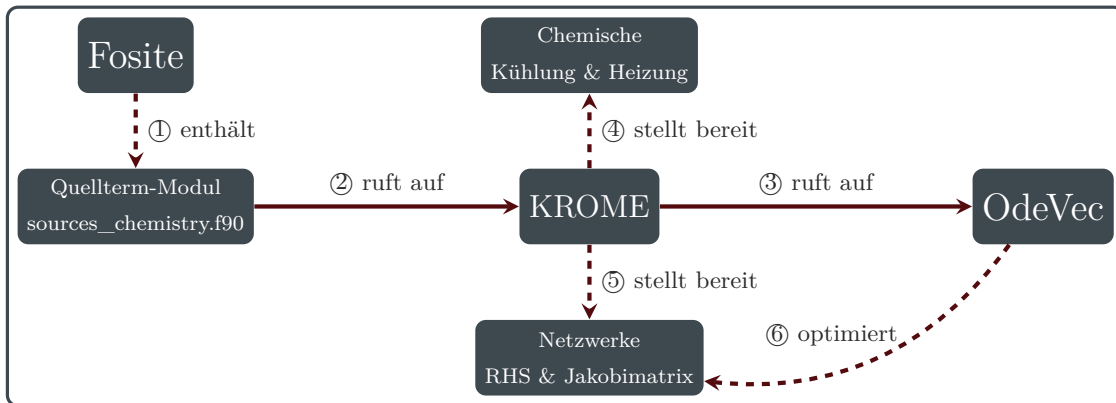


Abbildung 3.8.: Übersicht zur Verwendung von KROME mit OdeVec in Fosite. Innerhalb von Fosite wird KROME aus dem Quellterm-Modul `sources_chemistry.f90` aufgerufen (① + ②). KROME enthält spezifische chemische Netzwerke ④ mit den dazugehörigen Kühl- und Heizfunktionen ⑤. Um die eigentliche Lösung des Gleichungssystems kümmert sich OdeVec indem KROME dieses aufruft ③. Da sowohl KROME als auch OdeVec einen Präprozessor besitzen, wurde der KROME Präprozessor um jenen von OdeVec erweitert, wenn `-useOdevec` übergeben wird. In diesem Fall schreibt OdeVec die RHS und Jakobimatrix in optimierter Form nieder ⑥.

und RHS nieder. Die Kommunikation zwischen den Programmen wurde so realisiert, dass der Präprozessor von OdeVec automatisch in KROME aufgerufen wird ohne das weitere Schritte zur ursprünglichen Prozedur hinzukommen.

3.3.1. Aufsetzen eines Netzwerkes

KROME bietet bereits eine Auswahl insbesondere von primordialen Netzwerken für Berechnungen im frühen Universum an. Der Präprozessor von KROME wurde dabei derart erweitert, dass er automatisch jenen von OdeVec im Initialisierungsschritt aufruft. Um beispielsweise ein aus Wasserstoff und Helium bestehendes Netzwerk mit 9 verschiedenen Spezies zu generieren, kann

```

./krome -useOdevec -nvector=8 -packaging="DENSE" -compact \
-noVerbatimFile -n="networks/react_primordial3"

```

aufgerufen werden. `-useOdevec` zeigt den entsprechenden Löser (OdeVec) an, welcher verwendet werden soll, `-nvector=8` und `-packaging="DENSE"` werden direkt an den Präprozessor von OdeVec weitergereicht. Hier können auch weitere Parameter übergeben werden. `-compact` und `-noVerbatimFile` sollten immer mit aufgerufen werden, da nur so die Ausgabedateien von KROME später im Buildsystem von Fosite im richtigen Format vorliegen. Schlussendlich wählt `-n="networks/react_primordial3"` das oben genannte Netzwerk aus. Das Netzwerk ist eines der von KROME mitgelieferten für ein primordiales Setup, welches aus 9 verschiedenen Spezies besteht.

Anschließend müssen die durch den vorherigen Befehl erzeugten Dateien in den Unterordner *krome* in Fosite kopiert werden.

```
cp <kromeordner>/build/{krome_all.f90, \
    krome_user_commons.f90,odevec.f90} <fositeordner>/krome/
```

In einem letzten Schritt muss Fosite in der Konfiguration durch `-DHAVE_KROME=ON` mitgeteilt werden, dass die KROME-Dateien bereit liegen und ebenfalls kompiliert werden sollen. Aus einem Unterordner kann dann

```
cmake -DVECTORIZATION=ON -DHAVE_KROME=ON ..
```

aufgerufen werden. Wird `-DVECTORIZATION=OFF` verwendet geht Fosite davon aus, dass die nicht vektorisierte Version von KROME mit DLSODES verwendet wird. Dies ermöglicht es den neuen Löser mit den Veränderungen jederzeit gegen die vorherige Version testen zu können.

Zusammenfassend sind drei Schritte für das Einbauen eines chemischen Netzwerkes nötig:

1. Vorbereiten des Netzwerkes in KROME mit Schalter `-useOdevec` und `-nvector=<nvector>`.
2. Kopieren der drei von KROME erzeugten Dateien in den krome-Unterordner von Fosite.
3. Konfigurieren von Fosite mit `-DHAVE_KROME=ON`.

3.3.2. Wasserstoffdissoziation im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht

In selbstgravitierenden Akkretionsscheiben können die Massendichten hoch werden, insbesondere wenn Teile des Gases kollabieren. Wie in Abschnitt 2.3.4 beschrieben, kann in diesem Fall ein LTE erreicht werden. Hier ist eine Sonderbehandlung für die später verwendeten primordialen Netzwerke nötig, da selbst das darauf ausgelegte BDF-Verfahren nicht mehr in der Lage ist, das Problem über die nötigen Zeitskalen zügig zu lösen. Um diese Bereiche trotzdem berechnen zu können, wurde in der vektorisierten Version von KROME eine LTE Lösung implementiert, welche die Dreikörperstöße aus Abschnitt 2.3.4 für die Koeffizienten nach Martin u. a. (1996) und Forrey (2013) direkt berechnet. Der Ausdruck in Gl. 2.27 lässt sich mit

$$f(T, \mathbf{n}) \stackrel{!}{=} \frac{n_{\text{H}_2}}{n_{\text{H}}^2} = \frac{k_r(T, \mathbf{n})}{k_d(T, \mathbf{n})} \quad (3.33)$$

analytisch für n_{H_2} lösen, wenn man $n_{\text{c}} \stackrel{!}{=} 2n_{\text{H}_2} + n_{\text{H}} = \text{const.}$ annimmt, also nur ein unwesentlicher Teil des Wasserstoffs in anderer als atomarer oder molekularer Form vorliegt. Damit ergibt sich

$$n_{\text{H}_2}(T, \mathbf{n}) = \frac{4n_{\text{c}}f(T, \mathbf{n}) - \sqrt{8n_{\text{c}}f(T, \mathbf{n}) + 1} + 1}{8f(T, \mathbf{n})}. \quad (3.34)$$

Gleichzeitig wird die Temperaturänderung wie in Gl. 2.23 beschrieben. Für unseren Fall eines idealen Gases und Dissoziationsübergang des Dreikörperstoßes mit einer Energie von $\epsilon_{\text{diss}} = 4,48 \text{ eV}$ gilt dabei

$$\frac{d\tilde{n}_{\text{H}_2}}{dT} = \frac{k_B \sum_l n_l}{(\gamma - 1)\epsilon_{\text{diss}}}, \quad (3.35)$$

wobei l über alle vorhandenen Spezies summiert. Löst man den entsprechenden Ausdruck erhält man die Gleichung

$$\tilde{n}_{\text{H}_2}(T, \mathbf{n}) = \exp(-g(T)) \left(n_{\text{H}_2}(T_0) - (1 - \exp(g(T))) \sum_l n_l \right), \quad (3.36)$$

wobei ganz rechts über alle Werte ausgenommen molekularem Wasserstoff summiert wird und T_0 die Anfangstemperatur ist. Zudem ist

$$g(T) = \frac{k_B}{(\gamma - 1)\epsilon_{\text{diss}}}(T - T_0). \quad (3.37)$$

Zusammen mit Gl. 3.34 liegen somit zwei Ausdrücke vor, welche beide die Anzahldichte für molekularen Wasserstoff zurückliefern. Jene in Gl. 3.34 beschreibt bei gegebener Gesamtdichte und Temperatur die erlaubten Mengen n_{H_2} im LTE, die andere aus Gl. 3.36 (\tilde{n}_{H_2}) beschreibt den Lösungsast bei gegebener Anfangsdichte und -temperatur, welche abseits der Gleichgewichtslösung liegen kann. Das entsprechende Problem

$$n_{\text{H}_2}(T, \mathbf{n}) - \tilde{n}_{\text{H}_2}(T, \mathbf{n}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.38)$$

lässt sich als Nullstellenverfahren lösen und ist in Abbildung 3.9 verdeutlicht. Dort sind die beiden Lösungen grafisch abgebildet, wobei zum einem die Gleichgewichtslösung in Gl. 3.34 für $n_c = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ und die Lösungsäste bei konstanter Starttemperatur $T_0 = 3000 \text{ K}$ und verschiedenen Anfangsanteildichten von molekularem Wasserstoff beobachtet werden können. Der Schnittpunkt der jeweiligen Gleichungen liefert das Ergebnis.

Zur numerischen Lösung wird das Regula-Falsi-Verfahren verwendet (Press u. a. 2007). Das Verfahren ist nicht Teil von OdeVec sondern wird in der Hauptfunktion von KROME direkt vor dem Aufrufen von OdeVec abgearbeitet. Ebenso wie für OdeVec wurde dabei eine vektorisierte Version geschrieben, welche ein simultanes Lösen erlaubt. Um individuell zwischen Gleichgewichtslöser oder Nichtgleichgewichtslöser umschalten zu können kann eine logische Maske an beide Verfahren übergeben werden. Beide Löser berechnen so nur jene Bereiche für die sie angedacht sind. Die Maske wird dabei so gesetzt, dass ab einer Dichte von $n_c \geq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ der Gleichgewichtslöser zum Einsatz kommt (entspricht Maskenwert *false*) (vgl. Yoshida u. a. 2008; Greif 2015).

Wenn die Temperatur sehr niedrig ist, kann es zu numerischen Problemen kommen. In diesem Fall wird davon ausgegangen, dass keine Änderungen im Gas stattfinden und die Zelle wird übersprungen, was auch dem zu erwartenden Grenzfall entspricht, bei dem die RHS null wäre. Möchte man die Lösung bei hohen Dichten verwenden muss an den KROME-Präprozessor zusätzlich der Schalter

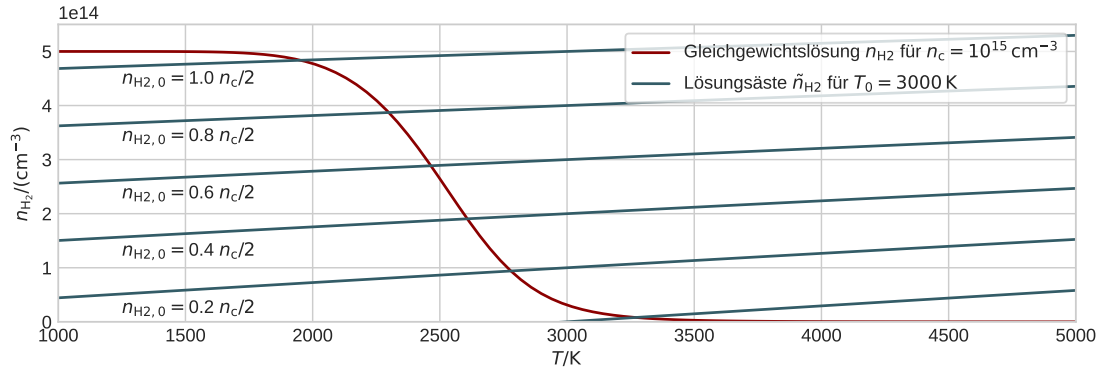


Abbildung 3.9.: Darstellung des Nullstellenproblems in Gl. 3.38 unter Verwendung von Gl. 3.34 und Gl. 3.36.

```
./krome -equilibrium_H=1 ...
```

übergeben werden. Die weitere Vorgehensweise ist identisch zu den in Abschnitt 3.3.1 beschriebenen Schritten.

3.4. Numerische Tests

Im Folgenden werden einige Tests durchgeführt, welche die Funktionstüchtigkeit und Performanz des neues Löser in Kombination der genutzten Pakete zeigen sollen. In verschiedenen Abstufungen werden dabei nur der ODE-Löser OdeVec, das Zusammenspiel zwischen KROME und OdeVec, sowie beider Pakete mit Fosite getestet.

3.4.1. Robertson's Test

Test für: OdeVec

Der klassische Test nach Robertson (1966) spiegelt ein kleines Netzwerk bestehend aus drei fiktiven chemischen Spezies wider (Hairer und Wanner 1996). Das Problem wird durch eine rechte Seite

$$f(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} -k_1 n_1 + k_3 n_2 n_3 \\ k_1 n_1 - k_2 n_2^2 - k_3 n_2 n_3 \\ k_2 n_2^2 \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

in Gl. 2.24 mit über mehrere Größenordnungen unterschiedlichen Koeffizienten $k_1 = 0.04$, $k_2 = 10^4$ und $k_3 = 3 \cdot 10^7$ beschrieben, was auf ein sehr steifes System schließen lässt. Die Anfangsbedingungen sind $\mathbf{n}_0 = (1.0, 0.0, 0.0)^T$, die Simulationszeit $T_{\text{sim}} = 10^{11}$. Typische Probleme, welche auftreten können, sind einerseits zu kleine Zeitschritte, falls das Verfahren nicht für eine steife Differentialgleichung geeignet ist oder ein plötzliches

Divergieren der Lösungen, wenn man bei großen Simulationszeiten ($\sim 10^{10}$) auf Grund von numerischen Ungenauigkeiten negative Werte erzeugt (Hairer und Wanner 1996)⁶. In Abb. 3.10 wird der Test zusammen mit der nötigen Rechenzeit dargestellt. Dabei wurden die Vektorlängen $n_{\text{vec}} = \{1, 8192\}$, sowie die SX-Architektur und eine CPU der IvyBridge Generation in Betracht gezogen, jeweils für den Löser OdeVec und DLSODE. Für die Vektorlänge $n_{\text{vec}} = 8192$ wird der Test entsprechend häufig ausgerechnet. Während OdeVec alles in einem Vektor löst, wird der DLSODE n_{vec} mal aufgerufen (wie es auch in KROME der Fall wäre). Zu beachten ist, dass die effektiven Laufzeiten dargestellt sind. Für den Fall $n_{\text{vec}} = 8192$ beschreibt die effektive Laufzeit jene, welche rechnerisch pro Zelle oder einmaliger Berechnung des ROBER-Tests benötigt wird. Auf der SX-Architektur wird der nfort-Compiler auf der Intel-Architektur gfortran verwendet.

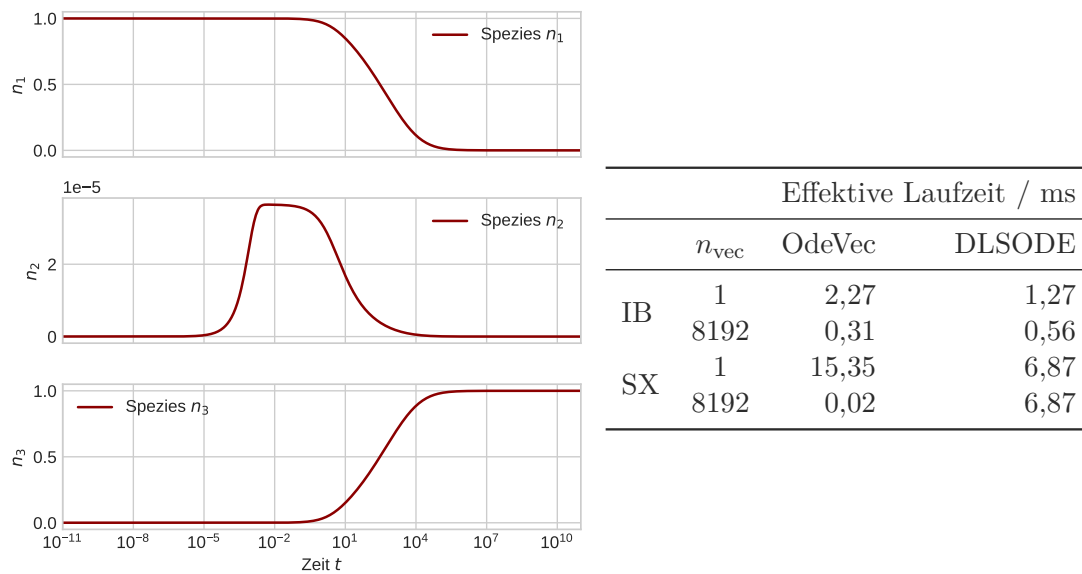


Abbildung 3.10.: *ROBER Test (links) zusammen mit Geschwindigkeitsmessungen für die effektive Laufzeit (rechts) auf verschiedenen Architekturen bei einer Vektorlänge von $n_{\text{vec}} = \{1, 8192\}$. Die Toleranzen liegen bei $\text{tol}_{\text{rel}} = 10^{-8}$, $\text{tol}_{\text{abs}} = 10^{-14}$ (IB: Intel(R) Core(TM) i3-3240 @ 3.40GHz, SX: NEC SX-Aurora Tsubasa - Type 10B). Verwendete Flags: -O2, -cpp.*

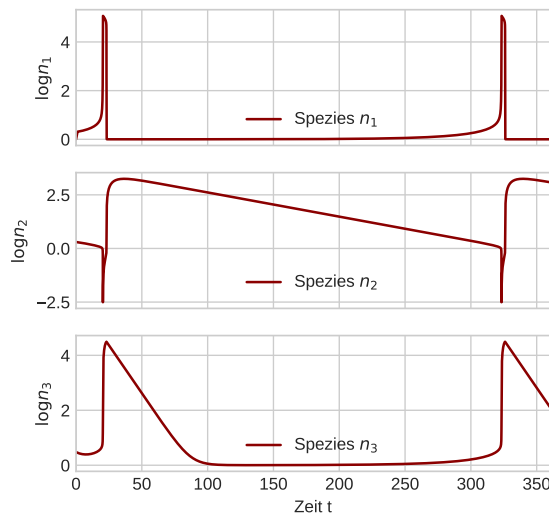
Während OdeVec bei $n_{\text{vec}} = 1$ durchgehend um etwa einen Faktor 2 langsamer ist, wird er für die lange Vektorlänge auf beiden Architekturen schneller, wenn auch nur im geringen Umfang auf der IvyBridge-Architektur. Eine Ausnahme bildet hier die Kombination zwischen SX Architektur und DLSODE, welche unabhängig von der Vektorlänge nahezu konstant ist. Dies deutet darauf hin, dass keine kleinteiligen Optimierungen möglich sind. Besonders deutlich wird der Geschwindigkeitszugewinn im Falle der SX-Architektur mit zunehmender Vektorlänge n_{vec} und OdeVec. Hier schlägt die Vektorisierung voll

⁶Der Effekt wurde ursprünglich von Alan C. Hindmarsh entdeckt, wie in der angegebenen Quelle beschrieben.

zu Buche. Bei $n_{\text{vec}} = 8192$ wird dort ein Vektorisierungsgrad von 99,09 % und eine mittlere Vektorlänge von 248,9 erreicht, was bedeutet, dass der Vektorrechner sein Register von 256 Einträgen im Schnitt nahezu vollständig füllen kann. Verglichen dazu hat DLSODE fast unabhängig von n_{vec} einen Vektorisierungsgrad von $\sim 18\%$ bei einer Vektorlänge von $\sim 3,6$, was auf einen nicht vektorisierbaren Code schließen lässt. Die schlechteste Vektorisierung hat mit einem Vektorisierungsgrad von $\sim 10\%$ und einer mittleren Vektorlänge von $\sim 1,2$ OdeVec bei $n_{\text{vec}} = 1$. Der Grund dafür ist, dass dem Compiler an verschiedenen Stellen im Code explizit mitgeteilt wird, dass er über die Schleife mit n_{vec} vektorisieren soll, wodurch kleinteilige Vektorisierungen über andere Schleifen unterbunden werden. Hier wäre noch Optimierungspotential möglich, allerdings ist eine Berechnung auf der SX-Architektur unter solchen Bedingungen ohnehin nicht sinnvoll.

3.4.2. OREGO Test

Test für: OdeVec



Effektive Laufzeit / ms			
	n_{vec}	OdeVec	DLSODE
IB	1	7,70	5,44
	512	1,00	2,49
SX	1	51,01	28,10
	512	0,14	27,98

Abbildung 3.11.: Links: *OREGO Test unter Verwendung von OdeVec.*

Rechts: *Performanz-Messungen auf verschiedenen Architekturen bei Vektorlängen von $N = 1$ und $N = 512$ (IB: Intel(R) Core(TM) i3-3240 @ 3.40GHz, SX: NEC SX-Aurora Tsubasa - Type 10B). Verwendete Flags: -O2, -cpp.*

Der OREGO Test ist vor allen Dingen deswegen interessant, da er eine periodische Lösung erzeugt. Mögliche kleine, sich aufsummierende Fehler würden so deutlich zum Vorschein kommen (Hairer und Wanner 1996; Field u. a. 1972). Hinzu kommt, dass sich das Verhalten des Systems langen Zeitraum langsam entwickelt und sich kurzfristig über viele Größenordnungen ändert.

Das zugrundeliegende Gleichungssystem lautet

$$f(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} 77.27 (n_2 + n_1 (1,0 - 8,375 \cdot 10^{-6} n_1 - n_2)) \\ \frac{1,0}{77,27} (n_3 - (1,0 + n_1) n_2) \\ 0,161 (n_1 - n_3) \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

wobei die Anfangsbedingungen durch $\mathbf{n}_0 = (1,0,2,0,3,0)^T$ gegeben sind. Es wird bis $T_{\text{sim}} = 360$ gerechnet. Die Toleranzen sind auf $tol_{\text{rel}} = 10^{-9}$ und $tol_{\text{abs}} = 10^{-17}$ gesetzt. In Abb. 3.11 sind die Ergebnisse dargestellt, wieder für zwei unterschiedliche Vektorlängen. Es fällt auf, dass für an die Löser übergebene Ausgabeschrittweiten (nicht zu verwechseln mit der internen Schrittweite der Löser selber) sowohl bei OdeVec, als auch bei DLSODE einen großen Einfluss auf die Laufzeit hat. Dies hat jedoch nichts mit Latenzzeiten durch Schreibzugriffe zu tun, da Ausgaben für die Performanz-Tests ausgeschaltet sind. Ferner bricht DLSODE bei einer Schrittweite $\Delta t > 0.5$ mit einer Fehlermeldung wegen zu vieler Iterationen ab. Die Vermutung ist, dass hier Unterschiede in den Implementierungen bei Neuaufrufen des Löser existieren. Die Rechnung wird daher für beide Löser über den oben gemachten Zeitraum gemacht, bei DLSODE wird aber der oben maximal mögliche Zeitschritt verwendet.

Ansonsten zeigt sich in der Tabelle auf der rechten Seite von Abb. 3.11 ein ähnliches Verhalten wie beim ROBER Test aus Abschnitt 3.4.1. Bei einer ausreichenden Vektorlänge schafft es die Vektorarchitektur ihre Möglichkeiten voll auszuschöpfen. Die Vektorisierungsgrade sind dabei ebenfalls erstaunlich ähnlich mit $\sim 18\%$ bei DLSODE und $\sim 98\%$ bei OdeVec mit $n_{\text{vec}} = 512$.

3.4.3. Primordiales Netzwerk

Test für: OdeVec, KROME, Vektorisierungsgrad

Dieser Test lässt ein aus KROME mitgeliefertes primordiales Netzwerk (*react_primordial3*) durchlaufen ohne weitere Rückkopplungseffekte zu betrachten. Das Netzwerk enthält dabei 9 unterschiedliche Spezies und 27 Reaktionen. Die isolierte Entwicklung ist sowohl innerhalb von OdeVec als Test eingebaut, als auch in der vektorisierten KROME Version unter dem Namen *primordial_vec* vorhanden. So kann das Zusammenwirken der beiden Pakete anhand eines realistischen Setups unter einfachen isolierten Bedingungen getestet werden.

Die Entwicklung des Netzwerks wird bei konstanter Dichte $\rho = 10^{-14} \text{ g/cm}^3$ und Temperatur $T = 2 \cdot 10^3 \text{ K}$ betrachtet und in Abb. 3.12 sind dazu die Anteile der jeweiligen Spezies dargestellt. Es ist zu erkennen, dass relativ schnell ein Gleichgewichtszustand erreicht wird. Da die Temperatur über der Dissoziationstemperatur liegt ist die auffälligste Reaktion, dass sich der molekulare Wasserstoff in atomaren umwandelt.

Hier soll auch ein Eindruck über die notwendige Vektorlänge n_{vec} auf der SX-Architektur vermittelt werden, was auf der rechten Seite von Abb. 3.12 illustriert ist. Die effektive Laufzeit nimmt mit zunehmenden n_{vec} stetig ab, mit einem Performanz-Sprung bei $n_{\text{vec}} = 8$. Der Ursprung dafür ist nicht vollständig klar, jedoch höchstwahrscheinlich durch Compiler-Optimierungen bedingt, da die Vektorlänge schon vor Kompilierzeit bekannt

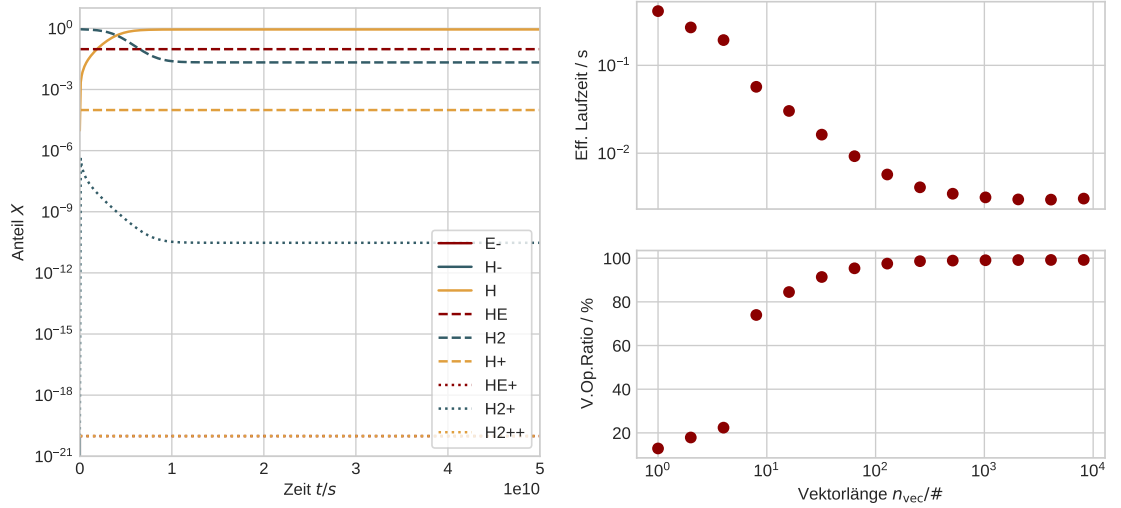


Abbildung 3.12.: Links: Zeitliche Entwicklung eines primordialen Netzwerkes, wobei Spezies, welche nicht im Plot zu sehen sind, einen Anteil $< 10^{-20}$ haben. Rechts: Übersicht zur Laufzeit und dem Vektorisierungsgrad bei zunehmender Vektorlänge n_{vec} auf NEC SX-Aurora Tsubasa - Type 10B (verwendete Flags: -O2, -cpp).

ist. Ab $n_{vec} = 256$, spätestens ab $n_{vec} = 512$ gibt es keinen deutlichen Performancegewinn mehr.

3.4.4. Atmosphäre

Test für: OdeVec & Dünnbesetztheit, KROME

Das Testproblem besteht aus einem sich entwickelndem Netzwerk aus 30 verschiedenen Spezies (Kasting und Donahue 1980) in einer diffusiven Atmosphäre

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -k(h) \frac{\partial^2 n_i}{\partial h^2}, \quad (3.41)$$

welches als Toy-Modell zu verstehen ist. Das Ergebnis für den CO_2 - und H_2 -Anteil kann dabei in Abb. 3.13 mit den Ergebnissen aus (Grassi u. a. 2014) verglichen werden und zeigt den zu erwartenden Verlauf.

Dieses Beispiel stammt direkt aus dem KROME-Paket und wird in Grassi u. a. (2014) genauer beschrieben. Es kann mit dem Schalter -test="atmosphere" aufgesetzt werden. Das Ergebnis wird hier lediglich als Vergleich präsentiert, ohne ins Detail gehen zu wollen. Es soll dabei gezeigt werden, dass der Präprozessor von OdeVec auch mit anderen Netzwerken, welche in KROME bereits existieren, umgehen kann. Zudem soll mit verschiedenen Präprozessor-Schaltern demonstriert werden, wie diese das Verfahren optimieren und damit die Laufzeit reduzieren können.

Da das Beispiel aus 64 Zellen besteht, kann auch nur über eine entsprechende Länge vektorisiert werden und es wird $n_{vec} = 64$ gewählt. Der Test wurde bei sonst gleichen Einstellungen mit dem zusätzlichen Schalter -packaging="CSC" ausgeführt, welcher

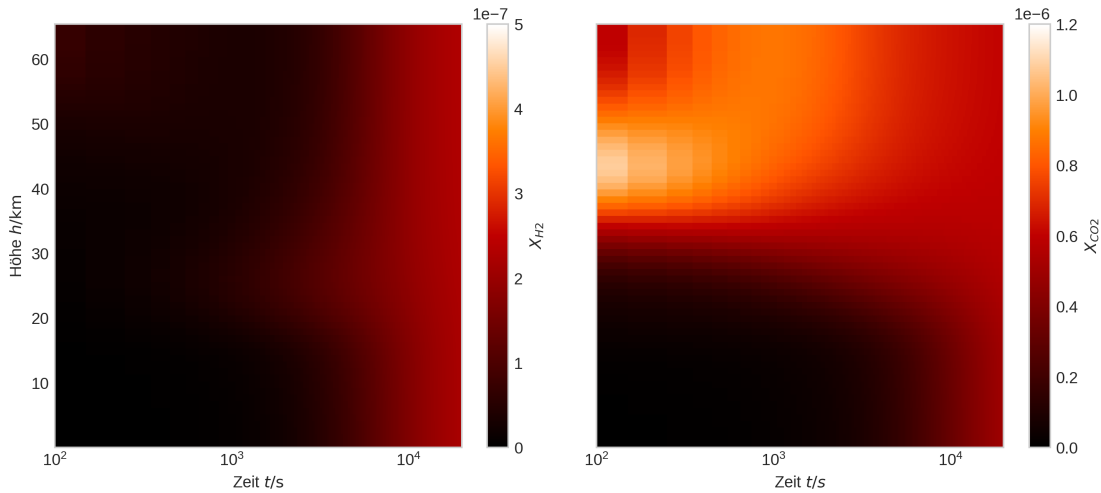


Abbildung 3.13.: Molekularer Wasserstoff- ($X(\text{H}_2)$, links) und Kohlendioxidanteil ($X(\text{CO}_2)$, rechts), jeweils aufgetragen über Zeit t und Höhe h .

Tabelle 3.3.: Laufzeiten und Besetztheiten der Matrix \mathbf{J} unter Verwendung verschiedener Schalter für den Test "atmosphere" aus KROME. Laufzeiten beziehen sich auf NEC SX-Aurora Tsubasa - Type 10B (verwendete Flags: -O2, -cpp).

Schalter	Keine	"CSC"	"CSC"+"FF"	"CSC"+"CMK"
Laufzeit	23,58 s	16,84 s	9,18 s	12,58 s
Dünnbesetztheit \mathbf{J}	79 %	79 %	79 %	79 %
Dünnbesetztheit \mathbf{LU}	36 %	36 %	74 %	56 %

angibt, dass OdeVec das Problem im CSC-Format abspeichern und berechnen soll. Zudem wurden die Schalter `-ordering="FF"` und `-ordering="CMK"` getestet. Letztere nutzen die Sortierung nach Jacobson und Turco (1994) bzw. Cuthill und McKee (1969) (vgl. Abschnitt 3.2.1), um möglichst wenige fill-ins in der LU-Matrix zu erzeugen. In Tab. 3.3 sind diese Zusammenhänge dargestellt. Es zeigt sich ein deutlicher Zugewinn der Laufzeit, wenn eine starke Dünnbesetztheit ausgenutzt werden kann. Werden keine Flags gesetzt, ist dies nicht der Fall und die Laufzeit beträgt 23,58 s. Die beste Performance bietet die Kombination aus CSC-Format und der Sortierung von Jacobson und Turco (1994) ("FF"). Dies liegt daran, dass dort nahezu die gesamte Dünnbesetztheit der Matrix \mathbf{J} in die zerlegte \mathbf{LU} -Matrix überführt werden kann.

3.4.5. Sod Tests

Der Stoßrohr-Test nach Sod (1978) ist ein bekannter Test, welcher häufig in der numerischen Fluidodynamik Verwendung findet (Toro 2013) und einen moderaten Stoß im Rohr dargestellt. Ohne Modifikationen wurde der Test bereits ausgiebig in Fosite betrachtet (Illenseer 2006; Jung 2016). Dazu werden in zwei Bereichen um eine Stoßposition x_0 ,

Druck P und Dichte ϱ in einem anfangs ruhenden Gas gesetzt. Um den Transport passiver Variablen zu beschreiben werden hier drei Varianten dieses Tests präsentiert. Eine, welche sich auf den passiven Transport ohne chemische Entwicklung konzentriert (Plewa und Müller 1999) und eine weitere, welche die Entwicklung und das Kühlungsfeedback in einem astrophysikalischen Kontext mit primordiales Netzwerk in Betracht zieht (Grassi u. a. 2014). In einer dritten Version wird der Sodtest so aufgesetzt, dass sich Teile des Rechengebietes im lokale thermodynamische Gleichgewicht befinden.

Transport passiver Spezies

Test für: Passive Skalare in Fosite

Tabelle 3.4.: Anfangsbedingungen für den Sod Stoßtest nach Plewa und Müller (1999)

Anfangsdichte	$\varrho_l(x \leq 0,5)$	1,0
	$\varrho_r(x > 0,5)$	0,125
Anfangsdruck	$P_l(x \leq 0,5)$	1,0
	$P_r(x > 0,5)$	0,1
Anfangsgeschwindigkeit	v	0,0
Spezies	$X_1(x \leq 0,5)$	0,5
	$X_1(0,5 < x \leq 0,75)$	0,3
	$X_1(x > 0,75)$	0,1
Spezies	X_2	$0,3 \sin(20\pi x^2)$
Spezies	X_3	$1 - X_1 - X_2$
Auflösung	N	512
Simulationszeit	t_{sim}	1.0

In Plewa und Müller (1999) wird dieser Test für die in Abschnitt 3.1.6 beschriebene konsistente Implementierung von passiven Skalaren in FVM beschrieben. Insbesondere die Erfüllung von der zusätzlichen Bedingung an die Hydrodynamik aus Gl. 2.14 lässt sich hiermit überprüfen. Die Anfangsbedingungen werden in Tab. 3.4 zusammengefasst. Neu hinzu kommen zu dem klassischen Test drei passive Variablen X_1, X_2, X_3 , welche einer komplexen Verteilung folgen. Insbesondere können die Konzentrationen der Spezies X_2 und X_3 auch in den negativen Bereich wechseln. Da das Verfahren in Plewa und Müller (1999) von höherer Ordnung ist, wurde zudem eine höhere Auflösung im Test verwendet.

Abb. 3.14 zeigt die Entwicklung der passiven Skalare. In den ersten beiden Diagrammen sind dabei die Anfangsbedingungen ($t = 0$) und das Endergebnis ($t = 1$) dargestellt. Letzteres zeigt einen ähnlichen Verlauf zu Plewa und Müller (1999) was die Stauchung in Abstandsrichtung für die Spezies X_2 und X_3 angeht. In Plewa und Müller (1999) ist zudem eine Stauchung in der Häufigkeitsverteilung nahe der Stoßfront zu beobachten, diese ist hier nicht oder nur kaum zu sehen. Dies hängt mit der Dissipation der unterschiedlichen Verfahren zusammen. Für niedrigere Auflösungen kommt es für Spezies X_2 und X_3 an eben dieser Stelle schnell zu einer Nivellierung, da dann eine größere Dissipation

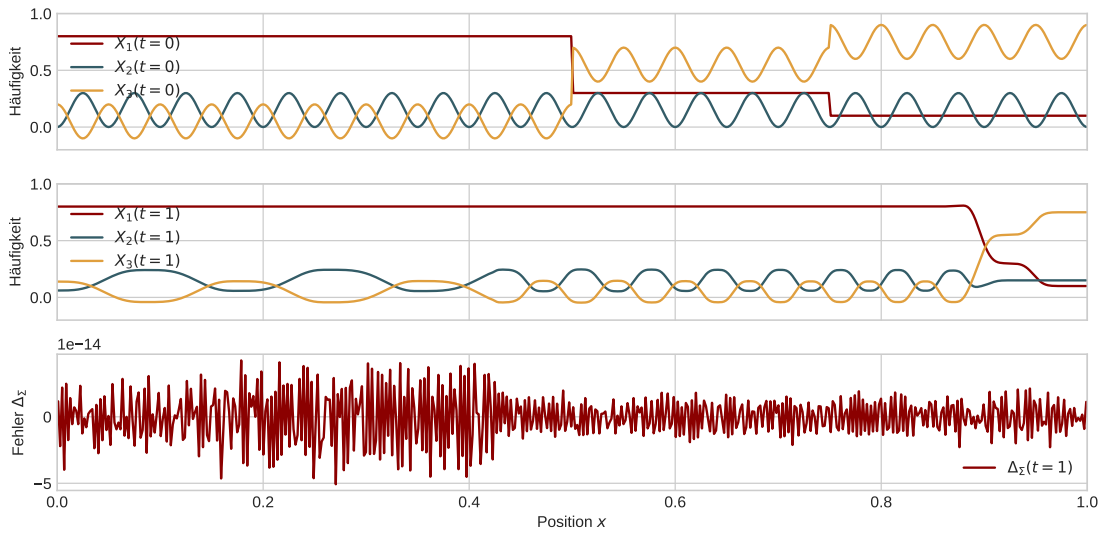


Abbildung 3.14.: Sod Stoßtest nach Plewa und Müller (1999). Oben befindet sich die Anfangsverteilung, mittig sind die passiven Skalare zum Zeitpunkt $t = 1$ dargestellt. Unten befindet sich die Abweichung der aufsummierten Häufigkeiten zu 1, ebenfalls zum Zeitpunkt $t = 1$.

vorliegt. Im untersten Plot ist die Abweichung $\Delta_{\Sigma} = 1 - \sum_{k=1}^3 X_k$ dargestellt. Diese liegt durchgängig in der Größenordnung 10^{-14} innerhalb des numerischen Rauschens. Die Zusatzbedingung des Verfahrens nach Gl. 2.14 wird damit bestätigt.

