

Hochgeschwindigkeits-Einschläge von Asteroiden, Kometen und Meteoriten

Von der Fakultät für Physik und Geowissenschaften
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina
zu Braunschweig
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)
genehmigte
D i s s e r t a t i o n

von Detlef de Niem

aus Berlin

2

1. Referent: Prof. Dr. rer. nat. Uwe Motschmann

2. Referent: Prof. Dr. rer. nat. Tilman Spohn

eingereicht am: 25. 04. 2005

mündliche Prüfung (Disputation) am: 21. 12. 2005

Druckjahr

2006

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|------------|
| 1 | Einführung | 11 |
| 1.1 | Asteroiden und Kometen | 11 |
| 1.2 | Bahnentwicklung | 17 |
| 1.3 | Kollisionen, Einschläge und kinetische Prozesse | 19 |
| 1.4 | Geologische und geochemische Produkte | 23 |
| 1.5 | Einschlagskrater als Zeitzeugen | 25 |
| 2 | Mechanische Prozesse bei Einschlägen | 29 |
| 2.1 | Stoßwellen in Geomaterialien | 29 |
| 2.2 | Hydrodynamik und Kontinuumsmechanik | 34 |
| 2.3 | Kontakt, Kompression und Excavation | 38 |
| 2.4 | Deformation von Gesteinen | 42 |
| 2.5 | Modifikation und Kollaps von Kratern | 43 |
| 2.6 | Skalierung und Ähnlichkeit | 44 |
| 3 | Die Gaswolke: Dynamik und Kondensation | 49 |
| 3.1 | Einleitende Betrachtungen | 49 |
| 3.2 | Phasenübergänge im Feuerball | 51 |
| 3.2.1 | Entwicklung der Gaswolke: analytische Näherung | 51 |
| 3.2.2 | Kondensations-Kinetik I: van der Waals Gas | 59 |
| 3.3 | Chemische Gleichgewichte | 68 |
| 3.3.1 | Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf | 68 |
| 3.3.2 | Kondensationskinetik II: Forsterit-Dampf | 76 |
| 3.3.3 | Zustandsgleichung für meteoritischen Dampf | 84 |
| 3.3.4 | Chemisches Gleichgewicht mit flüssigen Phasen | 94 |
| 4 | Numerische Methoden | 103 |
| 4.1 | Existierende Methoden | 103 |
| 4.2 | Ein-Material-Probleme | 106 |
| 4.2.1 | Gitter-basierte und Gitter-freie Methoden, Euler, Lagrange und ALE Formulierung | 106 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4.2.2 | Explizite und implizite Methoden, dimensionale Zerlegung, finite Volumen | 108 |
| 4.3 | Verfahren für Lösungen mit Stoßwellen | 110 |
| 4.3.1 | Godunov-Methoden | 110 |
| 4.3.2 | Spezielle Probleme bei krummlinigen Koordinaten . . . | 122 |
| 4.3.3 | Der SOVA-Algorithmus als eine implizite Methode . . | 122 |
| 4.3.4 | SOVA-Z: Zylinderkoordinaten | 129 |
| 4.3.5 | SOVA-S: sphärische Symmetrie | 134 |
| 4.3.6 | Beispiel 1: Eindimensionales Einschlagsproblem | 140 |
| 4.3.7 | Beispiel 2: Zweidimensionaler Einschlag, Zylinderkoordinaten | 143 |
| 4.3.8 | Beispiel 3: Gasexpansion mit chemischem Gleichgewicht | 153 |
| 4.3.9 | Beispiel 4: Expansion eines van der Waals-Gases in einer exponentiellen Atmosphäre | 157 |
| 4.4 | Multi-Material-Hydrodynamik | 158 |
| 4.4.1 | Volume of Fluid (VOF) Material-Rekonstruktion . . . | 158 |
| 4.4.2 | Godunov-Verfahren I: Colour-Advektion | 168 |
| 4.4.3 | Godunov-Verfahren II: Wellenrefraktion | 186 |
| 4.4.4 | Multi-Material-Erweiterungen in SOVA-Z | 195 |
| 4.4.5 | Materialordnung | 201 |
| 5 | Ergebnisse numerischer Simulationen | 203 |
| 5.1 | Energiepartitionen bei Einschlägen | 203 |
| 5.2 | Wechselwirkung mit einem Ozean | 218 |
| 5.3 | Der Chicxulub-Krater | 223 |
| 5.4 | Ein künstlicher Einschlag auf einem Kometen | 226 |
| 6 | Schlußbemerkungen | 235 |
| 6.1 | Zusammenfassung | 235 |
| 6.2 | Ausblick | 240 |
| 6.3 | Anmerkung zur Literaturliste | 241 |
| 6.4 | Danksagung | 241 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | Partialdrücke der Bestandteile der Gasphase bei Verdampfung von Forsterit: O (rot), Mg (grün), Si (blau), SiO (türkis), SiO_2 (violett), MgO (gelb), O_2 (braun). Obere Kurve: Sättigungsdruck von Forsterit Mg_2SiO_4 (schwarz). | 54 |
| 3.2 | Entwicklung der Dichte, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung. | 55 |
| 3.3 | Entwicklung des zentralen Drucks, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung. | 57 |
| 3.4 | Thermodynamischer Weg im T - ρ -Diagramm, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung. Gebiet unter der Koexistenzkurve (punktiert) entspricht Flüssigkeits-Gas-Mischung. | 57 |
| 3.5 | Entwicklung der Geschwindigkeit am äußeren Rand, \dot{R} , bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung. | 58 |
| 3.6 | Zweites Moment der Größenverteilung der Kondensattröpfchen, $\sqrt{r^2}$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie. | 65 |
| 3.7 | Übersättigung $S = \ln P/P_S$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie. | 66 |
| 3.8 | Temperatur T , bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie. | 67 |
| 3.9 | Thermodynamischer Weg im T - ρ -Diagramm, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie. | 68 |

| | | |
|------|--|----|
| 3.10 | Molare spezifische Wärme von Forsterit-Dampf, berechnet mit der Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht, Massendichte als Parameter. Dargestellte Kurven gelten nur in der Gasphase, unterhalb der Kondensationstemperatur würde im Gleichgewicht eine Phasenmischung auftreten, was hier nicht berücksichtigt ist. | 74 |
| 3.11 | Adiabaten-Exponent $\gamma := (\partial \ln(P)/\partial \ln(\rho))_s$ von Forsterit-Dampf, berechnet mit der Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht, Massendichte als Parameter. Dargestellte Kurven gelten nur in der Gasphase, unterhalb der Kondensationstemperatur würde im Gleichgewicht eine Phasenmischung auftreten. | 75 |
| 3.12 | Zweites Moment der Größenverteilung der Kondensattröpfchen, $\sqrt{r^2}$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie. | 79 |
| 3.13 | Übersättigung $S = \ln P/P_S$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie. | 80 |
| 3.14 | Temperatur T , bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie. | 81 |
| 3.15 | Thermodynamischer Weg im T - ρ -Diagramm, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie. | 82 |
| 3.16 | Entwicklung der radialen Geschwindigkeit für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Anfangsbedingung: Temperatur und Dichte entsprechend Einschlag mit 16.795 km/s, siehe Text. | 83 |
| 3.17 | Entwicklung der Temperatur für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Anfangsbedingung: Temperatur und Dichte entsprechend Einschlag mit 16.795 km/s, siehe Text. | 84 |