Mit Entwicklung primordialer Chemie

Test für: Fosite, KROME, chemische Kühlung/Heizung, OdeVec

Der chemische Sod Test wird in Grassi u. a. (2014) beschrieben. Dazu wird das primordiale Netzwerk ohne Deuterium mit dem Namen `react_primordial3` verwendet, welches aus 9 Spezies und 27 Reaktionen besteht. Die Chemie entwickelt sich innerhalb des Stoßes und kann über die Energiegleichung 2.11 rückkoppeln. Der Test wird einmal mit und einmal ohne die Rückkopplung der Kühlung durchgeführt. Im Falle vorhandener Kühlung wurden dabei die Werte "H2" und "ATOMIC" an den Schalter `-cooling` in KROME übergeben. Der Test wird auf Grund der Verbindung zu KROME in cgs-Einheiten überführt. Zudem wird als Anfangsbedingung eine Temperatur von jeweils gut 1000 K vorgegeben. Eine Übersicht der Simulationsparameter und insbesondere zu den Anfangswerten der chemischen Spezies befindet sich in Tab. 3.5.

Die Ergebnisse sind in Abb. 3.15 dargestellt. Die angelegte Kühlung hat einen deutlichen Einfluss auf den sich entwickelnden Stoß und kann unter anderem mit Grassi u. a. (2014) oder Ziegler (2016) verglichen werden. Die Funktionsweise dieses Testes ist insbesondere deswegen erwähnenswert, da er einen Großteil der Module, welche die Chemie betreffen und neu hinzugefügt wurden im Zusammenspiel testet.

Tabelle 3.5.: Anfangsbedingungen für den Sod Stoßtest nach Grassi u. a. (2014)

Anfangsdichte	$\rho_l(x \leq 0,5 \text{ pc})$	10^{-20} g/cm^3
	$\rho_r(x > 0,5 \text{ pc})$	$0,125 \cdot 10^{-20} \text{ g/cm}^3$
Anfangstemperatur	$T_l(x \leq 0,5 \text{ pc})$	$1,4 \cdot 10^3 \text{ K}$
	$T_r(x > 0,5 \text{ pc})$	$1,2 \cdot 10^3 \text{ K}$
Anfangsgeschwindigkeit	v	$0,0 \text{ cm/s}$
Atomarer Wasserstoff	X_{H}	$0,756 \text{ 15}$
Ionisierter Wasserstoff	X_{H^+}	$4,464 \text{ 06} \cdot 10^{-8}$
Molekularer Wasserstoff	X_{H_2}	$1,5123 \cdot 10^{-6}$
Elektronen	X_{E}	$4,464 \text{ 06} \cdot 10^{-8}$
Helium	X_{He}	$0,243 \text{ 75}$
Andere Spezies	X_{sonstige}	$0,0$
Simulationszeit	$t_{\text{sim}} / \text{a}$	$2,45 \cdot 10^4$
Auflösung	N	1024
Rechengebiet	L_x	$[0, 1] \text{ pc}$

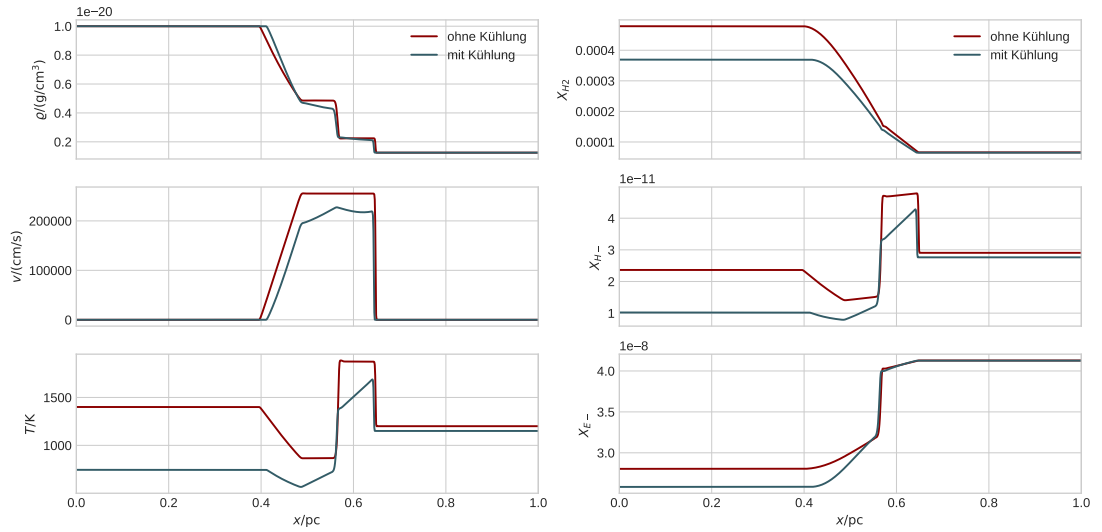


Abbildung 3.15.: Sod Stoßtest nach Grassi u. a. (2014). Links werden aktive, rechts passive Variablen nach einer Zeit von $t = 2,45 \cdot 10^4 \text{ a}$ dargestellt.

Tabelle 3.6.: Anfangsbedingungen für den Sod Stoßtest bei hohen Dichten.

Anfangsdichte	$\rho_l(x \leq 0,5 \text{ au})$	10^{-8} g/cm^3
	$\rho_r(x > 0,5 \text{ au})$	$0,125 \cdot 10^{-8} \text{ g/cm}^3$
Anfangstemperatur	$T_l(x \leq 0,5 \text{ au})$	$2,0 \cdot 10^3 \text{ K}$
	$T_r(x > 0,5 \text{ au})$	$0,8 \cdot 10^3 \text{ K}$
Anfangsgeschwindigkeit	v	$0,0 \text{ cm/s}$
Atomarer Wasserstoff	X_{H}	$0,756 \text{ 15}$
Molekularer Wasserstoff	X_{H_2}	$1,5123 \cdot 10^{-6}$
Helium	X_{He}	$0,243 \text{ 75}$
Simulationszeit	t_{sim}	$0,5 \text{ a}$
Auflösung	N	512
Rechengebiet	L_x	$[0, 1] \text{ au}$

Chemie bei hohen Dichten

Test für: Fosite, KROME, OdeVec, chemische Kühlung/Heizung, Gleichgewicht- und Nichtgleichgewichtslösung

Bei dieser Variante des Sod-Tests soll der Gleichgewichtslöser Verwendung finden. Dazu werden die in späteren Simulationen kürzesten Längen- und Zeitskalen im Bereich von Astronomischen Einheiten und Jahren betrachtet. Das Netzwerk wird auf die drei Spezies X_{H} , X_{H_2} und X_{He} reduziert (*react_primordial5*) und die Betrachtung ausschließlich auf Dreikörperstöße nach (Martin u. a. 1996) und (Forrey 2013) gerichtet (vgl. Gl. 2.25). Die Dichte wird gerade so gesetzt, dass die Anzahldichte $n_c = n_{\text{H}} + 2n_{\text{H}_2}$ um den Bereich $\sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ liegt, ab dem der Gleichgewichtslöser zur Verwendung kommt (vgl. Abschnitt 3.3.2). Den Schaltern **-cooling** und **-heating** wird zudem der Schalter "CHEM" übergeben, welcher für den Nichtgleichgewichtslöser die Dissoziationsenergie einbezieht. Im Fall des Gleichgewichtslösers ist diese ohnehin im Modell enthalten.

Da die Anzahldichten nicht weit über den $\sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ liegen, kann der gleiche Test auch ausschließlich mit dem BDF-Verfahren gerechnet werden, was einen direkten Vergleich ermöglicht. Die beiden Ergebnisse sind nach einer Laufzeit von $t = 0,25 \text{ a}$ in Abb. 3.16 zu sehen. Es zeigt sich dabei, dass beide Simulationen nahezu identische Ergebnisse liefern, bei ansonsten vollständig unterschiedlichen Lösungsverfahren. Während der Gleichgewichtslöser ein Nullstellenverfahren verwendet (vgl. 3.3.2), basiert der Nichtgleichgewichtslöser auf dem BDF-Verfahren (vgl. 3.2.1). Nur in den Stoßfronten zeigen sich kleine Unterschiede. Dies ist in sofern plausibel, als das in den Stoßfronten in der Hydrodynamik Veränderungen auf den kleinsten Zeitskalen stattfinden. Es zeigt sich, dass es in der heißeren linken Region zu einer starken Dissoziation kommt. Zudem wird für den Fall mit Gleichgewichtslöser deutlich, dass im Übergangsbereich bei $n_c = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ kein künstlicher Sprung oder dergleichen, existiert. Obwohl das Netzwerk klein und die Anzahldichten nicht zu hoch sind, wird zudem ein deutlicher Geschwindigkeitsvorteil deutlich. So ist die Laufzeit mit Gleichgewichtslöser weniger als halb so kurz.

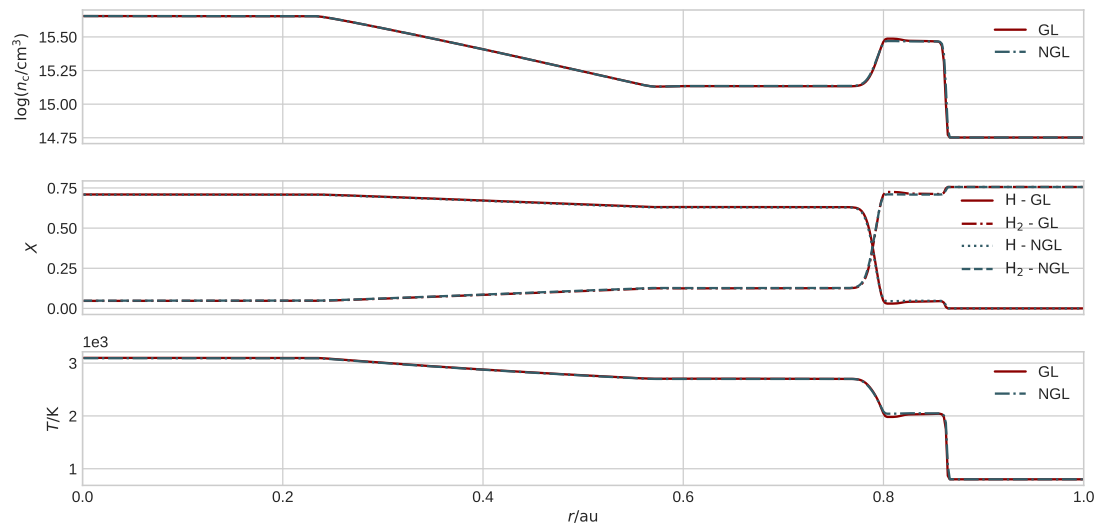


Abbildung 3.16.: Sod-Stoßtest nach $t = 0,25$ a im Gleichgewichtsregime, einmal unter Hinzunahme des Gleichgewichtslösers (GL) und einmal ausschließlich unter Verwendung vom BDF-Verfahren (NGL).

4. Numerische Einflüsse auf Fragmentation

In diesem Kapitel werden numerische Einflüsse auf Fragmentation in selbstgravitierenden Scheiben besprochen. Es werden Simulationen bei höchsten Auflösungen in lokaler Näherung, dem Shearingsheet, durchgeführt. Wesentliche Ergebnisse sind, dass 1. falsch gewählte limitierende Funktionen zu einer Übersteilung der Gradienten und somit zu fehlerhaften Simulationen oder Fragmentationsverhalten führen können, sowie 2. das Erreichen eines konvergierten Verhaltens durch den Vergleich der Spektren wichtiger physikalischer Größen bei Veränderung der numerischen Rahmenbedingungen (Limiter und Auflösung) bis zu den für Selbstgravitation kritischen Längen H und L_{krit} definiert werden kann. Bei höchsten Auflösungen, deren Simulation nahezu konvergiert sind wird ein $\beta_{\text{krit}} \approx 10$ beobachtet. Die Ergebnisse dieses Kapitels sind in Klee u. a. (2017) und Klee u. a. (2019) veröffentlicht worden.

4.1. Das Problem der Nichtkonvergenz

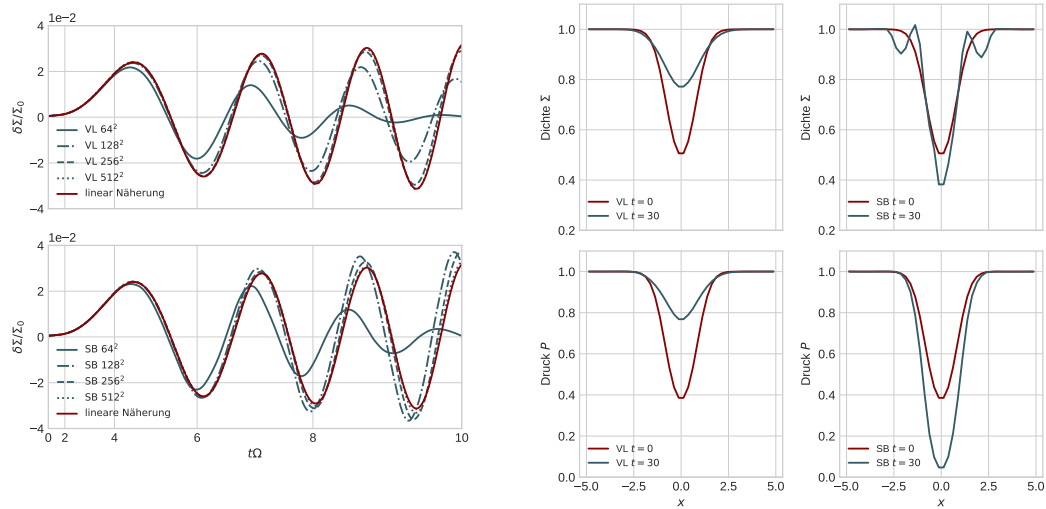
Ein in den letzten Jahren vielbeachtetes Problem ist eine scheinbare Nichtkonvergenz in gravitoturbulenten Akkretionsscheiben (Meru und Bate 2011; Brucy und Hennebelle 2021). Bei zunehmend höheren Auflösungen kommt es in den Simulationen auch bei immer langsamerer Kühlung zu Fragmentation (vgl. Abschnitt 2.1.2). Es ist nicht abschließend geklärt, ob ein tatsächlich physikalischer Grund hinter der Nichtkonvergenz steht oder ein rein numerischer.

Young und Clarke (2016) beschreiben neben einem direkten, einen quasi-statischen Kollaps, welcher bei größeren Kühlzeitskalen als der von Gammie (2001) gefundenen Obergrenze $\beta_{\text{krit}} \lesssim 3$ liegt. In ihrer Theorie gehen sie jedoch davon aus, dass eine vertikale Höhenstruktur vorliegt, welche nicht ein Vorhandensein von Fragmentation bei höheren Auflösungen in zweidimensionalen Simulationen erklären kann (Meru und Bate 2012; Paardekooper 2012). Des Weiteren hat Paardekooper (2012) gezeigt, dass der Fragmentationsprozess einer stochastische Natur unterliegt. Dazu hat er in der lokalen Approximation mehrere oder längere Simulationen mit gleichen Anfangsparametern, aber zufälliger initialen subsonischen Geschwindigkeitsverteilungen, ausgeführt. Auf numerischer Seite gibt es zahlreiche Effekte, welche unter Umständen stark von dem verwendeten Verfahren abhängen können (Lodato und Clarke 2011; Paardekooper u. a. 2011; Meru und Bate 2011; Rice u. a. 2014). Grundsätzlich wurde gezeigt, dass die künstliche Viskosität, welche zwangsläufig und je nach verwendetem Verfahren eingeführt wird, in Simulationen eine wichtige Rolle spielen kann (Meru und Bate 2012; Klee u. a. 2017; Deng u. a. 2017; Rice 2016). Die einfachste Auslegung ist dabei, dass numerische Viskosität zu Energiedissipation führt und somit das Gas künstlich aufheizt. In der Folge würde ein Fragmentieren verhindert (Meru und Bate 2011). Tatsächlich zeigt sich jedoch,

dass die künstliche Heizung nicht ausreichen würde, um das Fragmentationsverhalten vollständig zu beschreiben und, dass abhängig vom Verfahren die Neigung zu einer erhöhten Fragmentation auch durch falsch eingestellte künstliche Viskosität hervorgerufen werden kann (Meru und Bate 2012; Rice u. a. 2012; Rice u. a. 2014; Deng u. a. 2017).

4.1.1. Übersteilung durch limitierende Funktionen

In Klee u. a. (2017) wird auf einen numerischen Effekt hingewiesen, welcher durch limitierende Funktionen (Limiter) hervorgerufen wird und zu einer Übersteilung bei flachen Gradienten führt. Der Effekt wurde in Bezug auf Gravitoturbulenz erstmals in Klee (2016) anhand einer sich entwickelnden Dichtewelle im Shearingsheet beobachtet, welche ab einer gewissen Auflösung und, je nach verwendetem Limiter, qualitativ unterschiedliche Verläufe zeigen kann. Eine kleine initiale Übersteilung der Amplitude in der Massendichte wird hier über lange Zeiträume verstärkt und insbesondere durch gravitative Effekte skaliert. In Klee u. a. (2019) wird zudem ein stationärer Vortex als zusätzlicher Test aufgegriffen. Beide Tests sind in Abb. 4.1 dargestellt. Sie sollen motivieren, dass die



(a) Test zur zeitlichen linearen Entwicklung der Amplitude einer Dichtewelle. Beschrieben in Klee u. a. (2017). (b) Entwicklung eines stationären Vortex. Beschrieben in Klee u. a. (2019).

Abbildung 4.1.: Zwei Tests zur Demonstration von Übersteilung. Beide zeigen letzteres Phänomen bei dem Superbee-Limiter (SB), wohingegen der Vanleer-Limiter (VL) stetig konvergiert.

Übersteilung sowohl zu einer Überschätzung als auch einer Unterschätzung der physikalischen Variablen führen kann. Wo genau die Effekte dominieren ist schwer vorherzusagen, allerdings zeigen die Tests deutlich, dass der Superbee Limiter (Roe und Baines 1982) zu unrealistischen Lösungen tendiert, während Vanleer (Van Leer 1974) bei zunehmender Auflösung besser konvergiert. Zudem wird in Klee u. a. (2017) beschrieben, dass sich kleine

initiale Fehler in der Dichte mit der dynamischen Zeitskala und durch Selbstgravitation vergrößern. Hirsch (2007) bietet eine Übersicht verschiedener Limiter und geht dort auch darauf ein, dass jene mit unstetigen Ableitungen, wie es bei Superbee im Gegensatz zu Vanleer der Fall ist, schlechtes Konvergenzverhalten aufweisen. Die Frage die sich dabei stellt ist, ob die Fehler in den Testfällen in konsistenter Weise ebenso Fehler in sich nichtlinear entwickelnden Simulationen aufweisen.

4.1.2. Konvergenzverhalten von Gravitoturbulenz

Tabelle 4.1.: *Setup zu Simulationen im Shearingsheet. Im Einzelfall kann es Abweichungen geben, welche im Text erläutert werden.*

Physik	Kühlungsparameter β	3 – 20
	Winkelgeschwindigkeit Ω	1.0
	Adiabatenexponent γ	2.0
	Simulationszeit $T_{\text{sim}}/\Omega^{-1}$	100 – 1100 (mit Ausnahmen)
	Anfangsdichte Σ_0	1.0
	Anfangsdruck P	$\frac{(2.5\pi G)^2 \Sigma^3}{\gamma \Omega^2}$ ($\hat{=}$ Q=1)
	Residualgeschwindigkeiten	$v'_x, v'_y < 0.05 c_s$ (zufällig verteilt)
Numerik	Auflösung N_x, N_y	512, 1024, 2048, 4096, 8192
	Gitter	CARTESIAN
	Ausdehnung $/L_{\text{krit}}$	320×320
	Limiter	VANLEER, SUPERBEE
	Zeitschrittverfahren	DORMAND-PRINCE
	Randbedingungen	PERIODIC & SHEARING

Ziel ist es das Fragmentationsverhalten bei unterschiedlichen Limitern und Auflösungen zu untersuchen und damit zu verstehen unter welchen Rahmenbedingungen das sich Formen von gravitativ gebunden Objekten vonstatten geht. Dazu werden Simulationen bei zunehmend höheren Auflösungen mit den beiden in Abschnitt 4.1.1 diskutierten Limitern, Vanleer und Superbee, in der lokalen Näherung (Abschnitt 3.1.2) durchgeführt. Es wird zudem die parametrisierte Kühlung aus Gammie (2001) verwendet und der Parameter β variiert. Das vollständige Setup für die Simulationen ist in Tab. 4.1 zusammengefasst. Die durchgeführten Simulationen stammen aus den Veröffentlichungen Klee u. a. (2017) und Klee u. a. (2019). Auflösungen von $N \leq 2048$ stammen dabei aus der ersten, die höheren Auflösungen aus der zweiten Publikation. Zwischen diesen wurden einige Optimierungen vorgenommen, welche in Abschnitt 3.1.2 erläutert wurden und einen höheren Vektorisierungsgrad bei gleichzeitiger Parallelisierung erlauben. Hinzu kommt, dass die Anfangsbedingungen anders gewählt sind. Statt konstanter Anfangsdichte und Anfangsdruck mit einem zufälligen subsonischen Geschwindigkeitsfeld (wie ursprünglich bei Gammie 2001), werden bei den Simulationen mit $N \geq 4096$ nichtfragmentierte, aber vollständig entwickelte Simulationen niedrigerer Auflösungen auf feinere Gittern interpoliert und als Anfangsbedingungen verwendet. Der Grund dafür liegt in dem Initialisierungsprozess

von Gravitoturbulenz im Shearingsheet. Dort können künstliche Überdichten während der Initialisierung entstehen, welche die Bildung von Fragmenten zur Folge haben, im weiteren Verlauf bestehen bleiben und so die Simulationsergebnisse gegebenenfalls verfälschen. Ein weiterer Unterschied ist die Dauer der Simulationen, welche für bei den nichtfragmentierenden Fall zwischen $(100-1100)\Omega^{-1}$ liegen. Die große Variabilität in der obereren Grenze liegt darin begründet, dass dort auch ein mögliches Langzeitverhalten oder stochastische Fragmentation einbezogen werden sollen. Die detaillierten Längen sind in Klee u. a. (2017) und Klee u. a. (2019) beschrieben.

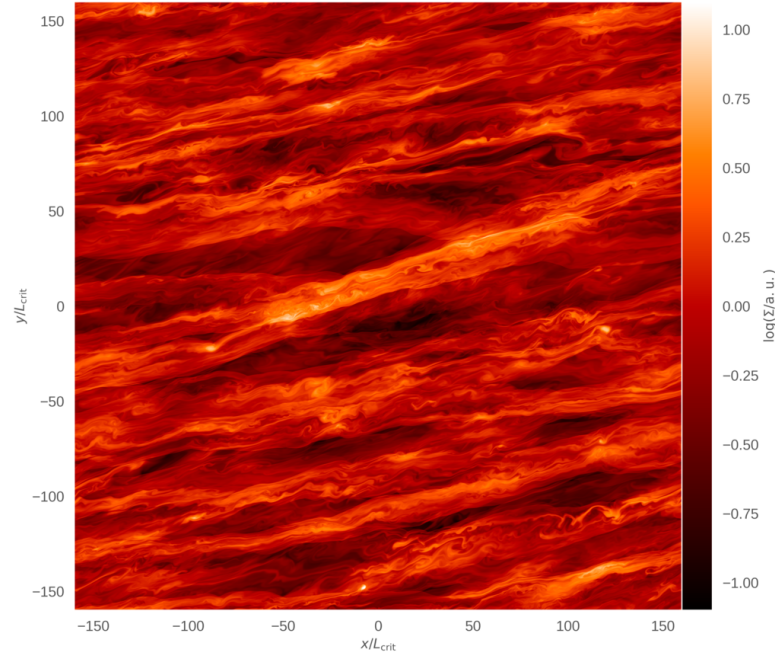


Abbildung 4.2.: *Gravitoturbulenz bei einer Auflösung von 8192^2 mit Vanleer-Limiter und $\beta = 10$. Später fragmentiert diese Simulation.*

In Abb. 4.2 und Abb. 4.3 sind Farbkarten der Dichte zu Simulationen bei höchsten Auflösungen ($N = 8192$) zu einem Zeitpunkt abgebildet, in der sich noch keine möglichen Klumpen gebildet haben. Das physikalische Setup ist dabei weitestgehend bei einem Kühlungsparameter von $\beta = 10$ identisch, unterscheidet sich jedoch durch die limitierenden Funktionen, Vanleer und Superbee. Die kleinen Strukturen sind mit dem Superbee Limiter wesentlich detailreicher, was auch für niedrigere Auflösungen beobachtet werden kann und in Klee u. a. (2017) hervorgehoben wird. Hinzu kommen bei Auflösungen $N \geq 4096$ und für Simulationen mit Superbee zahlreiche kleine Dichteminima entlang der x -Achse bei $y \approx 0$ (Abb. 4.3), welche ebenfalls im Druck zu sehen sind. Diese numerischen Artefakte lassen sich teilweise durch den in Abb. 4.1b präsentierten Vortextest erklären, wo Druck und Dichte ebenfalls mit Superbee unterschätzt werden. Warum die Fehler um die Mittelebene entstehen ist nicht abschließend geklärt, ein wesentlicher Effekt könnte hier aber sein, dass die Geschwindigkeiten und resultierende Fargoverschiebung

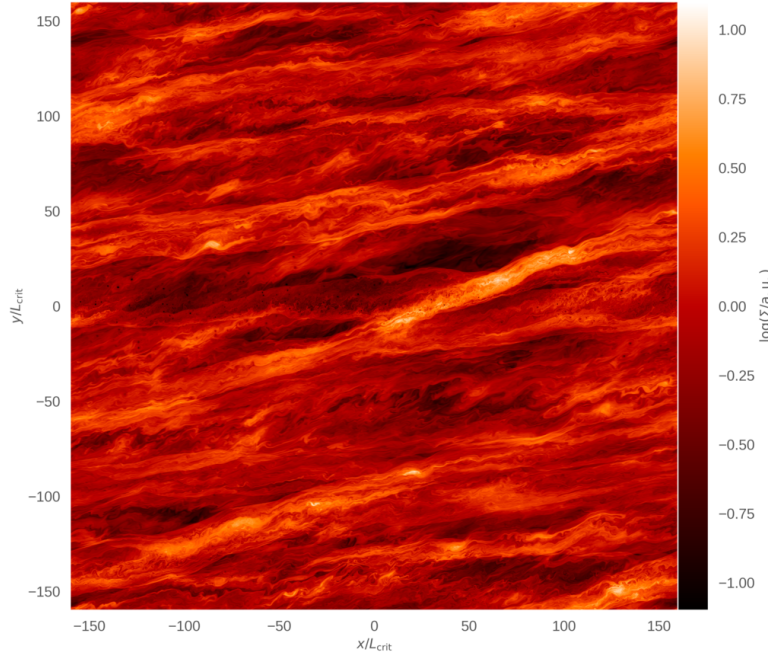


Abbildung 4.3.: Gravitoturbulenz bei einer Auflösung von 8192^2 mit Superbee-Limiter und $\beta = 10$.

abseits von $y \approx 0$ die Entwicklung dieser Erscheinungen stört. Diese entspricht in der lokalen Näherung dem konstanten Offset in der Hintergrundgeschwindigkeit aus Gl. 3.4, $v_x = \frac{3}{2}\Omega y$, verschwindet somit bei $y = 0$ und wird entlang der y -Achse bis zum Rand größer. Schlussendlich zeigen diese Artefakte unabhängig von Fragmentationsverhalten, dass der Superbee-Limiter zu ungewollten numerischen Effekten führen kann und tendenziell trotz eventuell schnellerer Konvergenz ein schlechteres Konvergenzverhalten insgesamt beinhaltet. Abb. 4.4 zeigt ebenfalls eine Simulation mit $N = 8192$ und Vanleer-Limiter, hier jedoch mit einer Kühlung von $\beta = 5$. Es zeigt sich deutliche Fragmentation, welche Stern- und Planetenentstehung zur Folge haben kann.

In Abb. 4.5 ist das resultierende Fragmentationsverhalten für alle Simulationen zusammengefasst. Für große Auflösungen zeichnet sich ein kritischer Kühlungsparameter von $\beta_{\text{krit}} \approx 10$ für beide Limiter ab. Während bei niedrigen Auflösungen weniger eindeutige Ergebnisse resultieren. Betrachtet man nur die Auflösungen $N \leq 2048$ so wäre unter Betrachtung der Tests in Abschnitt 4.1.1 eine naheliegende Interpretation, dass der Superbee-Limiter zu einer künstlichen Fragmentation neigt, während Vanleer diese vermeidet wie sie in Klee u. a. (2017) vorgenommen wurde. Nimmt man die höheren Auflösungen hinzu wird das Bild uneindeutiger. Beide Limiter zeigen dort ein ähnliches Verhalten bzgl. Fragmentation, wobei bei höchsten Auflösungen sogar der Vanleer Limiter bei $\beta = 10$ fragmentiert während für Superbee keine Fragmentation zu sehen ist. Auch quantitativ gibt es Unterschiede in der Fragmentation. Während die Simulationen für $\beta \lesssim 5$ wie in Abb. 4.4 vollständig fragmentieren, entstehen für höhere β nur vereinzelt

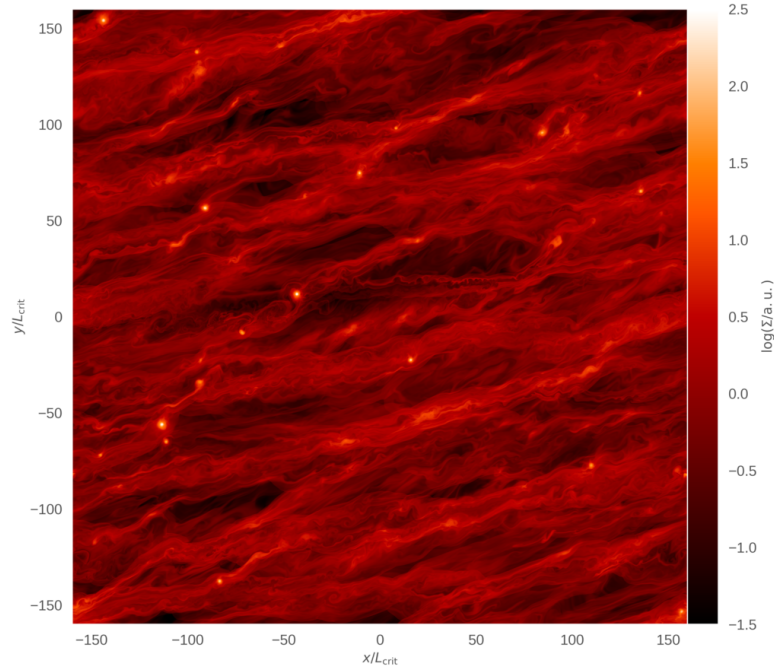


Abbildung 4.4.: *Fragmentation bei einer Auflösung von 8192 mit Vanleer Limiter und $\beta = 5$. Dichteerhöhungen entsprechen Kandidaten für Sterne oder Planeten.*

Fragmente, welche teilweise sogar wieder nach einiger Zeit zerrissen werden können. Hier ist insbesondere die Simulation bei $N = 4096$ und Vanleer mit $\beta = 10$ erwähnenswert, bei der sich ein Fragment bei ca. $75 \Omega^{-1}$ bildet, welches vor dem Ende des Laufes bei $200 \Omega^{-1}$ wieder aufgelöst ist. Ebenso ist mit Superbee ein Fragment bei gleicher Auflösung und β kurz vor Ende des Laufes entstanden. Hier wurde die Simulation nochmal um $50 \Omega^{-1}$ erweitert, um sicherzustellen, dass die Dichteerhöhung für einen längeren Zeitraum stabil ist. Die fragmentierte Simulation bei $\beta = 10$ und Vanleer Limitierung bei der höchsten Auflösung zeigt einen Dichtepunkt für mind. $40 \Omega^{-1}$, welcher jedoch nur $20 - 30$ mal der Hintergrunddichte entspricht, während sonst häufig das hundertfache erreicht wird.

Problematisch bei diesen Betrachtungen ist es eine klare Definition für konvergiertes Verhalten zu finden, weil das Fragmentationskriterium einen plausiblen aber etwas willkürlichen Schwellwert enthält. In aktuellen Studien wird dieses wie im obigen Abschnitt bei immer höheren Auflösungen untersucht. Wenn sich das Fragmentationsverhalten nicht mehr ändert, wird Konvergenz angenommen (Deng u. a. 2017; Meru und Bate 2012). Dies kann jedoch nicht sicherstellen, dass bei noch höheren Auflösungen oder Simulationszeiten wieder Fragmentation eintritt. Daher wurde in Klee u. a. (2019) das Spektrum der für den Fragmentationsprozess relevanten physikalischen Größen hinzugezogen, um bessere Aussagen über die Konvergenz der numerischen Simulationen machen zu können.

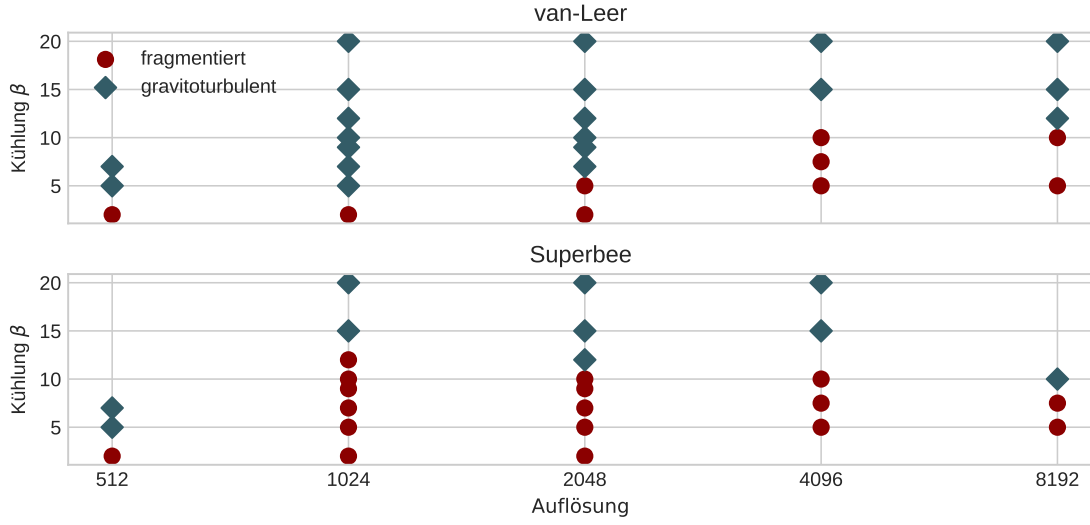


Abbildung 4.5.: Übersicht zum Fragmentationsverhalten bei unterschiedlichen Limiterfunktionen (oben und unten), Auflösungen (x -Achse) und Kühlungsgeschwindigkeit (y -Achse). Simulationen bis zu einer Auflösung von 2048 stammen aus Klee u. a. (2017), höhere Auflösungen aus Klee u. a. (2019).

4.1.3. Untersuchung der Spektren

In Abschnitt 2.1.2 wird beschrieben, dass nur ein bestimmter Längenbereich $L_J < L < L_{\text{krit}}$ durch Gravitoturbulenz instabil wird. Dieser Bereich muss also aufgelöst sein, um Fragmentation beobachten zu können. Gammie (2001) verwendete bei einer Ausdehnung des Feldes von $320 L_{\text{krit}}$ eine Auflösung von $N = 512$, löst also mit $1,6 L_{\text{krit}}$ auf. Damit kann der lokale Kollaps simuliert werden, was jedoch nicht bedeutet, dass das Verhalten auf den kleinen Skalen, bei denen sich L_{krit} befindet, richtig dargestellt wird. Es wurde schon früh erkannt, dass eine minimale Anzahl an Zellen nötig ist, mit der die in Gl. 2.6 beschriebene kritische Länge aufgelöst sein sollte (Nelson 2006). Auch nach der Theorie von Toomre (1964) gibt es einen klaren Längenbereich (vgl. Gl. 2.6), welcher gravitativ instabil werden kann. In ebendiesem Bereich würde es letztendlich auch zu Fragmentation kommen können. Daher müssen die Spektren der turbulenten Kaskade von physikalischen Größen, welche für den Fragmentationsprozess eine Rolle spielen, bis zu den genannten Längenskalen richtig dargestellt werden.

In Abb. 4.6 sind die Spektren über die Wellenzahlen für die Dichte und den Druck für verschiedene Limiter und Auflösungen bei einem Kühlungsparameter von $\beta = 10$ dargestellt. Die beiden Größen sind von Interesse, da die Dichte als ein durch die Gravitationskraft kontrahierender Term und der Druck als Term für eine expansive Kraft gesehen werden kann. Anstatt Konvergenz nur über das Fragmentationsverhalten zu bestimmen, werden die Spektren relevanter Größen in (noch) nicht fragmentierten Simulationen bei $\beta = 10$ untersucht. Die Fourier-transformierten Werte spiegeln dabei periodische Strukturen entlang x und y wider und werden über den in Abschnitt 3.1.2 eingeführten Wellenvektor

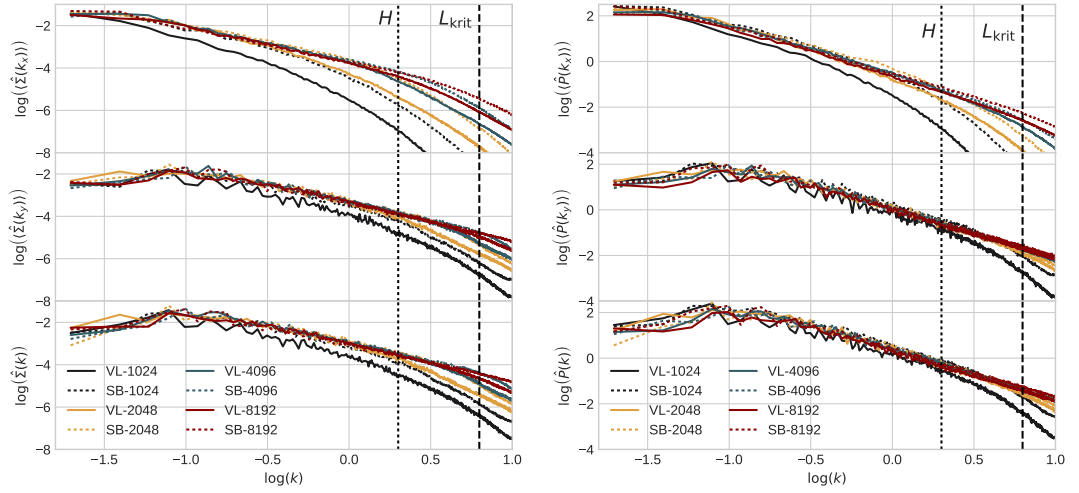


Abbildung 4.6.: *Spektren von Dichte (links) und Druck (rechts) bei unterschiedlichen Auflösungen und Limitern ($\beta = 10$). Es werden jeweils die Spektren in x (oben) und y -Dimension (mittig) sowie entlang des Radius k (unten) dargestellt.*

aufgetragen. Die physikalischen Größen werden für die Komponenten k_x , k_y des Wellenvektors \mathbf{k} , sowie der Gesamtbetrag k dargestellt. Dazu wird ein Zustand verwendet bei dem noch keine Fragmentation sichtbar ist, falls diese zu einem späteren Zeitpunkt eintreten sollte (vgl. Abb. 4.5). Die doppelt logarithmisch dargestellten Graphen zeigen für große Wellenzahlen k eine deutliche Annäherung an einen linearen Zusammenhang, was auf Potenzgesetze schließen lässt. Zudem sind die den Längenskalen H und L_{krit} im Fourierraum zuordenbaren Wellenzahlen hervorgehoben. Nimmt man L_{krit} als Maßgabe, so kann man für die x -Komponente der Dichte auch bei den höchsten Auflösungen nur von einer nahezu konvergierten Simulation sprechen. Es wird aber ersichtlich, dass, um ein annähernd konvergiertes Spektrum für beide Limiterfunktionen zu erreichen die Auflösungen von ≥ 4096 nötig sind. Der Druck P scheint dabei etwas schneller zu konvergieren als die Dichte Σ . Für beide Größen kann bei höheren Auflösungen jedoch bis auf die Skalenhöhe H von Konvergenz gesprochen werden. Bei Auflösungen $N = 2048$ ist auch dies auf den kleinen Skalen nicht gegeben. Eine wichtige Beobachtung ist dabei, dass mit einem großen Unterschied der Spektren bei L_{krit} im Vergleich mit Abb. 4.5 auch ein großer Unterschied im Fragmentationsverhalten einherzugehen scheint.

In Abb. 4.7 wird das Spektrum für die in Turbulenzen häufig betrachtete kinetischen Energie dargestellt. Im Unterschied zu den Größen aus Abb. 4.6 werden hier alle physikalischen Variablen entlang eines Radius' k im Fourierraum aufsummiert. Dies wird für die kinetische Energie der x - und y -Komponente, sowie beider Komponenten gemacht. Auch hier ist nahezu Konvergenz bei höchsten Auflösungen für die entsprechenden Längenskalen zu erkennen. In der doppelt logarithmisch aufgetragenen Abbildung zeigt sich, dass das Spektrum über weite Teile mit $k^{-5/3}$ abfällt. Dies ist grundsätzlich für Turbulenz in zwei Dimensionen zu erwarten (Kraichnan 1967; Boffetta und Ecke 2012), wobei die

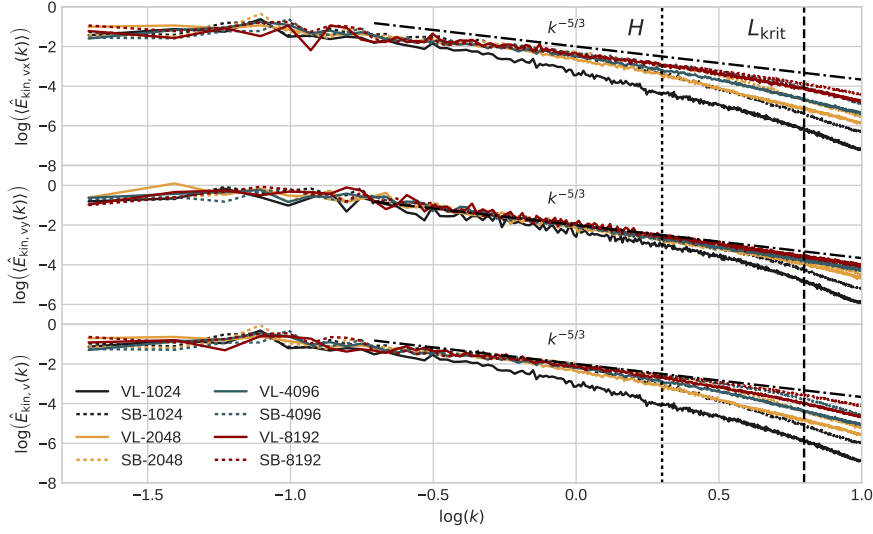


Abbildung 4.7.: Kinetisches Energiespektrum bei unterschiedliche Auflösungen und Limitern.

in Kraichnan (1967) dargestellte Abhängigkeit jedoch für isotrope und inkompressible Fluide gilt. Die erste Annahme wird in der Regel als erfüllt angenommen, da auch Fluide, welche auf großen Skalen nicht isotrop sind in immer kleinere Wirbel zerfallen und ab einer ausreichend kleinen Größenordnung Isotropie wieder erfüllen. Dies ist eine grundsätzliche Annahme, welche bereits von Kolmogorov (1941) in Bezug auf dreidimensionale Turbulenz gemacht wurde. In Abb. 4.6 und Abb. 4.7 ist jedoch zu erkennen, dass die unterschiedlichen Richtungskomponenten deutlich voneinander abweichen, Isotropie also nicht gegeben ist. Auch die Inkompressibilität kann nicht als vorhanden angenommen werden. Ganz im Gegenteil ist ein wesentlicher Teil der Turbulenz die Stoßheizung. Gerade für kleine k macht sich dies auch in den Spektren bemerkbar. Umso erstaunlicher ist es, dass das $k^{-5/3}$ -Gesetz so gut abgebildet wird.

Zudem sollte erwähnt werden, dass es wesentliche Unterschiede zwischen zwei- und dreidimensionaler rein hydrodynamischer Turbulenz gibt. In zwei Dimensionen sollte sich hier auf sehr kleinen Skalen ein k^{-3} -Gesetz einstellen (Boffetta und Ecke 2012). Des Weiteren ist die $k^{-5/3}$ -Kaskade in drei Dimensionen eine Zerfallskaskade, in zwei Dimensionen jedoch invers dazu, womit die Energie in anderer Richtung transportiert wird. Grundsätzlich sollten die Größenordnungen auf denen der dominierende gravitative Teil der Turbulenz stattfindet jedoch wesentlich größer sein als jener der Hydrodynamik. Dies wird auch dadurch bestätigt, dass wir das $k^{-5/3}$ -Gesetz hinunter bis auf die für Fragmentation relevante Längenskala L_{krit} verfolgen können, ohne dass ein k^{-3} Zusammenhang zu beobachten ist. Hinzu kommt, dass bis zur Skalenhöhe H die Annahme einer zweidimensionalen Kaskade selbst für die Hydrodynamik bestätigt ist, da bis dort die Strukturen entlang der Zentralebene größer als die vertikale Ausrichtung der Scheibe und damit auf zwei Dimensionen eingeschränkt sind.

Ob für den darunterliegenden Spektralbereich trotzdem Unterschiede durch die Hydro-

dynamik auftreten können, kann letztendlich nur mit dreidimensionalen Simulationen untersucht werden. Eine besondere Schwierigkeit hierbei ist, dass diese, sofern sie nach dem hier präsentierten Kriterium konvergent sein sollen, auch in drei Dimensionen ähnliche Auflösungen in x- und y-Richtung erreichen müssten, was mit enormen Rechenkapazitäten einhergehen würde. Maximale Auflösungen bewegen sich hier aktuell in horizontaler Richtung bei $N_{x,y} = 1024$ (Booth und Clarke 2019; Baehr u. a. 2017).

4.2. Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde das Problem der Nichtkonvergenz in Gravitoturbulenz erläutert und untersucht. Mit Hilfe lokaler Shearingsheet Simulationen konnte der numerische Effekt der Übersteilung zunächst innerhalb von isolierten Tests demonstriert werden indem zwei Limiter, Superbee und Vanleer, miteinander verglichen wurden. Nachfolgend wurde auch der Einfluss auf nicht-lineare gravitoturbulente Systeme bei zunehmend höheren Auflösungen beobachtet. Bei höchsten Auflösungen gab es dabei trotz numerischer Fehler für Superbee eine Annäherung im Fragmentationsverhalten zwischen den Limitern. Gleichzeitig wurden die Spektren von Dichte, Druck und kinetischer Energie bis auf die kritische Länge L_{krit} verglichen, um für ein zusätzliches unabhängiges Entscheidungskriterium für konvergente Gravitoturbulenz hinzugezogen werden zu können. Dabei wurde eine zunehmende Ähnlichkeit im Verhalten der Fragmentation bei gleichzeitiger Konvergenz im Spektrum beobachtet. Bei höchsten Auflösungen wurde eine kritische Kühlzeitskala nahe $\beta_{\text{krit}} \approx 10$ festgestellt.

5. Wasserstoffdissoziation in Gravitoturbulenz

In diesem Kapitel werden Simulationen unter Betrachtung der energetischen Wechselwirkung von Wasserstoffdissoziation durch Dreikörperstöße in Gravitoturbulenz untersucht. Der Einfluss der chemischen Rückkopplung führt dabei zu einem Grenzyklus. Dieser besteht aus einer relativ kurzen explosiven Phase der Dissoziation und Fragmentation mit einer anschließenden längeren ruhigen Phase. In letzterer findet eine Umwandlung hin zu molekularem Wasserstoff statt und eine dadurch erzeugte Heizung bewirkt eine abgeschwächte Gravitoturbulenz. Der Prozess beginnt von neuem sobald der Wasserstoff aufgebraucht ist. Die Simulationen werden zunächst in lokaler Näherung durchgeführt, um ein detailliertes isoliertes Bild zu erhalten und später in globalen Simulationen bestätigt, welche nachfolgend auf grundsätzliche Eigenschaften wie der Akkretionsrate oder der Beobachtbarkeit hin untersucht werden.

5.1. Selbstgravitierende Scheiben im frühen Universum

In diesem Kapitel soll die Frage geklärt werden, welchen Einfluss die Dissoziationsenergie von Wasserstoff in einem gravitoturbulenten Prozess haben kann. Greif u. a. (2012) beschreiben in ihren Simulationen sich ausbildende Keplersch selbstgravitierende Scheiben um die ersten Sterne, welche anschließend fragmentieren (Greif 2015; Bromm 2013). Als entscheidender Mechanismus wird dabei die Dissoziationsenergie mit $\epsilon_{\text{diss}} = 4,48 \text{ eV}$ ausgemacht, um atomaren Wasserstoff zu erzeugen. Auch wenn dies in Greif (2014) relativiert wird, da der Prozess eventuell überschätzt wurde, tritt durch zusätzliche H_2 -Kühlungen und unter Betrachtung vollständiger Strahlungsprozesse Fragmentation auf. Auch in Schleicher u. a. (2016) wird auf eine Wasserstoffdissoziation in primordialen, selbstgravitierenden ADs eingegangen. Dort wird gezeigt, dass um eine Zentralmasse mit $10 M_{\odot}$ in einem Abstand von $\lesssim 10 \text{ au}$ Dissoziation auftreten kann, für eine Zentralmasse von $10^4 M_{\odot}$ bei einer Entfernung von $\lesssim 1000 \text{ au}$. Dabei kommen eindimensionale Simulationen mit parametrisierter Viskosität zum Einsatz. Die tatsächliche nichtlineare Rückkopplung durch den gravitoturbulenten Vorgang nach Paczynski (1978), wie er bereits in Kapitel 4 besprochen wurde, ist dabei jedoch nicht enthalten.

In diesem Kapitel soll der Einfluss der Dissoziation in detailliertem nichtlinearem Wechselspiel mit dem gravitoturbulenten Zustand untersucht werden. Die Untersuchung des Mechanismus zwischen Gravitoturbulenz und der chemischen Rückkopplung ist auf Grund starker zu erwartender Gegenspieler interessant. Denn entstehen im Gas hohe Temperaturen, so führt dies zu der Erzeugung von atomarem Wasserstoff. Dieser Prozess bewirkt jedoch zugleich eine Kühlung. Kühlt das Gas, wird es wiederum eher gravitativ

instabil (vgl. Gl. 2.5), was einerseits die Stoßheizung antreibt und andererseits zu Fragmentation führen kann. Bei letzterer ist immer die Frage, ob durch die erhöhte Dichte molekularer Wasserstoff entsteht oder eine zusätzliche Aufheizung atomaren Wasserstoff erzeugt. Schlussendlich hängt das Verhalten dabei auch immer vom Anfangszustand der chemischen Komposition ab. So mag es sein, dass in Stoßfronten und benachbarten Gebieten in geringer örtlicher Distanz große Unterschiede herrschen. Es existieren also viele verschiedene Agonisten und Antagonisten, welche ein Wechselspiel vermuten lassen, welches ohne Simulationen nur schwer vorherzusagen ist. Des Weiteren sind selbstgravitierende ADs sowie Wasserstoff im Universum allgegenwärtig und insbesondere im frühen Universum von Interesse. Zu jener Zeit kommt Kühl- und Heizprozessen durch Wasserstoff eine besondere Rolle zu, da alternative und in späteren Zeiten dominante Kühlprozesse, vor allem durch Staub, noch nicht vorhanden sind, da das Material noch nicht prozessiert ist (vgl. Abschnitt 2.3.2).

In den nachfolgenden Abschnitten des Kapitels sollen diese Wechselwirkungen in lokalen (Abschnitt 5.2) und globalen Simulationen (Abschnitt 5.3) nachvollzogen werden. Erstere bieten den Vorteil, dass dort über viele Orbitalzeitskalen in hohen räumlichen Auflösungen gerechnet werden kann. In den globalen Modellen kann nachfolgend ein vollständigeres Bild erhalten werden, welches die Geometrie der Scheibe und globale gravitative Wechselwirkungen mit einbezieht. Dabei sollen sich die abgedeckten Parameterbereiche in den bereits oben genannten bewegen, was im Kontext von BHs eine eher geringere Masse im Bereich $\lesssim 10^5 M_\odot$ und Scheibenmassen in einer ihnen ähnlichen Größenordnung bedeutet.

5.2. Berechnungen in lokaler Näherung

Grundsätzlich ist der Simulationsaufbau so gewählt, dass zu dem bekannten Standardlauf im Shearingsheet mit parametrisierter Kühlung die Chemie und deren Rückkopplungseffekte hinzugefügt werden. In Tab. 5.1 sind die dazugehörigen Anfangsbedingungen dargestellt. Da die Kühlungen und Heizungen zusammen mit den chemischen Ratengleichungen nicht mehr dimensionslos aufgeschrieben werden können, sondern in cgs-Einheiten vorliegen, muss das Setup entsprechend angepasst werden. Die Anfangsbedingungen werden so gewählt, dass die Dichte Σ_0 bei gegebenem Abstand R_0 um ein Zentralobjekt mit Masse M_{BH} zu einer gewünschten Gleichgewichtstemperatur führt. Der Zusammenhang der letzten drei Größen mit der Dichte wird dabei über das Toomre-Kriterium $Q = 1$ (Gl. 2.5) bestimmt und ist später nur näherungsweise erfüllt. So gilt in der Regel $Q \gtrsim 1$ und es entwickelt sich eine dementsprechend abweichende Gleichgewichtstemperatur zu T_{init} . Die Wahl von R_0 und M_{BH} ist so gewählt, dass die Ausdehnung des Shearingsheets bei den betrachteten Temperaturen noch klein gegenüber R_0 selber ist. In den Simulationen soll der Einfluss der energetischen Prozesse der Dissoziation auf Gravitoturbulenz untersucht werden. Daher wird die bekannte β -Kühlung mit $\beta = 10$ angenommen in deren Hintergrund sich die Chemie entwickelt und einen energetischen Rückkopplungsprozess anstoßen kann. Für die Chemie wird ein kleines chemisches Netzwerk mit neutralem Wasserstoff (H, H_2) und Helium (He) angenommen, welches die Dissoziationsübergänge und deren Energieeintrag in Form von Dreikörperreaktionen enthält (Gl. 2.25), während

das Helium inaktiv bleibt. Die verwendeten Übergangskoeffizienten werden über KROME bereitgestellt und basieren auf Martin u. a. (1996) und Forrey (2013) (vgl. Anhang A.3). Zudem wird der in Abschnitt 3.3.2 beschriebene Gleichgewichtslöser dazugeschaltet, um auch bei hohen Dichten eine Lösung zu erlauben. Das bedeutet, dass dieser bei einer Teilchendichte $n > 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ die Lösungsberechnung übernimmt. Die konkreten Aufrufe zur Vorbereitung der Chemie sind in Anhang A.2 aufgelistet. Dabei wird für die Vektorlänge ein Wert von $n_{\text{vec}} = 512$ verwendet, was einen hohen Vektorisierungsgrad in den Simulationen verspricht. Es wird eine untere Temperaturschranke $T_{\text{min}} = 10 \text{ K}$ verwendet, welche als Sicherheitspuffer eingeführt wird, sodass auch bei starker plötzlicher Kühlung und anschließendem endlichen Hydrodynamikschritt keine negativen Drücke entstehen können. Gleichzeitig lässt sie sich physikalisch dadurch motivieren, dass bei hohen Rotverschiebungen nach dem Gesetz $T(z) = T_0(1 + z)$ eine höhere Hintergrundtemperatur in Form eines Wärmebades zu erwarten ist (z.B. de Martino u. a. 2012). Hier wäre unter Verwendung von $T_0 \approx 2.7$ und $z \lesssim 20$, bei der Entstehung der ersten Sterne sogar eine höhere Minimaltemperatur denkbar (Greif 2015). Die Simulationen werden bei

Tabelle 5.1.: *Standard-Setup für Shearingsheet-Simulationen mit sich entwickelnde Chemie. Σ_0 wird nach dem Toomre-Kriterium $Q = 1$ bei gegebener Temperatur T_{init} gesetzt.*

Physik	Anfangstemperatur	$T_{\text{init}} = (100; 250; 400) \text{ K}$
	Zentralmasse	$M_{\text{BH}} = 10^5 M_{\odot}$
	Radialer Abstand	$R_0 = 100 \text{ au}$
	Anfangsdichte	$\Sigma_0 = \Sigma(Q = 1.0)$
	Anfangsgeschwindigkeit	$v \lesssim 0,1 c_s$
	Simulationszeit	$T_{\text{sim}} \leq 1000 \Omega^{-1}$
	Adiabatenindex	$\gamma = 1,6$
	Parametrisierte Kühlung	$\beta = 10$
	Minimaltemperatur	$T_{\text{min}} = 10 \text{ K}$
Chemie	Atomarer Wasserstoff	$X_{\text{H},0} = 1,5123 \cdot 10^{-6}$
	Molekularer Wasserstoff	$X_{\text{H}_2,0} = 0,756 \text{ } 15$
	Helium	$X_{\text{He},0} = 0,243 \text{ } 75$
	Kühlung/Heizung	chemische Assoziation/Dissoziation
Numerik	Gitter	CARTESIAN
	Auflösung	$N_x = N_y = 512$
	Ausdehnung	$L_x = L_y = 320 L_{\text{krit}}$
	Limiter	VANLEER
	Zeitschrittverfahren	SSPRK (5. Ordnung)
	Randbedingungen	SHEARING
	Vektorlänge OdeVec n_{vec}	512

einer Auflösung von $N_x = N_y = 512$ durchgeführt, mit für den Shearingsheet typischen Ausmaßen von $320 L_{\text{krit}}$ (Gammie 2001). Beachtet werden sollte, dass die kritische Länge $L_{\text{krit}} = G\Sigma/\Omega^2$ über die Dichte Σ und Winkelgeschwindigkeit Ω direkt von den variierten

Parametern unterschiedlicher Simulationen abhängt und sich daher in absoluten Einheiten zwischen den Simulationen ändert.

5.2.1. Einfluss der Anfangstemperatur

Um ein grundsätzliches Verständnis der Prozesse zu bekommen, sind zunächst in Abb. 5.1 und Abb. 5.2 Farbkarten von Temperatur und atomarem Wasserstoffanteil bei zwei unterschiedlichen Anfangstemperaturen von $T_{\text{init}} = 100$ K, 400 K zu sehen. Unter Betrachtung des Toomre-Parameters kann eine bestimmte Hintergrundtemperatur immer dadurch erreicht werden, dass Dichte Σ und Abstand R_0 sowie Zentralmasse M_{BH} variieren. Die beiden letzten Werte gehen in den Toomre-Parameter in Form der Winkelgeschwindigkeit Ω ein und werden mit $M_{\text{BH}} = 10^5 M_{\odot}$ und $R_0 = 100$ au konstant gehalten. Die Temperatur selber geht über die Schallgeschwindigkeit c_s in den Toomre-Parameter ein. Abb. 5.1

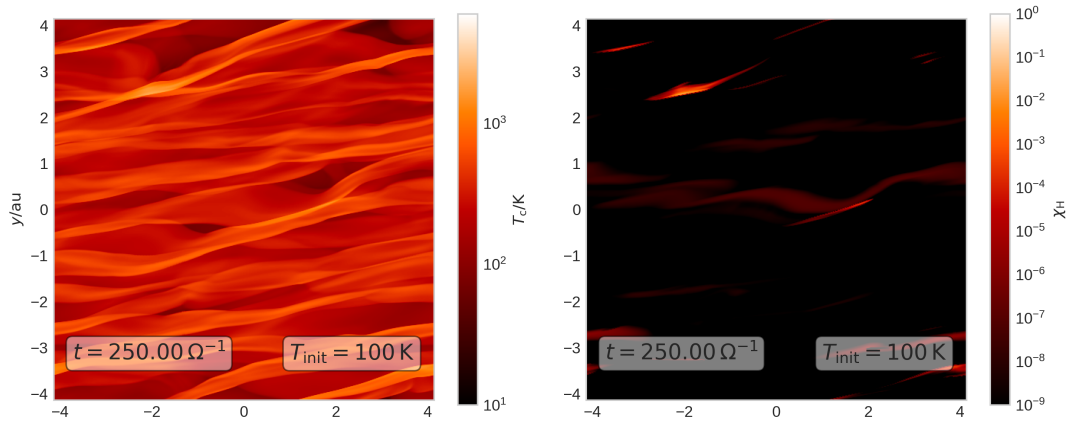


Abbildung 5.1.: Momentaufnahme von Mittelebenen-Temperatur (links) und atomarem Wasserstoffanteil (rechts) bei einer Initialtemperatur von $T_{\text{init}} = 100$ K.

zeigt, dass für den Fall $T_{\text{init}} = 100$ K die Temperatur größtenteils nicht ausreicht, um im Gas eine wesentliche Dissoziation hervorzurufen (atomarer Wasserstoff ist logarithmisch dargestellt). Insgesamt fällt unter Betrachtung der Temperatur aber auf, dass diese in angrenzenden Bereichen der Stoßfronten weit über eine Größenordnung voneinander abweichen können. So kann es dort vereinzelt zu Dissoziations Ereignissen kommen, welche wiederum zu einer atomaren Wasserstoffzunahme führen. Als Anhaltspunkt für die nötige Temperatur kann Abb. 3.9 hinzugezogen werden, in der die Gleichgewichtslösung für die verwendeten Reaktionen dargestellt ist. Ist die Dichte niedriger als in dem dargestellten Beispiel, so ist eine Dissoziation auch bei niedrigeren Temperaturen möglich. Für die Momentaufnahmen mit $T_{\text{init}} = 400$ K in Abb. 5.2 weicht das Verhalten wesentlich ab. Dort sind zwei unterschiedliche Zeitpunkte dargestellt, da es starke zeitliche Variationen über viele dynamische Zeitskalen gibt. Bei $T = 250 \Omega^{-1}$ ist ein eher weniger turbulentes Gas beobachtbar, wohingegen bei $T = 300 \Omega^{-1}$ deutliche Fragmentierung beobachtet werden kann. Zudem sieht man, dass die Zentralebenentemperatur T_c insgesamt weit über derjenigen bei T_{init} liegt. Es zeigt sich, dass zu beiden dargestellten Zeitpunkten wesentliche Teile des Gases aus atomarem Wasserstoff bestehen, weshalb zur sinnvollen

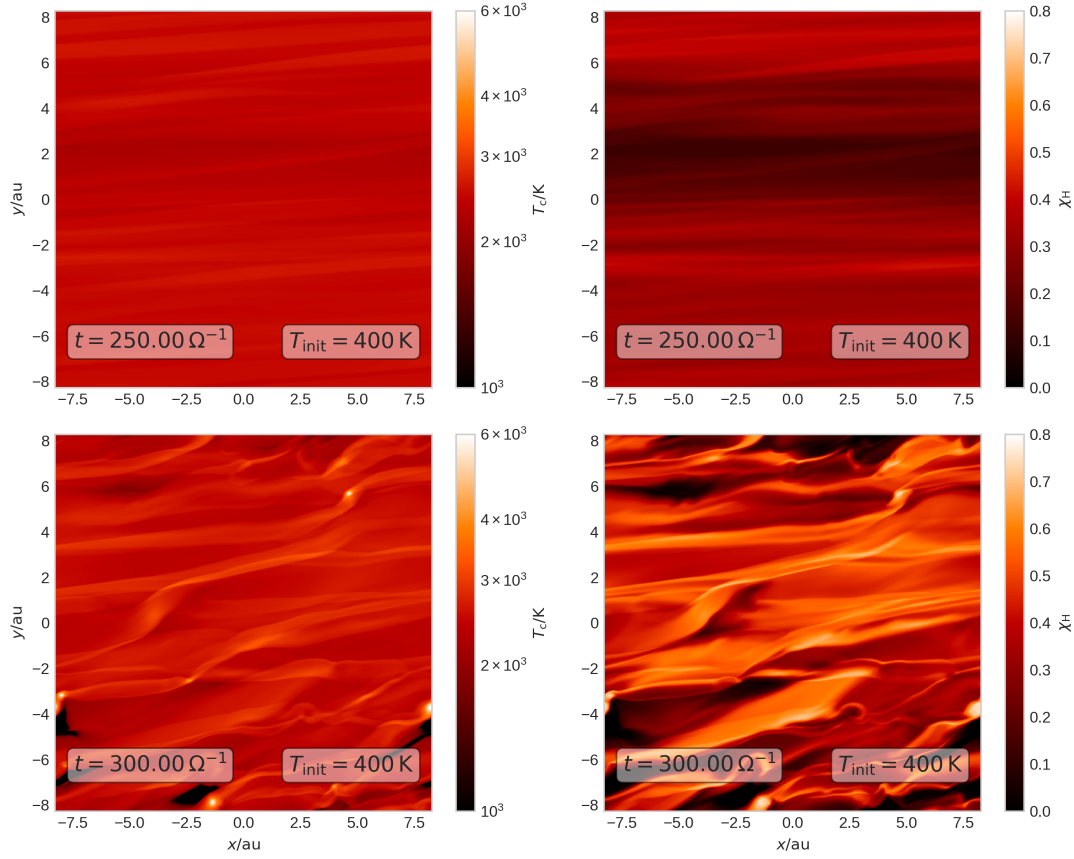


Abbildung 5.2.: Momentaufnahme von Mittelebenen-Temperatur (links) und atomarem Wasserstoffanteil (rechts) bei einer Initialtemperatur von $T_{\text{init}} = 400$ K zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten. Beachtet werden sollte, dass die Skalierung der Farbbalken zu jenen in Abb. 5.1 abweichen, um einen sinnvolle Darstellung zu ermöglichen.

Betrachtung eine abweichende Skalierung zur Simulationen bei $T_{\text{init}} = 100$ K gewählt wurde.

Bei ausreichend hohen Temperaturen und gegebener Dichte kommt es somit zur Dissoziation im Gas, welche wiederum einen starken Einfluss auf die Morphologie der Scheibe hat. Dabei gibt es eine zeitliche Abhängigkeit, welche auf Zeitskalen vieler Orbitalzeitskalen Ω^{-1} stattfindet. Die genauere zeitliche Entwicklung soll im folgenden detaillierter untersucht werden.

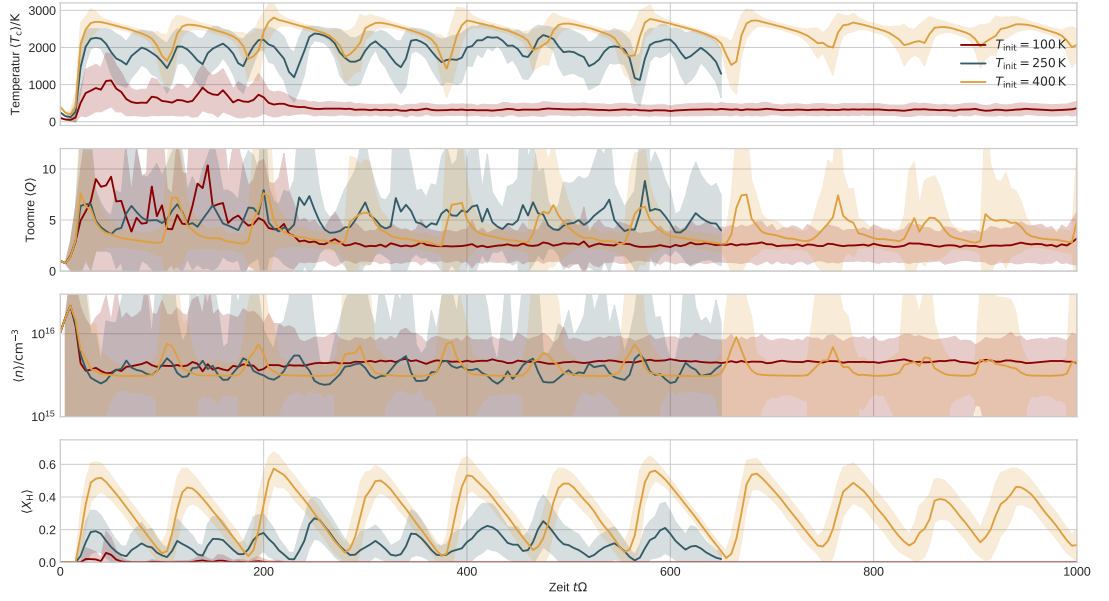


Abbildung 5.3.: Langzeitverhalten räumlich gemittelter Größen mit Standardabweichung für Initial-Temperaturen zwischen $T_{\text{init}} = (100; 250; 400)$ K.

5.2.2. Zeitliche Entwicklung

Variation der Anfangstemperatur

Um die zeitliche Entwicklung zu untersuchen, werden zunächst einige physikalische Größen örtlich gemittelt und mit Standardabweichung bei unterschiedlichen Initialtemperaturen in Abb. 5.3 über einen Zeitraum von maximal $t = 1000 \Omega^{-1}$ dargestellt. Dabei wird das aus Tab. 5.1 beschriebene Setup verwendet. Bei niedrigen initialen Temperaturen $T_{\text{init}} = 100$ K tritt nur eine leichte anfängliche Dissoziation auf und die Simulation geht in das für die Gravitoturbulenz bekannte quasi-stationäre Verhalten über. Bis dies erreicht ist, wird dennoch mit $\sim 200 \Omega^{-1}$ ein langer Zeitraum benötigt. Reicht die Temperatur jedoch aus, um in den Stoßfronten ausreichend Wasserstoff zu dissoziieren ($T_{\text{init}} = 250$ K), so sieht man ein periodisches Verhalten mit einem Trend zu höheren Anfangs-Temperaturen ($T_{\text{init}} = 400$ K). Diese Periodizität ist über alle physikalischen Größen zu erkennen, wobei die Temperatur $\langle T_c \rangle$ und der atomare Wasserstoffanteil $\langle X_H \rangle$ das Verhalten besonders deutlich widerspiegeln. Für den Toomre-Parameter $\langle Q \rangle$ und die Teilchendichte $\langle n \rangle$ fallen auf, dass die Standardabweichung im Vergleich zum Mittelwert stark abweichen kann, was auf Fragmentation und damit stark einhergehenden Inhomogenitäten hindeutet. Vor allem bei $T_{\text{init}} = 400$ K ist zu erkennen, dass die Zeitpunkte einer Dichteerhöhung, bei gleichzeitig großer Standardabweichung mit der Erzeugung atomaren Wasserstoffs zusammenfallen. Wird die Temperatur zusätzlich zeitlich gemittelt (von $250 \Omega^{-1}$ bis Simulationsende), erhält man $\langle \langle T_c \rangle \rangle \approx (324; 1918; 2373)$ K. Nimmt man den entsprechend gemittelten Toomre-Parameter $\langle \langle Q \rangle \rangle \approx 2,6; 5,1; 3,9$ hinzu, wird deutlich, dass die beiden

Größen zueinander keinen gemeinsamen Trend aufweisen, wie durch die Definition des Toomre-Parameters in Gl. 2.5 eigentlich erwartet werden könnte. Dies liefert einen Hinweis darauf, dass es sich nicht mehr um reine Gravitoturbulenz handelt, bei der der Mittelwert alleine aussagekräftig genug ist, sondern durch die Chemie bedingten Effekte im Gas wie Verwirbelungen und lokale Dicht erhöhungen ein komplexeres Bild erzeugen.

In Abb. 5.4 wird das Langzeitverhalten der parametrisierten Kühlung Q_{cool} , des chemischen Quellterms Q_{chem} und die Summe der beiden dargestellt. Dabei wird ersichtlich, dass die meiste Zeit eine Nettokühlung vorliegt. Für die Kurve bei $\langle Q_{\text{chem}} \rangle$ und $T_{\text{init}} = 400$ K ist mit einer besonders stabilen Periodizität ersichtlich, bei der über lange Zeiträume chemisch geheizt wird und über verhältnismäßig kurze Zeit Kühlung stattfindet. Dies muss mit den in Abb. 5.3 gezeigten Steigungen im atomaren Wasserstoffanteilen in Einklang stehen. Entsteht dabei atomarer Wasserstoff, wird dem Gas innere Energie in Form einer Temperaturänderung entzogen. Zudem deutet eine durchgehend große Standardabweichung darauf hin, dass es starke regionale Unterschiede innerhalb des Simulationsgebietes für die Quellterme gibt. Vergleicht man die wiederkehrenden Zustände mit entsprechenden Dichtekarten wie in Abb. 5.2, so sieht man, dass die kurzen chemischen Kühlzeiträume in Q_{chem} mit Fragmentation einhergehen (vgl. bei $t = 250 \Omega^{-1}$) und die Zeiträume mit $Q_{\text{chem}} > 0$ ruhigen Phasen im Gas entsprechend ($t = 300 \Omega^{-1}$). Dies ist nicht verwunderlich, da eine starke Kühlung, deren Zeitskala im Bereich der Orbitalzeitskala nach Gl. 2.8 liegt, für Fragmentation Voraussetzung ist. Für die Simulation bei $T_{\text{init}} = 100$ K

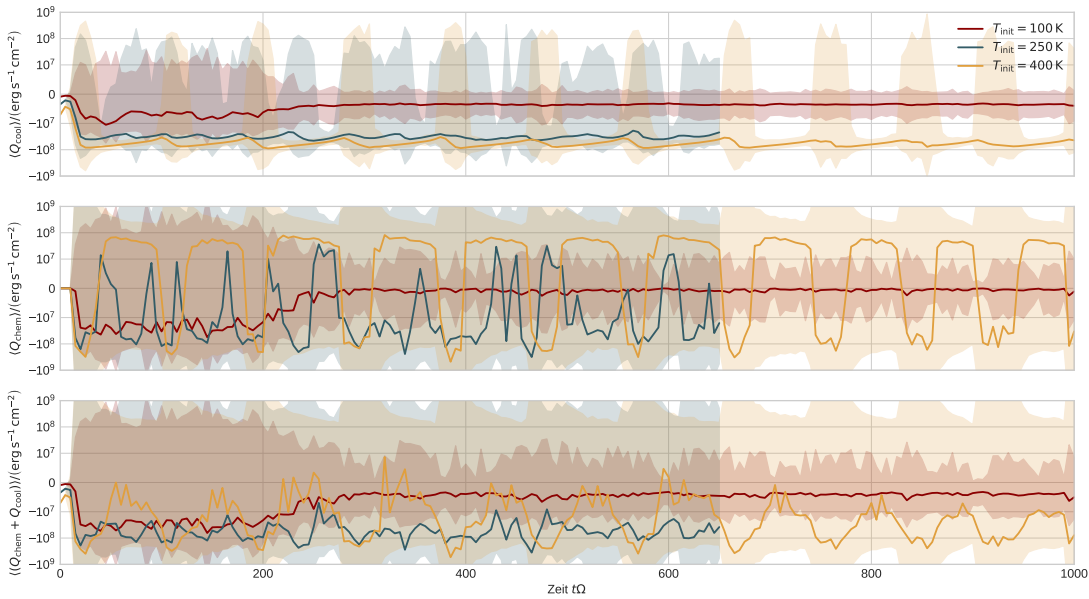


Abbildung 5.4.: Langzeitverhalten räumlich gemittelter Quellterme mit Standardabweichung für Initial-Temperaturen $T_{\text{init}} = (100; 250; 400)$ K.

wird für Q_{chem} ersichtlich, dass nach anfänglichen Beiträgen die Chemie inaktiv wird und nicht mehr das Geschehen beeinflusst, für sehr kalte AD der Effekt also keine Rolle mehr spielt.