| | | |
|------|---|-----|
| 3.18 | Entwicklung des Drucks für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Anfangsbedingung: Temperatur und Dichte entsprechend Einschlag mit 16.795 km/s, siehe Text. | 85 |
| 3.19 | Verteilungen des Gasdrucks P und des Sättigungsdrucks P_s im Vergleich für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Übersättigung ($P > P_s$) setzt von außen nach ~ 12 s ein und erreicht das Zentrum nach ~ 15 s. | 86 |
| 3.20 | Partialdrücke, in Atmosphären, für Gasgemisch aus 26 Elementen im Dissoziations-Gleichgewicht mit 183 Molekülen entsprechend Sharp und Hübner (1990). Elementenhäufigkeit für CI-Chondriten nach McDonough und Sun (1995), jedoch $O/Fe = 1.7$ | 89 |
| 3.21 | Molare spezifische Wärme c_V , in Einheiten der universellen Gaskonstante R , berechnet mit der Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht, 26 Elementen und 183 molekularen Verbindungen, entsprechend Sharp und Hübner (1990). Elementenhäufigkeit für CI-Chondriten nach McDonough und Sun (1995), jedoch $O/Fe = 1.7$. Dargestellte Kurven gelten nur in der Gasphase, oberhalb der Sättigungskurve. | 94 |
| 4.1 | Schematische Darstellung der Annahmen für das genäherte Riemann-Problem im HLLC-Löser von Toro, Spruce und Speares (1994). | 113 |
| 4.2 | Dichte ρ für eindimensionales Einschlagsproblem. | 140 |
| 4.3 | Druck p für eindimensionales Einschlagsproblem. | 141 |
| 4.4 | Geschwindigkeit u für eindimensionales Einschlagsproblem. | 142 |
| 4.5 | Spezifische innere Energie ϵ für eindimensionales Einschlagsproblem. | 143 |
| 4.6 | Dichte des Bodenmaterials nach 80 Sekunden, nur geringer Variationsbereich der Dichte dargestellt, siehe Text. | 144 |
| 4.7 | Dichte des Materials des Asteroiden nach 80 Sekunden. | 146 |
| 4.8 | Dichte des Bodenmaterials nach 80 Sekunden, logarithmischer Maßstab. | 147 |
| 4.9 | Druck nach 80 Sekunden, linearer Maßstab. | 148 |
| 4.10 | Druck nach 80 Sekunden, logarithmischer Maßstab, nur positiver Anteil dargestellt, siehe Text. | 149 |
| 4.11 | Dichte der Rest-Atmosphäre nach 80 Sekunden, linearer Maßstab. | 150 |
| 4.12 | Totale spezifische Energie nach 80 Sekunden. | 151 |

| | | |
|------|---|-----|
| 4.13 | Betrag der Geschwindigkeit nach 80 Sekunden. | 152 |
| 4.14 | Verlauf der radialen Geschwindigkeit für halbkugelförmige Expansion des beim Einschlag eines CI-Chondriten mit 15km/s Geschwindigkeit erzeugten Dampfes. Parameter siehe Text. . . | 154 |
| 4.15 | Temperaturverlauf zu verschiedenen Zeiten für halbkugelförmige Expansion des beim Einschlag eines CI-Chondriten mit 15km/s Geschwindigkeit erzeugten Dampfes. Parameter siehe Text. | 155 |
| 4.16 | Druckverlauf zu verschiedenen Zeiten für halbkugelförmige Expansion des beim Einschlag eines CI-Chondriten mit 15km/s Geschwindigkeit erzeugten Dampfes. Parameter siehe Text. . . | 156 |
| 4.17 | Druckverlauf nach $t = 6.75$ Sekunden für Expansion des beim Einschlag erzeugten Dampfes in einer exponentiellen Atmosphäre. Van der Waals-Zustandsgleichung, Parameter siehe Text. . . . | 158 |
| 4.18 | Dichteverlauf nach $t = 6.75$ Sekunden für Expansion des beim Einschlag erzeugten Dampfes in einer exponentiellen Atmosphäre. Van der Waals-Zustandsgleichung, Parameter siehe Text. . . . | 159 |
| 4.19 | Temperaturverlauf nach $t = 6.75$ Sekunden für Expansion des beim Einschlag erzeugten Dampfes in einer exponentiellen Atmosphäre. Van der Waals-Zustandsgleichung, Parameter siehe Text. | 160 |
| 4.20 | Annahmen für die PLIC Materialgrenzen-Rekonstruktion. . . . | 161 |
| 4.21 | Trajektorien bei Wechselwirkung mit einer Stoßwelle im Riemann-Problem | 175 |
| 4.22 | Addition des Volumens der Flüssigkeit bei Vereinigung zweier rechteckiger Regionen | 180 |
| 4.23 | Wellenpropagation mit unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten, dargestellt für zwei Materialien. Schnitt bei konstantem y , zweite Raumkoordinate y zeigt in die Zeichenebene. Materialgrenze liegt anfangs bei x_0 | 190 |
| 5.1 | Materialgrenzen nach 10 Sekunden simulierter Zeit. Rot: Asteroidenmaterial. Grün: Planetenmaterial. Planetenoberfläche bei $z = 85$ km. Zeichenalgorithmus verwendet gleiche Subroutinen wie VOF-Rekonstruktion. | 206 |
| 5.2 | Verhältnis der Massen mit spezifischer Energie ϵ zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 0.8$ Sekunden. | 207 |
| 5.3 | Verhältnis der Massen mit spezifischer Energie ϵ zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 1.6$ Sekunden. | 209 |

| | | |
|------|---|-----|
| 5.4 | Verhältnis der Massen mit spezifischer Energie ϵ zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 5$ Sekunden. | 210 |
| 5.5 | Verhältnis der Massen mit Betrag der Geschwindigkeit v zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 0.8$ Sekunden. | 211 |
| 5.6 | Verhältnis der Massen mit Betrag der Geschwindigkeit v zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 1.6$ Sekunden. | 212 |
| 5.7 | Verhältnis der Massen mit Betrag der Geschwindigkeit v zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 5.0$ Sekunden. | 213 |
| 5.8 | Konturen der Dichte des Planetenmaterials nach 10.0 Sekunden | 214 |
| 5.9 | Konturen des Drucks nach 10.0 Sekunden. | 215 |
| 5.10 | Geschwindigkeitsfeld nach 10.0 Sekunden. | 216 |
| 5.11 | Dichte des Planetenmaterials nach 50 Sekunden. | 217 |
| 5.12 | Spezifische innere Energie nach 50 Sekunden. | 218 |
| 5.13 | Dichte des Planetenmaterials nach 20 Sekunden, mit Godunov-Methode. Keine Zylinderkoordinaten ! Planetenoberfläche bei 65 km. | 219 |
| 5.14 | Druck-Konturen 20 Sekunden, mit Godunov-Methode. Keine Zylinderkoordinaten ! Planetenoberfläche bei 65 km. | 220 |
| 5.15 | Materialgrenzen nach 0.5 Sekunden, Einschlag in einen Ozean, Basalt (rot), Wasser (grün), Oberfläche bei 8.5 km. | 221 |
| 5.16 | Geschwindigkeitsverteilung nach einer Sekunde, normiert mit Masse des Projektils M_p , für Einschlag eines Asteroiden mit 1 km Durchmesser in Wasser. | 222 |
| 5.17 | Dichte des Wassers nach 1.9 Sekunden, für Einschlag eines Asteroiden von 1 km Durchmesser mit 20 km/s Geschwindigkeit. | 223 |
| 5.18 | Dichte des Kometenmaterials nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit. | 228 |
| 5.19 | Druck nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis, 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit. Dargestellt ist nur der Bereich positiver Werte. | 229 |
| 5.20 | Innere Energie nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis, 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit. Dargestellt ist nur der Bereich positiver Werte. | 230 |
| 5.21 | Betrag der Geschwindigkeit nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis, 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit. | 231 |

Abkürzungsverzeichnis

| | |
|-------|--|
| ANEOS | Analytic Equations of State - Analytische Zustandsgleichungen |
| CI | nach dem Fall von Ivuna, Tansania benannte kohlige Chondrite |
| DOB | Depth of Burial - Tiefe der Eingrabung (bei Detonationen) |
| HLL | Harten Lax van Leer - eine Approximation des Riemann-Problems |
| JANAF | Joint Army Navy Air Force - thermochemische Tabellen |
| K/T | Kreide-Tertiär |
| NEO | Near Earth Objects - Erdnahe Objekte |
| NIST | National Institute of Standards |
| PLIC | Piecewise Linear Interface Construction - Stückweise lineare (Material)grenzen-Rekonstruktion |
| P/T | Perm-Trias |
| SAIC | Science Applications International Corporation |
| SALE | Simplified Arbitrary Lagrangean Eulerian |
| SLIC | Simple Linear Interface Construction - Einfache lineare (Material)grenzen-Rekonstruktion |
| SPH | Smoothed Particle Hydrodynamics |
| VOF | Volume of Fluid - Volumen der Flüssigkeit |