Detaillierte Betrachtung bei $T_{\text{init}} = 400 \text{ K}$

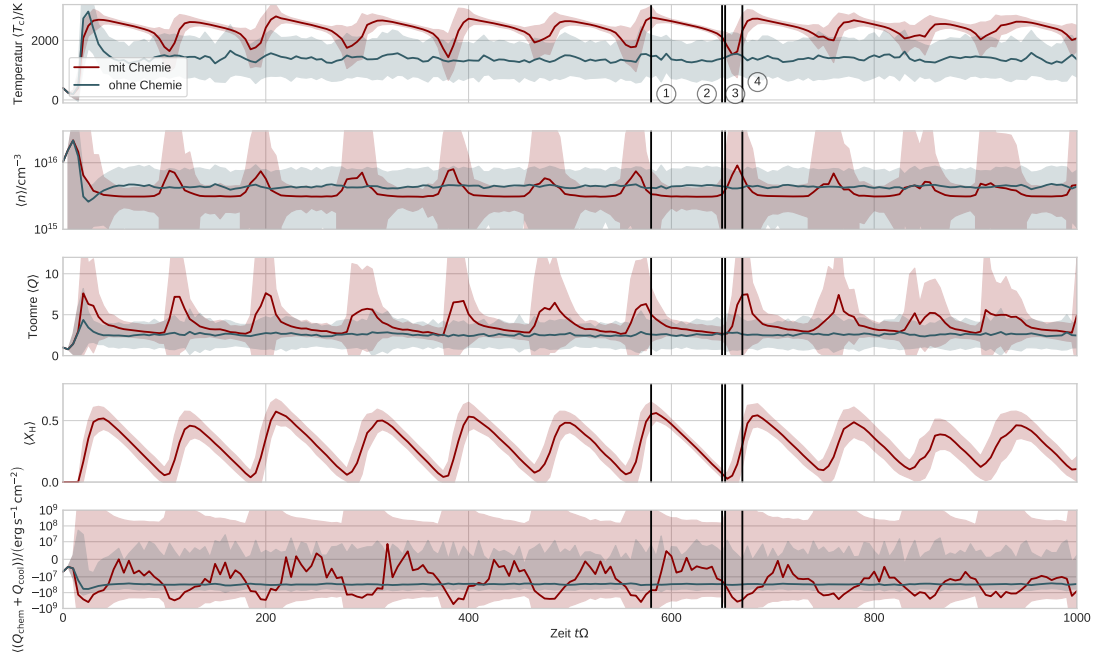


Abbildung 5.5.: Vergleich des Langzeitverhaltens mit und ohne chemische Rückkopplung charakteristischer physikalischer Größen für eine Initialtemperatur bei $T_{\text{init}} = 400 \text{ K}$.

In Abb. 5.5 ist der Extremfall bei $T_{\text{init}} = 400 \text{ K}$ für die zuvor dargestellten Größen, sofern vorhanden, zusammen mit einer entsprechenden Simulation ohne Chemie gegenübergestellt. Wie zu erwarten begibt sich die Simulation ohne Chemie dabei nach einer kurzen Initialisierungsphase in den bekannten gravitoturbulenten Zustand, welche sich über die Simulationszeit nicht mehr ändert. Für die Berechnung der Mittelebenentemperatur wird eine molare Masse von $\mu = 2,27 \text{ g/mol}$ verwendet, welcher dem Gemisch der Anfangsverteilung aus Tab. 5.1 entspricht. Zusätzlich sind über die Größen hinweg charakteristische Stellen innerhalb einer Periode durch vertikale Linien markiert.

Der Toomre-Parameter $\langle Q \rangle$ lässt weitere Rückschlüsse auf das gravitoturbulente Verhalten zu. Dessen Mittelwert ist insgesamt größer, was der erhöhten Temperatur geschuldet ist und darauf hindeutet, dass das Rechenggebiet in diesen Zeiten nur noch teilweise gravitativ instabil ist. Ebenfalls interessant ist der 1σ -Schlauch. Daraus wird ersichtlich, ob wesentliche Bereiche des Gases trotz erhöhtem Mittelwert zumindest lokal gravitativ instabil sein können. Beginnend beim Zeitpunkt ① in Abb. 5.5 (rote Kurve) verringert sich der Mittelwert von $\langle Q \rangle$ und ebenso dessen Standardabweichung und nähert sich dem kritischen Wert für den Toomre-Parameter Q_{krit} an (②), bei welchem sich die Simulation ohne Chemie dauerhaft befindet. Im Vergleich der beiden Kurven, lässt sich gut erkennen, dass sobald $\langle Q \rangle \lesssim Q_{\text{krit}}$ gilt, der periodische Zyklus erneut angestoßen wird (③). Zuvor geht dies mit einem gleichzeitigen starken Temperaturabfall einher. Der Toomre-Parameter erreicht schlussendlich ein Maximum bei ④ und fällt anschließend

wieder kontinuierlich ab. Vergleicht man alle Größen bei den Markierungen lässt sich eine vorsichtige zeitliche Abhängigkeit in der Entwicklung ausmachen. An Position ④ wird deutlich, dass der Toomre Parameter $\langle Q \rangle$ und Dichte $\langle n \rangle$ als erstes ihr Maximum erreichen, welches für Temperatur und Wasserstoffanteil mit einem zeitlichen Versatz erscheint. Dies könnte darauf hindeuten, dass der Zyklus durch den gravitativen Part in der Turbulenz in Form eines Katalysators getrieben wird und die chemischen Komponenten als Vermittler und Speicher von Energie das nachfolgende Verhalten beschreiben.

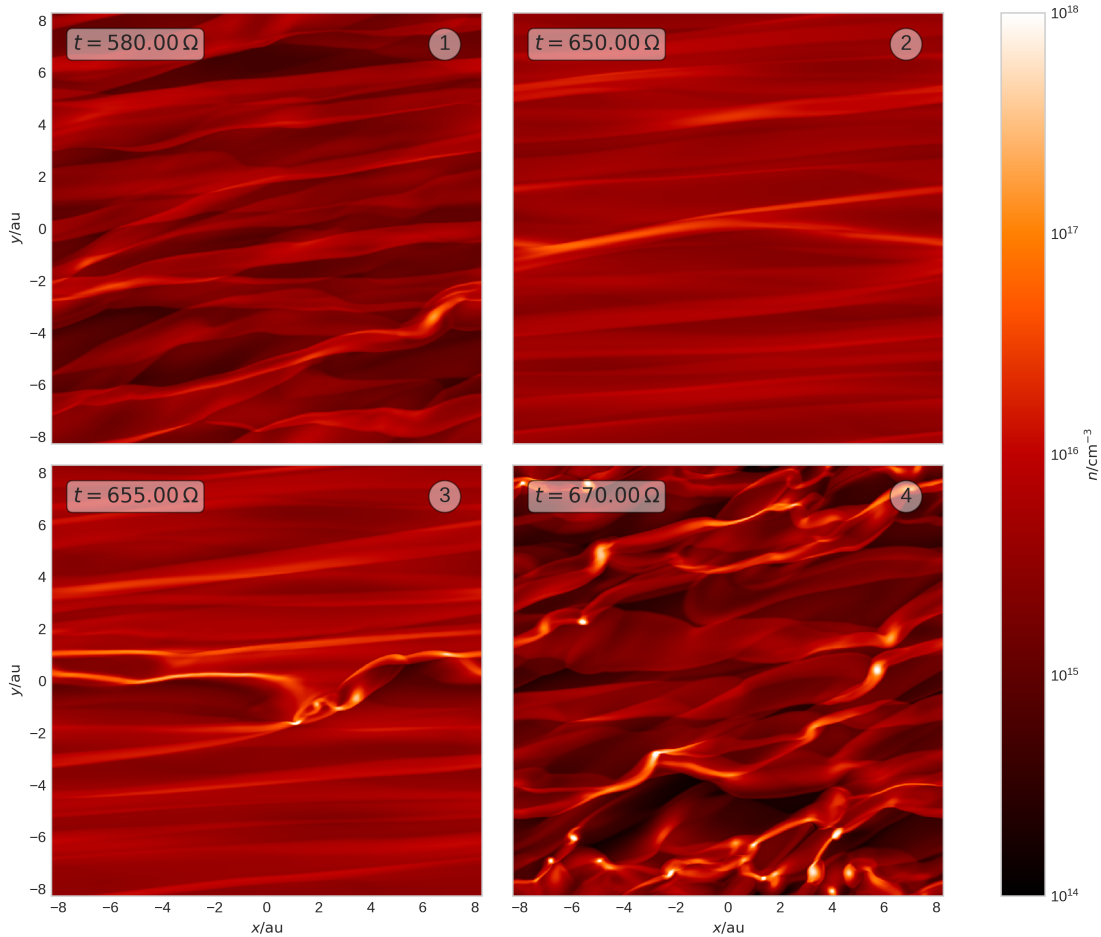


Abbildung 5.6.: Farbkarten der Teilchendichte aus in Abb. 5.5 markierten Zeitpunkten.

Für die vertikalen Markierungslinien aus Abb. 5.5 sind in Abb. 5.6 und Abb. 5.7 entsprechende Momentaufnahmen für die Teilchendichte n und den Wasserstoffanteil X_H dargestellt. Hier wird nochmals ersichtlich, dass der Zustand mit stark ansteigender Temperatur, zunehmendem Anteil atomaren Wasserstoffs und Toomre-Parameter mit einem fragmentierten Gas einhergeht (von ③ nach ④), während der länger abklingende Zeitraum durch ein verhältnismäßig wenig turbulentes Gas gekennzeichnet ist (① nach ②). Die Teilchendichte ist in dem betrachteten Beispiel insgesamt recht hoch und zu

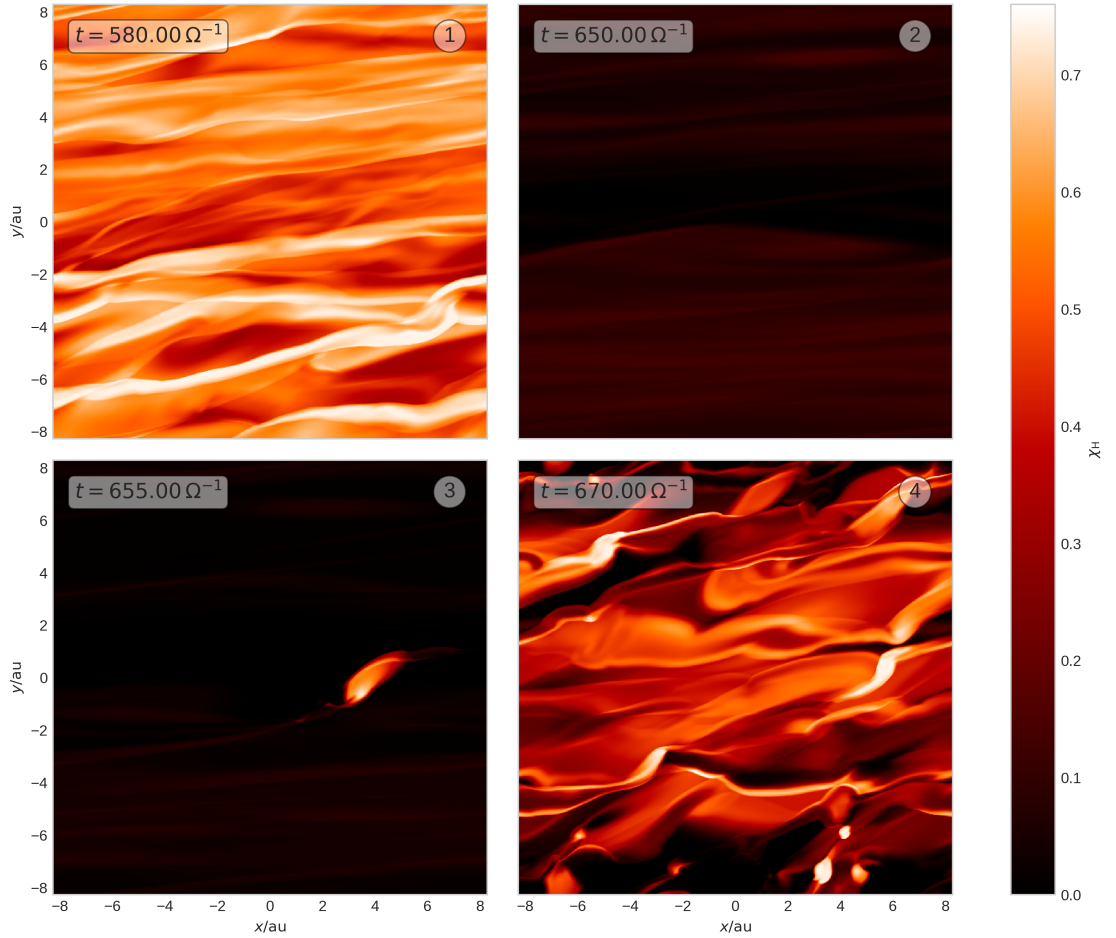


Abbildung 5.7.: Farbkarten des atomaren Wasserstoffs aus in Abb. 5.5 markierten Zeitpunkten.

großen Teilen im Gleichgewichtsbereich, wobei kollabierte Regionen schnell um zwei bis drei Größenordnungen über der mittleren Teilchendichte (Abb. 5.5) liegen können. Auf Seiten des atomaren Wasserstoffs kann man die Bedeutung als Vermittler erkennen. Während zu Beginn (①) auch global gesehen ein Großteil des Gases in atomarer Form vorliegt, ist dies am Ende der ruhigen Phase bei ② nicht mehr der Fall. Bei Beginn der Fragmentation (③) zeigt sich, dass eine eingeschlossene Region zwischen zwei Stoßfronten bei gleichzeitigem Zusammenfall im Gas eine starke Erzeugung von atomarem Wasserstoff zur Folge hat. Zusammen mit Abb. 5.6 ist erkennbar, dass sich in dieser Region die Teilchendichte entlang der Stoßfronten bereits zusammengezogen und erhöht hat, was auf eine erhöhte Kühlung in der Region schließen lässt. Dazu kann in Abb. 5.8 für die entsprechenden Zeitpunkte der kombinierte Quellterm $Q_{\text{chem}} + Q_{\text{cool}}$ betrachtet werden. Dort lassen sich Bereiche starker Kühlung und Heizung beobachten. Es wird ersichtlich, dass entlang der Stoßfronten in regional begrenzten Bereichen Kühlung und damit die Erzeugung atomaren Wasserstoffs stattfindet, wohingegen in den Regionen zwischen

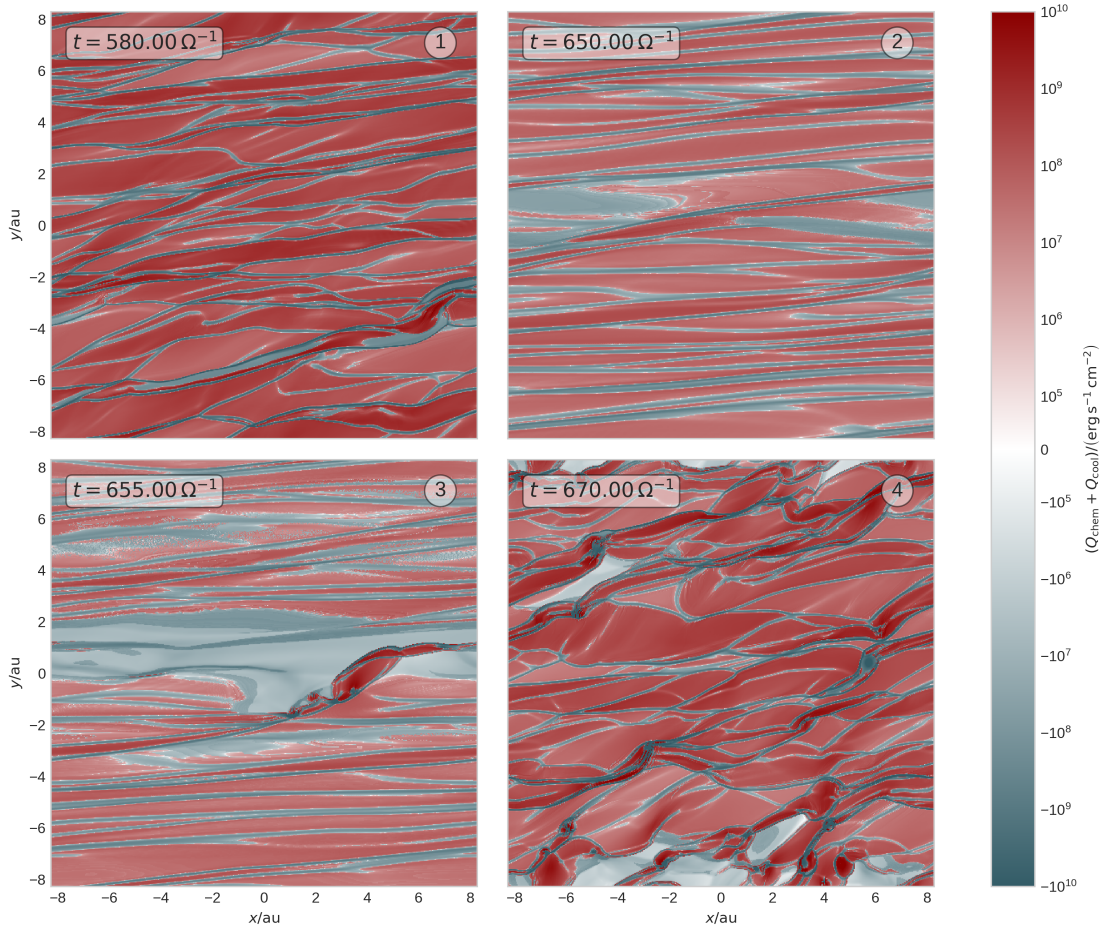


Abbildung 5.8.: Momentaufnahmen des kombinierten Quellterms $Q_{\text{chem}} + Q_{\text{cool}}$ zu den in Abb. 5.5 markierten Zeitpunkten.

den Stoßfronten großteils geheizt wird und der Wasserstoff in molekulare Form zurück wechselt. Dies ist nicht mehr der Fall ab ② in der auch die Zwischenräume anfangen zu kühlen, da der Anteil atomarem Wasserstoffs erschöpft ist. In ③ wird einerseits deutlich, dass in den fragmentierenden Bereichen starke Kühlung und Heizung dicht beieinander liegen, andererseits zeigt sich, dass die zuvor benannten zusammengezogenen Region mit erhöhter Teilchendichte mit jenen Bereichen zusammenfallen in der auch abseits der Stoßfronten gekühlt wird. Es sollte auch auf die logarithmische Darstellung in der Abbildung hingewiesen werden, durch die deutlich wird, dass die fragmentierenden Regionen zu einer Änderung in den Quelltermen von mehreren Größenordnungen führen können. Zudem wird nochmals die stark inhomogene Natur des Verhaltens offensichtlich. Letztendlich ist in diesen regional begrenzten Bereichen der kritische Kühlungsparameter β_{krit} (vgl. Gl. 2.8) unterschritten, was zu der zu sehenden Fragmentation führt. Dort ist die Kühlzeitskala aus Gl. 2.7 somit niedriger als die Orbitalzeitskala Ω^{-1} . In Abb. 5.9 sind die Entwicklung gemittelter Energiedichten ähnlich wie in Gammie

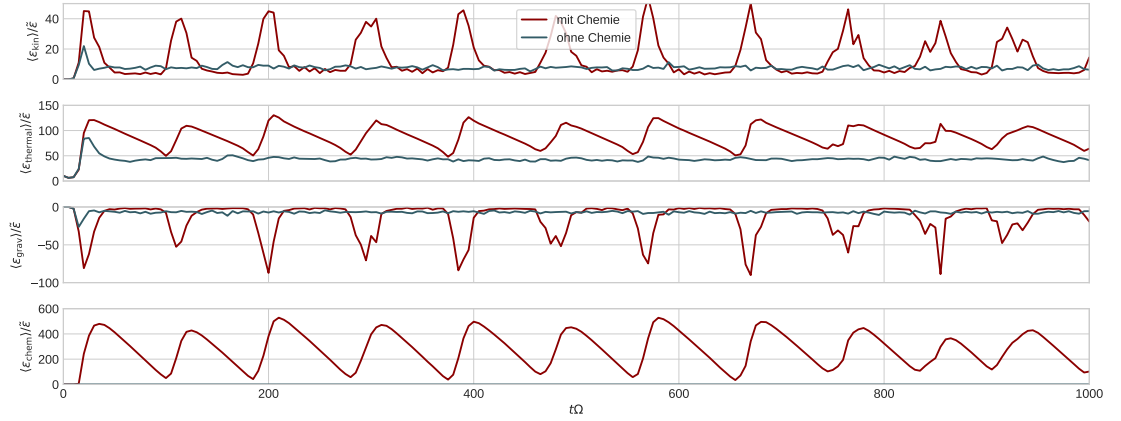


Abbildung 5.9.: Langzeitverhalten verschiedener Energiedichten normiert auf $\tilde{\epsilon} = \frac{G^2 \Sigma^3}{\Omega^2}$.

(2001) dargestellt. Diese beinhalten die im Gas vorhandene kinetische Energiedichte

$$\epsilon_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \Sigma \delta \mathbf{v}^2, \quad (5.1)$$

wobei beachtet werden sollte, dass es sich bei $\delta \mathbf{v}$ um die Residualgeschwindigkeit handelt, bei welcher die konstante Hintergrundgeschwindigkeit in der Shearingbox abgezogen werden muss. Dazu kommen die innere Energie

$$\epsilon_{\text{thermal}} = U = \frac{P}{\gamma - 1} \quad (5.2)$$

und die gravitative Energie

$$\epsilon_{\text{grav}} = \frac{1}{2} \Sigma \Phi, \quad (5.3)$$

mit dem Gravitationspotential Φ . Als weitere in Gammie (2001) nicht enthaltene Größe soll ein Maß für die chemische Energiedichte hinzugefügt werden. Hier wird die chemische Bindungsenergie der Wasserstoffdissoziation von 4,48 eV mit der Anzahlichte des molekularen Wasserstoffs n_{H_2} nach

$$\epsilon_{\text{chem}} = 4,48 \text{ eV} (n_{\text{H}_2, \text{max}} - n_{\text{H}_2}) \quad (5.4)$$

verrechnet. Die Größe beschreibt also den frei verfügbaren Wasserstoff, welcher sich noch zu molekularem Wasserstoff umwandeln und dabei einen entsprechenden Energieeintrag generieren kann. Alle Energiedichten in Abb. 5.9 sind auf $\frac{G^2 \Sigma^3}{\Omega^2}$ normiert. Insgesamt ergibt sich für den Fall ohne Chemie ein sehr ähnliches Bild wie in Gammie (2001). Im Gegensatz dazu zeigt der Fall mit Chemie das bekannte periodische Verhalten auf. Der auffälligste Unterschied ist die chemische Komponente, welche vielfach größer werden kann als die anderen Energieformen. Aber auch die Komponente der Gravitationsenergie ist um ein Vielfaches stärker zu Zeiten starker Fragmentation. Dies ist verständlich, da in fragmentierten Regionen auch das Gravitationspotential wesentlich höher ist. Kinetische

und gravitative Energie sowie innere Energie und chemische Energie weisen dabei jeweils ein gemeinsames Verhalten auf. Während letztere Gruppe lange Entwicklungszeitskalen zeigen haben kinetische und gravitative Energien kurzfristig explosiven Charakter mit langen zwischenzeitlichen Ruhephasen. Sind die gravitativen Wechselwirkungen dabei hoch, bedeutet dies auch immer eine starke Verwirbelung im Gas, was hohe Geschwindigkeiten mit sich zieht.

In Abb. 5.10 ist der über das Rechengebiet gemittelte $\langle\alpha\rangle$ -Parameter dargestellt (Shakura und Sunyaev 1973). Dieser entspricht einem Zahlenwert für eine effektive Viskosität, welcher die Turbulenz im Gas parametrisiert (vgl. Abschnitt 2.1) und z.B. in eindimensionalen Modellen verwendet werden kann. Der Parameter kann mit

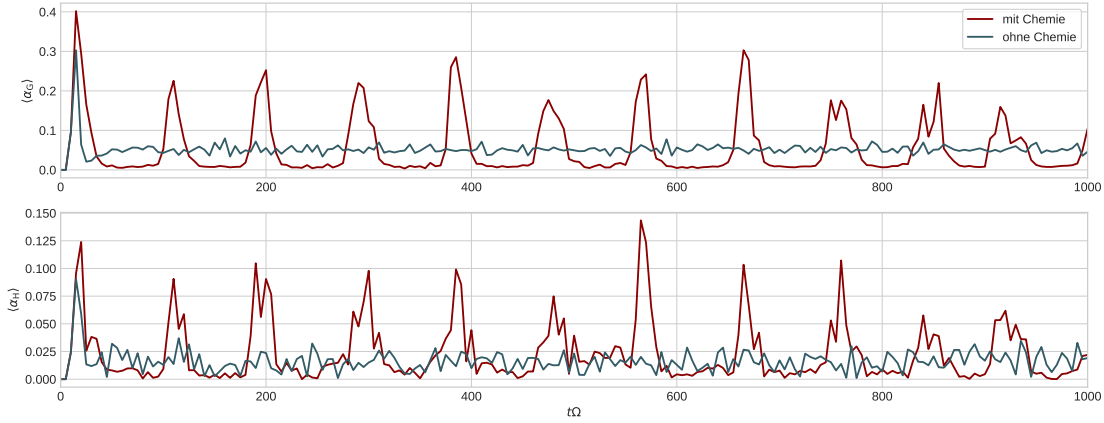


Abbildung 5.10.: Langzeitverhalten des gravitativen und des hydrodynamischen Anteils des α -Parameters.

$$\alpha = \alpha_{\mathbf{H}} + \alpha_{\mathbf{G}} \quad (5.5)$$

in einen hydrodynamischen Teil

$$\alpha_{\mathbf{H}} = \frac{2}{3\langle\Sigma c_s^2\rangle} \Sigma \delta v_x v_y \quad (5.6)$$

und einen gravitativen Teil

$$\alpha_{\mathbf{G}} = \frac{2}{3\langle\Sigma c_s^2\rangle} \sum_{k_x, k_y} \frac{\pi G k_x k_y |\Sigma_{\mathbf{k}}|^2}{|\mathbf{k}|^3} \quad (5.7)$$

aufgeteilt werden und somit aus der numerischen Simulation bestimmt werden (Gammie 2001). Insgesamt ist gerade der gravitative Anteil im Fall ohne Chemie verglichen mit Gammie (2001) etwas hoch, was jedoch durch die geringere Auflösung und daraus entstehenden dissipativen Effekte erklärt werden kann. Im Fall mit Chemie zeigt sich, dass während in ruhigen Phasen eher ein kleinerer α -Parameter das Resultat ist, der Parameter in turbulenten Phasen den Standardverlauf um einen Faktor 3 bis 4, teilweise sogar

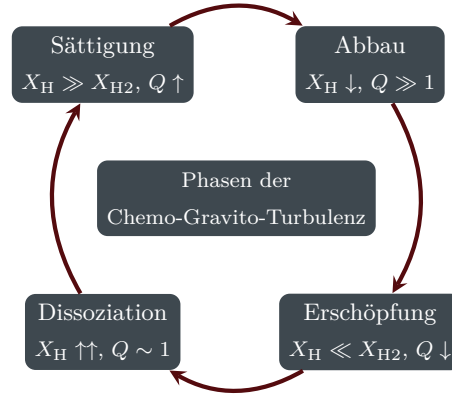


Abbildung 5.11.: Schematische Abbildung zu den Phasen des Grenzyklus. \downarrow , \uparrow sollen eine zeitliche Abnahme, bzw. Zunahme der Größe signalisieren.

noch höher übertreffen kann. Die α -Parameter können nochmal zeitlich gemittelt werden. Dabei werden die ersten $100\Omega^{-1}$ ausgespart, um Initialisierungseffekte auszublenden. Dies ergibt einen Wert von $\langle\langle\alpha_{G,Diss}\rangle\rangle \sim 0,054$ mit Chemie und $\langle\langle\alpha_{G,NoDiss}\rangle\rangle \sim 0,052$ ohne Chemie. Zeitlich gemittelt zeigt der gravitative Anteil des α -Parameters also nur geringfügige Unterschiede. Geht man ebenso für den hydrodynamischen Anteil vor, so ergeben sich die Werte $\langle\langle\alpha_{H,Diss}\rangle\rangle \sim 0,023$ und $\langle\langle\alpha_{H,noDiss}\rangle\rangle \sim 0,016$. Hier ist eine größere, jedoch auch moderate, relative Abweichung zu beobachten.

Interpretation des Grenzyklus

Mit dem in den vorangegangenen Abschnitt gemachten Beobachtungen soll eine erste Interpretation der physikalischen Wechselwirkungen gemacht werden, welcher das periodische Verhalten zwischen turbulenten Zeiträumen mit Fragmentation im Gas und weniger aktiven Zuständen beschreibt.

Dazu ist in Abb. 5.11 ein Prozess illustriert, welcher unten links damit beginnt, dass in gravitoturbulenten Scheiben Stoßfronten mit hohen Dichtegradienten ausreichend hohe Temperaturänderungen für Wasserstoffdissoziation aufweisen. Diese Dissoziation kühlt das Gas lokal, führt jedoch in einem nichtlinearen Prozess zu noch stärkeren lokalen Verdichtungen und Verwirbelungen, was große Mengen der potentiellen gravitativen Energie verfügbar macht. Dies führt lokal zu Fragmentation durch erhöhte Kühlung (atomarer Wasserstoff entsteht), global aber zu vermehrter Stoß-Heizung. Hierbei wird viel atomarer Wasserstoff in relativ kurzem Zeitraum erzeugt, was die chemische potentielle Energie erhöht. Die starke Aufheizung des Gases führt schlussendlich dazu, dass die Fragmentation abnimmt und ein Sättigungseffekt für den atomaren Wasserstoff eintritt. Nach diesen vergleichsweise schnell ablaufenden Events liegt ein wesentlicher Teil des Gases in atomarer Form vor und steht als zusätzliche Heizquelle zur Verfügung.

Bei gleichzeitig vorhandener Kühlung und Toomre-Stabilität ($Q \gtrsim 1$) kann die chemische Heizung unter Abbau von atomarem Wasserstoff das Gas über viele Orbitalzeitskalen stabil halten und den Kühlprozessen entgegenwirken. Bei dem Setup von $T_{init} = 400\text{ K}$ ist

dabei die Heizzeitskala vergleichbar aber kleiner zur Kühlzeitskala, was das relativ stabile Verhalten bei gleichzeitig abklingender Temperatur erklärt. Dies kann insbesondere in Abb. 5.5 für $Q_{\text{chem}} + Q_{\text{cool}}$ gesehen werden. Dort herrscht fast durchgehend eine Nettokühlung, wobei diese aber in ruhigen Phasen geringer ausfällt als im Fall ohne Chemie.

Ist nicht mehr ausreichend atomarer Wasserstoff vorhanden um der Kühlung entgegenzuwirken kühlt das Gas mit zunehmender Geschwindigkeit ab. Dies sieht man ebenfalls besonders gut unter Betrachtung der Temperatur in Abb. 5.5, bei der ein klarer Abknickpunkt an der Kurve zu sehen ist. In der Folge wird das Gas wieder Toomre instabil ($Q \lesssim 1$), ausgeprägtere Stoßfronten nehmen zu und der Zyklus beginnt von neuem.

5.2.3. Weitere Einflüsse

Numerische Einflüsse

Auch unter Anbetracht der Ergebnisse aus Kap. 4 sollen hier mögliche numerische Einflüsse auf die Ergebnisse besprochen werden. In Abb. 5.12 ist eine Simulation bei einer Auflösung von $N = 1024$ mit dem Standardlauf bei $N = 512$ verglichen ($T = 400$ K). Beide Simulationen zeigen grundsätzlich den hier beschriebenen Grenzzzyklus. Hinsichtlich

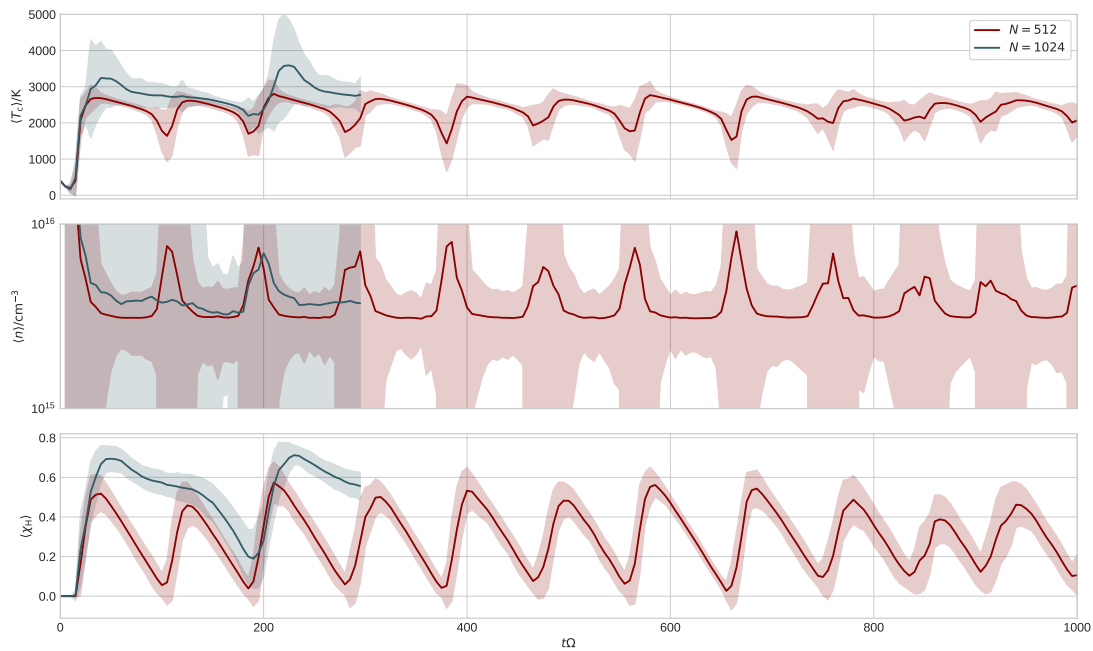


Abbildung 5.12.: Betrachtung über das Rechengebiet gemittelter Größen bei veränderter Auflösung.

Periodizität und vor allem der maximalen mittleren Dissoziation $\langle X_{\text{H}} \rangle$, sowie maximalen mittleren Temperatur $\langle T_{\text{c}} \rangle$ gibt es aber deutliche Unterschiede. Ein Erklärungsversuch für die Abweichungen könnte in den fragmentierenden Bereiche gesucht werden. Diese

können bei höherer Auflösung eventuell stärker komprimieren bevor sie wieder auseinander getrieben werden. Der Unterschied in der Periodizität selber ist auf Grund der nur zwei abgebildeten Fragmentationsevents (für $N = 1024$) aber schwer zu deuten. Einerseits könnte die Periode tatsächlich auflösungsunabhängig sein, es wäre aber auch denkbar, dass Einschalteffekte eine Rolle spielen. Wenn bei noch nicht vollständig entwickelter Gravitoturbulenz Fragmente entstehen ist es denkbar, dass diese das Verhalten stören. Dabei ist bekannt, dass eine initiale Fragmentation mit zunehmender Auflösung schwerer zu verhindern ist (Klee u. a. 2019).

Um bessere Aussagen machen zu können wären jedoch detailliertere Studien nötig, welche das Auflösungsgeschehen genauer untersuchen. Bereits aus dem vergangenen Kapitel 4 sind die starken Abhängigkeiten zwischen Auflösung und Gravitoturbulenz bekannt. Das hinzukommende, chemische Feedback macht ein Verständnis diesbezüglich noch schwieriger. Das grundsätzliche Verhalten eines Grenzyklus bleibt aber in der Betrachtung bestehen.

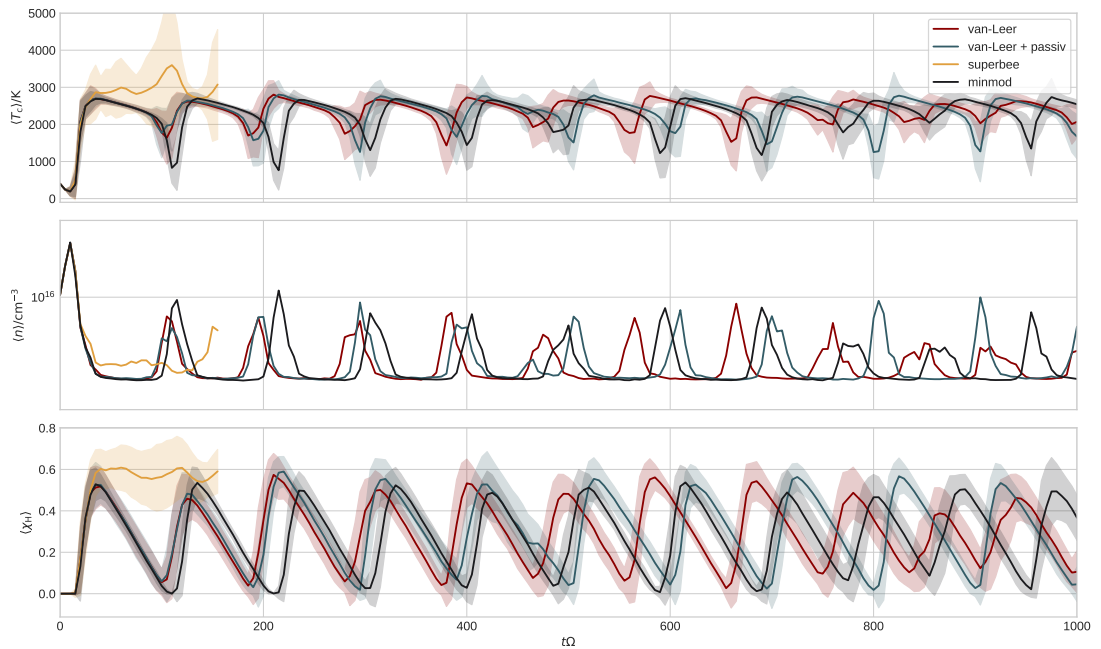


Abbildung 5.13.: Betrachtung über das Rechengebiet gemittelter Größen unter Verwendung unterschiedlicher Limiter.

In Abb. 5.13 ist der Einfluss von verschiedenen Limitern gezeigt. Die Verwendung der passiven Limitierung aus Abschnitt 3.1.6 hat dabei einen geringen Einfluss auf den Vergleichslauf mit dem Vanleer-Limiter. Eine Simulation mit dem Superbee-Limiter zeigt jedoch auch hier einen qualitativ abweichenden Ausgang, welche auf Grund von numerischer Schwierigkeiten bei $T \sim 150 \Omega^{-1}$ abbricht. Schlussendlich ist auch noch eine Simulation mit Minmod hinzugefügt. Dieser Limiter hat klassischerweise eine starke Dissipation. Hier ist zu sehen, dass das grundsätzliche Verhalten am qualitativen Ausgang

der Simulationen nichts ändert, wobei das Maximum der gemittelten Werte und Periode leichte Abweichungen aufweisen.

Insgesamt kann man somit festhalten, dass die Numerik einen Einfluss auf die Simulationen hat, welche sich am stärksten in Form der Auflösung bemerkbar macht. Das qualitative Verhalten ändert sich jedoch nur bei Verwendung des Superbee-Limiters, welcher schon im vergangenen Kapitel als weniger geeignet erkannt wurden.

Wasserstoffanteil

Hier soll das Verhalten bei unterschiedlichem Anteil des Wasserstoffs zu Helium untersucht werden. Es ist zu erwarten, dass sich das Wasserstoff- zu Helium-Verhältnis unter primordialen Bedingungen in dem in vorherigen Abschnitten besprochenen Bereichen befindet. Das Verhältnis wird hier trotzdem variiert, um ein besseres Verständnis des zugrundeliegenden Prozesses zu erhalten, denn steht weniger Wasserstoff zur Verfügung wird der Energiespeicher kleiner. In Abb. 5.14 sind dazu die räumlich gemittelten Werte

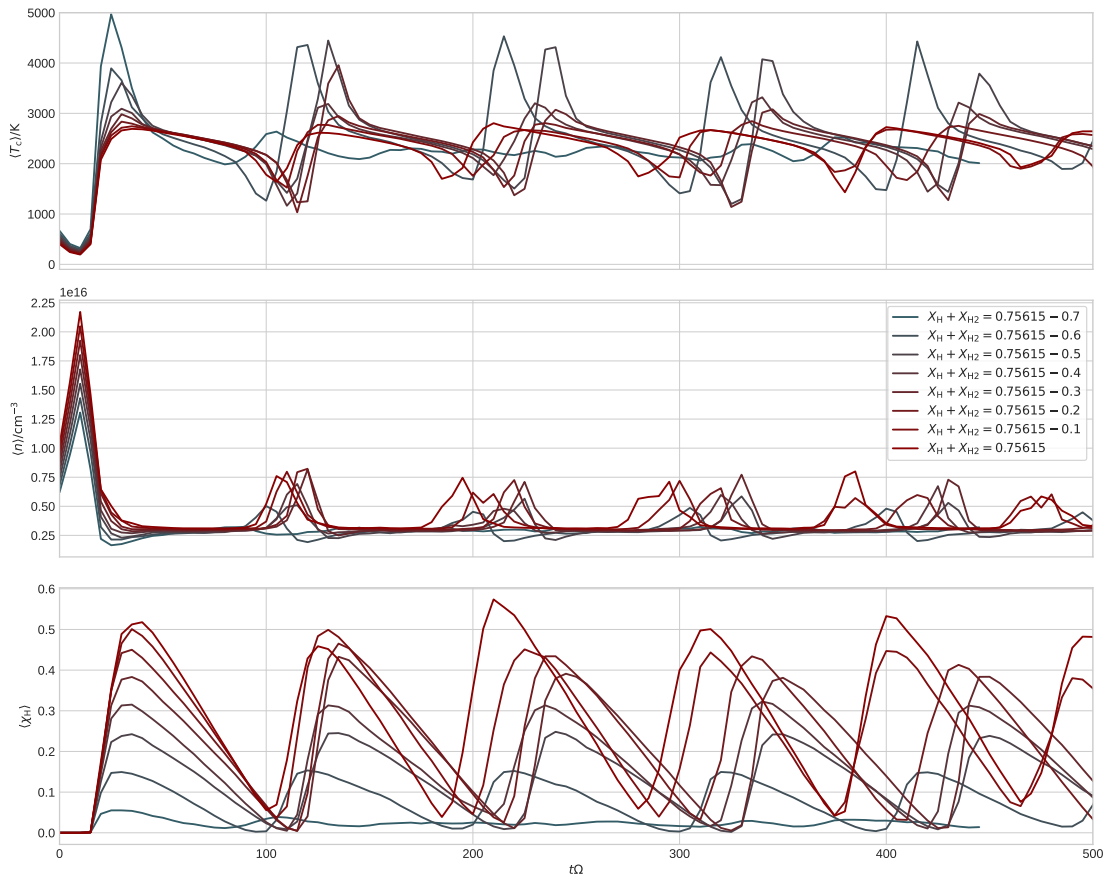


Abbildung 5.14.: Betrachtung gemittelter Größen bei variablem Wasserstoffanteil.

der Temperatur, der Teilchendichte und des atomaren Wasserstoffanteils an der Ge-

samtdichte dargestellt. Um den Trend für zunehmend weniger Wasserstoff beobachten zu können werden hier relativ kleine Schritte und damit viele Plots in der Abbildung untergebracht, dafür aber nur die halbe Simulationszeit ($t = 500 \Omega^{-1}$) dargestellt.

Das Wasserstoff-zu-Helium-Verhältnis nimmt in Abb. 5.14 stetig bis zu dem bekannten Verhältnis zu. Insbesondere in den ersten Perioden ist zu erkennen, dass die Ausschläge der gemittelten Temperatur bei niedrigerem Wasserstoffanteil größer werden. Dies deutet eventuell darauf hin, dass der Wasserstoff, der einerseits für den Fragmentationsprozess verantwortlich ist, gleichzeitig auch die Fragmentation wieder zu einem späteren Zeitpunkt stabilisiert.

Des weiteren kann man beobachten, dass bei weniger aber ausreichend Wasserstoff für den Grenzzyklus, die Amplitude des atomaren Anteils immer den gleichen Wert erreicht, was in etwa dem gesamten verfügbaren Wasserstoff entspricht, wohingegen bei höheren Gesamtanteil eine Variation in der Amplitude zu sehen ist. Dies lässt vermuten, dass bei hohem Wasserstoffanteil der Fragmentationsprozess vor einer vollständigen Dissoziation des Gases gestoppt wird und fügt sich zu der vorherigen Beobachtung, in der die Temperaturschläge bei weniger atomarem Wasserstoff größer sind. Ist der Wasserstoffanteil zu klein ($X_H + X_{H_2} = 0.75615 - 0.7$), kann kein richtiger Grenzzyklus sondern nur noch leichte Oszillationen im Gas beobachtet werden.

Einfluss Kühlzeitskala

In Abb. 5.15 ist die Rückkopplung bei sonst gleichem Setup für verschiedene Zeitskalen der oppositionellen parametrisierten Kühlung $\beta = \{5, 10, 20\}$ aufgetragen. Für kleine

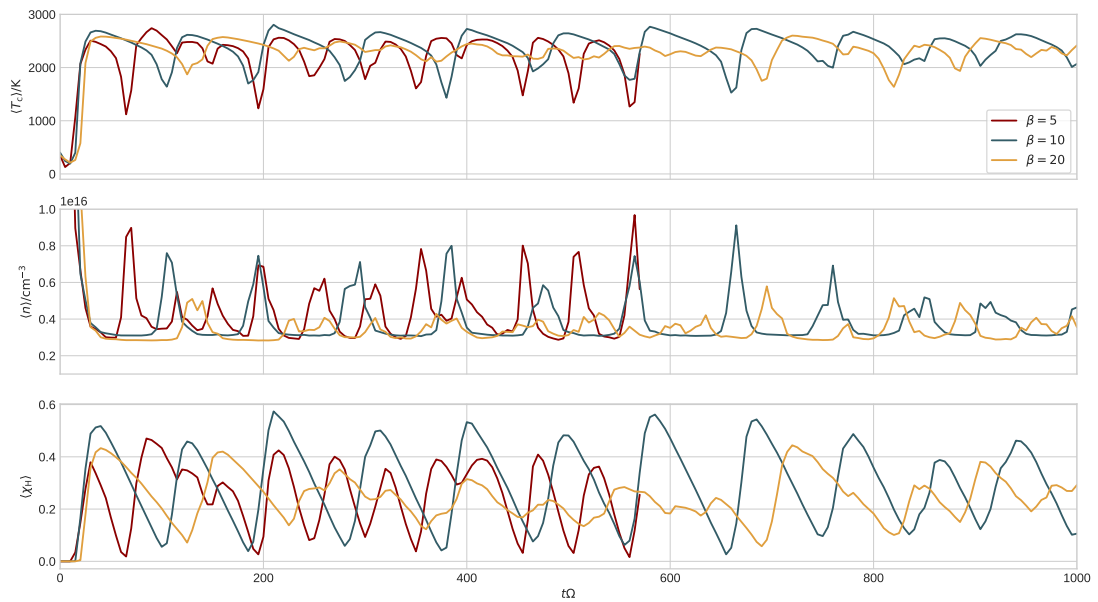


Abbildung 5.15.: Betrachtung gemittelter Größen bei variablem Kühlungsparameter β .

Werte von β findet die Hintergrundkühlung im Vergleich zur dynamischen Zeitskala

Ω^{-1} schneller statt. Unter Betrachtung der Temperatur T_c wird ersichtlich, dass eine schnellere Kühlung zu einer Verkürzung der Periode führt. Auffällig ist, dass sowohl bei $\beta = 5$ als auch bei $\beta = 20$ nicht eine ähnlich stabile Periodizität zu sehen ist wie für $\beta = 10$. Insbesondere die ersten zwei bis drei Perioden zeigen aber, dass aus einer schnelleren Kühlung auch eine kürzere Periode folgt. Hierbei ist die Steigung im Ast der ruhigen Phase klar an β gekoppelt. Dass sich der relativ lange stabile Zeitraum zwischen den Punkten ① und ② (vgl. Abb. 5.5) verändert, kann dadurch erklärt werden, dass der durch den atomaren Wasserstoff zur Verfügung gestellten Energiespeicher schneller aufgebraucht ist, wenn eine stärkere Kühlung anliegt, welcher entgegengewirkt wird.

5.3. Berechnungen in globalem Setup

In Abschnitt 5.2 wurden Simulationen in der lokalen Shearingsheet-Approximation gezeigt. In diesem Abschnitt sollen nun globale Simulationssetups mit sonst ähnlichen Rahmenbedingungen betrachtet werden. Dazu wird eine logarithmisch-polare Darstellung des Gitters verwendet, wie sie in Abschnitt 3.1 beschrieben wurde. Das Standardsetup der Simulationen ist in Tab. 5.2 zusammengefasst. Dort entspricht die Dichteverteilung jener einer Mestel-Scheibe mit $\Sigma(r) = \Sigma_0 r^{-1}$ (Mestel 1963). Solche Scheiben sind gerade so geartet, dass die Rotationsgeschwindigkeit in der Scheibe auf Grund des eigenen Potentials einen konstanten Wert erreicht (Binney u. a. 2009). Der Skalierungswert der Dichte Σ_0 wird über die gewünschte Gesamtmasse der Scheibe bestimmt, welche $M_D = 0,1 M_{\text{BH}}$ beträgt. Es werden somit sogenannte Keplersch-selbstgravitierende Scheiben betrachtet. Damit sich Gravitoturbulenz entwickeln kann wird auf diesen Wert ein gleichverteiltes Rauschen η nach $\Sigma_0 = \eta \tilde{\Sigma}_0$ gelegt, wobei $\eta = [0,9, 1,1]$ gewählt wurde. M_{BH} ist die Masse des Zentralobjektes und kann variiert werden. Der initiale Druck wird so gewählt, dass überall $Q = 1,5$ gilt, welches dem Toomre Kriterium 2.5 mit einem zusätzlichen Sicherheitsfaktor entspricht, um einerseits überall einen schnellen gravitoturbulenten Zustand zu erreichen und andererseits einen sofortigen Zerfall der Scheibe (bei zu kleinen $Q < 1$) zu verhindern. Das Geschwindigkeitsfeld wird im Fliehkraftgleichgewicht aufgesetzt, also $v_r = 0$ cm/s. Dabei werden sowohl die Beschleunigungen des Zentralobjektes als auch jene der Scheibe selber für v_φ einbezogen (a_{rhs}). Auch hier wird eine parametrisierte Hintergrundkühlung mit $\beta = 10$ aufgesetzt, welche die Gravitoturbulenz treibt und auf der die chemische Rückkopplung der Dreikörperstöße untersucht werden soll.

Die chemische Anfangsbedingung und das Netzwerk werden wie im vorangegangenen Abschnitt gewählt, mit atomarem und molekularem Wasserstoff, sowie Helium, wobei der Wasserstoff zu Beginn hauptsächlich in molekularer Form vorliegt. Als mögliche Reaktionen werden wie im vorherigen Abschnitt die Dreikörperstöße angenommen, welche in Abschnitt 2.3.4 erläutert wurden, womit es eine einfache Hin- sowie Rücktransformation gibt. Dabei werden neben der Änderung in den chemischen Komponenten, die Dissoziationsenergien in Form der Operator-Teilung in Gl. 3.15 als Druckänderung an Fosite zurückgespielt.

Ein weiterer Parameter ist der Innenradius r_{in} . Dieser ermöglicht es unterschiedlich kompakte Scheiben bei gleichbleibendem Scheibe- zu Zentralmasse-Verhältnis zu betrachten.

Tabelle 5.2.: *Standardeinstellungen zu globalen Simulationen gravitoturbulenter Scheiben mit Wasserstoff und Helium.*

Physik	Zentralmasse	$M_{\text{BH}} = (10^2; 10^3; 10^4; 10^5) M_{\odot}$
	Simulationszeit	$T_{\text{sim}} = 6 \text{ ORP}$
	Dichteverteilung	$\Sigma = \Sigma_0 r^{-1}$
	Scheibenmasse	$M_{\text{D}}/M_{\text{BH}} = 0.1$
	Druck	$P = P(Q = 1.5)$
	Geschwindigkeiten	$v_{\varphi} = \sqrt{[ra_{\text{rhs}}]}, v_r = 0 \text{ cm s}^{-1}$
	Adiabatenindex	$\gamma = 1,6$
	Parametrisierte Kühlung	$\beta = 10$
	Minimaltemperatur	$T_{\text{min}} = 10 \text{ K}$
Chemie	Atomarer Wasserstoff	$X_{\text{H}} = 1,5123 \cdot 10^{-6}$
	Molekularer Wasserstoff	$X_{\text{H}_2} = 0,756 \text{ 15}$
	Helium	$X_{\text{He}} = 0,243 \text{ 75}$
	Kühlung/Heizung	chemische Assoziation/Dissoziation
Numerik	Gitter	LOGCYLINDRICAL2
	Auflösung	$N_{\varphi} \times N_r = 768 \times 256$
	Ausdehnung	$[0, 2\pi] \text{ rad} \times [r_{\text{in}}, r_{\text{out}}]$
	innerer Radius	$r_{\text{in}} = 100 \text{ au}$
	äußerer Radius	$r_{\text{out}} = 25 r_{\text{in}}$
	Limiter	VANLEER
	Zeitschrittverfahren	SSPRK (5. Ordnung)
	Randbedingungen	OUTFLOW

Der äußere Radius hängt immer vom inneren ab und beträgt $r_{\text{out}} = 25 r_{\text{in}}$. Dieser Wert ist vor allen Dingen durch technische Limitierungen bedingt. Die Simulationszeitskalen sind an die keplersche Umlaufzeit am äußeren Rand (engl. outer rotational periods, ORP) geknüpft, um sicherzustellen, dass der äußere Bereich über einen ausreichend langen Zeitraum abgedeckt wird. Dies bedeutet, dass ORP eine an die zentrale Masse gekoppelte Einheit ist. Die mögliche Zeitschrittgröße des Hydrodynamikpakets ist durch das CFL-Kriterium (Hirsch 2007) limitiert, welche durch die kleinsten Zellen mit der schnellsten Dynamik am Innenrand bestimmt wird. Wird der Abstand zwischen äußerem und innerem Rand vergrößert, verlängert dies die Simulationszeit somit wesentlich. Die Zeitschrittlimitierung wird durch den Fargo-Algorithmus verbessert, welcher in Masset (2000) beschrieben wird. Dieser steht in Fosite auch in globalen Geometrien zur Verfügung und ist in Jung (2016) genauer beschrieben. Ähnlich wie im Falle des Shearingsheets wird dabei das Hintergrundgeschwindigkeitsfeld abgezogen und auf den Residualgeschwindigkeiten gerechnet. Des weiteren wird auf das vorhandene Drehimpulserhaltungmodul zurückgegriffen, welches auch in Jung (2016) beschrieben wird. Dies macht insbesondere Sinn, da nicht der Impuls, sondern der Drehimpuls die in einer Akkretionsscheibe rele-

vante Erhaltungsgröße ist. Für die Randbedingungen werden Outflow-Ränder verwendet, welche verhindern, dass Material aus den Scheiben abgezogen wird. Schlussendlich wird das in Abschnitt 3.1.2 angepasste logarithmisch-zylindrische Gitter verwendet, welches eine gute Vektorisierung bei gleichzeitiger Parallelisierung ermöglicht.

Im Folgenden werden die Einflüsse der chemischen Rückkopplung in globalen Simulationen genauer untersucht. Nach einer kurzen grundsätzlichen Betrachtung in Abschnitt 5.3.1, werden die Einflüsse der Zentralmasse und der Kompaktheit der Scheibe in Form von Parameterstudien untersucht. Zudem wird das Verhalten hinsichtlich des Limit-Cycle aus Abschnitt 5.2 betrachtet.

5.3.1. Grundsätzliche Betrachtungen

Abb. 5.16 vergleicht die Dichte Σ bei $M_{\text{BH}} = 10^4 M_{\odot}$ und $r_{\text{in}} = 100 \text{ au}$, einmal mit und ohne Chemie, ansonsten identisch aufgesetzt. Typisch für gravitoturbulente Scheiben sind dabei die deutlich zu sehenden Armstrukturen. Die Natur dieser Moden wurde mit einem Fokus auf protoplanetare Systeme ausgiebig untersucht (Cossins u. a. 2009). So neigen massereichere Scheiben zu kleineren Moden (Lodato und Rice 2004; Lodato und Rice 2005), also ausgeprägteren einzelnen Armen, welche nicht mehr in lokaler Näherung angenommen werden können, sondern einer globalen Betrachtung bedarf. Es ist zu erkennen, dass die Simulation ohne Chemie ausgeprägte Arme im gesamten Rechengebiet aufweist. Die Simulation mit Chemie kann man in zwei Bereiche einteilen, wobei offensichtlich sowohl gravitative Effekte als auch chemische Rückkopplungseffekte eine Rolle spielen. Unter

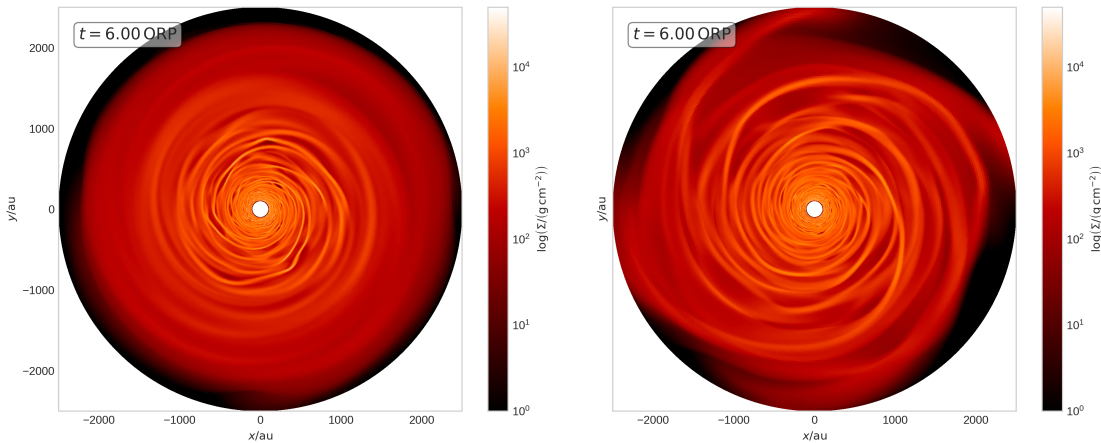


Abbildung 5.16.: Darstellung der Dichte mit (links) und ohne (rechts) chemischer Rückkopplung bei ansonsten gleichem Setup $M_{\text{D}}/M_{\text{BH}} = 0.1$ und einer Zentralmasse $M_{\text{BH}} = 10^4 M_{\odot}$. Beide Simulationen sind nach 6 ORP gezeigt.

Hinzunahme der Ergebnisse der lokalen Simulationen im vorherigen Abschnitt 5.2 würde dabei der äußere Bereich der ruhigen Phase entsprechen in der atomarer Wasserstoff in molekularen umgewandelt wird, da dort die Armstrukturen ausgeschmierter sind. Dort spielt die Chemie damit eine besonders große Rolle, wohingegen der innere Bereich der Scheibe eher dem ohne Chemie ähnelt und normale Gravitoturbulenz zeigt. Um die

Verhaltensweisen in ihren radialen und temporalen Dimension nachvollziehen zu können, muss jedoch auch die zeitliche Entwicklung hinzugezogen werden.

In Abb. 5.17 sind weitere physikalische Größen für die Simulation mit chemischer Rückkopplung dargestellt. Beobachtet man die Zentralebenentemperatur und den atomaren

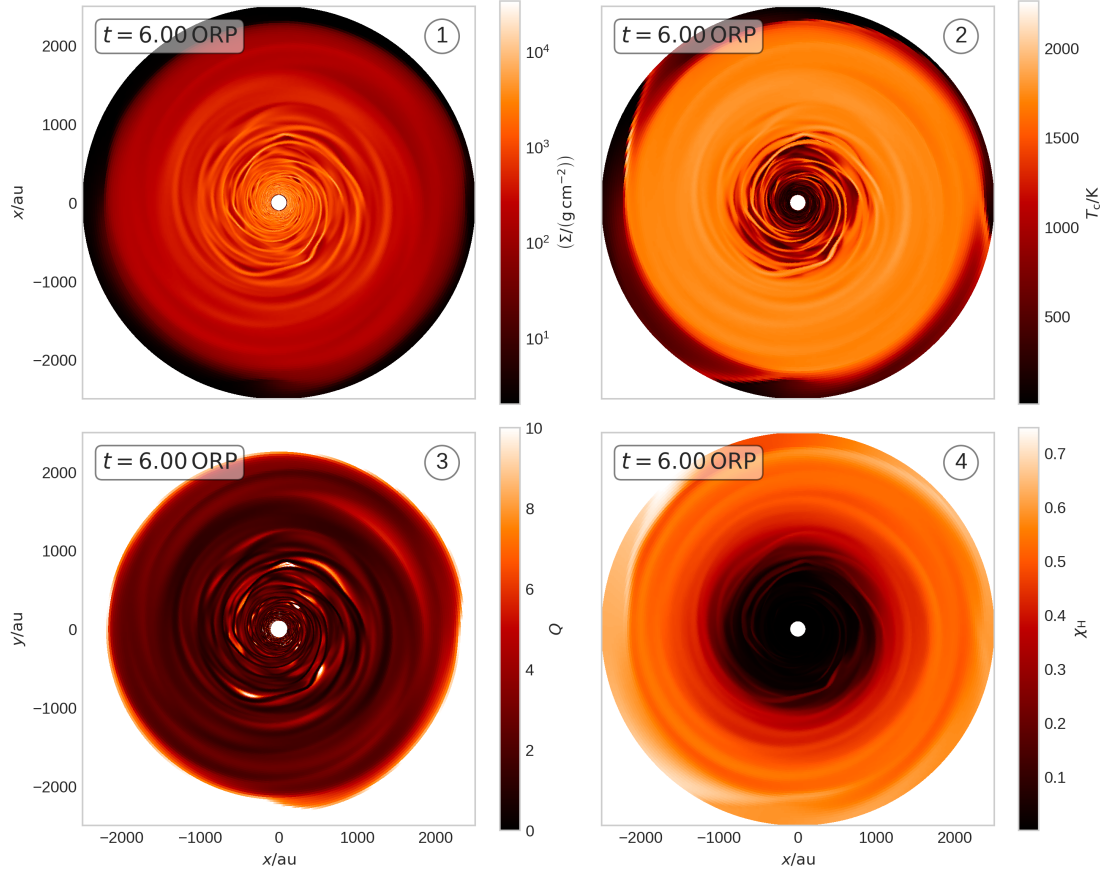


Abbildung 5.17.: Farbkarten verschiedener physikalischer Größen, für eine gravitoturbulente Scheibe $M_D/M_{\text{BH}} = 0.1$ um eine Zentralmasse $M_{\text{BH}} = 10^4 M_\odot$.

Wasserstoffanteil wird ein deutlicher Übergang bei einem Radius $r \approx 1000$ au sichtbar. Die Zentralebenentemperatur folgt dabei im inneren Bereich den Armstrukturen der Dichte, wobei hohe Temperaturen mit hohen Dichten zusammenfallen. Im inneren Bereich ist zudem großteils eine Temperatur $T_c < 500$ K, bei gleichzeitig nahezu keinem atomaren Wasserstoff auszumachen, wohingegen im Außenbereich eine homogene, wesentlich höhere Temperatur $T_c \gtrsim 1500$ K mit dissoziiertem Wasserstoff vorliegt. Der Toomre-Parameter hat nicht einen so deutlichen Übergang, wobei er jedoch in den Außenbereichen homogener als innen ist. Insgesamt bewegt er sich im niedrigen einstelligen Bereich wie es für eine gravitoturbulente AD zu erwarten ist.

5.3.2. Einfluss der Zentralmasse

Um den Einfluss der Zentralmasse zu untersuchen soll diese für eine festgehaltene Massendichteverteilung über einen fixen radialen Bereich variiert werden. Das Scheiben-Masse-Verhältnis wird konstant bei $M_D/M_{BH} = 0.1$ gehalten und der innere Radius bei $r_{in} = 100$ au angenommen, was einen äußeren Radius von $r_{out} = 2500$ au bedeutet. Die

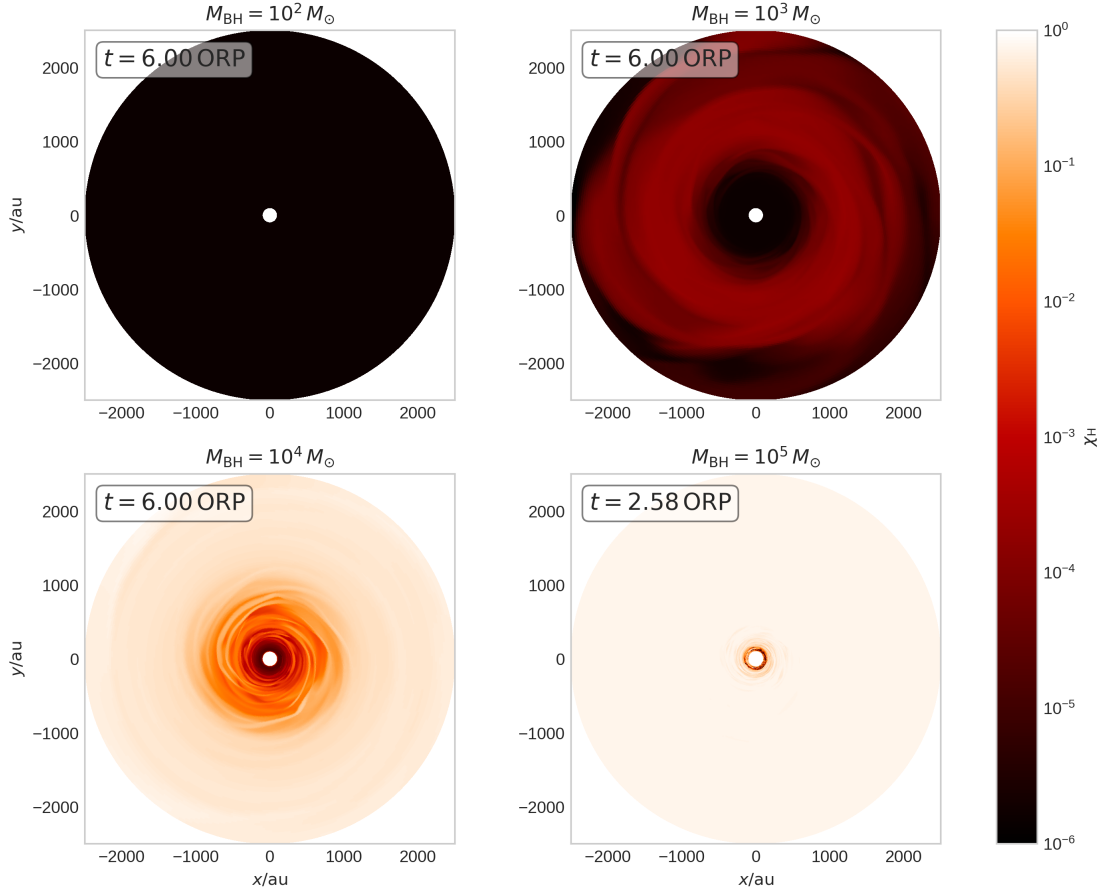


Abbildung 5.18.: Farbkarten des atomaren Wasserstoffanteils bei variabler Zentralmasse und fixer Ausdehnung ($r_{in} = 100$ au) sowie Scheiben-Masse-Verhältnis von 0.1.

Zentralmasse wird zwischen $10^2 M_\odot$ und $10^5 M_\odot$ variiert. In Abb. 5.18 ist der atomare Wasserstoffanteil bei $t = 6$ ORP gezeigt, mit Ausnahme des Setups bei $10^5 M_\odot$, welche zu Ende der Simulationszeit bei $t = 2,57$ ORP dargestellt wird. Ausgehend von einer niedrigen Zentralmasse M_{BH} mit dementsprechend ebenso niedriger Scheibenmasse M_D ist ein zunehmend größerer Anteil der Akkretionsscheibe dissoziiert. Während für die Massen $M_{BH} = 100 M_\odot$ und $M_{BH} = 10^5 M_\odot$ von einer nahezu vollständigen molekularen, bzw. atomaren Zusammensetzung gesprochen werden kann, gibt es für $M_{BH} = 10^3 M_\odot$ eine geringfügige Dissoziation im Bereich $X_H \approx 10^{-4}$. Bei $M_{BH} = 10^4 M_\odot$ liegt ein wesentlicher Teil in atomarer Form mit dem bekannten Übergang bei $r \approx 10^3$ au vor.

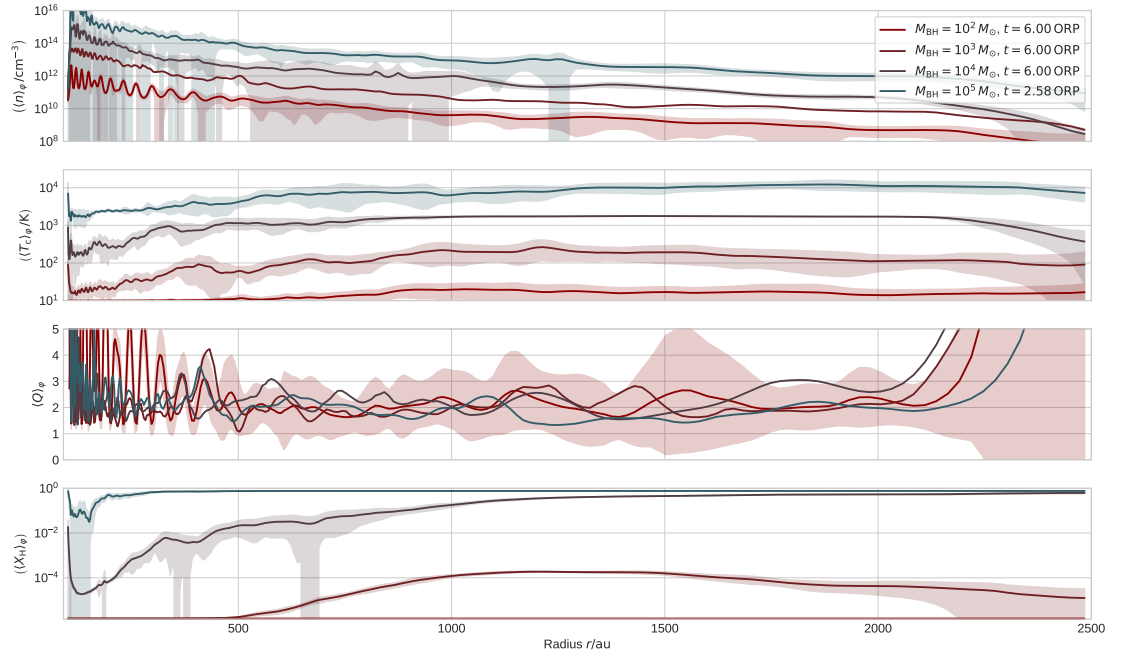


Abbildung 5.19.: Radialer Verlauf verschiedener charakteristischer Größen mit 1σ -Standardabweichung gemittelt in azimuthaler Richtung und aufgetragen über den Radius.

In Abb. 5.19 ist der azimuthal gemittelte Wasserstoffanteil $\langle X_H \rangle_\varphi$, die Teilchendichte $\langle n \rangle_\varphi$, die Zentralebenentemperatur $\langle T_c \rangle_\varphi$ und der Toomre Parameter $\langle Q \rangle_\varphi$ für die vier Zentralmassen zum gleichen Zeitpunkt wie für die Farbkarten (Abb. 5.18) über den Radius r dargestellt.

Die beiden abgeleiteten Zustandsgrößen $\langle n \rangle_\varphi$ und $\langle T_c \rangle_\varphi$ geben einen grundsätzlichen Einblick in die physikalischen Gegebenheiten der Scheiben. Für alle Zentralmassen existiert dabei ein vergleichbarer charakteristischer Verlauf. Die Teilchendichte $\langle n \rangle_\varphi$ fällt nach außen zunehmend ab, was bei einem r^{-1} Verlauf für die integrierte Dichte Σ zu erwarten ist. Es wird auch deutlich, dass sich die Teilchendichten zum größten Teil im Nichtgleichgewichtsbereich (vgl. Abschnitt 2.3.2) bewegen also $n < 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ gilt. Davon ausgenommen sind $M_{\text{BH}} = 10^5 M_\odot$ und in geringerem Maße auch $M_{\text{BH}} = 10^4 M_\odot$ am inneren Rand. Die Temperatur nimmt bei zunehmender Zentralmasse und Radius zu, erreicht bei letzterer dann ein Maximum bzw. konstanten Wert und flacht am äußeren Rand, eventuell auch auf Grund von Randeffekten, wieder ab. Insbesondere interessant ist die Standardabweichung für $M_{\text{BH}} = 10^4 M_\odot$, welche ab $r \approx 10^3 \text{ au}$ fast vollständig verschwindet. Diese Region fällt gerade mit jenem Bereich zusammen, in dem der atomare Anteil am Wasserstoff dominant wird, während der Verlauf der Standardabweichung für z.B. $M_{\text{BH}} = 10^3 M_\odot$ über das gesamte Rechengebiet ähnlich bleibt.

Im Fall von $M_{\text{BH}} = 10^2 M_\odot$ liegt ein Teil des Rechenbereiches am Innenrand nahe der unteren Temperaturschranke von T_c . Für $M_{\text{BH}} = 10^5 M_\odot$ erreichen die Temperaturen

Werte $> 10^4$ K was nicht mehr vom physikalischen und insbesondere chemischen Modell gestützt wird. Hier ist allerdings der Innenbereich interessant, bei dem eine Teilchendichte von $\langle n \rangle_\varphi \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und eine Temperatur von $\langle T_c \rangle_\varphi \sim 2000$ K vorliegt, welcher dem Zustand in den lokalen Näherungen aus Abschnitt 5.2.2 mit $T_{\text{init}} = 400$ K am nächsten kommt. Der Mittelwert des Toomre Parameters ist mit $\langle Q \rangle_\varphi \approx 2 - 3$ weitestgehend unabhängig vom Radius und dem gewählten Setup. Nur am Innen- und Außenrand sind hier Abweichungen zu sehen. Während der Außenbereich dabei höchstwahrscheinlich durch die Randbedingungen bedingt ist, sind Oszillation des Parameters im Innenbereich schwieriger abzugrenzen. Dass die Effekte am Außenbereich klarer und eindeutiger sind, kann durch die dort wesentlich größeren Zellen und langsamere Dynamik erklärt werden. Auch hier sind wieder die Standardabweichungen von besonderem Interesse, welche auf lokal gravitativ instabile Bereiche hindeutet. Vergleicht man dazu die Fälle $M_{\text{BH}} = 10^3 M_\odot$ und $M_{\text{BH}} = 10^4 M_\odot$, so sieht man ein mit der Chemie einhergehendes unterschiedliches Verhalten. Während die nur gering dissoziierte Simulation bei $M_{\text{BH}} = 10^3 M_\odot$ ein ähnliches, radial gegebenenfalls leicht größer werdende Standardabweichung zeigt, enthält die Simulation für $M_{\text{BH}} = 10^4 M_\odot$ in jenen Regionen welche durch atomaren Wasserstoff dominiert sind ($r > 10^3$ au) eine deutlich kleiner werdende Standardabweichung. Dies steht im Einklang mit dem kleiner werdenden Schlauch der Teilchendichte $\langle n \rangle_\varphi$ und den Dichte-Farbkarten in Abb. 5.16. Dort kann die entsprechende Region mit schwächeren Armstrukturen betrachtet werden.

Zeitliche Entwicklung

Die bisher gemachten Betrachtungen sind zeitlich gesehen Momentaufnahmen. Diese nehmen an, dass ein nahezu stationärer Zustand erreicht wurde, unter der Annahme, dass sich die Zentralmasse nicht zu schnell ändert. Insbesondere unter Hinzunahme der Beobachtungen in Abschnitt 5.2 muss jedoch davon ausgegangen werden, dass diese Betrachtung unvollständig ist und eine zeitliche Abhängigkeit und Periodizität möglich ist. Die Frage ist, ob die nötigen räumlichen und zeitlichen Skalen abgedeckt werden, um die entsprechenden Effekte abbilden zu können. Insbesondere in jenen Simulationen, bei denen ein großer Unterschied der chemischen Komponenten in atomarer und molekularer Form innerhalb des Rechengebietes vorhanden ist, wurde bereits gesehen, dass ein Einfluss auf die Morphologie der Scheibe besteht (Abb. 5.16).