Kapitel 1

Einführung

1.1 Asteroiden und Kometen: Relikte der Planetenentstehung und Produkte ihrer Eigenentwicklung

Neben den Planeten mit ihren Monden hat das Sonnensystem andere Populationen von kleineren Himmelskörpern, deren Einschläge zumindest zum heutigen Zeitpunkt die wichtigste Quelle für äußere Veränderungen der festen Planetenoberflächen darstellen. Im Unterschied zu den Planeten kann man diese kleineren Körper über lange Zeiträume nicht als Einzelobjekte ansehen (siehe u. a. [Öpik \(1951\)](#), [Wetherill \(1967\)](#), [Dohnanyi \(1969\)](#), [Davis u. a. \(1985\)](#), [Greenberg und Nolan \(1989\)](#)), da sie zum Teil viel kürzere Lebensdauern besitzen. Man muss sie also als statistische Gesamtheit behandeln (wenn es auch noch besondere Untergruppierungen, etwa Asteroidenfamilien gibt). Nur diese gesamtheitliche Behandlung eröffnet Chancen, auch etwas über den Grund ihrer Existenz zu erfahren. Zudem beeinflussen sie die Entwicklung der terrestrischen Planeten so stark, daß Langzeit-Tendenzen in der Vergangenheit dieser Populationen für verschiedenste geologische Erscheinungen verantwortlich gemacht werden.

Kleine Körper werden nach ihrem optischen Auftreten und physikalischer Beschaffenheit in Kometen und Asteroiden oder kleine Planeten untergliedert. Dabei sind die hauptsächlich aus Wasser-, CO -, CO_2 -Eis und mineralischem Staub, sowie organischen (HCON) Verbindungen bestehenden Kometen ([Altwegg u. a. , 1999](#)), falls sie sich im inneren Sonnensystem aufhalten, äußerst veränderlich in ihrer Erscheinung; aktive Kometen besitzen eine ausgedehnte Gas- und Staubhülle - die Koma, und vielfach veränderliche Gas-, Staub- und Plasma-Schweife, die sich über mehrere AU erstrecken können.

Die meisten Kometen wurden und werden erst während dieser Aktivität entdeckt.

Dagegen rufen Asteroiden sternartige Bilder hervor, die jedoch bei längerer Beobachtung Bewegungseffekte erkennen lassen. Die geochemische Zusammensetzung von Asteroiden läßt sich gut aus Meteoritenfunden ableiten, danach dominieren bei den Chondriten Olivine und Pyroxene, Silikatgläser, jedoch gibt es auch Sulphide. Achondriten enthalten hauptsächlich FeO , MgO , CaO und die Eisenmeteoriten vorwiegend Fe und Ni . Bis zum Ende der achtziger Jahre kannte man nur den zwischen den Bahnen von Mars und Jupiter gelegenen Hauptgürtel der Asteroiden und die erdnahen Asteroiden. Allein die Population des Asteroidengürtels wird auf mehr als 2.5 Millionen Objekte mit Durchmessern über 1 km geschätzt, der größte Asteroid, Ceres, ist mit etwa 914 km Durchmesser bereits vergleichbar mit den Planetenmonden; etwa 200 Körper besitzen mehr als 100 km Durchmesser (Cellino u. a. , 1991). Große Asteroiden mit Durchmessern über 30 km sind nahezu vollständig beobachtet. Jedoch beträgt die Gesamtmasse des Asteroidengürtels nicht mehr als ca. $1.9 - 5 \times 10^{-3}$ Erdmassen.

Weiterhin existieren kurz- und langperiodische Kometen im inneren und äußeren Sonnensystem, wobei die Umlaufzeiten der kurzperiodischen Kometen unter 200 Jahren liegen. Im Gegensatz zur Mehrzahl der Asteroiden sind die Bahnen der Kometen der Jupiterfamilie (Umlaufzeiten unter 20 Jahren) bereits im Laufe von Jahrhunderten starken Veränderungen unterworfen. Jedes Jahr werden sogenannte neue Kometen entdeckt, deren Bahnen vor ihrem Einfang nahezu parabolisch sind, d.h. elliptisch, aber mit Exzentrizitäten sehr nahe bei Eins. Aufgrund von Modellen vermutet man, daß sie aus einem Halo von Kometen stammen, der Oortschen Wolke (Oort , 1950), welche aus einigen 10^{12} Kometen mit großen Halbachsen zwischen $10^{3.5}$ und $10^{4.5}$ AU besteht (Heisler und Tremaine , 1992). Die Bindungsenergie ihrer Bewegung um die Sonne ist so gering, daß Bahnstörungen durch nahe Vorbeigänge von Sternen und bei der Bewegung der Sonne durch das Gravitationsfeld der Galaxis ihr Eindringen in den Einflußbereich der großen Planeten verursachen können (Heisler und Tremaine , 1992). Nach nahen Vorbeigängen an Jupiter oder Saturn werden die Bahnen einiger Kometen so beeinflusst, das sie im inneren Sonnensystem verbleiben, oder, weitaus häufiger, für immer aus dem Schwerefeld der Sonne entweichen (Everhart , 1969). Ungefähr 700 langperiodische Kometen wurden bisher beobachtet (Wiegert und Tremaine , 1999). Versuche, die Entstehung der bekannten Kometenfamilien von Jupiter und Saturn allein durch den Einfang von Kometen (Newton , 1893) zu erklären (H. Newton berechnete die Wahrscheinlichkeit für den Einfang von Kometen durch Vorbeigänge an Planeten, siehe auch Radzievskii (1967)), stießen auf gewisse Schwierigkeiten: die statistische Verteilung der Bahnneigungen der

Kometen der Jupiter-Familie ist kaum auf diese Weise zu verstehen (Duncan, Quinn und Tremaine , 1988). Duncan, Quinn und Tremaine (1988) simulierten ein Ensemble von 5000 parabolischen Kometen mit anfänglich gleichverteiltem Perihelabstand q zwischen 4 und 6 AU, sowie isotroper Verteilung der Bahnnormalen. Von diesen wurden insgesamt 28 zu „sichtbaren“ Kometen, d. h. mit $q \leq 2.5$ AU. 12 von diesen waren kurzperiodisch (Periode < 200 Jahre). Die Inklinationsverteilung der eingefangenen Kometen erwies sich als ungefähr isotrop und veränderte sich vom Zeitpunkt des Einfangs an nicht wesentlich, im Gegensatz zu früheren Monte-Carlo-Simulationen von Everhart (1969).

Es gibt zwei Gebiete des Streuverhaltens der parabolischen Kometen mit großen Halbachsen a weit außerhalb des inneren Sonnensystems, jedoch Perihel im Bereich der Planetenbahnen. Das erste ist ein „random walk“ der Energie, d. h. der großen Halbachse a , wo nur kleine Änderungen auftreten, und entspricht sehr fernen Vorbeigängen an den großen Planeten (Wiegert und Tremaine , 1999). Hierbei entstehen keine starken Anisotropien der Inklinationsverteilung (Emel’yanenko und Bailey , 1998). Da die Bindungsenergie der Oort-Kometen sehr gering ist, geht ein großer Teil der Kometen durch Streuung verloren, andere wandern in die sogenannte innere Oort-Wolke und „diffundieren“ langsam im Raum der Kepler-Elemente. Der zweite, seltenere Fall sind sehr nahe Vorbeigänge an Planeten (innerhalb der Hill-Sphäre), die in einem einzigen Akt einen Einfang in kurzperiodische Bahnen herbeiführen; dieses Regime beschreiben die Formeln von Newton (1893) oder Radzievskii (1967); letztere mit Korrektur durch stückweise Näherung mit Hilfe von Kegelschnitts-Bahnen (conic matching) an der Hill-Sphäre des störenden Planeten. Beide Fälle haben sehr unterschiedliche Abhängigkeiten der Inklination. Es ist sehr schwierig, aufgrund verschiedener Näherungen bei numerischen Langzeit-Simulationen, abrupte Einfänge korrekt zu behandeln, vor allem ist die Statistik sehr gering.