In Abb. 5.20 sind die Werte zusätzlich über den radialen Ausschnitt $5 r_{\text{in}} \leq r \leq 15 r_{\text{in}}$ gemittelt und zeitlich aufgetragen. Der Innen- und Außenrand wird ausgespart um Effekte durch Randbedingungen zu verringern. Die Teilchendichten $\langle n \rangle_{\varphi,r}$ erreicht nach anfänglichen kleinen Schwankungen schnell einen nahezu konstanten Wert. Dies ist zu erwarten, solange es nicht zu große Umverteilungen gibt, hat aber keine Aussagekraft über die Akkretionsrate, welche in einem stationären Zustand ebenfalls zu einem konstanten $\langle n \rangle_{\varphi,r}$ führen würde. Die Temperatur $\langle T_c \rangle_{\varphi,r}$ zeigt ein ähnliches Verhalten wobei hier nochmals erwähnt werden sollte, dass für $M_{\text{BH}} = 10^5 M_\odot$ die Temperatur mit $\langle T_c \rangle_{\varphi,r} \gtrsim 10^4$ K zu Stoßionisation führen könnte und somit nicht mehr vom Modell abgebildet werden wird. Der Toomre Parameter $\langle Q \rangle_{\varphi,r}$ unterscheidet sich lediglich in der Initialisierungsphase, wobei insbesondere $M_{\text{BH}} = (10^4; 10^5) M_\odot$ einen großen Sprung mit teilweise $\langle Q \rangle_{\varphi,r} > 10$

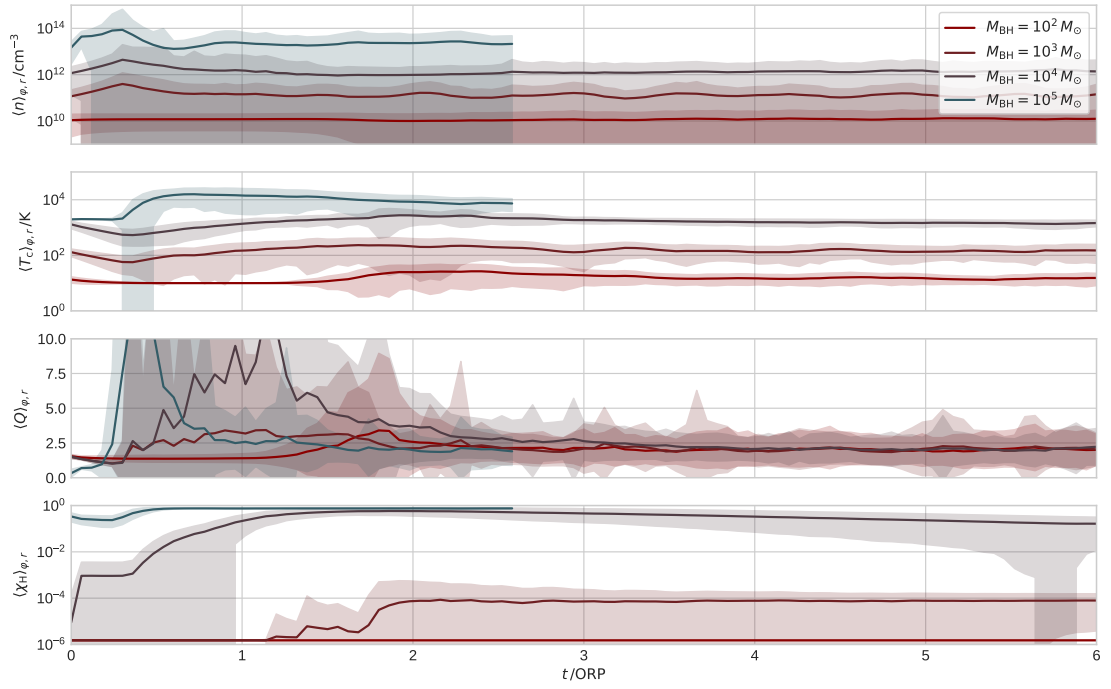


Abbildung 5.20.: Zeitlicher Verlauf von azimuthal und radial ($5r_{\text{in}} \leq r \leq 15r_{\text{in}}$) gemittelten Größen.

aufweisen. Der Grund hierfür liegt in der Rückkopplung mit der Chemie, welche sich, wie in dem Plot zu $\langle X_H \rangle_{\varphi,r}$ zu sehen, ebenfalls stark ändert. Hier ist zudem erwähnenswert, dass $\langle X_H \rangle_{\varphi,r}$ in der Simulation bei $M_{\text{BH}} = 10^4 M_{\odot}$ keinen konstanten Wert erreicht, sondern offensichtlich ein Maximum bei $t \approx 2$ ORP aufweist und in der nachfolgenden Zeit kontinuierlich kleiner wird.

Während für $M_{\text{BH}} = (10^2; 10^3; 10^5) M_{\odot}$ davon ausgegangen werden kann, dass keine größeren Änderungen mehr eintreten, kann dieser Schluss über die Simulation nach $t_{\text{sim}} = 6$ ORP nicht für $M_{\text{BH}} = 10^4 M_{\odot}$ gezogen werden, da dort kein stationärer Zustand in der Chemie erreicht wird.

5.3.3. Langzeitverhalten bei $M = 10^4 M_{\odot}$ und $R_{\text{in}} = 100$ au

Um das Langzeitverhalten nachvollziehen zu können werden einzelne Simulationen, welcher einen Einfluss durch Dissoziation vermuten lassen mit erhöhter Laufzeit wiederholt und so lange durchgeführt wie es die Walltime¹ erlaubt, maximal jedoch bis zu 30 ORP. In Abb. 5.21 ist die entsprechende Simulation für $10^4 M_{\odot}$ mit innerem Radius $r_{\text{in}} = 100$ au zu sehen, welche bis ≈ 8 ORP reicht und im Folgenden detaillierter untersucht werden soll. Zusätzlich ist ein Vergleichslauf bis 6 ORP ohne chemischen Einfluss dargestellt, wobei

¹Die maximale Simulationszeit auf der NEC-SX Tsubasa beträgt zum Zeitpunkt der Erstellung der Doktorarbeit 48 h.

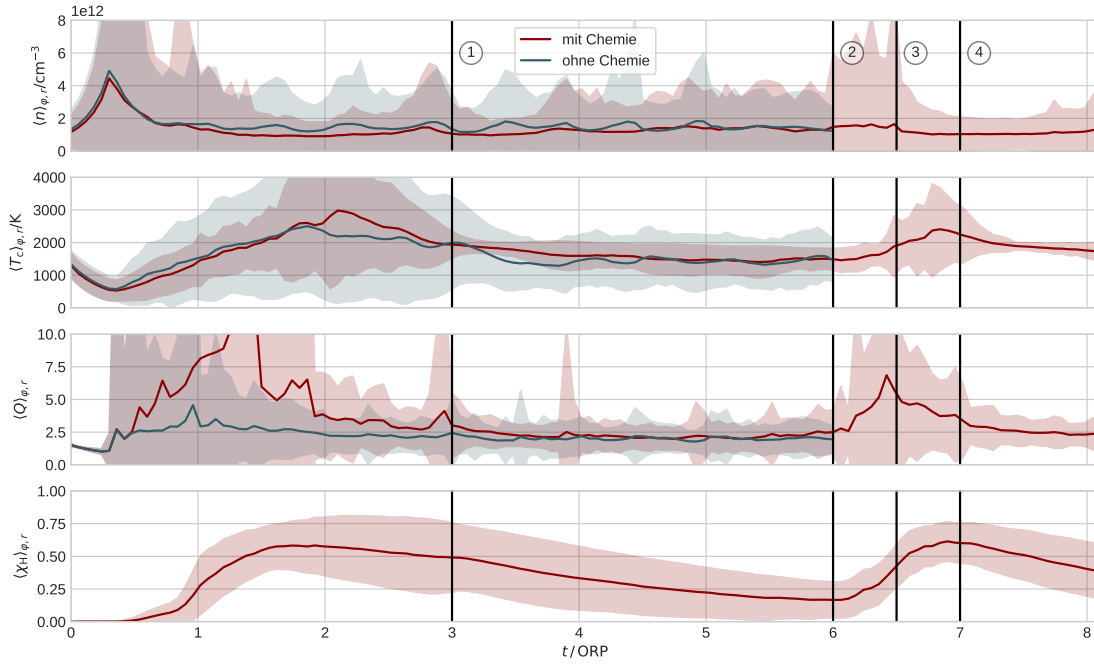


Abbildung 5.21.: Zeitlicher Verlauf von azimuthal und radial ($5 r_{\text{in}} \leq r \leq 15 r_{\text{in}}$) gemittelten Größen bei verlängerter Laufzeit für $M_{\text{BH}} = 10^4 M_{\odot}$.

von einem rein molekularen Wasserstoff für die Bestimmung von $\langle n \rangle_{\varphi,r}$ ausgegangen wird. Im Gegensatz zu Abb. 5.20 wurden alle Größen linear aufgetragen, um kleinere Unterschiede sichtbar machen zu können und da sich die Variation der Größen für das gleiche Setup nicht über mehrere Größenordnungen erstreckt.

Vergleicht man die Simulation mit Abb. 5.20 kann dabei ein weiteres Dissoziationsevent beobachtet werden. Nach den 6 ORP steigt der Anteil am atomaren Wasserstoff wieder an, wobei ein ähnlich hoher Wert wie nach der Initialisierung erreicht wird. Wie hoch dieser letztendlich ist, ist auch vom verwendeten radialen Ausschnitt der Mittelung abhängig. Im Vergleich ist der Verlauf der Temperaturen $\langle T_c \rangle_{\varphi,r}$ zu Beginn ähnlich, im späteren Verlauf hat die Simulation ohne Chemie jedoch eine größere Standardabweichung. Das erreichte Maximum der mittleren Temperatur ist wiederum für die Simulation mit Chemie größer. Zusammen mit den Ergebnissen aus den lokalen Simulationen wäre hier eine denkbare Erklärung, dass Exzesse in der Temperatur durch Dissoziation abgefangen werden und lokal atomarer Wasserstoff erzeugt wird, gleichzeitig die dadurch hervorgerufene Kühlung aber zu einer Verstärkung der Gravitoturbulenz inklusive Fragmentation führt, wodurch die höher erreichte gemittelte Gesamttemperatur erklärt werden kann.

Wie schon im vorherigen Abschnitt wurden in Abb. 5.21 vertikale Markierungslinien eingetragen, um charakteristische Momente hervorzuheben und die Zeitpunkte den Farbkarten der Teilchendichte n (Abb. 5.22) und des atomaren Wasserstoffs X_{H} (Abb. 5.23) zuzuordnen. Beide Abbildungen zeigen das schon bekannte Bild aus Abschnitt 5.2, hier allerdings nicht mehr an das lokale Setup gebunden und in einem anderen Parameterbe-

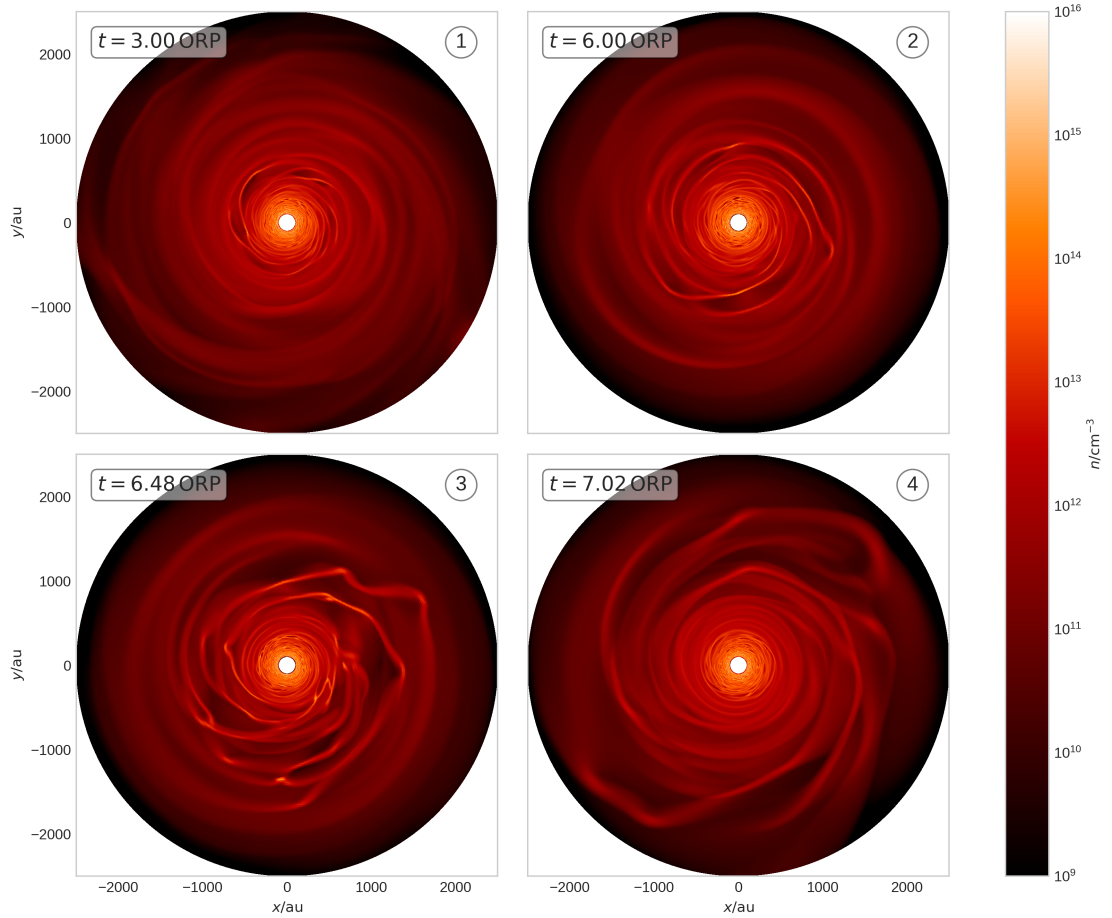


Abbildung 5.22.: Farbkarten zu den Anzahlichten n der in Abb. 5.21 vermerkten Zeitpunkte.

reich. Zu Beginn kaum vorhandene Armstrukturen bei $t = 3$ ORP (①) in Abb. 5.22 gehen mit einem hohen Anteil an atomarem Wasserstoff X_{H} einher. Letzterer nimmt in einem zunehmend größer werdenden radialen Bereich ab, da die chemische Heizung der angelegten Kühlung entgegenwirkt. Dort, wo diese Heizung wegfällt, werden Armstrukturen wieder dominanter ($t = 6$ ORP, ②), bis es schlussendlich zu erneuten Dissoziationsevents mit anschließender Fragmentation kommt ($t = 6,48$ ORP, ③). Ist wieder ein wesentlicher Teil in Form atomarem Wasserstoffs vorhanden, beginnt der Grenzyklus von Neuem ($t = 7,02$ ORP, ④).

Wasserstoff

Die Mittelung über einen selbst definierten radialen Bereich erlaubt nur einen sehr ungenauen Einblick in die Gegebenheiten der Scheiben. Daher ist in Abb. 5.24 der Wasserstoff-Anteil in Form einer Farbkarte über Zeit t und Radius r , zusammen mit eingetragenen radialen Schnitten, dargestellt. In der Farbkarte sind dabei deutliche Keim-

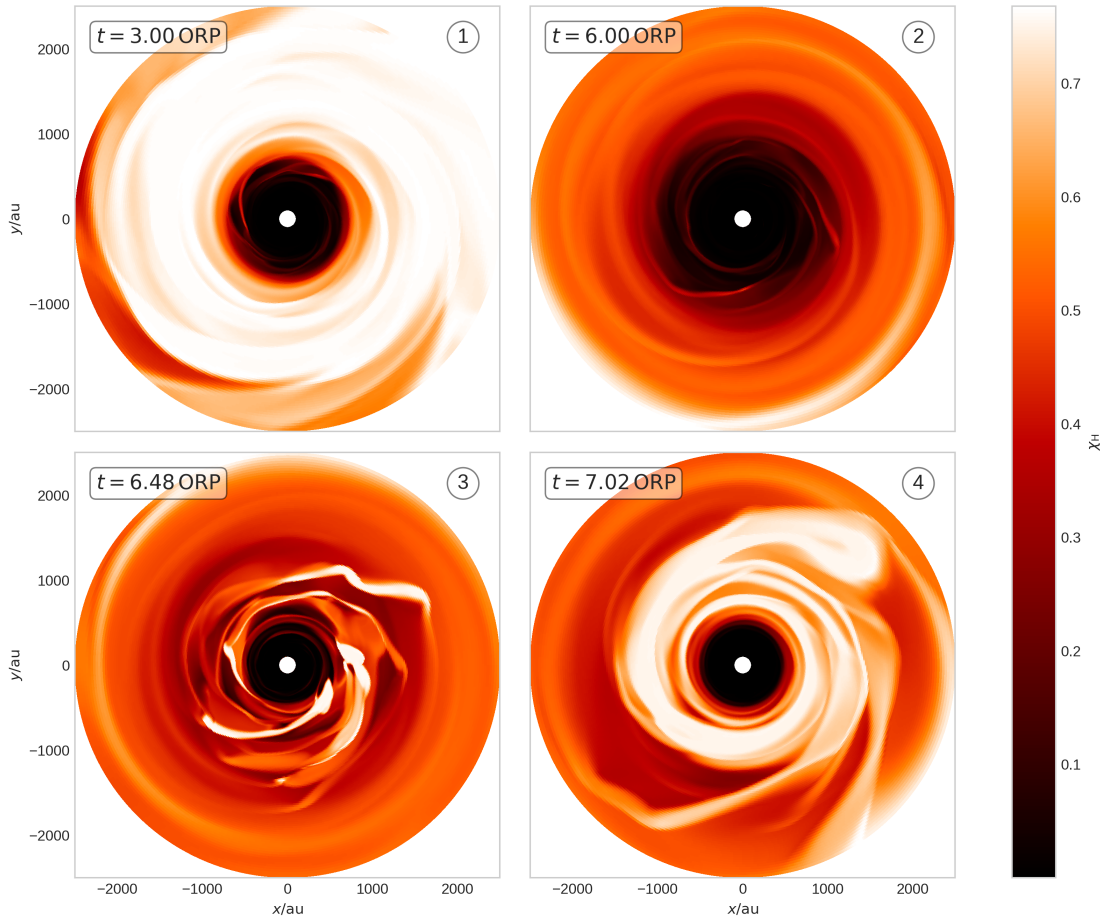


Abbildung 5.23.: Farbkarten des atomaren Wasserstoffanteils X_H der in Abb. 5.21 vermerkten Zeitpunkte.

zellen einer Wasserstoffdissoziation zu beobachten, welche bei kleinen Radien $r \approx 500$ au beginnend nach außen hin stattfindet. Der Prozess startet innen, da die parametrisierte Kühlung dort nach Gl. 2.7 kleiner und die Scheibe somit an diesen Orten früher gravitativ instabil ist. Nachfolgend wird zu immer größeren Radien ein Maximum erreicht, während zeitgleich der Anteil am atomaren Wasserstoff im Innenbereich wieder abnimmt. Ist beim inneren Radius kein atomarer Wasserstoff mehr vorhanden kommt es zur Entstehung einer neuen Keimzelle, welche schnell in Bereiche vorheriger Dissoziation bei größeren Radien hineinwächst. Zudem ist eine scharfe Grenze bei kleinsten Radien vorhanden. Der Grund dafür kann unter Betrachtung von Abb. 5.25 durch die durchwachsenen Werte für den Toomre Parameter erklärt werden, welcher auf Grund seiner Abhängigkeit zu Ω (vgl. Gl. 2.5) in der Nähe der Zentralmasse groß wird. So gilt bei dominierender Zentralmasse $Q \propto R^{-1/2}$ (vgl. Schleicher u. a. 2016) und in der Abbildung wird dies durch ein $Q > 3$ sichtbar. Dies führt zu einer geringeren Temperatur was bei größer werdender Dichte zum Innenrand eine Dissoziation erschwert (vgl. Abb. 3.9). Die Schnitte sind im

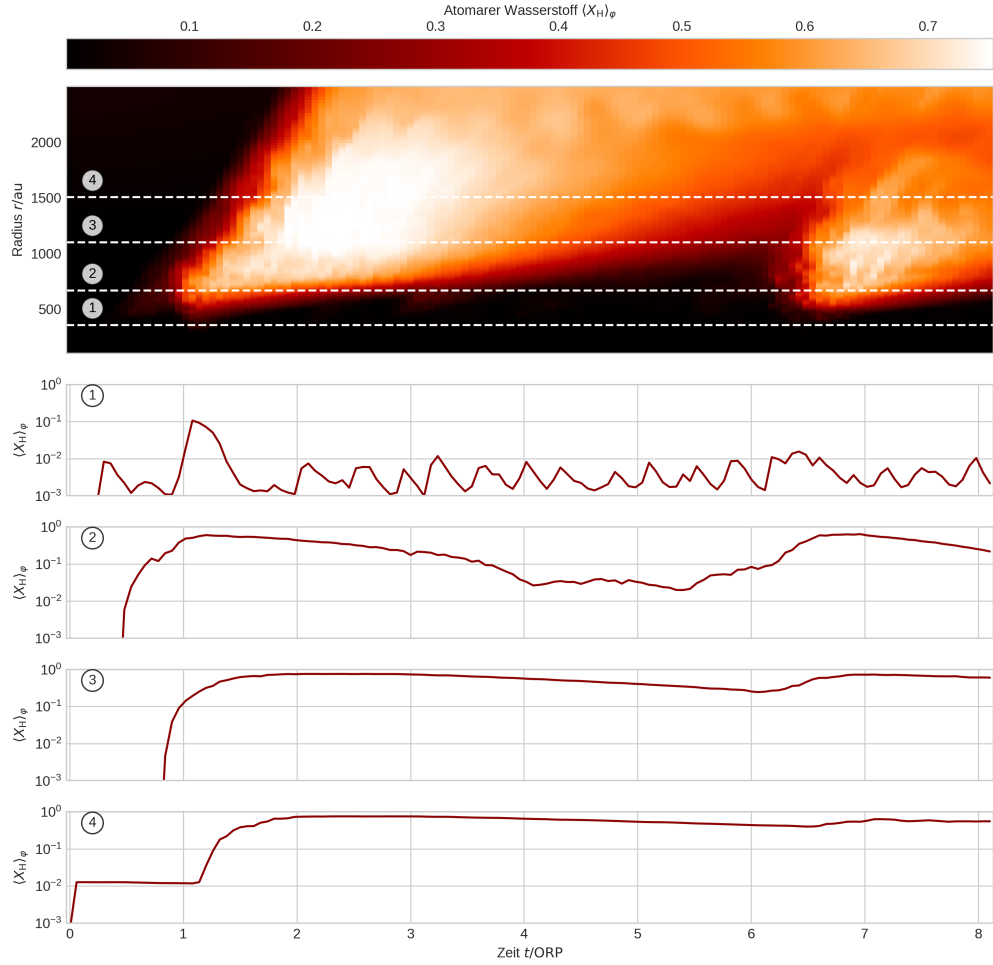


Abbildung 5.24.: Farbkarte des atomaren Wasserstoff-Anteils $\langle X_H \rangle_\varphi$ aufgetragen über Radius r und Zeit t . Darunter Schnitte entlang der dargestellten horizontalen Linien.

Gegensatz zur Farbkarte logarithmisch aufgetragen. Hier ist insbesondere der Schnitt ② interessant, da dort sichtbar wird, wie die Re-Dissoziation bei $t \approx 6,5$ ORP stattfindet. Zudem wird deutlich, dass bei größeren Radien nicht ausreichend Zeit für einen ähnlichen Abbau atomaren Wasserstoffs ist, da bereits die Front der zweiten Keimzelle bei diesen Radien hineinläuft. Schlussendlich sieht man in der logarithmischen Darstellung für Schnitt ④ zu Beginn einen konstanten Zustand, mit $X_H \approx 10^{-2}$, welcher durch die Anfangsbedingungen bedingt und künstlichen Ursprungs sein könnte. Dort kühlt das Gas aus seinem Anfangszustand noch ab und es gibt kaum Umverteilung, da die Gravitotubulenz noch nicht greift. Dadurch ist dieser Bereich chemisch inaktiv und ändert sich über viele Zeitskalen nicht, bis die Gravitoturbulenz auch dort stärker wird und die Temperaturen in einen für die Dissoziation interessanten Bereich führt. Betrachtet man die Schnitte ①, ② und ③ genauer, so wird zudem deutlich, dass diese zu Beginn ebenfalls ein Plateau bei $X_H \approx 10^{-5}$ besitzen bis die Chemie aktiv wird, was jedoch

auf Grund besserer Darstellbarkeit nicht im Plot sichtbar wird. Schlussendlich sind im weiteren Verlauf und in der Farbkarte keine offensichtlichen Kanten zu erkennen, welche darauf schließen lassen könnten, dass dies einen Einfluss auf den späteren Verlauf der Simulationen haben könnte.

Toomre-Parameter

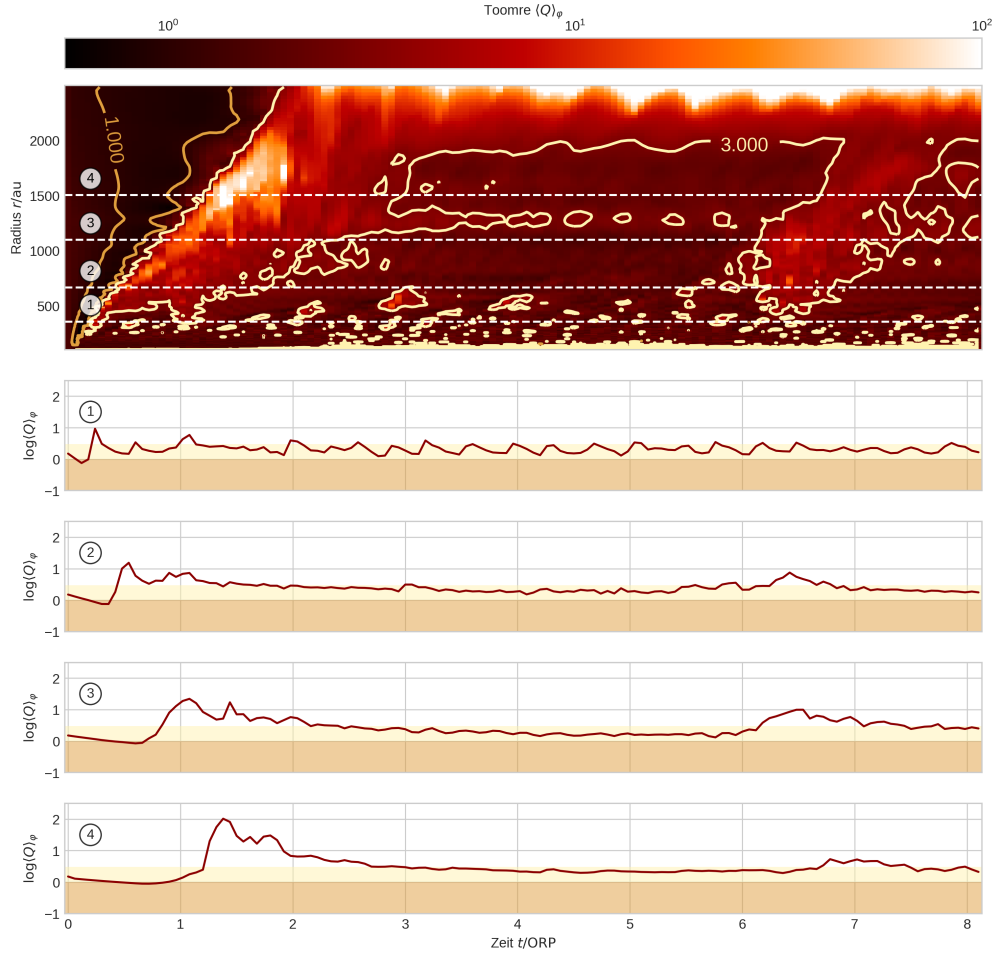


Abbildung 5.25.: Farbkarte des Toomre Parameters $\langle Q \rangle_\phi$, aufgetragen über Radius r und Zeit t . Darunter Schnitte entlang der dargestellten horizontalen Linien.

In Abb. 5.25 ist der Toomre-Parameter $\langle Q \rangle_\phi$ im selben Stil wie für den atomaren Wasserstoffanteil dargestellt. Der Plot zeigt in logarithmischer Skalierung den in Gl. 2.5 beschriebenen Wert. Zusätzlich sind der Farbkarte Konturen bei $\langle Q \rangle_\phi = 1$ und $\langle Q \rangle_\phi = 3$ eingefügt, um einen Überblick zu instabilen Regionen bekommen zu können. Unter theoretisch idealen Bedingungen wird eine Scheibe gravitativ instabil, wenn $\langle Q \rangle_\phi < 1$ gilt. Der tatsächliche Wert, bei dem sich die Simulationen im Fall ohne Chemie einpendeln liegt jedoch ähnlich wie bei den lokalen Simulationen bei $\langle Q \rangle_\phi \lesssim 3$. Es kann gesehen

werden, dass die Scheibe initial schnell über das gesamte Rechengebiet stark Toomre instabil ($\langle Q \rangle_\varphi < 1$) wird. Bei zunehmend größer werdenden Radien nimmt das instabile Verhalten mit $\langle Q \rangle_\varphi > 10$ in kurzer Zeit ab. Wie zuvor gesehen geht mit dieser Phase auch eine starke Dissoziation einher. Während $\langle Q \rangle_\varphi$ danach bei großen Radien $r \gtrsim 2000$ au dauerhaft einen hohen Wert behält, gilt in einem Großteil des Rechengebietes über lange Zeiten $1 < Q < 3$, partiell aber auch größer. Hier befindet sich die Scheibe also wieder in einer Mischform, in der Gravitoturbulenz vorhanden ist, diese aber nicht unbedingt alleine das Verhalten dominiert, sondern mit der Chemie wechselwirkt und ist somit wieder bei der ruhigen Phase in der atomarer Wasserstoff abgebaut wird, zu verorten. Im innersten Bereich $r \lesssim 500$ au ist das Bild mit $\langle Q \rangle_\varphi \approx 3$ uneinheitlicher, es zeigen sich jedoch häufiger Region mit $\langle Q \rangle_\varphi > 3$ was auf eine schwächere Gravitoturbulenz hindeutet.

Temperatur

In Abb. 5.26 ist die Temperatur dargestellt. Diese weist eine zum Wasserstoff weniger gleichmäßige, granulare Struktur auf, hat sein Maximum im $t-r$ -Raum aber an ähnlicher Stelle. Dies steht im Gegensatz zum Toomre-Parameter, welcher eine andere Verteilung verfolgt und sein Maximum direkt hinter der anfänglichen Dissoziationsfront hat. Da der Toomre-Parameter aber linear von der Schallgeschwindigkeit (und damit \sqrt{T}) abhängt, deutet dies darauf hin, dass auch die anderen auf Q einwirkenden Größen, die integrierte Dichte Σ und die Winkelgeschwindigkeit Ω einen dominierenden Anteil am betrachteten Prozess haben.

5.3.4. Akkretionsflüsse & Beobachtbarkeit

Abschließend soll untersucht werden, ob ein durch die chemo-gravitative Instabilität getriebener Akkretionsfluss in dem hier betrachteten Setup zu einer ausreichend starken Änderung der Leuchtkraft führen kann, um beobachtbar zu sein. Die Leuchtkraft einer Scheibe ist dabei durch

$$L = \frac{GM\dot{M}}{2r_0} \approx \eta \dot{M} c^2 \quad (5.8)$$

gegeben (Schneider 2006; Shakura und Sunyaev 1973), wobei \dot{M} die pro Zeiteinheit akkretierte Masse und r_0 der innere Radius der Scheibe (nicht des Rechengebietes) ist. Zugleich kann die Leuchtkraft über einen Effizienzfaktor η , welcher für BHs typischerweise bei ~ 0.1 angenommen wird (Schneider 2006), bestimmt werden. Die Leuchtkraft hängt somit linear mit der Akkretionsrate zusammen. In Abb. 5.27 ist $\langle \dot{M} \rangle_\varphi$ für das bekannte Setup mit $M = 10^4 M_\odot$ bei $R_{\text{in}} = 100$ au über Radius und Simulationszeit in Form einer Farbkarte mit Schnitten dargestellt. Auf der Farbkarte sind im zeitlichen Verlauf bei den zwei Dissoziationsevents Fluktuationen in $\langle \dot{M} \rangle_\varphi$ zu erkennen. Insbesondere im ersten Fall ist eine klare Front zu sehen, welche mit der initialen Fragmentation und der dazugehörigen turbulenten Erzeugung atomaren Wasserstoffs zusammenfällt. Im globalen Setup beginnt dieser Prozess bei den kleinsten Radien, da dort auch die Kühlzeitskala am kleinsten ist und die entsprechenden Bereiche am schnellsten gravitativ instabil

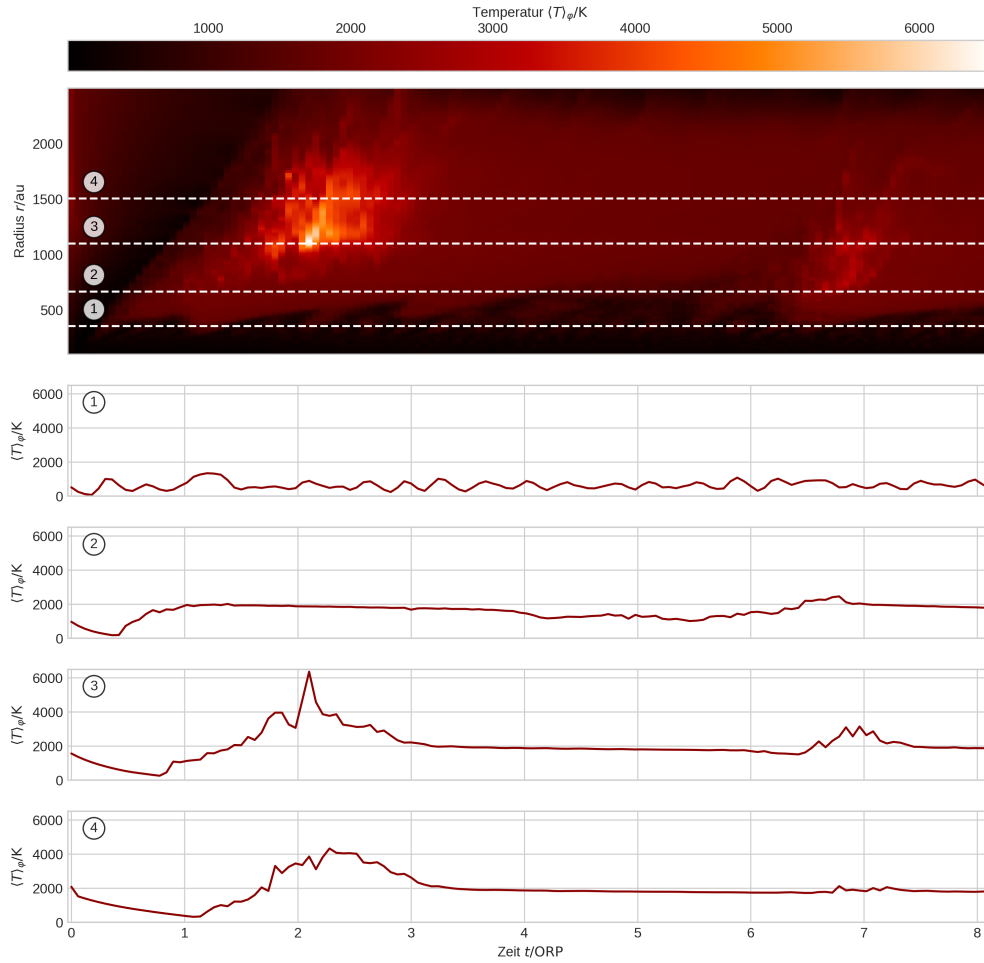


Abbildung 5.26.: Farbkarte der über φ gemittelten Temperatur $\langle T_c \rangle_\varphi$, aufgetragen über Radius r und Zeit t . Darunter Schnitte entlang der dargestellten horizontalen Linien.

werden. Dieser Trend ist auch bei der zweiten Dissoziationen, wenn auch schwächer, zu erkennen. Auf Grund der kleineren Kühlzeitskala wird der atomare Wasserstoff auch dort schneller aufgebraucht. Hinter der Dissoziationsfront ist das Verhalten uneindeutiger. Grundsätzlich ist zu erwarten, dass in einem turbulenten Gas der größere Teil des Materials durch Drehimpuls umverteilung zu kleineren Radien wandert und diese Bereiche wiederum instabil werden lässt. Werden jedoch die inneren Bereiche zuerst instabil (was hier grundsätzlich der Fall ist), wird das Material dort gegebenenfalls abgetragen und es entsteht ein Spalt, der einen weiteren Zufluss durch Außenbereiche verhindert. In den Schnitten von Abb. 5.27 wird für vier markierte Radien $\langle \dot{M} \rangle_\varphi$ dargestellt. Für den kleinsten Radius ist kaum Variation zu Zeiten großer Dissoziation ersichtlich. Dies liegt daran, dass die Scheibe dort keine Gravitoturbulenz aufweist. Vergleicht man mit Abb. 5.23 so sieht man, dass dort auch keine Dissoziation stattfindet. Geht man jedoch zu größeren Radien werden starke Variationen in der Akkretionsrate um die Dissoziationszeiträume sichtbar.

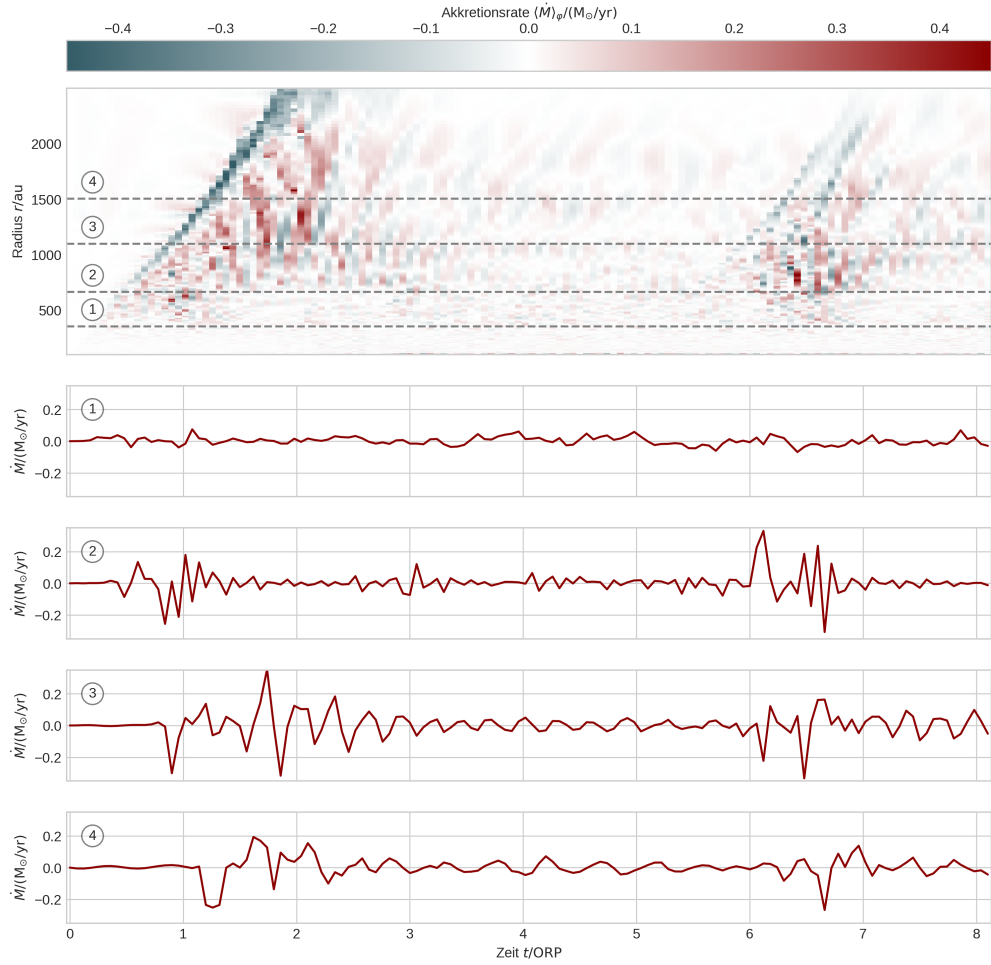


Abbildung 5.27.: *Azimal gemittelte Akkretionsrate bei verschiedenen Radien und über die Zeit für die Simulation bei $M = 10^4 M_\odot$ und $r_{\text{in}} = 100$ au.*

Gleichzeitig ist $\langle \dot{M} \rangle_\varphi$ zwischen diesen Zeiträumen in einer ähnlichen Größenordnung wie im inneren Bereich. Die Größenordnung der maximalen Akkretionsrate liegt dabei bei $\sim 0,06 M_\odot \text{a}^{-1}$ (im Bereich $3,3 \text{ ORP} < t < 5,7 \text{ ORP}$). Zugleich sind die Ausschläge in den aktiven Bereichen mit $\sim 0,3 M_\odot \text{a}^{-1}$ (für Radien ②, ③ und ④) um einen Faktor 5 größer. Zudem muss der zeitlich stark oszillierende Charakter betont werden, es handelt sich also bei diesen Größen nicht um einen Wert, welcher sich direkt in Gl. 5.8 als Leuchtkraft interpretieren lässt. Hier wäre auch wichtig, dass sich die Masse sich nicht lokal umverteilt, sondern, bis über den Innenradius zum Zentralobjekt wandert. Dies wird aus den Simulationen nicht ersichtlich, da dort nicht ausreichend lange Simulationszeiten abgedeckt werden.