Die Entdeckung von Körpern im Edgeworth-Kuiper-Gürtel (Jewitt und Luu , 1992), 1992 QB1 war das erste dieser Objekte, hat gezeigt, daß zwischen 30 und ~ 80 AU eine massereichere Population als der Asteroidengürtel existiert, die gegenwärtig auf etwa 0.1 bis 0.3 Erdmassen geschätzt wird (Stern und Colwell , 1997). Ob jedoch der Kuiper-Gürtel die alleinige Quelle der Kometen des inneren Sonnensystems darstellt, ist nach wie vor ungewiß. Wenn auch Levison und Duncan (1997) umfangreiche Simulationsrechnungen vorlegten, die solche Annahmen plausibel machen, kann man die Oort’sche Wolke wegen der großen Masse der Gesamtpopulation wohl nicht völlig als Quelle ausschließen. Sie erzeugt nach Emel’yanenko und Bailey (1998) theoretisch etwa 10^2 mehr Kometen vom Halley-Typ, als beobachtet werden. Nach den Berechnungen dieser Autoren ist die Übergangswahrscheinlichkeit der ins in-

nere Sonnensystem eindringenden parabolischen Kometen in Halley-ähnliche Bahnen derart hoch, bezogen auf die beobachtete Anzahl von parabolischen Kometen pro Zeiteinheit.

Aus physikalischer Sicht hat es kaum Zweck, Asteroiden oder Kometen als Einzelobjekte zu behandeln, vielmehr muß der Ensemble-Charakter berücksichtigt werden (Öpik , 1951; Dohnanyi , 1969; Davis u. a. , 1985; Greenberg und Nolan , 1989). Für die Dynamik der Oort'schen Kometen spielen zusätzlich Störungen durch den Vorbeigang naher Sterne eine Rolle (Fernandez , 1982), sowie Gezeitenwirkung der Galaxis (Heisler und Tremaine , 1992). Die im Vergleich zum Alter des Sonnensystems kurzen Lebensdauern kleinerer Asteroiden gegenüber mechanischer Zerstörung durch Zusammenstöße, sowie der kurzlebige Charakter der inneren Kometenpopulation lassen es als sinnvoll erscheinen, die Populationsentwicklung physikalisch zu untersuchen. Hierbei wird klar, daß sowohl im Asteroidengürtel als auch im Edgeworth-Kuiper-Gürtel auf längere Sicht Erosion durch Kollisionen Einfluß haben muß. Die kurzperiodischen Kometen im inneren Sonnensystem werden von der ihre Aktivität auslösenden Sonnenstrahlung beeinflusst, ihre dynamische Lebensdauer hängt von den Störungen durch die großen Planeten und nichtgravitativen Kräften ab. Es ist ebenso bekannt, daß viele Kometen sich aus nicht klar ersichtlichen Gründen teilen, wonach die Fragmente weitaus schwieriger zu beobachten sind.

Die Lebensdauern der erdnahen Asteroiden werden von Bahnstörungen durch Jupiter, weniger durch die terrestrischen Planeten, sowie durch Verlust infolge von Zusammenstößen mit Hauptgürtel-Asteroiden und den terrestrischen Planeten begrenzt (Öpik , 1951; Dohnanyi , 1969; Safronov , 1969; Davis u. a. , 1985; Greenberg und Nolan , 1989). Auch nichtgravitative Kräfte wie der Yarkovski-Effekt können eine sekulare Drift in Regionen mit instabiler Dynamik auslösen, allerdings nur für Körper von Meteoritengröße (Farinella u. a. , 1989); dies ermöglicht u. a. auch den Transport der Marsmeteoriten in erdnahe Bahnen. Kleine Asteroiden und Kometen unter 100 km Durchmesser sind je nach ihrer Quellregion Bruchstücke der ursprünglichen physikalischen Körper aus der Zeit der Entstehung des Sonnensystems, es sei denn, sie hielten sich bis vor kurzer Zeit in einer Region mit geringer Wahrscheinlichkeit für Kollisionen und Bahnveränderungen auf, wie die Kometen der Oortschen Wolke. In gewisser Weise ähneln die heutigen kleineren Asteroiden und Kometen der verschwundenen Anfangspopulation der Planetesimale, welche das Urmaterial für die Planetenentstehung bildeten. Welche Rolle den Kometen dabei zukam, ist weniger klar. So könnte die Oortsche Wolke nach einer Vorstellung von Fernandez (1982) aus der Entstehungsregion von Jupiter und Saturn sowie aus der Uranus-Neptun-Region stammen, d. h. ein Abfallprodukt der Entstehung der dortigen Pla-

neten sein. Jedoch ist ein „Transport“ aus dem Planetensystem mit Verlusten verbunden, und ein alternatives Modell behandelt auch direkte Entstehung der Kometen beim Kollaps des Vorläufers des solaren Urnebels, einer interstellaren Wolke aus Gas und Staub (Neslusan , 2000). Für den Kuiper-Gürtel spielen langzeitige Migrationseffekte eine wichtige Rolle (Levison und Duncan , 1993). Hinzu kommt, daß gegenwärtige Modelle mit weitaus höherer Anfangsmasse des Kuiper-Gürtels rechnen, d.h. 10-30 Erdmassen (Stern und Colwell , 1997). Falls dies zutrifft, ist entweder die dynamische Entwicklung oder der Erosionsverlust bei Kollisionen für die dramatische Massenabnahme bis zum heutigen Zeitpunkt verantwortlich.

Für das Gebiet des Hauptgürtels der Asteroiden wird zwar auch eine Anfangsmasse im Bereich einer Erdmasse vermutet, jedoch sind die Vorgänge, die zur Erosion geführt haben, relativ unklar; so gibt es auch Vorstellungen, nach denen der Asteroidengürtel niemals wesentlich massereicher als heute war (Davis u. a. , 1985). Große Hauptgürtel-Asteroiden und Kuiper-Gürtel-Objekte sind Relikte der Planetenentstehung, jedoch sind alle kleineren Körper mit Durchmessern von einigen bis zu einigen zehn Kilometern in diesen Populationen Zerfallsprodukte der Fragmentation bei Zusammenstößen (Greenberg und Nolan , 1989). Die Kometen der Oort'schen Wolke sind entweder Überbleibsel der Planetenentstehung oder entstanden bereits bei der Kontraktion der protosolaren Molekülwolke. In beiden Fällen haben sie weitgehend ihren ursprünglichen physikalischen und chemischen Aufbau bewahrt, und es gibt auch Anzeichen für ein Vorhandensein von interstellarer Materie (Altwegg u. a. , 1999) in Kometen.

Während der Anfangsphase der Akkretion der terrestrischen Planeten werden aufgrund einer bekannten Relation von Safronov (1969) die Relativgeschwindigkeiten (bzw. die Abweichungen von der lokalen Keplerschen Kreisbahngeschwindigkeit) in der präplanetaren Scheibe in der Größenordnung der Fallgeschwindigkeit and der Oberfläche des größten Objekts liegen. Damit spielen für die Frühphase der Entwicklung der Planetesimalen Zusammenstöße mit hohen Geschwindigkeiten kaum eine Rolle. Folglich wurde die physikalische Behandlung von inelastischen Stößen während der Planetesimal-Entwicklung bisher weitgehend vereinfacht. Erst wenn massive Protoplaneten auftreten, erreichen die Relativgeschwindigkeiten mehrere Kilometer pro Sekunde. Die dabei auftretende Erosion und Fragmentation von Planetesimalen wurden in der Theorie der Planetenentstehung bisher aber weitgehend abstrahiert, allein wegen der Unmöglichkeit, die tatsächlichen komplizierten physikalischen Vorgänge zu berücksichtigen. Aber nicht nur gravitative Selbstwechselwirkung der Schwärme von Planetesimalen, sondern auch die Störungen der langsam wachsenden großen Planeten heizen die Geschwindigkeitsverteilung der kleineren Körper auf. So beträgt die mittlere

Relativgeschwindigkeit im Asteroidengürtel heute etwa 5.29 km/s (Bottke u. a. , 1994). Die Zunahme der Relativgeschwindigkeiten, der Exzentrizitäten und Inklinationen der Bahnen verändern den Charakter der Entwicklung von der Akkretion zur Fragmentation. Im Spätstadium der Akkretion sind einzelne große Einschläge wesentlich für die Entstehung der Drehimpulse der Protoplaneten, d.h. erst zu diesem Zeitpunkt entsteht der Spin der Planeten (Safronov , 1969). Eine der Hypothesen zur Entstehung des Erdmondes nimmt den Zusammenstoß der Erde mit einem Mars-großen Körper an (Cameron , 2000; Kokubo u. a. , 2000). Die bei Hochgeschwindigkeitseinschlägen auftretenden Temperaturen verändern die chemische Zusammensetzung an der Oberfläche der entstehenden Planeten, und kinetische Energien der Impaktoren erreichen Werte, die ausreichend für die Verdampfung von Gesteinen sind. Re-Kondensation von Impakt-erzeugten Gasen ist ein wichtiger Vorgang zur Entstehung von Mineralien auf Oberflächen der Planeten, wozu bisher noch kaum quantitative theoretische Modelle existieren.

Erst genauere Beobachtungen erdnaheer Asteroiden in jüngster Zeit konnten die heutige Größenordnung der Einschlagswahrscheinlichkeit auf der Erde einigermaßen bestimmen. Die Entdeckungen von Alvarez u. a. (1980) und die spätere Identifikation des Chicxulub-Kraters (Hildebrand u. a. , 1991) verdeutlichen, daß Einschläge großer Asteroiden oder Kometen auf der Erde tatsächlich immer noch vorkommen. Obwohl man sich der Gefahren bewußt ist, die durch solche Katastrophen drohen, wird mit weniger Intensität an physikalischen Modellen ihrer Folgen gearbeitet, als dies für Erdbeben und Vulkanausbrüche der Fall ist.

Es sollte nun klar sein, daß die Physik der Hochgeschwindigkeitseinschläge planetarer Körper mehr als nur eine exotische Spezialdisziplin darstellt, vielmehr ist besseres Verständnis dieser Vorgänge für die Physik des Planetensystems, seiner Anfänge, aber auch der heutigen Gestalt unverzichtbar. Dazu jedoch müssen die physikalischen Grundlagen der hydrodynamischen Simulation von kosmischen Einschlägen dargestellt und weiterentwickelt werden. Danach werden schrittweise zusätzliche physikalische Prozesse einbezogen, die über die rein hydrodynamische Behandlung hinausgehen, sowie an Modellproblemen getestet. Umgekehrt erfordert aber die Besonderheit dieses Gebiets, sich eingehend mit Modellen der Entstehung der Populationen der Impaktoren, also der Asteroiden, Meteoriten und Kometen zu beschäftigen, bis hin zu ihrer chemischen und geologischen Beschaffenheit.

1.2 Bahnentwicklung

Am Beispiel des Asteroidengürtels sollen kurz die bahnmechanischen Besonderheiten verdeutlicht werden, wobei im Kuiper-Gürtel analoge Betrachtungen gelten. Störende Einflüsse der großen Planeten sind für die Dynamik der Asteroiden wesentlich. Asteroidenbahnen besitzen allgemein höhere Exzentrizitäten und Inklinationen als die der terrestrischen Planeten. Die Verteilung der großen Halbachsen der Asteroiden des Hauptgürtels weist Regionen mit geringer Aufenthaltsdichte auf. Diese sogenannten Kirkwood-Gaps befinden sich in der Nähe von Werten, welche einer Resonanz mit der Umlaufperiode des Jupiter entsprechen. Daneben existieren im Phasenraum auch kompliziertere sogenannte säkulare Resonanzgebiete, welche einer Kommensurabilität der wesentlich langsameren Präzessionsbewegung (d.h. einer langsamen quasiperiodischen Änderung der oskulierenden Elemente) mit der eines Planeten zugeordnet werden können (Brouwer und Clemence , 1961).

Seit langem ist bekannt, daß die Bahnen von Testteilchen bereits im einfachsten nichtintegrablen Fall - dem des restringierten Sonne-Jupiter-Asteroid-Dreikörperproblems sehr kompliziert sind. Die traditionelle Behandlung mit Hilfe der himmelsmechanischen Störungstheorie versagt für beide Typen von Resonanzen, sie führte zum klassischen Problem der kleinen Divisoren (Brouwer und Clemence , 1961). Fortschritte zum Verständnis des Charakters der Bahnbewegung von Asteroiden in der Nähe von Resonanzen erbrachten Entwicklungen in der Theorie Hamiltonscher Systeme. Zunächst gelang die Konstruktion von vereinfachten Hamiltonschen Modellproblemen, die Lösungen in Form einer Abbildung nach einer Umlaufperiode von Jupiter erlauben (Wisdom , 1983). Bei Computereperimenten mit diesen Abbildungen wurde deren chaotischer Charakter entdeckt, d.h. man fand Gebiete im Phasenraum, in denen zwei beliebig benachbarte Anfangsbedingungen zu exponentiell divergierenden Lösungen nach langer Zeit führen. Die Zeitabhängigkeit des Abstands zweier solcher Lösungen parametrisiert der charakteristische Ljapunov-Exponent, d. h. die Zeit für eine relative Vergrößerung des Abstandes im Phasenraum um einen Faktor e an. Die Hamiltonschen Modellsysteme ersetzen in einer Reihenentwicklung des ursprünglichen Problems nach oskulierenden Elementen die Terme mit schnellen resonanten Argumenten durch Summen von Delta-Funktionen (Zaslavskii , 1985). Dadurch wird die Bewegung integrabel, außer zu diskreten Zeitpunkten. Diese Technik erzeugt ein System, welches mit dem ursprünglichen physikalischen Problem vergleichbar, ihm jedoch nicht unbedingt äquivalent ist. Trotzdem erbrachte die Methode erfolgreiche analytische Schätzungen für den Ljapunov-Exponenten sowie die Gestalt der instabilen Bereiche im Phasenraum. Man fand so die charakteristischen Zeiten und den qualitativen Verlauf der Veränderung der

oskulierenden Elemente für die wichtigsten Resonanzen.

Inzwischen sind mit den symplektischen Integratoren auch Methoden für eine direkte numerische Integration über vergleichbare Zeiträume entwickelt worden (Levison und Duncan , 1997). Während diese Methoden höhere Genauigkeit bei der Erhaltung von Bewegungsintegralen besitzen, stellen sie andererseits im Raum der Koordinaten und Impulse eine relativ schlechte Approximation dar. Sie versagen bezeichnenderweise dann, wenn ein Test-Teilchen der gravitativen Einflußsphäre (der Hill-Sphäre) eines störenden Planeten zu nahe kommt, da dort der formale Approximationsparameter der Reihenentwicklung, der zu den symplektischen Methoden führt, von der Größenordnung Eins ist. Somit können sie nur unter Vorbehalt zur quantitativen Untersuchung von Einschlags-Wahrscheinlichkeiten auf den Planeten benutzt werden. Zur Simulation von großen Populationen von Testteilchen jenseits naher Vorbeigänge an den großen Planeten sind sie jedoch geeignet. Beispielsweise wurden diese Methoden auch zur Simulation der Entstehung der Jupiter-Familie der Kometen aus dem Kuiper-Gürtel verwendet. Andererseits existiert mit der stochastischen Methode von Arno'ld und Öpik ein Verfahren (Öpik , 1976), die Effekte naher Vorbeigänge an Planeten zu berechnen, jedoch versagt dieses Verfahren für chaotische Orbits, und berücksichtigt auch keine Bahnentwicklung. Die Öpik'sche Methode ergibt aber eine realistische Statistik für die Häufigkeit von Einschlägen auf den Planeten, wobei nach Vergleichen mit direkter Integration lediglich Fehler in Größenordnung eines Faktors 2-3 in der Einschlagsrate entstehen. In der Praxis kann eine Kombination der Öpik-Methode mit symplektischer Integration (Levison und Duncan , 1997) beispielsweise Einschlagsraten der Kometen der Jupiter-Familie auf den terrestrischen Planeten oder den Jupiter-Monden liefern. Die von Öpik abgeleiteten Formeln für die Einschlagswahrscheinlichkeit und ihre Weiterentwicklungen sind brauchbare Näherungen für viele Untersuchungen zur Statistik der Kraterentstehung.