Helligkeitsschwankungen über Leuchtkraftunterschiede am Innenrand nach Gl. 5.8 zu bestimmen ist somit schwierig, da die gravitoturbulenten Scheiben in den äußeren Bereichen instabil werden und die Dynamik auf vielfach längeren Zeitskalen stattfindet als

in den inneren Bereichen. Zudem macht sich in dem Beispiel oben bereits bemerkbar, dass die lokalen Variationen im Außenbereich beim weiteren Verlauf durch die Scheibe gedämpft werden und höchstens eine gemittelte Variation am Innenrand beobachtbar wird. Für tiefere Einblicke müssten die Simulationen über längere Zeiträume mit einem weiter nach innen verschobenen Innenrand durchgeführt werden. Hinzu kommt, dass eine tatsächliche Beobachtung für das oben gemachte Beispiel schwierig wäre, da die Zeitskalen für menschliche Verhältnisse lang sind. Dabei gilt für das Beispiel aus Abb. 5.27, dass $1 \text{ ORP} \approx 1250 \text{ a}$, womit die aktive Phase ein- bis zweitausend Jahre dauert und die Zwischenphase $\approx 4000 \text{ a}$ in Anspruch nimmt. Es wäre also wünschenswert, wenn man die lokalen Gegebenheiten und Fluktuationen direkt beobachten könnte.

Weitere Beobachtungsmöglichkeiten

Als Alternative können direkte Beobachtungen in Betracht gezogen werden. In räumlich aufgelösten ADs sind die Bewegungen lokaler Fragmente innerhalb der Scheibe sichtbar, welche auf kürzeren Zeitskalen als denen des Grenzyklus stattfindet. So könnte man in dem hier betrachteten Beispiel bei einem Radius von $r = 10^3 \text{ au}$ ein Fragment innerhalb von $\approx 50 \text{ a}$ um $\approx 10^\circ$ wandern sehen. Problematisch ist es eher ein geeignetes Objekt zu finden. Grundsätzlich wird davon ausgegangen, dass der Grenzyklus vor allem im frühen Universum eine Rolle spielen kann, welches auf Grund der großen Entfernung nicht für direkte Beobachtungen in Betracht kommt. Selbst wenn man eine Scheibe z.B. in der lokalen Gruppe in einem Abstand von $d = 10^6 \text{ ly}$ finden würde, bei dem der Prozess vorkomme, würde die hier betrachtete AD mit ihrem Durchmesser von 5000 au unter einem Winkel von $\approx 0,0004''$ erscheinen. Gleichzeitig hat das Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA), das (allein betrachtet) am besten auflösende Radioteleskop der Welt, eine maximale Auflösung von $0,005''$ (Cortes u. a. 2021), was mehr als eine Größenordnung über dem gesuchten Bereich liegt. Auch bei entsprechenden Teleskopen im sichtbaren Bereich wie dem Very Large Telescope Interferometer (VLTI) liegt die bestmögliche Auflösung bei $0,002''$ (ESO 2022). Zudem wäre Voraussetzung, dass die Scheibe im richtigen Wellenlängenbereich betrachtet werden kann.

So kann auch das Spektrum der Scheibe hinzugezogen werden. In Abb. 5.28 (links) ist dazu der azimuthal gemittelte Verlauf der Zentralebenentemperatur $\langle T_c \rangle_\varphi$ für die fragmentierte (bei $t = 2,25 \text{ ORP}$) und die ruhige Phase (bei $t = 4,92 \text{ ORP}$) dargestellt. Dies entspricht jeweils einem vertikalen Schnitt in der Farbkarte von Abb. 5.26. In einem ersten Modell können die Ringe als Schwarzstrahler angenommen und für das Spektrum in Form von

$$S_\nu = \frac{\cos \gamma}{d^2} \int_{r_{\text{in}}}^{r_{\text{out}}} B_\nu(T(r)) 2\pi r dr \quad (5.9)$$

integriert werden (Kato u. a. 2008; Frank u. a. 2002). Dabei ist γ die Inklination und d die Distanz der AD zum Beobachter. $B_\nu(T(r))$ ist das temperaturabhängige Spektrum eines Schwarzstrahlers (vgl. Kato u. a. 2008). Abb. 5.28 (rechts) zeigt Gl. 5.9 beispielhaft bei einem Abstand $d = 10^6 \text{ ly}$ und einer Inklination $\gamma = 0$. Wie von einem Schwarzstrahler zu erwarten, führt die höhere Temperatur zu einer Verschiebung hin zu höheren Frequenzen ν . Ein bekanntes Merkmal, der Ausbildung eines mittleren Potenzgesetzes im Spektrum,

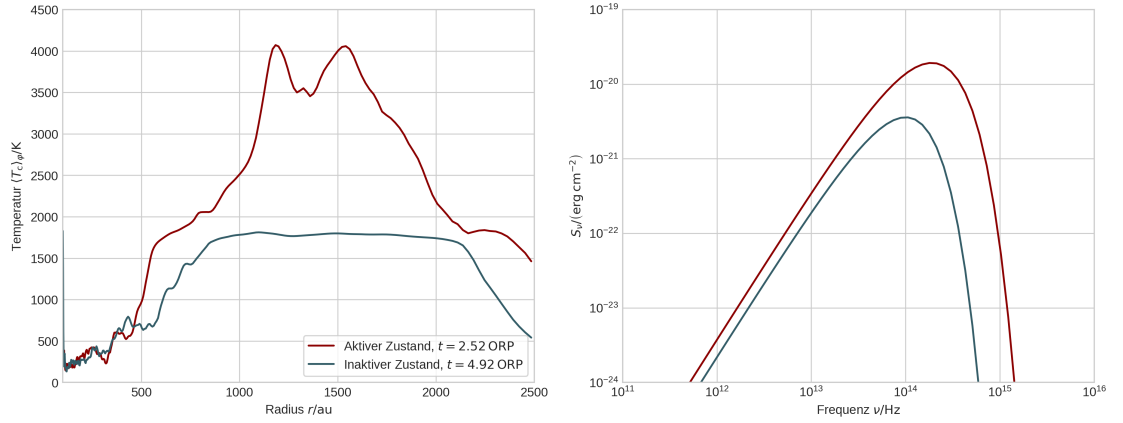


Abbildung 5.28.: Temperaturverlauf $\langle T_c \rangle_{\varphi}$ für die zwei verwendeten Zeitpunkte (links) und das daraus resultierende Spektrum der Scheibe (rechts).

wie in Kato u. a. (2008) beschrieben ist hier jedoch nicht zu sehen. Dazu müsste die AD eine größere radiale Ausdehnung aufweisen.

Die interessanten Frequenzen liegen auf Grund der entsprechenden Temperaturen eher im sichtbaren Bereich und sind damit zunächst größer als die von ALMA beobachtbare (84 – 950) GHz. Das kürzlich gestartete Weltraumteleskop James-Webb-Space Telescope (JWST) wäre hier mit einem Frequenzbereich von (11 – 500) THz somit besser geeignet (NASA u. a. 2022). Auch das oben angesprochene VLTI würde mit seinem Frequenzbereich von (15 – 10^3) THz als Beobachtungsinstrument in Frage kommen.

Nicht betrachtet dabei ist, dass die tatsächlich beobachtbare effektive Temperatur kleiner als die Zentralebenentemperatur sein würde, womit das Maximum aus Abb. 5.28 (rechts) weiter zu niedrigeren Frequenzen wandern würde. Ein weiterer Effekt wäre die Rotverschiebung, welche allerdings weniger für den hier angenommenen Abstand eine Rolle spielen würde. Nimmt man trotzdem eine Rotverschiebung bei $z = 20$ und eine Frequenz $2 \cdot 10^{14}$ Hz (ungefähres Maximum des Spektrums) an, so würde man nach

$$z = \frac{\nu - \nu_{\text{obs}}}{\nu_{\text{obs}}} \quad (5.10)$$

für die tatsächlich beobachtete Frequenz $\nu_{\text{obs}}(z = 20) \approx 10^{13}$ Hz erhalten (Schneider 2006). Damit ergibt sich nochmal eine Verschiebung der Frequenz um mehr als eine Größenordnung hin zu kleineren Frequenzen.

5.3.5. Parameterraum für Chemo-Gravitoturbulente Scheiben

Um herauszufinden, wo mit einem chemisch-gravitoturbulenten Effekt zu rechnen ist, werden Zentralmassen im Bereich $M_{\text{BH}} = (10^2 - 2,5 \cdot 10^4) M_{\odot}$ und Radien $r_{\text{in}} = (4 - 100)$ au betrachtet. Dabei werden die Simulationen bis max. 30 ORP und bei sonst wie in Tab. 5.2 beschriebenem Setup durchgeführt. Ein klares Kriterium für einen aktiven Grenzzyklus zu fassen ist nicht leicht. Man könnte einfach einen Schwellwert für den Anteil an dissoziiertem Wasserstoff definieren, müsste aber für eine sinnvolle Anwendung immer um den

richtigen Radius mitteln, da bei Verrechnung des gesamten Rechengebietes große Fehler auftreten können. Hinzu kommt, dass auf Grund der, verglichen zu lokalen Simulationen relativ wenigen abgedeckten Orbitalzeitskalen, mehrfache Dissoziationsevents eventuell nicht sichtbar werden (wie in Abb. 5.21). Daher wird als Kriterium für einen Grenzzzyklus die Bedingung gewählt, dass, wenn nach der anfänglichen Initialisierungsphase ein radialer Bereich gefunden werden kann, bei dem eine nochmalige wesentliche Dissoziation ($X_H > 0,1$) stattfindet, von einem möglichen Grenzzzyklus ausgegangen wird. Dass eine zweimalige Dissoziation auftreten muss ist wichtig, denn bei sehr hohen Hintergrundtemperaturen kann auch eine dauerhafte Dissoziation eintreten, welche ebenfalls keinen Grenzzzyklus mehr zur Folge hätte. Schlussendlich bedeutet eine Dissoziation hier auch nicht zwangsläufig eine Fragmentation, da eine leichte Dissoziation auftreten kann, welche nicht ausreicht um Fragmente zu erzeugen.

In Abb. 5.29 ist die Zusammenfassung dieser Auswertung zu beobachten. Ein Trend,

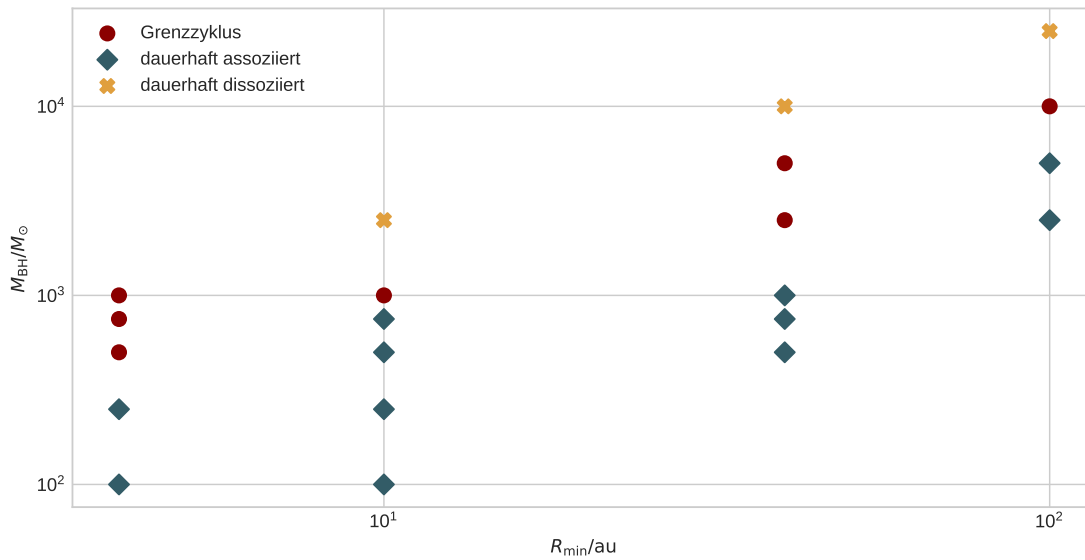


Abbildung 5.29.: Überblick zum Parameterraum, welcher die Simulationen einteilt in vorhandener Grenzzzyklus und den Region darunter (dauerhaft assoziiert) und darüber (dauerhaft dissoziiert).

welcher einem klaren funktionalen Zusammenhang folgt, kann mit den aktuellen Simulationen noch nicht ausgemacht werden. Dazu müsste der Parameterraum größer gewählt und um zusätzliche Simulationen verdichtet werden. Grundsätzlich ist aber aus der Abbildung ersichtlich, dass bei höheren Zentralmassen auch bei entsprechend höheren Radien der Grenzzzyklus erreicht werden kann. Dies ist zu erwarten, da sich auch die Scheibenmasse über das konstante Scheiben-Zentralmasse-Verhältnis mit erhöht und dementsprechend die AD bei höheren Temperaturen gravitativ instabil wird. Für Extremfälle tritt eine dauerhafte Dissoziation ein, was ebenfalls in Abb. 5.29 vermerkt ist. In Abb. 5.30 sind für die als Grenzzzyklus definierten Simulationen die dazugehörigen Dissoziationen im Bereich $5 au < r < 15 au$ aufgetragen. Diese liefern einen groben Eindruck wie unterschiedlich

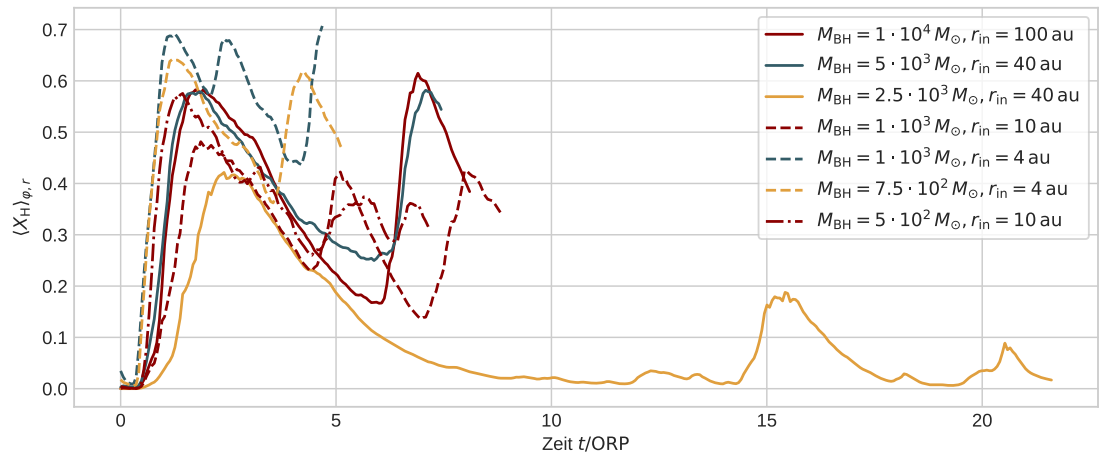


Abbildung 5.30.: Übersicht des gemittelten atomaren Wasserstoffanteils im Bereich $5 \text{ au} < r < 15 \text{ au}$ über die Zeit für die Simulationen welche als Grenzyklus in Abb. 5.29 deklariert sind.

das Dissoziationsverhalten sein kann. Angemerkt werden muss auch, dass man durch die Wahl eines anderen radialen Bereiches über den gemittelt wird, durchaus starke Abweichungen zu dem hier gewählten Bereich haben kann. Hier wurde der radiale Bereich so gewählt, dass er die Simulation bei $10^4 M_{\odot}$ besonders gut trifft.

5.4. Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Kapitel wurde der Einfluss von Wasserstoffdissoziation mit ihrer Bindungsenergie von 4,48 eV auf Gravitoturbulenz untersucht. Dazu wurden lokale Shearingsheet- und globale Simulationen betrachtet. Bei ausreichend hoher Temperatur konnte ein periodisches Verhalten beobachtet werden, welches als Grenzyklus beschrieben und für beide Simulationstypen anhand eines Setups mit prominenter Ausprägung detailliert beleuchtet wurde. Wesentliche Merkmale sind eine turbulente Phase mit Fragmentation, welche mit einem vergleichsweise schnellen Anstieg des atomaren Wasserstoffanteils und der mittleren Temperatur einhergeht und einer langen Abklingphase, bei der sich der atomare Wasserstoff wieder in die molekulare Form zurück wandelt und die dabei entstehende Heizung der parametrisierten Kühlung entgegenwirkt. Dies ist der Fall bis der Grenzyklus auf Grund des verbrauchten atomaren Wasserstoffes von neuem beginnt. Für die globalen Simulationen wird die Beobachtbarkeit geprüft, wobei diese durch eine sehr klein zu erwartende Winkelauflösung und Zeitskalen, welche sich über einige tausend Jahre erstrecken als schwierig erweist. Am aussichtsreichsten scheint sich hier das Spektrum der Scheibe zu erweisen, welches durch den hohen Temperaturunterschied zwischen den Stadien beobachtbare Abweichungen vermuten lässt.

Vergleicht man die Ergebnisse der globalen Simulationen aus Abschnitt 5.3.3 mit den zu Beginn des Kapitels angesprochenen von Schleicher u. a. (2016), so findet man für $10^4 M_{\odot}$

mit $r_{\text{in}} = 10^2$ au (und somit $r_{\text{out}} = 2,5 \cdot 10^3$ au) einen ähnlichen Bereich ($r = 10^3$ au) in dem Dissoziation stattfindet, wobei jedoch bei Schleicher u. a. (2016) auch für $r \lesssim 10^3$ au Dissoziation vorausgesagt wird. Dass ein ähnlicher Bereich gefunden wird ist insofern erstaunlich, da die beiden Modelle durchaus unterschiedliche Annahmen machen. Neben der Eindimensionalität wird dort eine konstante Akkretionsrate \dot{M} angenommen und diese entweder durch eine nicht weiter definierte Viskosität erzeugt oder durch in einem sich einstellenden Scheibenprofil $\Sigma(r)$ bei $Q = 1$ sichergestellt. Die Temperaturverläufe sind dabei mitunter zwischen den Simulationen sehr unterschiedlich. Zudem sind in den eindimensionalen Modellen die Rückkopplung durch Fragmentation nicht mit abgebildet und der potentielle Grenzyklus nicht abbildbar. Dahingegen werden in den zweidimensionalen Modellen dieser Arbeit die Scheiben so aufgesetzt, dass sich Gravitoturbulenz eigenständig entwickelt und nur eine parametrisierte Kühlung zusätzliche zum chemischen Dissoziationseffekt angenommen wird. Das chemische Netzwerk ist dabei einfacher gehalten, während in Schleicher u. a. (2016) auch weitere Varianten von Wasserstoff einbezogen werden.

Grenzyklen existierenden auch in anderen Bereichen der Akkretionsscheiben-Physik, wie z.B. bei Zwergnovae (Voigt 2012). Ohne ins Detail dieser physikalischen Objekte gehen zu wollen, wird dort ein Grenzyklus durch eine thermisch-viskose Instabilität erzeugt, die zu regelmäßigen Ausbrüchen führt und erfolgreich Leuchtkraftvariationen beschreiben kann (Meyer und Meyer-Hofmeister 1981; Lasota 2001; Hameury 2020). Wesentlich für das Verständnis des Mechanismus ist ein Sprung in der Relation zwischen Σ und T_{eff} , auch S-Kurve genannt. Der Sprung findet zwischen zwei Zuständen im Gas, jenen von ionisiertem und neutralem Wasserstoff, statt, mit denen unterschiedliche effektive Viskositäten α_{eff} einhergehen. Die Beschreibung ist durchaus ähnlich zu den Beobachtungen der Rückkopplung durch Dissoziation von Wasserstoff in Gravitoturbulenz. In Abb. 5.10 kann man sogar ebenso eine entsprechende Veränderung für den α -Parameter in Gravitoturbulenz zu den beiden Zuständen finden, wobei dieser jedoch nach Gammie (2001) numerisch aus den Simulationsdaten berechnet wurde. Eine ähnliche S-Kurve für die in dieser Arbeit simulierte Rückkopplung zu beobachten würde somit das Verständnis des Prozess verbessern und wünschenswert. Die Frage ist zwischen welchen Variablen diese genau darzustellen wäre und ob dies überhaupt in gleicher Weise möglich ist, denn im Gegensatz zur S-Kurve der thermisch-viskosen Instabilitäten spielt die aufgelöste zweidimensionale Gravitoturbulenz mitsamt der Stoßheizung und der einhergehenden Dynamik im Gas eine Rolle bei der Rückkopplung und dem Übergang vom molekularem zum atomaren Zustand. Der hier beschriebene Prozess wäre auch deswegen interessant, da die thermisch-viskose Instabilität bekannterweise besonders mit selbstgravitierenden ADs nicht gut vereinbar ist (Hameury u. a. 2009) und bei der Beschreibung von Variabilitäten über lange Zeitskalen Schwierigkeiten hat (de Vries u. a. 2006; Ulrich u. a. 1997). Dass der in dieser Arbeit beschriebene Grenzyklus mit seinen sehr langen Zeitskalen von einigen tausend Jahren die Lücke schließen kann scheint an der Stelle aber unwahrscheinlich. Hier wäre es aber durchaus denkbar kleinere Zeitskalen zu erreichen, wenn man unter Betrachtung von Abb. 5.29 kleinere, kompakte Scheiben um ein entsprechend kleineres Zentralobjekt detaillierter untersuchen würde.

6. Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit wird Gravitoturbulenz und der Einfluss von Numerik und Rückkopplung einer primordialen Chemie auf ebendiese erörtert. Gravitoturbulenz spielt eine wichtige Rolle in massereichen, selbstgravitierenden Akkretionsscheiben, welche sich um Schwarze Löcher ausbilden. Insbesondere der Fragmentationsprozess, dem lokalen Kollabieren der Scheibe, wird unter unterschiedlichen Aspekten beleuchtet, um ein genaueres Verständnis über die physikalischen Wechselwirkungen zu erhalten.

Die Wahl der Numerik kann den Ausgang in selbstgravitierenden Scheiben stark beeinflussen. Die Frage, bei welchem kritischen Verhältnis zwischen Kühlzeitskala zu Orbitalzeitskala β_{krit} Fragmentation auftritt ist davon betroffen. Insbesondere für den Bereich $3 \lesssim \beta \lesssim 10$ kann bei unterschiedlichen Auflösungen im Shearingsheet gezeigt werden, dass die Wahl der Limiter, nichtlinearen, heuristisch eingeführten Funktionen, welche hochaufgelöste Verfahren ermöglichen, das Fragmentationsverhalten beeinflussen. In Tests wird dabei isoliert demonstriert, dass der Superbee-Limiter numerische Fehler bei kleinen Gradienten, wie sie abseits der Stoßfronten zu erwarten sind, erzeugt, welche durch Gravitation verstärkt werden. Dies führt in der Folge möglicherweise zu Fragmentation, welche nicht physikalisch erklärbar ist. Trotz dessen stellt sich bei höchsten Auflösungen von 8192^2 Gitterzellen ein ähnliches Verhältnis von $\beta_{\text{krit}} \approx 10$ verglichen zu alternativen Limitern, hier dem Vanleer-Limiter, ein. Bei der Untersuchung der Spektren verschiedener physikalischer Größen über die Auflösungen und Limiter hinweg, fällt auf, dass sich diese zunehmend annähern und insbesondere bei höchsten Auflösungen bis auf die kritische Länge L_{krit} nahezu konvergiert sind. Diese beschreibt die für gravitoturbulente Scheiben charakteristische und instabil werdende Länge, weshalb die Konvergenz der Spektren bis zu dieser Größenordnung zusammen mit der Beobachtung eines ähnlichen Fragmentationsverhaltens als sinnvolles Kriterium für ein konvergiertes Verfahren bezüglich Fragmentation insgesamt gewertet wird. Dadurch können auch Ergebnisse, welche mit unterschiedlichen numerischen Verfahren und Codes erzeugt wurden, besser verglichen werden, da ein zusätzliches Kriterium neben der Fragmentation selber zur Verfügung steht.

Die Grenzen des Modells liegen in der Annahme zu zwei Dimensionen und der lokalen Näherung (Shearingsheet), beides Restriktionen, welche nötig sind um die hohen erreichten Auflösungen und Zeitskalen abdecken zu können. In Hinblick auf Turbulenz sollten hier dreidimensionale Simulationen, in Hinblick auf Selbstgravitation auch globale Simulationen in Betracht gezogen werden. Hier sind verfügbare Rechenkapazitäten das maßgeblich einschränkende Kriterium.

Um die Rückkopplung chemischer Ratengleichungen auf Gravitoturbulenz untersuchen zu können wird ein aufwändiges numerisches Verfahren erläutert und implementiert, welches in der Lage ist steife gewöhnliche Differentialgleichungen effizient lösen zu können.

Insbesondere ein zell-vektorisierter Ansatz, welcher in Fosite bereits für die Hydrodynamik Anwendung findet, wird dabei implementiert, um die Simulationen auf den Vektorrechnern der SX-Architektur von NEC zu ermöglichen. Vervollständigt wird das Verfahren durch einen Python-Präprozessor, welcher die nötige Flexibilität in Bezug auf das Einbinden verschiedener Netzwerke liefert. Der schlussendlich neu geschriebene resultierende Löser namens OdeVec basiert auf dem BDF-Verfahren von DLSODE, jedoch um die genannten Komponenten erweitert. Des Weiteren sind durch den eingeführten Präprozessor Optimierungen vor Kompilierzeit möglich, welche eine Sortierung der Gleichungssysteme erlaubt, was wiederum Vorteile der im Verfahren auftretenden dünnbesetzten Jacobimatrizen und den niedrig zu haltenden Fill-Ins mit sich zieht und folglich Rechenoperationen spart. Im Anwendungsfall der chemischen Ratengleichungen stehen dort die möglichen Übergänge zwischen den Spezies. Mit Hilfe verschiedener Tests und unterschiedlicher Netzwerke, insbesondere für primordiale und atmosphärische Gase, wird die Funktionstüchtigkeit und der Performance-Gewinn durch Vektorisierung und Präprozessor demonstriert. Für die verwendeten Netzwerke und Kühlfunktionen aus dem Chemie-Paket KROME, werden zudem die nötigen Erweiterungen und die Integration mit OdeVec bereitgestellt.

Für die Berechnung von dichten Gasen, wie sie in selbstgravitierenden Scheiben auftreten, wird ein spezialisierter Gleichgewichtslöser hinzugefügt, welcher auf einem vektorisierten Nullstellenverfahren basiert. Dieser ist für die später verwendeten Dreikörperstöße im LTE geeignet, für welches das BDF-Verfahren nicht mehr verwendet werden kann. Die beiden Verfahren wechseln sich mit Hilfe von Maskierungen zell-basiert ab, um im Nichtgleichgewichtsfall durch OdeVec eine zeitliche Entwicklung zu berücksichtigen und im Gleichgewichtsfall den Zustand direkt ausrechnen zu können.

Schlussendlich wird die energetische Rückkopplung durch Wasserstoffdissoziation und -assoziation von Dreikörperstößen auf Gravitoturbulenz betrachtet, einer Wechselwirkung, welche insbesondere im frühen Universum in primordialen Gasen und bei hohen Dichten von Interesse ist. Dazu wird eine Hintergrundkühlung angelegt in der sich die Gravitoturbulenz entwickelt und anschließend der Einfluss der Chemie beobachtet. Sowohl in lokalen Shearingsheet- als auch in globalen Simulationen kann dabei ein Grenzyklus beobachtet werden, welcher ein periodisches Verhalten zwischen Ruhephasen und Fragmentation beschreibt, was sich in der Morphologie der Scheibe bemerkbar macht.

Innerhalb von lokalen Simulationen kann dies über viele Perioden als stabiler Prozess abgebildet werden. Dabei übernimmt die Gravitoturbulenz eine treibende Rolle. Sind die Temperaturen in den Stoßfronten ausreichend hoch, kommt es zu einer Dissoziation, welche durch die zusätzliche Kühlung mit starken Turbulenzen und Fragmentation einhergeht. Dies führt bei zunehmender Stoßheizung in einer Aufwärtsspirale zu immer größer werdendem atomarem Wasserstoffanteil, bis ein Sättigungseffekt einsetzt und die Dynamik im Gas wieder abnimmt. Anschließend kommt es zu einer über viele Orbitalzeitskalen stabilen Ruhephase mit nur wenig ausgeprägter Gravitoturbulenz und langsam abnehmender Temperatur. Hier sind die angelegte Kühlung und der atomare Wasserstoff als Heizreservoir Gegenspieler. Das Gas bleibt so lange in diesem Zustand bis der atomare Wasserstoff aufgebraucht ist und in der Folge die Scheibe wieder vollständig Toomre instabil wird. Eine erneute Fragmentation in den Stoßfronten lässt den Zyklus von Neuem beginnen. Die globalen Simulationen unterstützen dieses Bild wobei hier allerdings zwei,

maximal drei Perioden aufgelöst werden können. Der Prozess erzeugt durch zusätzliche radiale Abhängigkeiten ein komplexeres und weniger eindeutiges Bild, kann jedoch in Bezug auf das grundsätzlichen Dissoziationsverhalten mit anderen wissenschaftlichen Veröffentlichungen verglichen werden.

Insgesamt können die Ergebnisse als vielversprechendes physikalisches Phänomen gedeutet werden, wobei die genauen Auswirkungen auf Beobachtbarkeit und Akkretionsverhalten jedoch nicht vollständig erschlossen und verstanden sind. Erste Betrachtungen deuten darauf hin, dass Beobachtungen durch Leuchtkraftveränderungen einerseits auf Grund der Kopplung an die dynamische Zeitskala schwierig sind, was schnell tausende von Jahre in der Periodizität des Grenzyklus bedeutet und andererseits die lokalen Änderungen in den Akkretionsraten durch die Fragmentation, wie sie in den äußeren radialen Bereich zu sehen sind, erst verzögert (über die viskose Zeitskala) und in gemittelter Form am Innenrand der Scheibe ankommen würden, was in den bisherigen Simulationen kaum abgedeckt ist. Dazu müsste der innere Bereich der Scheibe kleiner und über längere Zeiten besser aufgelöst werden, was die nötigen Rechenkapazitäten erhöht. Für Beobachtungszwecke wäre der aussichtsreichste Kandidat das Spektrum der Scheibe zu untersuchen, da die Temperaturabweichungen zwischen einzelnen Stadien des Prozesses relativ groß sind.

Die wesentlichen Grenzen des Modells sind durch die angelegte Hintergrundkühlung und die betrachtete Chemie gegeben. Die parametrisierte Hintergrundkühlung sollte dabei für ein genaueres Verständnis durch eine an die Chemie gebundene primordiale und kontinuierliche Kühlung erweitert werden. Neben den Dreikörperstößen sind zudem mehr Reaktionen in primordialen Gasen bekannt, welche hier nicht zum Einsatz kommen. Dabei werden die Fähigkeiten von OdeVec bei weitem nicht ausgeschöpft und es müsste vor allem der Gleichgewichtslöser, welcher bei hohen Dichten Verwendung findet und in den selbstgravitierenden Scheiben nötig ist, entsprechend erweitert oder bestenfalls verallgemeinert werden. Für sehr hohe Temperaturen muss insbesondere mit Stoßionisation gerechnet werden, welche nicht abgebildet ist und die Komplexität des Prozesses erhöhen könnte. Schlussendlich wären genauere Parameterstudien über längere Zeiträume erstrebenswert, um ein eindeutigeres Bild darüber zu bekommen, wo mit dem betrachteten Grenzyklus gerechnet werden kann.

In Zukunft wäre es auch von besonderem Interesse die physikalischen Folgen durch den Grenzyklus besser abschätzen zu können. So könnte man die aus den lokalen Simulationen gewonnen Viskositätsparameter in ein eindimensionales Modell einfließen lassen, um den Einfluss des Grenzyklus auf den Akkretionsprozess und die Leuchtkraft genauer zu untersuchen. Das eindimensionale Modell würde dabei die Möglichkeit bieten den inneren Rand weit genug zum Zentralobjekt zu verschieben und über längere Zeitskalen rechnen zu können. Zudem wurden in dieser Arbeit Keplersch selbstgravitierende Scheiben betrachtet. So wurde in den globalen Modellen durchgehend ein Verhältnis von $M_D/M_{BH} = 0.1$ gewählt. Hier wäre es betrachtenswert, ob der Grenzyklus auch in voll selbstgravitierenden Scheiben mit $M_D/M_{BH} > 1.0$ existieren kann. Letztendlich wäre es auch wichtig der Frage nachzugehen, ob der Grenzyklus das Potential hat zu einer abweichenden Akkretion im noch jungen Universum, verglichen mit dem heutigen, zu führen. Hierzu müssten Simulationen mit unterschiedlichen Hintergrundkühlungen durchgeführt werden, welche zum Beispiel angereicherten Staub als kühlendes Medium mit einbeziehen.

Literatur

- [1] M. A. Abramowicz und O. Straub. »Accretion discs«. In: *Scholarpedia* 9.8 (2014). revision #145813, S. 2408. DOI: 10.4249/scholarpedia.2408.
- [2] R. A. Alpher, H. Bethe und G. Gamow. »The Origin of Chemical Elements«. In: *Physical Review* 73.7 (Apr. 1948), S. 803–804. DOI: 10.1103/PhysRev.73.803.
- [3] H. Baehr, H. Klahr und K. M. Kratter. »The Fragmentation Criteria in Local Vertically Stratified Self-gravitating Disk Simulations«. In: *ApJ* 848.1, 40 (Okt. 2017), S. 40. DOI: 10.3847/1538-4357/aa8a66.
- [4] S. A. Balbus und J. C. B. Papaloizou. »On the Dynamical Foundations of α Disks«. In: *ApJ* 521.2 (Aug. 1999), S. 650–658. DOI: 10.1086/307594.
- [5] E. Bañados u. a. »An 800-million-solar-mass black hole in a significantly neutral Universe at a redshift of 7.5«. In: *Nature* 553.7689 (Jan. 2018), S. 473–476. DOI: 10.1038/nature25180.
- [6] J. Binney, S. Tremaine und K. Freeman. *Galactic Dynamics*. Bd. 62. 5. Jan. 2009, S. 56. DOI: 10.1063/1.3141945.
- [7] G. Boffetta und R. E. Ecke. »Two-Dimensional Turbulence«. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 44.1 (Jan. 2012), S. 427–451. DOI: 10.1146/annurev-fluid-120710-101240.
- [8] R. A. Booth und C. J. Clarke. »Characterizing gravito-turbulence in 3D: turbulent properties and stability against fragmentation«. In: *MNRAS* 483.3 (März 2019), S. 3718–3729. DOI: 10.1093/mnras/sty3340.
- [9] A. P. Boss. »Evolution of the Solar Nebula. IV. Giant Gaseous Protoplanet Formation«. In: *ApJ* 503.2 (Aug. 1998), S. 923–937. DOI: 10.1086/306036.
- [10] S. Bovino und D. Galli. »Thermodynamics and chemistry of the early universe«. In: *Formation of the First Black Holes*. Hrsg. von M. Latif und D. Schleicher. 2019, S. 45–66. DOI: 10.1142/9789813227958_0003.

- [11] J. D. Bowman, A. E. E. Rogers, R. A. Monsalve, T. J. Mozdzen und N. Mahesh. »An absorption profile centred at 78 megahertz in the sky-averaged spectrum«. In: *Nature* 555.7694 (März 2018), S. 67–70. DOI: 10.1038/nature25792.
- [12] V. Bromm. »Formation of the first stars«. In: *Reports on Progress in Physics* 76.11, 112901 (Nov. 2013), S. 112901. DOI: 10.1088/0034-4885/76/11/112901.
- [13] V. Bromm und R. B. Larson. »The First Stars«. In: *ARA&A* 42.1 (Sep. 2004), S. 79–118. DOI: 10.1146/annurev.astro.42.053102.134034.
- [14] N. Brucy und P. Hennebelle. »A two-step gravitational cascade for the fragmentation of self-gravitating discs«. In: *MNRAS* 503.3 (Mai 2021), S. 4192–4207. DOI: 10.1093/mnras/stab738.
- [15] J. C. Butcher. »On Runge-Kutta processes of high order«. In: *Journal of the Australian Mathematical Society* 4.2 (1964), S. 179–194.
- [16] C.-k. Chan, D. Psaltis und F. Özel. »Spectral Methods for Time-dependent Studies of Accretion Flows. II. Two-dimensional Hydrodynamic Disks with Self-Gravity«. In: *ApJ* 645.1 (Juli 2006), S. 506–518. DOI: 10.1086/500394.
- [17] P. Cortes u. a. *ALMA Cycle 8 2021 Technical Handbook*. Additional contributors to this edition: Tim Bastian, Crystal Brogan, John Carpenter, Chinshin Chang, Geoff Crew, Paul Fisher, Misato Fukagawa, Melissa Hoffman, Chat Hull, Hugo Messias, Todd Hunter, Ruediger Kneissl, Andy Lipnicky, Ryan Loomis, Sergio Martin, Lynn Matthews, Luke Maud, Yusuke Miyamoto, Tony Mroczkowski, Hiroshi Nagai, Kouichiro Nakanishi, Masumi Shimojo, Richard Simon, Jeremy Thorley, MCarmen Toribio, Catarina Ubach, Catherine Vlahakis, Martin Zwaan. März 2021. DOI: 10.5281/zenodo.4612218.
- [18] P. Cossins, G. Lodato und C. J. Clarke. »Characterizing the gravitational instability in cooling accretion discs«. In: *MNRAS* 393.4 (März 2009), S. 1157–1173. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2008.14275.x.
- [19] C. F. Curtiss und J. O. Hirschfelder. »Integration of Stiff Equations«. In: *Proceedings of the National Academy of Science* 38.3 (März 1952), S. 235–243. DOI: 10.1073/pnas.38.3.235.
- [20] E. Cuthill und J. McKee. »Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices«. In: *Proceedings of the 1969 24th national conference*. ACM. 1969, S. 157–172.
- [21] G. G. Dahlquist. »A special stability problem for linear multistep methods«. In: *BIT Numerical Mathematics* 3.1 (1963), S. 27–43.