Die heute wenig bevölkerten resonanten Bereiche mit den Verhältnissen $1 : 2$, $1 : 3$, $2 : 3$, $2 : 5$ etc. zur Umlaufzeit des Jupiter führen im restringierten Dreikörperproblem zum schnellen Anwachsen der Exzentrizität ursprünglich kreisförmiger Bahnen innerhalb von einigen $10^5 - 10^6$ Jahren, mit dem Resultat, daß einige Asteroiden in die Sonne fallen oder aus dem Sonnensystem entfernt werden. Ein Übergang in andere Bahnen, die vorher durch die Wechselwirkung mit terrestrischen Planeten aus der Resonanz abwandern, ist weniger wahrscheinlich, obwohl auch möglich. Diese auch als „fast track“ bezeichneten Resonanzen werden nicht mehr ausschließlich für den Transport von Meteoriten in erdnahe Bahnen verantwortlich gemacht. Der Mechanismus der Entstehung der Meteoriten wird in einem Zusammenspiel zwischen nichtgravitativen Kräften, wie dem Yarkovski-Effekt, und resonan-

ten Störungen unter Beteiligung der terrestrischen Planeten gesucht (Farinella u. a. , 1989). Die wesentlich längeren Ljapunov-Zeiten der entsprechenden chaotischen Bereiche im Phasenraum mit ihrer langsameren Veränderung der Exzentrizität sorgen für einen weniger verlustreichen Zustrom in die erdnahe Population. Die nichtgravitativen Kräfte verursachen dabei die Migration in den Bereich von Resonanzen, sie bilden aber auch einen größenabhängigen Sortiermechanismus. Ebenso können Fragmente bei der Kollision großer Asteroiden in resonante Bereiche injiziert werden. Simulation solcher Prozesse setzt eine Abstraktion der Folgen der Einschlagsvorganges voraus, d.h. eine Kenntnis der Massen- und Geschwindigkeitsverteilung der Fragmente.

1.3 Kollisionen, Einschläge und kinetische Prozesse

Die meisten Gesteine und Metalle sowie Wassereis besitzen bei Normaldichten Schallgeschwindigkeiten im Bereich einiger Kilometer pro Sekunde. Dies ist das Gebiet der sogenannten Hypergeschwindigkeiten für Stöße makroskopischer Körper. Bei Einschlägen auf den terrestrischen Planeten und dem Erdmond werden typische Geschwindigkeiten von 12-25 Kilometern pro Sekunde für Asteroideneinschläge erreicht. Parabolische Kometen haben wesentlich höhere Relativgeschwindigkeiten bis zu maximal $v_c(1 + \sqrt{2})$ (retrograd) wenn v_c die Kreisbahngeschwindigkeit des Planeten um die Sonne ist. Im Kuiper-Gürtel herrschen Relativgeschwindigkeiten im Bereich 1-2 km/s, im Asteroidengürtel ungefähr 5 km/s. Alle erwähnten Materialien verhalten sich in der Anfangsphase des Einschlags bei diesen Geschwindigkeiten hydrodynamisch, und der Energietransport vollzieht sich aufgrund einer Stoßwelle. Bei Beschränkung auf die Kollision von kleinen Körpern untereinander werden hauptsächlich zwei physikalische Parameter wichtig. Der erste ist die kritische Impaktorgröße für einen gegebenen Asteroiden oder Kometen, bei bekannter Geschwindigkeit. Als Kriterium für die Schwelle der Zerstörung gilt dabei, das der Restkörper etwa 1/2 der ursprünglichen Masse enthält. Unterhalb dieser Schwelle bezeichnet man den Prozeß noch als Kraterbildung, wobei allerdings die maximale erreichbare Größe von Kratern auf Asteroiden nicht genau bekannt ist. Die relativ großen Inklinationen und Exzentrizitäten der Asteroidenbahnen führen zu häufigen Zusammenstößen mit einer mittleren Geschwindigkeit von $\bar{U} = 5.29 \text{ km s}^{-1}$, die gemittelte Stoßwahrscheinlichkeit zwischen zwei bestimmten Körpern beträgt für die 682 nummerierten Asteroiden im Hauptgürtel mit über 50 km Durchmesser (Bottke u. a. , 1994)

$$W_{\text{impact}} = P_i(r_1 + r_2)^2, \quad P_i = 2.86 \times 10^{-18} y^{-1} km^{-2}, \quad (1.1)$$

wenn r_1, r_2 , die Radien der beiden betreffenden Asteroiden sind. Multipliziert man diese Zahl mit der Anzahl der potenziell zerstörenden Asteroiden mit dem Radius r_2 für einen bestimmten Ziel-Asteroiden der Größe r_1 , bekommt man die inverse Lebensdauer der Körper dieser Größe. Dem kritischen potenziell gefährlichen Körper kommt auf jeder Skala eine Schlüsselrolle zu. Die Energie des einschlagenden Körpers pro Masse des Bodenmaterials ist (Davis u. a. , 1985)

$$Q = \frac{1}{2} \frac{\rho_2 r_2^3 U^2}{\rho_1 r_1^3}, \quad (1.2)$$

und wenn $r_2 = \alpha(r_1, U)r_1$, beim kritischen Wert Q^* gilt. Q^* ist im allgemeinen eine Funktion von Materialparametern, der Geschwindigkeit U und dem Impaktor-Radius r_1 . Die Dichten des einschlagenden und getroffenen Körpers sind ρ_1 bzw. ρ_2 . Aus Gl.(1.2) ergibt sich

$$\alpha = \left(\frac{2Q^*}{U^2} \frac{\rho_2}{\rho_1} \right)^{1/3}. \quad (1.3)$$

Ein Maß für die Zerstörung ist das Massenverhältnis des größten überlebenden Fragments zur Gesamtmasse, f_L (Davis u. a. , 1985). Aus Ähnlichkeitsbetrachtungen kann man

$$f_L = f_L(Q/Q^*) = F(r_2/(\alpha r_1)), \quad (1.4)$$

ableiten (Housen und Holsapple , 1990). Die zweite charakteristische Größe oder Funktion ist die Massen- und Geschwindigkeitsverteilung der Fragmente, bei gegebenen Massen und Relativgeschwindigkeit der stoßenden Körper. Letztere sollte den Fall der Kraterentstehung als Grenzfall einschließen. Die Untersuchung von de Niem und Werner (2002b) hat sich u. a. mit einigen phänomenologischen Modellen zum kritischen Impaktor und der Fragmentverteilung beschäftigt. Dazu müssen aber erst die wesentlichen physikalischen Vorgänge beim Einschlag untersucht werden. Dabei ist für die Auswahl der Methode wichtig, daß sie realistische Energiepartitionen liefern soll (wieviel verbleibt als kinetische Energie in Fragmenten?).

Kennt man Fragmentationsschwelle und Massenspektrum sowie die Einschlagswahrscheinlichkeit, lassen sich in Analogie zur kinetischen Theorie der Gase Modelle für die Entwicklung der Massen- und Geschwindigkeitsverteilung finden (letztere ist auch ortsabhängig). Die Störungen der großen Planeten, insbesondere Jupiters führen zu chaotischer Instabilität in gewissen Teilen des Phasenraumes, d. h. zu geringerer Häufigkeit von Asteroiden mit den entsprechenden „chaotischen“ Werten ihrer Elemente, und auch zu einer räumlichen Verteilung, den Kirkwood-Gaps. Asteroiden oder Bruchstücke

mit chaotischen Bahnen stoßen entweder mit Planeten zusammen oder können auch nach nahen Vorbeigängen an Jupiter das Sonnensystem verlassen. Die Dynamik schon eines einzelnen Asteroiden kann also sehr kompliziert werden, wie soll dann ein ganzes Ensemble korrekt beschrieben werden, das zudem ständiger Gefahr der Zerstörung bei Stößen ausgesetzt ist, und wie soll das Schicksal der Bruchstücke im Einzelfall behandelt werden, zudem über einen Zeitraum von mehreren Milliarden Jahren ? Je länger der Zeitraum, desto mehr Austausch von Masse, Impuls und Drehimpuls innerhalb räumlich relativ getrennter Teile des Asteroidengürtels findet statt. Im folgenden werden wir von der Hypothese ausgehen, daß sich dabei eine mittlere Massenverteilung einstellt, allenfalls für sehr große Asteroiden mit einer Lebensdauer über der des Sonnensystems ist das verletzt, aber diese muß man ohnehin aus einer statistischen Beschreibung ausklammern, sie sind Einzelobjekte. Eine detaillierte statistische Beschreibung der Verteilung aller Asteroiden im Phasenraum wäre mittels der Boltzmann-Gleichung für ein Ensemble mit kontinuierlich variierenden Massen möglich

$$\frac{\partial f_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_k} \left(f_m \frac{\partial H}{\partial p_k} \right) - \frac{\partial}{\partial p_k} \left(f_m \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) = \hat{S}t\{f_m\}, \quad (1.5)$$

hierbei ist $f_m(q_k, p_k)$ die Einteilchen-Verteilungsfunktion, sie hängt aber auch noch von der Masse m ab. Die kanonisch konjugierten Koordinaten und Impulse sind q_k bzw. p_k , und $H = H(q_k, p_k)$ bezeichnet die Hamiltonfunktion für das Problem im Gravitationsfeld des Planetensystems. Weiterhin ist $\hat{S}t$ der Stoßintegral-Operator, ein bilineares Funktional der Verteilungsfunktion. Genaugenommen müßte f_m auch vom Spin der Teilchen abhängen, davon wird hier jedoch abgesehen. Mittelt man die Boltzmann-Gleichung über den Phasenraum, und ist das System abgeschlossen, leistet das auf der linken Seite entstehende Oberflächenintegral keinen Beitrag. Durch Neuzugang (Kometen) oder chaotische Verluste hat der Phasenraum jedoch praktisch „Löcher“ und man hat solche Prozesse extra zu behandeln, etwa über einen Relaxationszeit-Term, der (formal) ins Stoßintegral auf die rechte Seite kommt. Für den regularisierten Teil des Phasenraums verschwindet das Oberflächenintegral. Übrig bleibt eine Gleichung für die Massenverteilung allein, die noch über den Phasenraum gemittelte Wahrscheinlichkeiten für Erzeugung und Vernichtung von Teilchen einer bestimmten Masse enthält. [Safronov \(1969\)](#) und [Dohnanyi \(1969\)](#) fanden analytische Lösungen dieser Gleichung, während spätere Behandlungen numerische Simulationen mit Monte-Carlo-Methoden ([Davis u. a. , 1985](#); [Greenberg und Nolan , 1989](#)) oder direkte numerische Lösungen der entsprechenden Integrodifferentialgleichung ([de Niem und Werner , 2002b](#)) beinhalten.

Je nach Vorhandensein der Möglichkeit von Wachstum (Akkretion) oder Erosion (Fragmentation) spricht man hier vom Fragmentations-Koagulations-Problem, einem zentralen Problem der Theorie der Planetenentstehung. Die mathematischen Theorien zur Koagulation haben vor allem das Phänomen der Gelation untersucht, d.h. die Besonderheit, daß beim Zulassen von Akkretion im Extremfall ein einziger Körper nahezu die gesamte Masse zu seinem Wachstum verbraucht, und das während einer endlichen Zeit. Diese Tendenzen zur Gelation wurden unter weitgehend allgemeinen Annahmen zur funktionellen Form der Koagulationswahrscheinlichkeit bewiesen (Lee , 2000). Das ist die tiefere Ursache für das in einigen frühen Computerexperimenten gefundene sogenannte „runaway“-Wachstum des massivsten Körpers. Solche, wenn auch sehr allgemeinen Resultate scheinen gegen das Überleben einer sehr massiven Restpopulation von Planetesimalen zu sprechen, sie führen eher zum oligarchischen Wachstum einer Reihe großer Körper in voneinander isolierten Zonen (Kokubo und Ida , 1998). Dies sind aber noch nicht die terrestrischen Planeten. Falls die Körper Hill-stabil (Gladman , 1993) bleiben, d. h. ihre Bahnen sich niemals infolge gravitativer Wechselwirkung treffen können, bleiben sie isoliert. Im entgegengesetzten Fall tritt eine Art „Kannibalismus“ ein, den wenige große Körper überleben (Safronov , 1969).

Sobald Erosion vorhanden ist, scheitert eine direkte Monte-Carlo-Simulation des Planetesimalproblems an der zu großen Anzahl von Körpern, da die Größenverteilungen mit kleiner werdendem Durchmesser des Objekts steil ansteigen. Andererseits hängen Wachstum und Stabilität gegenüber Kollisionen auf jeder Größenskale von der Häufigkeit und Geschwindigkeit von Körpern mit der weitaus kleineren kritischen Skale ab. Eine gewisse Vereinfachung des Problems im Falle des Asteroidengürtels stellt die Annahme einer stationären und massenunabhängigen Geschwindigkeitsverteilung dar, gegeben durch die beobachteten Verteilungen von großer Halbachse, Exzentrizität und Inklination. Meist wird dieser Ansatz aber noch weiter vereinfacht, so daß lediglich eine einzige mittlere Relativgeschwindigkeit in das Problem der Erosion und Fragmentation eingeht. Eine kinetische Theorie, welche die Größenverteilung der heutigen Asteroiden berechnen kann, ist ein Test der phänomenologischen Annahmen zum kritischen Impaktor.

Die Entwicklung der Geschwindigkeitsverteilung im Planetesimalproblem wurde sowohl semianalytisch als auch mit Methoden der Simulation von Vielteilchensystemen untersucht. Für semianalytische Betrachtungen kann mit einer anisotropen Maxwell-Verteilung relativ zur lokalen Keplerschen Kreisbahn gearbeitet werden. Während der Planetenentstehung herrschten andere Aufenthaltsdichten kleiner Körper als in den heutigen Restpopulationen, dem Asteroiden- und Kuiper-Gürtel, und Relativgeschwindigkeiten waren weitaus geringer (Safronov , 1969; Davis u. a. , 1985; Stern und Colwell , 1997). Da-

her dominierten anfangs andere Effekte die Entwicklung der Geschwindigkeitsverteilung, wie gravitative Zweikörper-Streuung und Relaxation infolge dynamischer Reibung und inelastischen Stößen. Gegen Ende, wenn bereits ein großer Protoplanet vorhanden ist, versagen die meisten analytischen Betrachtungen. Jedoch ist diese Phase der Entstehung die interessanteste: erst hier entscheidet sich die Frage nach dem Drehimpuls des entstehenden Planeten, der Bildung einer Atmosphäre und eventuellen Satellitensystemen. Wie sich das Material weiterentwickelt hat, welches nicht in den Planeten endete, ist theoretisch wenig untersucht. Es gibt auf dem Erdmond Hinweise auf ein spätes heftiges Bombardement (late heavy bombardment) (Hartmann u. a. , 2000) mit Asteroiden oder Planetesimalen, welches bis vor etwa 3.8 Milliarden Jahren anhielt, wobei die Einschlagsrate vor etwa 4.2 Milliarden Jahren bis 10^3 des heutigen Werts betrug. Das wirft die Frage auf, welche massive Population von kleinen Körpern bis zu 600 Millionen Jahre nach der Entstehung der terrestrischen Planeten „gespeichert“ wurde. In diesem Zusammenhang wäre ein direkter Nachweis ähnlicher Ereignisse auf der Oberfläche der größten Asteroiden oder des Mars interessant. In ähnlicher Weise wie an Mondmaterial, wurden Versuche unternommen, das late heavy bombardment an Marsmeteoriten nachzuweisen. Hierbei gibt nach Untersuchungen von Ash u. a. (1995) im Meteoriten ALH 84001 Anzeichen für Ereignisse, welche zum „Rücksetzen“ der Alter bei ~ 3.9 Milliarden Jahren führten, allerdings sind die Altersdaten nicht so eindeutig, d. h. stärker gestreut, als beim Erdmond.

1.4 Geologische und geochemische Produkte

Die Erde besitzt trotz ihrer geologisch aktiven Oberfläche, welche sich als Folge der Plattentektonik ständig verändert, eine größere Anzahl (etwa 160) gut erhaltener Einschlagskrater im Bereich einiger Kilometer Durchmesser bis hin zu wenigen sehr großen, wie dem Chicxulub-Krater. In den letzten drei Jahrzehnten, hauptsächlich durch die Entdeckung der weltweiten Anreicherung an Elementen der Platingruppe, d.h. einer Iridium-Anomalie (Alvarez u. a. , 1980) in einer Schicht, die zeitlich nahe des Massensterbens gegen Ende der Kreidezeit auftritt, setzten verstärkt geologische Untersuchungen dieser Krater ein. Infolge des hohen Alters der meisten Impakt-Strukturen ist ein direkter Nachweis von Material des Impaktors nur selten gelungen. Vielmehr sind geologisch nachweisbare Reste der Frühphase von Einschlägen Objekt der Diskussion unter Geochemikern und Geologen. Dagegen sind die Folgen für das Gestein am Boden der Einschlagsgebiete gut studiert. So gibt es zahlreiche Indikatoren für den Druck in der Stoßwelle in unmittelbarer Nähe.