- [22] I. de Martino, F. Atrio-Barandela, A. da Silva, H. Ebeling, A. Kashlinsky, D. Kocevski und C. J. A. P. Martins. »Measuring the Redshift Dependence of the Cosmic Microwave Background Monopole Temperature with Planck Data«. In: *ApJ* 757.2, 144 (Okt. 2012), S. 144. DOI: 10.1088/0004-637X/757/2/144.
- [23] W. H. de Vries, R. H. Becker und R. L. White. »Long-Term Optical Quasar Variability«. In: *AGN Variability from X-Rays to Radio Waves*. Hrsg. von C. M. Gaskell, I. M. McHardy, B. M. Peterson und S. G. Sergeev. Bd. 360. Astronomical Society of the Pacific Conference Series. Dez. 2006, S. 29.
- [24] K. Denbigh. *The principles of chemical equilibrium : with applications in chemistry and chemical engineering*. Cambridge England New York: Cambridge University Press, 1981.
- [25] H. Deng, L. Mayer und F. Meru. »Convergence of the Critical Cooling Rate for Protoplanetary Disk Fragmentation Achieved: The Key Role of Numerical Dissipation of Angular Momentum«. In: *ApJ* 847.1, 43 (Sep. 2017), S. 43. DOI: 10.3847/1538-4357/aa872b.
- [26] D. Donevski u. a. »In pursuit of giants. I. The evolution of the dust-to-stellar mass ratio in distant dusty galaxies«. In: *A&A* 644, A144 (Dez. 2020), A144. DOI: 10.1051/0004-6361/202038405.
- [27] J. R. Dormand und P. J. Prince. »New Runge-Kutta Algorithms for Numerical Simulation in Dynamical Astronomy«. In: *Celestial Mechanics* 18.3 (Okt. 1978), S. 223–232. DOI: 10.1007/BF01230162.
- [28] V. M. Douna, L. J. Pellizza, P. Laurent und I. F. Mirabel. »Microquasars as heating sources of the intergalactic medium during reionization of the Universe«. In: *MNRAS* 474.3 (März 2018), S. 3488–3499. DOI: 10.1093/mnras/stx2983.
- [29] I. Duff. *Direct methods for sparse matrices*. Oxford New York, NY: Oxford University Press, 2017. DOI: DOI : 10.1093/acprof:oso/9780198508380.001.0001.
- [30] W. J. Duschl, P. A. Strittmatter und P. L. Biermann. »A note on hydrodynamic viscosity and selfgravitation in accretion disks«. In: *A&A* 357 (Mai 2000), S. 1123–1132.
- [31] W. J. Duschl und M. Britsch. »A Gravitational Instability-driven Viscosity in Self-gravitating Accretion Disks«. In: *ApJ* 653.2 (Dez. 2006), S. L89–L92. DOI: 10.1086/510526.

- [32] W. J. Duschl und P. A. Strittmatter. »The cosmogony of supermassive black holes«. In: MNRAS 413.2 (Mai 2011), S. 1495–1504. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.18232.x.
- [33] ESO. *FAQ VLT/Paranal*. 2022. URL: <https://www.eso.org/public/about-eso/faq/faq-vlt-paranal/> (besucht am 12.03.2022).
- [34] R. J. Field, E. Koros und R. M. Noyes. »Oscillations in chemical systems. II. Thorough analysis of temporal oscillation in the bromate-cerium-malonic acid system«. In: *Journal of the American Chemical Society* 94.25 (1972), S. 8649–8664.
- [35] M. J. Flynn. »Some computer organizations and their effectiveness«. In: *IEEE transactions on computers* 100.9 (1972), S. 948–960.
- [36] R. C. Forrey. »Rate of Formation of Hydrogen Molecules by Three-body Recombination during Primordial Star Formation«. In: ApJ 773.2, L25 (Aug. 2013), S. L25. DOI: 10.1088/2041-8205/773/2/L25.
- [37] J. Frank, A. King und D. J. Raine. *Accretion Power in Astrophysics: Third Edition*. 2002.
- [38] M. Frigo und S. G. Johnson. »FFTW: Fastest Fourier Transform in the West«. In: ascl:1201.015 (Jan. 2012), ascl:1201.015.
- [39] D. Galli und F. Palla. »The chemistry of the early Universe«. In: A&A 335 (Juli 1998), S. 403–420.
- [40] D. Galli und F. Palla. »The Dawn of Chemistry«. In: ARA&A 51.1 (Aug. 2013), S. 163–206. DOI: 10.1146/annurev-astro-082812-141029.
- [41] C. F. Gammie. »Nonlinear Outcome of Gravitational Instability in Cooling, Gaseous Disks«. In: ApJ 553.1 (Mai 2001), S. 174–183. DOI: 10.1086/320631.
- [42] C. W. Gear. *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. Upper Saddle River, NJ, USA: Prentice Hall PTR, 1971.
- [43] A. George und J. W. Liu. »Computer solution of large sparse positive definite«. In: (1981).
- [44] S. K. Godunov. »A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics«. In: *Matematicheskii Sbornik* 89.3 (1959), S. 271–306.

- [45] P. Goldreich und D. Lynden-Bell. »II. Spiral arms as sheared gravitational instabilities«. In: MNRAS 130 (Jan. 1965), S. 125. DOI: 10.1093/mnras/130.2.125.
- [46] S. Gottlieb, D. I. Ketcheson und C.-W. Shu. *Strong stability preserving Runge-Kutta and multistep time discretizations*. World Scientific, 2011.
- [47] T. Grassi, S. Bovino, D. R. G. Schleicher, J. Prieto, D. Seifried, E. Simoncini und F. A. Gianturco. »KROME - a package to embed chemistry in astrophysical simulations«. In: MNRAS 439.3 (Apr. 2014), S. 2386–2419. DOI: 10.1093/mnras/stu114.
- [48] T. H. Greif. »Multifrequency radiation hydrodynamics simulations of H₂ line emission in primordial, star-forming clouds«. In: MNRAS 444.2 (Okt. 2014), S. 1566–1583. DOI: 10.1093/mnras/stu1532.
- [49] T. H. Greif. »The numerical frontier of the high-redshift Universe«. In: *Computational Astrophysics and Cosmology* 2, 3 (März 2015), S. 3. DOI: 10.1186/s40668-014-0006-2.
- [50] T. H. Greif, V. Bromm, P. C. Clark, S. C. O. Glover, R. J. Smith, R. S. Klessen, N. Yoshida und V. Springel. »Formation and evolution of primordial protostellar systems«. In: American Institute of Physics Conference Series 1480 (Sep. 2012). Hrsg. von M. Umemura und K. Omukai, S. 51–56. DOI: 10.1063/1.4754327.
- [51] E. Hairer und G. Wanner. »Solving ordinary differential equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems«. In: *Springer Series in Computational Mathematics* 14 (1996).
- [52] E. Hairer, G. Wanner und S. P. Nørsett. *Solving ordinary differential equations I: Nonstiff Problems*. Berlin: Springer-Verlag, 1993.
- [53] J. M. Hameury. »A review of the disc instability model for dwarf novae, soft X-ray transients and related objects«. In: *Advances in Space Research* 66.5 (Sep. 2020), S. 1004–1024. DOI: 10.1016/j.asr.2019.10.022.
- [54] J. M. Hameury, M. Viallet und J. P. Lasota. »The thermal-viscous disk instability model in the AGN context«. In: A&A 496.2 (März 2009), S. 413–421. DOI: 10.1051/0004-6361/200810928.
- [55] A. Harten. »High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws«. In: *Journal of Computational Physics* 49.3 (März 1983), S. 357–393. DOI: 10.1016/0021-9991(83)90136-5.

- [56] J. F. Hawley, C. F. Gammie und S. A. Balbus. »Local Three-dimensional Magnetohydrodynamic Simulations of Accretion Disks«. In: *ApJ* 440 (Feb. 1995), S. 742. DOI: 10.1086/175311.
- [57] A. C. Hindmarsh. »ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers«. In: *Scientific computing* (1983), S. 55–64.
- [58] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows: The fundamentals of computational fluid dynamics*. Elsevier, 2007.
- [59] T. Illenseer. »Hochauflösende Verfahren zur numerischen Berechnung von strahlungsgetriebenen Scheibenwinden«. ger. Diss. Heidelberg, Univ., Diss., 2006, 2006, Online-Ressource.
- [60] T. F. Illenseer und W. J. Duschl. »Two-dimensional central-upwind schemes for curvilinear grids and application to gas dynamics with angular momentum«. In: *Computer Physics Communications* 180.11 (Nov. 2009), S. 2283–2302. DOI: 10.1016/j.cpc.2009.07.016.
- [61] T. F. Illenseer und W. J. Duschl. »Self-similar evolution of self-gravitating viscous accretion discs«. In: *MNRAS* 450.1 (Juni 2015), S. 691–713. DOI: 10.1093/mnras/stv587.
- [62] M. Z. Jacobson und R. P. Turco. »SMVGEAR: A sparse-matrix, vectorized gear code for atmospheric models«. In: *Atmospheric Environment* 28.2 (Jan. 1994), S. 273–284. DOI: 10.1016/1352-2310(94)90102-3.
- [63] J. H. Jeans. »The Stability of a Spherical Nebula«. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A* 199 (Jan. 1902), S. 1–53. DOI: 10.1098/rsta.1902.0012.
- [64] M. Jung. »Multiskalensimulationen von Schwarzslochakkretion in Balkengalaxien«. Diss. Christian-Albrechts Universität Kiel, 2016.
- [65] M. Jung, T. F. Illenseer und W. J. Duschl. »Multi-scale simulations of black hole accretion in barred galaxies: Numerical methods and tests«. In: *arXiv e-prints*, arXiv:1803.02055 (März 2018), arXiv:1803.02055.
- [66] J. F. Kasting und T. M. Donahue. »The evolution of atmospheric ozone«. In: *J. Geophys. Res.* 85.C6 (Juni 1980), S. 3255–3263. DOI: 10.1029/JC085iC06p03255.
- [67] S. Kato, J. Fukue und S. Mineshige. *Black-Hole Accretion Disks — Towards a New Paradigm* —. 2008.

- [68] J. Klee, T. F. Illenseer, M. Jung und W. J. Duschl. »The impact of numerical oversteepening on the fragmentation boundary in self-gravitating disks«. In: *A&A* 606, A70 (Okt. 2017), A70. DOI: 10.1051/0004-6361/201730606.
- [69] J. Klee, T. F. Illenseer, M. Jung und W. J. Duschl. »Closing the gap to convergence of gravitoturbulence in local simulations«. In: *A&A* 632, A35 (Dez. 2019), A35. DOI: 10.1051/0004-6361/201936064.
- [70] J. Klee. »Selbstgravitativ getriebene Dissipation in der Shearingbox-Approximation«. Masterarbeit. Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, CAU Kiel, 2016.
- [71] W. Kley. »On the treatment of the Coriolis force in computational astrophysics«. In: *A&A* 338 (Okt. 1998), S. L37–L41.
- [72] A. Kolmogorov. »The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds' Numbers«. In: *Akademiia Nauk SSSR Doklady* 30 (Jan. 1941), S. 301–305.
- [73] J. Kormendy und L. C. Ho. »Coevolution (Or Not) of Supermassive Black Holes and Host Galaxies«. In: *ARA&A* 51.1 (Aug. 2013), S. 511–653. DOI: 10.1146/annurev-astro-082708-101811.
- [74] R. H. Kraichnan. »Inertial Ranges in Two-Dimensional Turbulence«. In: *Physics of Fluids* 10.7 (Juli 1967), S. 1417–1423. DOI: 10.1063/1.1762301.
- [75] A. Kurganov und E. Tadmor. »New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations«. In: *Journal of Computational Physics* 160.1 (Mai 2000), S. 241–282. DOI: 10.1006/jcph.2000.6459.
- [76] W. Kutta. »Beitrag zur näherungsweise integration totaler differentialgleichungen«. In: *Z. Math. Phys.* 46 (1901), S. 435–453.
- [77] L. D. Landau und E. M. Lifshitz. »Hydrodynamik«. In: *Lehrbuch der theoretischen Physik, Berlin: Akademie-Verlag, 1966* (1966).
- [78] J.-P. Lasota. »The disc instability model of dwarf novae and low-mass X-ray binary transients«. In: *New A Rev.* 45.7 (Juni 2001), S. 449–508. DOI: 10.1016/S1387-6473(01)00112-9.
- [79] Y. Levin und A. M. Beloborodov. »Stellar Disk in the Galactic Center: A Remnant of a Dense Accretion Disk?«. In: *ApJ* 590.1 (Juni 2003), S. L33–L36. DOI: 10.1086/376675.

- [80] S. Li, M. J. Buoni und H. Li. »A Fast Potential and Self-Gravity Solver for Nonaxisymmetric Disks«. In: ApJS 181.1 (März 2009), S. 244–254. DOI: 10.1088/0067-0049/181/1/244.
- [81] D. N. C. Lin und J. E. Pringle. »A viscosity prescription for a self-gravitating accretion disc«. In: MNRAS 225 (Apr. 1987), S. 607–613. DOI: 10.1093/mnras/225.3.607.
- [82] A. Liu und J. R. Shaw. »Data Analysis for Precision 21 cm Cosmology«. In: PASP 132.1012, 062001 (Juni 2020), S. 062001. DOI: 10.1088/1538-3873/ab5bfd.
- [83] G. Lodato und W. K. M. Rice. »Testing the locality of transport in self-gravitating accretion discs«. In: MNRAS 351.2 (Juni 2004), S. 630–642. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2004.07811.x.
- [84] G. Lodato und W. K. M. Rice. »Testing the locality of transport in self-gravitating accretion discs - II. The massive disc case«. In: MNRAS 358.4 (Apr. 2005), S. 1489–1500. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2005.08875.x.
- [85] G. Lodato und C. J. Clarke. »Resolution requirements for smoothed particle hydrodynamics simulations of self-gravitating accretion discs«. In: MNRAS 413.4 (Juni 2011), S. 2735–2740. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.18344.x.
- [86] C. Low und D. Lynden-Bell. »The minimum Jeans mass or when fragmentation must stop.« In: MNRAS 176 (Aug. 1976), S. 367–390. DOI: 10.1093/mnras/176.2.367.
- [87] R. Lüst. »Die Entwicklung einer um einen Zentralkörper rotierenden Gasmasse. I. Lösungen der hydrodynamischen Gleichungen mit turbulenter Reibung«. In: *Zeitschrift Naturforschung Teil A* 7.1 (1952), S. 87–98.
- [88] P. G. Martin, D. H. Schwarz und M. E. Mandy. »Master Equation Studies of the Collisional Excitation and Dissociation of H₂ Molecules by H Atoms«. In: ApJ 461 (Apr. 1996), S. 265. DOI: 10.1086/177053.
- [89] F. Masset. »FARGO: A fast eulerian transport algorithm for differentially rotating disks«. In: A&AS 141 (Jan. 2000), S. 165–173. DOI: 10.1051/aas:2000116.
- [90] M. Mayer und W. J. Duschl. »Rosseland and Planck mean opacities for primordial matter«. In: MNRAS 358.2 (Apr. 2005), S. 614–631. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2005.08826.x.

- [91] F. Meru und M. R. Bate. »Non-convergence of the critical cooling time-scale for fragmentation of self-gravitating discs«. In: MNRAS 411.1 (Feb. 2011), S. L1–L5. DOI: 10.1111/j.1745-3933.2010.00978.x.
- [92] F. Meru und M. R. Bate. »On the convergence of the critical cooling time-scale for the fragmentation of self-gravitating discs«. In: MNRAS 427.3 (Dez. 2012), S. 2022–2046. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2012.22035.x.
- [93] L. Mestel. »On the galactic law of rotation«. In: MNRAS 126 (Jan. 1963), S. 553. DOI: 10.1093/mnras/126.6.553.
- [94] A. Meurer, C. P. Smith, M. Paprocki, O. Čertík, S. B. Kirpichev, M. Rocklin, A. Kumar, S. Ivanov, J. K. Moore, S. Singh u. a. »SymPy: symbolic computing in Python«. In: *PeerJ Computer Science* 3 (2017), e103.
- [95] F. Meyer und E. Meyer-Hofmeister. »On the elusive cause of cataclysmic variable outbursts.« In: A&A 104 (Jan. 1981), S. L10–L12.
- [96] A. Mignone, M. Flock, M. Stute, S. M. Kolb und G. Muscianisi. »A conservative orbital advection scheme for simulations of magnetized shear flows with the PLUTO code«. In: A&A 545, A152 (Sep. 2012), A152. DOI: 10.1051/0004-6361/201219557.
- [97] I. F. Mirabel und L. F. Rodríguez. »Sources of Relativistic Jets in the Galaxy«. In: ARA&A 37 (Jan. 1999), S. 409–443. DOI: 10.1146/annurev.astro.37.1.409.
- [98] J. Miralda-Escudé. »The Dark Age of the Universe«. In: *Science* 300.5627 (Juni 2003), S. 1904–1909. DOI: 10.1126/science.1085325.
- [99] NASA, ESA und CSA. *JWST Pocket Guide*. 2022. URL: https://www.stsci.edu/files/live/sites/www/files/home/jwst/instrumentation/_documents/jwst-pocket-guide.pdf (besucht am 12.03.2022).
- [100] NEC Corp. *NEC Vector Engine Models*. März 2022. URL: https://de.nec.com/de_DE/global/solutions/hpc/sx/vector_engine.html?.
- [101] A. F. Nelson. »Numerical requirements for simulations of self-gravitating and non-self-gravitating discs«. In: MNRAS 373.3 (Dez. 2006), S. 1039–1073. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2006.11119.x.
- [102] A. Nordsieck. »On numerical integration of ordinary differential equations«. In: *Mathematics of Computation* 16 (Jan. 1962), S. 22–49.
- [103] E. S. Oran und J. P. Boris. *Numerical Simulation of Reactive Flow*. 2000.

- [104] S.-J. Paardekooper. »Numerical convergence in self-gravitating shearing sheet simulations and the stochastic nature of disc fragmentation«. In: MNRAS 421.4 (Apr. 2012), S. 3286–3299. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2012.20553.x.
- [105] S.-J. Paardekooper, C. Baruteau und F. Meru. »Numerical convergence in self-gravitating disc simulations: initial conditions and edge effects«. In: MNRAS 416.1 (Sep. 2011), S. L65–L69. DOI: 10.1111/j.1745-3933.2011.01099.x.
- [106] B. Paczynski. »A model of selfgravitating accretion disk.« In: Acta Astron. 28 (Jan. 1978), S. 91–109.
- [107] J. d. Paula. *Atkins'physical chemistry*. 2006.
- [108] A. A. Penzias und R. W. Wilson. »A Measurement of Excess Antenna Temperature at 4080 Mc/s.« In: ApJ 142 (Juli 1965), S. 419–421. DOI: 10.1086/148307.
- [109] T. Plewa und E. Müller. »The consistent multi-fluid advection method«. In: A&A 342 (Feb. 1999), S. 179–191.
- [110] W. H. Press, H. William, S. A. Teukolsky, A. Saul, W. T. Vetterling und B. P. Flannery. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [111] J. E. Pringle. »Accretion discs in astrophysics«. In: ARA&A 19 (Jan. 1981), S. 137–162. DOI: 10.1146/annurev.aa.19.090181.001033.
- [112] K. Radhakrishnan und A. C. Hindmarsh. »Description and use of LSODE, the Livermore solver for ordinary differential equations«. In: (1993).
- [113] M. J. Rees. »Opacity-limited hierarchical fragmentation and the masses of proto-stars«. In: MNRAS 176 (Sep. 1976), S. 483–486. DOI: 10.1093/mnras/176.3.483.
- [114] K. Rice. »The Evolution of Self-Gravitating Accretion Discs«. In: PASA 33, e012 (März 2016), e012. DOI: 10.1017/pasa.2016.12.
- [115] W. K. M. Rice, D. H. Forgan und P. J. Armitage. »Convergence of smoothed particle hydrodynamics simulations of self-gravitating accretion discs: sensitivity to the implementation of radiative cooling«. In: MNRAS 420.2 (Feb. 2012), S. 1640–1647. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.20153.x.
- [116] W. K. M. Rice, S. .-. Paardekooper, D. H. Forgan und P. J. Armitage. »Convergence of simulations of self-gravitating accretion discs - II. Sensitivity to the implementation of radiative cooling and artificial viscosity«. In: MNRAS 438.2 (Feb. 2014), S. 1593–1602. DOI: 10.1093/mnras/stt2297.

- [117] E. Ripamonti und T. Abel. »Fragmentation and the formation of primordial protostars: the possible role of collision-induced emission«. In: MNRAS 348.3 (März 2004), S. 1019–1034. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2004.07422.x.
- [118] B. E. Robertson, R. S. Ellis, J. S. Dunlop, R. J. McLure und D. P. Stark. »Early star-forming galaxies and the reionization of the Universe«. In: Nature 468.7320 (Nov. 2010), S. 49–55. DOI: 10.1038/nature09527.
- [119] H. Robertson. »The solution of a set of reaction rate equations«. In: *Numerical analysis: an introduction* 178182 (1966).
- [120] P. L. Roe. »Characteristic-based schemes for the euler equations«. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 18 (Jan. 1986), S. 337–365. DOI: 10.1146/annurev.fl.18.010186.002005.
- [121] P. L. Roe und M. J. Baines. »Algorithms for advection and shock problems«. In: *Numerical Methods in Fluid Mechanics*. Jan. 1982, S. 281–290.
- [122] D. J. Rose und R. E. Tarjan. »Algorithmic aspects of vertex elimination on directed graphs«. In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 34.1 (1978), S. 176–197.
- [123] C. Runge. »Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen«. In: *Mathematische Annalen* 46.2 (1895), S. 167–178.
- [124] D. R. G. Schleicher, S. Bovino, M. A. Latif, A. Ferrara und T. Grassi. »The chemical evolution of self-gravitating primordial disks«. In: A&A 585, A11 (Jan. 2016), A11. DOI: 10.1051/0004-6361/201526356.
- [125] P. Schneider. *Einführung in die extragalaktische Astronomie und Kosmologie*. 2006.
- [126] N. I. Shakura und R. A. Sunyaev. »Black holes in binary systems. Observational appearance.« In: A&A 500 (Juni 1973), S. 33–51.
- [127] F. H. Shu. *The physics of astrophysics. Volume II: Gas dynamics*. 1992.
- [128] G. A. Sod. »Review. A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws«. In: *Journal of Computational Physics* 27.1 (Apr. 1978), S. 1–31. DOI: 10.1016/0021-9991(78)90023-2.
- [129] B. Sperling. »Large Eddy Simulationen von selbstgravitierenden Akkretionsscheiben«. de. Diss. 2013.

- [130] P. K. Sweby. »High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws«. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 21.5 (Okt. 1984), S. 995–1011. DOI: 10.1137/0721062.
- [131] A. Toomre. »On the gravitational stability of a disk of stars.« In: *ApJ* 139 (Mai 1964), S. 1217–1238. DOI: 10.1086/147861.
- [132] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [133] M. J. Turk, P. Clark, S. C. O. Glover, T. H. Greif, T. Abel, R. Klessen und V. Bromm. »Effects of Varying the Three-body Molecular Hydrogen Formation Rate in Primordial Star Formation«. In: *ApJ* 726.1, 55 (Jan. 2011), S. 55. DOI: 10.1088/0004-637X/726/1/55.
- [134] M.-H. Ulrich, L. Maraschi und C. M. Urry. »Variability of Active Galactic Nuclei«. In: *ARA&A* 35 (Jan. 1997), S. 445–502. DOI: 10.1146/annurev.astro.35.1.445.
- [135] A. Unsöld und B. Baschek. *Der neue Kosmos: Einführung in die Astronomie und Astrophysik*. Springer-Verlag, 2013.
- [136] B. Van Leer. »Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme«. In: *Journal of computational physics* 14.4 (1974), S. 361–370.
- [137] B. P. Venemans u. a. »Copious Amounts of Dust and Gas in a $z = 7.5$ Quasar Host Galaxy«. In: *ApJ* 851.1, L8 (Dez. 2017), S. L8. DOI: 10.3847/2041-8213/aa943a.
- [138] H.-H. Voigt. *Abriss der Astronomie*. John Wiley & Sons, 2012.
- [139] M. Volonteri, M. Habouzit und M. Colpi. »The origins of massive black holes«. In: *Nature Reviews Physics* 3.11 (Sep. 2021), S. 732–743. DOI: 10.1038/s42254-021-00364-9.
- [140] F. Wang u. a. »A Luminous Quasar at Redshift 7.642«. In: *ApJ* 907.1, L1 (Jan. 2021), S. L1. DOI: 10.3847/2041-8213/abd8c6.
- [141] C. Weizsäcker. »Über die Entstehung des Planeten Systems. Zeitschr. f«. In: *Astrophysik*, 22: 319 355 (1944).
- [142] X.-B. Wu u. a. »An ultraluminous quasar with a twelve-billion-solar-mass black hole at redshift 6.30«. In: *Nature* 518.7540 (Feb. 2015), S. 512–515. DOI: 10.1038/nature14241.

- [143] N. Yoshida, K. Omukai und L. Hernquist. »Protostar Formation in the Early Universe«. In: *Science* 321.5889 (Aug. 2008), S. 669. DOI: 10.1126/science.1160259.
- [144] M. D. Young und C. J. Clarke. »Quantification of stochastic fragmentation of self-gravitating discs«. In: MNRAS 455.2 (Jan. 2016), S. 1438–1442. DOI: 10.1093/mnras/stv2378.
- [145] S. Zaroubi. »The Epoch of Reionization«. In: *The First Galaxies*. Hrsg. von T. Wiklind, B. Mobasher und V. Bromm. Bd. 396. Astrophysics and Space Science Library. Jan. 2013, S. 45. DOI: 10.1007/978-3-642-32362-1_2.
- [146] U. Ziegler. »A chemical reaction network solver for the astrophysics code NIRVANA«. In: A&A 586, A82 (Feb. 2016), A82. DOI: 10.1051/0004-6361/201527262.

Glossar

AD Akkretionsscheibe

ALMA Atacama Large Millimeter/submillimeter Array

BDF backward differentiation formulas

BH Schwarzes Loch

CIE collisionally induced emission

CMA konsistente multi-fluid Advektionmethode

CMB kosmische Hintergrundstrahlung

CPU central processing unit

CSC compressed sparse column

EoR Reionisierungsepoche

FDM Finite-Differenzen-Verfahren

FFT Fast Fourier Transform

FVM Finite-Volumen-Verfahren

HPC Hochleistungsrechnen

JWST James-Webb-Space Telescope

LTE lokales thermodynamisches Gleichgewicht

MIMD multiple instruction, multiple data

MPI Message Passing Interface

ODE gewöhnliche Differentialgleichung

ORP outer rotational periods

RHS rechte Gleichungsseite

SIMD single instruction, multiple data

SISD single instruction, single data

SMBH supermassereiches Schwarzes Loch

SPH smooth particle hydrodynamics

TVD total variation diminishing

VC vector core

VE vector engine

VLTI Very Large Telescope Interferometer

A. Anhang

A.1. Präprozessorflags für OdeVec

Der Präprozessor von OdeVec bietet diverse Einstell- und Optimierungsmöglichkeiten, welche in Tab. A.1 dargestellt sind. Grundsätzliche Funktionsweise ist, dass der Präprozessor aufgerufen wird und an deklarierten Positionen die nötigen optimierten Gleichungssysteme niederschreibt. Alle Flags können auch mit Hilfe des Befehls

```
./pre_odevec.py --help
```

in der Kommandozeile aufgelistet werden.

Für die Benutzung in Fosite werden die entsprechenden Flags über KROME weitergereicht, welches das Netzwerk bereitstellt und anschließend an OdeVec zur Optimierung weitergibt.

A.2. Aufsetzen der Chemie

Um KROME zusammen mit OdeVec für das Einbinden in Fosite aus Kap. 5 vorzubereiten, wird der Befehl

```
./krome -compact -noVerbatimFile -LUmethod=3 -nvector=512 \
-useOdevec -equilibrium_H=1 -cooling=CHEM -heating=CHEM \
-n=networks/react_primordial5
```

verwendet. *-compact* bewirkt, dass die KROME Ausgabe gebündelt in eine Datei geschrieben wird, *-noVerbatimFile* reduziert ebenfalls die Anzahl der benötigten KROME-Dateien zur Laufzeit. *-LUmethod=3* verlangt eine numerische Bestimmung der Jacobi-Matrix und *-nvector=512* lässt auf einer Vektorlänge mit 512 Einträgen rechnen. *-useOdevec* deklariert die Benutzung von OdeVec, ist dieser Schalter nicht gesetzt wird stattdessen DLSODES verwendet. *-equilibrium_H=1* gibt an, dass der LTE-Löser verwendet werden soll und *-[cooling,heating]=CHEM* bewirken, dass die Dissoziationsenergie in der Temperaturentwicklung mit betrachtet wird. Der letzte Schalter *-n=networks/react_primordial5* deklariert schlussendlich das reduzierte Netzwerk in dem lediglich atomarer und molekularer Wasserstoff mit den Reaktion von Forrey (2013) und Martin u. a. (1996) sowie Helium, welches jedoch keine Reaktionsmöglichkeit besitzt. Nachdem der Präprozessor durchgelaufen ist, werden die drei resultierenden Dateien *krome_all.f90*, *odevec.f90* und *krome_commons.f90* in den *krome*-Unterorder von Fosite verschoben. Anschließend wird Fosite mit

Tabelle A.1.: Übersicht zu *Flags in OdeVec*.

Flag	Erklärung
-h -help	Gibt Hilfe in Standardausgabe aus
-commonfile FILE	Pfad zu .F90-Datei, welches Präprozessor-Direktiven bereit hält in die OdeVec seine Auswertungen schreiben soll
-commonout FILE	Pfad zum zu schreibenden Ausgabefile
-example EXAMPLE	Vordefinierte Beispiele: Aktuell "ROBER", "OREGO", "PRIMORDIAL"
-krome_setupfile KROME_SETUPFILE	Schnittstelle zum Laden eines krome-netzwerk files. OdeVec liest die Netzwerkdatei ein und lädt sie in einen Sympy Datentypen, der dann weiterverarbeitet und als ODE gespeichert werden kann.
-LUmethod LUMETHOD	Definiert die Handhabung der LU-Matrix: "1"=symbolisch, "2"=symbolisch mit symbolischer LU-Dekomposition (experimentell) oder "3"=numerisch
-dt_min DT_MIN	Definiere minimalen Zeitschritt bevor der ODE-Löser abbricht
-nvector NVECTOR	Vektorlänge über die der Löser vektorisieren darf
-equilibrium_H EQUILIBRIUM_H	Berechnet Gleichgewichtslösung für Dreikörperstöße mit Hilfe von Regula-Falsi
-ordering ORDERING	Ordnet die Jacobimatrix vor Kompilierzeit: "CMK"=Cuthill-McKee-Algorithmus, "FF"=Wenigste Zuerst wie in Jacobson und Turco (1994), "INVERT"=tauscht Reihenfolge der Zeilen aus
-packaging PACKAGING	Entweder "DENSE"=dichte Besetzung oder "CSC"=compressed sparse column
-solverfile SOLVERFILE	Pfad mit dem noch nicht prozessierten Solverfile
-solverout SOLVEROUT	Pfad in das prozessierte Solverfile geschrieben werden soll
-sparsity_structure	Gebe zusätzliche Informationen zur Dünnbesetztheit der Eingangsmatrix aus

```
FC=mpinfort cmake ../../ -DPARALLEL=ON -DHAVE_KROME=ON \
-DMAKE_TOOLCHAIN_FILE=../../Toolchain-SX-Aurora.cmake
```

konfiguriert und mit *make* kompiliert.

A.3. Übergangskoeffizienten Dreikörperstöße

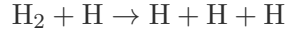
Die in dieser Arbeit verwendeten Übergangskoeffizienten werden in Martin u. a. (1996) und Forrey (2013) beschrieben und sind in KROME implementiert. Die Reaktion in Richtung



hat dabei die Koeffizienten

$$k_{\text{Forrey}} = 6^{-32} T^{-1/4} + 2^{-31} T^{-1/2}$$

während jene für



durch einen wesentlich längeren Fit dargestellt wird. Die in KROME (Grassi u. a. 2014) implementierte Lösung wird durch den Ausdruck

$$\begin{aligned} \log k_{h,1,i} &= k_{\text{CID}(1,i)} + k_{\text{CID}(2,i)} \log T + k_{\text{CID}(3,i)} (\log T)^2 + k_{\text{CID}(4,i)} (\log T)^3 \\ &\quad + k_{\text{CID}(5,i)} \log \left(1 + k_{\text{CID}(6,i)} \right) \frac{1}{T} \\ \log k_{h,2,i} &= k_{\text{CID}(7,i)} \frac{1}{T} \\ \log k_{l,1,i} &= k_{\text{CID}(8,i)} \log T + k_{\text{CID}(9,i)} \log T + k_{\text{CID}(10,i)} * (\log T)^2 \\ &\quad + k_{\text{CID}(11,i)} \log \left(1 + k_{\text{CID}(12,i)} \frac{1}{T} \right) \\ \log k_{l,2,i} &= k_{\text{CID}(13,i)} \frac{1}{T} \\ \log n_{c,1,i} &= k_{\text{CID}(14,i)} + k_{\text{CID}(15,i)} \log T + k_{\text{CID}(16,i)} (\log T)^2 + k_{\text{CID}(17,i)} \frac{1}{T} \\ \log n_{c,2,i} &= k_{\text{CID}(18,i)} + \log n_{c,1} \\ p &= k_{\text{CID}(19,i)} + k_{\text{CID}(20,i)} \exp(-T/1850) + k_{\text{CID}(21,i)} \exp(-T/440) \\ \log k_{\text{CID}} &= \log k_{h,1} - (\log k_{h,1} - \log k_{l,1}) / (1 + (n_{\text{H,nuclei}}/n_{c,1})^p) \\ &\quad + \log k_{h,2,i} - (\log k_{h,2} - \log k_{l,2}) / (1 + (n_{\text{H,nuclei}}/n_{c,2})^p) \\ \log k_{\text{Martin},i} &= \log k_{h,1} - (\log k_{h,1} - \log k_{l,1}) / (1 + (n_{\text{H,nuclei}}/n_{c,1})^p) \\ &\quad + \log k_{h,2} - (\log k_{h,2} - \log k_{l,2}) / (1 + (n_{\text{H,nuclei}}/n_{c,2})^p) \end{aligned}$$

bestimmt, wobei $n_{\text{H,nuclei}}$ der Gesamteilchendichte aller Wasserstoff-Spezies entspricht und die Koeffizienten k_{CID} in Tab. A.2 dargestellt sind. Der finale Übergangskoeffizient ergibt sich dann über

$$k_{\text{Martin}} = k_{\text{Martin},1} + k_{\text{Martin},2}. \quad (\text{A.1})$$

Tabelle A.2.: *Verwendete Koeffizienten in KROME für den Fit auf Grundlage von Martin u. a. (1996).*

$k_{\text{CID}(:,1)}$	-178,4239; -68,42243; 43,20243; -4,633167; 69,70086; 40870,38; -23705,70; 128,8953; -53,91334; 5,315517; -19,73427; 16780,95; -25786,11; 14,82123; -4,890915; 0,4749030; -133,8283; -1,164408; 0,8227443; 0,5864073; -2,056313
$k_{\text{CID}(:,2)}$	-142,7664; 42,70741; -2,027365; -0,2582097; 21,36094; 27535,31; -21467,79; 60,34928; -27,43096; 2,676150; -11,28215; 14254,55; -23125,20; 9,305564; -2,464009; 0,1985955; 743.0600; -1,174242; 0,7502286; 0,2358848; 2,937507

Danksagung

Zuerst möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. W. J. Duschl herzlich danken. Dafür, dass er mich immer ermutigt hat Dinge mit der nötigen Freiheit auszuprobieren und dafür, dass er immer ein zwischenmenschlich vertrauenswürdiger Ansprechpartner während der Doktorarbeit war.

Ganz besonders möchte ich zudem Dr. T. F. Illenseer danken, ohne dessen fachliche Expertise und steter Beistand diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Für all die vielen Dinge die er mir über die Jahre häufig im Zwiegespräch beigebracht hat, bin ich ihm zu tiefem Dank verpflichtet.

Frau Kuhr und Herrn Boll, welche mittlerweile beide im wohlverdienten Ruhestand sind, möchte ich für das schöne Umfeld danken, für das sie verantwortlich waren und ihrem ständigen Beistand im Falle technisch-administrativer Probleme, ebenso wie deren Nachfolgenden Frau du Bosque und Herrn Breslein.

Zudem möchte ich Manuel Jung und Stephan Deschner für das Korrekturlesen und die schöne gemeinsame Zeit am ITAP danken.

Auch möchte ich meiner Familie danken. Meinen Eltern, meinem Bruder mit Familie und meinen Großeltern, deren beständige Unterstützung immer eine große Hilfe ist und war. Zu guter Letzt möchte ich meiner Frau Anna danken. Danke für deine Unterstützung und Geduld mit dieser Arbeit in den letzten Jahren. Mit dir ist einfach alles etwas schöner und ich hoffe wir haben noch viele weitere gemeinsame Jahre vor uns.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass

1. die vorliegende Arbeit, abgesehen von der Beratung durch meine Betreuer, nach Inhalt und Form von mir selbständig verfasst worden ist.
2. die Arbeit und ihre Teile nicht im Rahmen eines Prüfungsverfahrens vorgelegen haben oder vorliegen.
3. Teile dieser Arbeit im Fachmagazin Astronomy & Astrophysics als Klee u. a. (2017) oder Klee u. a. (2019) veröffentlicht worden sind.
4. die Arbeit unter Einhaltung der Regeln guter wissenschaftlicher Praxis der Deutschen Forschungsgemeinschaft entstanden ist.
5. mir kein akademischer Grad entzogen wurde.

Kiel, den

Jannes Klee