Bei Einschlägen auf der Erde werden anfangs immer Energien erreicht, welche zur vollständigen Verdampfung der für Asteroiden typischen Gesteine ausreichen. Beispielsweise entspricht einer Geschwindigkeit von 20 km/s eine spezifische Energie von $2 \times 10^8 \text{ J/kg}$. Die spezifische innere Energie der vollständigen Verdampfung von Granit oder Basalt beträgt $1.8 \times 10^7 \text{ J/kg}$, also rund ein Zehntel. Tatsächlich erreicht die spezifische Energie in der Stoßwelle nur Anfangswerte in Höhe eines Viertels der spezifischen kinetischen Energie des Impaktors (Melosh, 1989). Jedoch verteilt sich diese innere Energie auf „Projektile“ und Bodenmaterial, und es verdampft eine größere Menge an Material am Boden der Einschlagsstelle. Der Transport des Materials des „Projektils“ findet in einer Gaswolke statt, und Mineralien kondensieren in der Form von Aerosolen, kleinen Tropfen oder sogenannten Spherulen. Die Gaswolke in einer Simulation der Chicxulub-Ereignisses (Melosh und Pierazzo, 1997) enthielt nach 3 Sekunden etwa gleichviel Asteroiden- und Bodenmaterial. Dadurch ist kaum mit Funden der reinen urprünglichen Materialzusammensetzung des Impaktors zu rechnen, und lediglich Häufigkeitsverhältnisse von Platin-Gruppen-Elementen, welche in der Erdkruste um bis zu 1000 mal weniger verbreitet als in Meteoritenmaterial sind, dienen als Indikator für die extraterrestrische Herkunft. Als weitere Indikatoren dienen sogenannte Impaktgläser, Tektite und Mikrotektite. Geologen favorisieren derzeit eine Entstehung der Tektite aus der beim Einschlag gebildeten Schmelze. Jedoch finden sich in einigen Fällen kleinere Spuren von Mineralien, die als Hochtemperatur-Kondensate bekannt sind, so z.B. Magnesioferrit-Spinel in den Spherulen der Kreide-Tertiär Schicht (Smit und Kyte, 1984). Die Temperatur der Kondensation überstieg dabei 2000 K. Weiterhin besitzen diese Kondensate hohen *Ni*- und *Co*-Anteil, in einigen findet sich auch angereichertes *Ir*. Die sie umgebenden Spherulen sollten also aus der Gasphase stammen, werden aber von Geologen als Schmelz-Spherulen bezeichnet. Nur in der Gasphase werden die höchsten Geschwindigkeiten erreicht. Globaler Transport von flüssigen und auch festem Auswurfsmaterial ist im Fall des Chicxulub-Kraters aber ebenfalls nachgewiesen. Bei anderen Kratern auf der Erde finden sich ebenfalls mit ihnen assoziierte Tektit-Streufelder, so beim bekannten Ries-Krater. Ein physikalisches Problem ist die Schwierigkeit, Tektite in einem Gas mit annähernd Atmosphärendichte ohne Abbremsung über weite Entfernungen zu transportieren. Daher schlagen neuere Modelle einen aerodynamischen Mitnahme-Effekt durch Gas an der Oberfläche der Einschlagsstelle vor. Dieses Gas könnte entweder atmosphärische Luft oder verdampfte Mineralien enthalten. Im zweiten Falle hat das Gas anfangs bedeutend höhere Dichten als die umgebende Atmosphäre, wenigstens in den ersten Sekunden für den Fall des Chicxulub-Kraters, und Temperaturen über dem Schmelzpunkt der Tektite. Später, falls die Tektite in größere Höhe transportiert

werden, müßte das Gas an ihren Oberflächen kondensieren und daher eine Schicht mit verschiedener chemischer Zusammensetzung ausbilden. Andere Autoren (von Engelhardt u. a. , 1987) schlugen jedoch auch Entstehung der Tektite des Ries-Kraters in einem Plasma vor. Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß relativ uneinheitliche Meinungen bei Geologen über den Ursprung und die Natur der Relikte des Impaktors bei irdischen Einschlägen bestehen. Dies gilt ebenfalls für Mondmaterial mit den dort verbreiteten Spherulen und Impaktgläsern. Allein die Tatsache, daß die Astronauten in kurzer Zeit Impakt-Gläser und Tektite fanden, zeigt ihre starke Verbreitung auf der Mondoberfläche an, und ihr Entstehungsmechanismus hat offensichtlich nichts mit dem Vorhandensein einer Atmosphäre zu tun.

Die Schwierigkeiten bei quantitativen Modellen der chemischen Zusammensetzung von Kondensaten aus einem Dampf meteoritischer Zusammensetzung liegen daran, daß es hierbei um einen weitgehend nicht erforschten $P - T$ Bereich für die beteiligten Gase mineralischen Ursprungs geht, in dem wenig zuverlässige thermochemische Daten vorliegen. Außerdem gibt es kaum Lösungs-Modelle für die Hochtemperatur- Flüssigkeits-Gemische, die aus ihnen kondensieren. Daher wurden und werden hauptsächlich Experimente, wie z. B. zur Laser-Verdampfung von meteoritischem Analogmaterial durchgeführt. In dieser Arbeit werden theoretische Überlegungen mit Hilfe eines idealen Lösungsmodells für die wichtigsten Flüssigkeiten angestellt, die aus einem Gemisch der etwa 182 häufigsten Gasverbindungen in einem Dampf meteoritischer Komposition hervorgehen. Die Notwendigkeit solcher Modelle ergibt sich daraus, daß sie bisher kaum zur Verfügung stehen, bzw. ohne realistische hydrodynamische Entwicklung des Dampfes betrachtet worden sind.

1.5 Einschlagskrater als Zeitzeugen des Bombardements

Die bekannteste von Kratern geprägte Oberfläche besitzt der Erdmond. Wegen des Fehlens einer Atmosphäre lassen sich Krater auf nahezu allen Skalen beobachten, und die meisten Studien zu Kraterentstehung entstanden zur Zeit der Mondlandungen und unmittelbar danach. Die Kraterverteilung zeigt eine Art von geometrischer Selbst-Ähnlichkeit, d. h. über weite Bereiche gehorcht die Anzahl von Kratern pro Fläche als Funktion ihres Durchmessers einem Potenzgesetz, wobei der Exponent auf logarithmischem Maßstab gewisse Oszillationen aufweist. Dabei ist klar, daß ausreichender Zeit unterhalb eines bestimmten Durchmessers jedes Flächenelement mehrmals getroffen

wurde, und neue Krater alte auslöschten, dieser Zustand wird als „Gleichgewicht“ bezeichnet (Melosh, 1989). Nur oberhalb dieser Skale kann man von einer „Produktionsverteilung“ sprechen. Weiterhin existiert das Phänomen der geometrischen Sättigung, d. h. eine Fläche kann nur eine gewisse maximale Anzahl von Kratern einer gegebenen Größe aufnehmen, bei gegebenem Exponenten der als Potenzgesetz genäherten Durchmesser-Verteilung (Melosh, 1989). Dies und die Tatsache eines in der Vergangenheit viel intensiveren Bombardements (Hartmann u. a. , 2000) erschwert geologische Untersuchungen zur Altersbestimmung mit Hilfe von Kraterzählungen.

Am mitgebrachten Mondmaterial bot sich der Vorteil, direkte Altersbestimmungen mit radioaktiven Isotopenverhältnissen anzustellen. Daher kennt man das Alter der großen Einschlagsbecken, wie der Umgebung der Landesstellen (Hartmann u. a. , 2000). Allerdings wird darüber diskutiert, ob nicht die von den Astronauten mitgebrachten Bodenproben hauptsächlich ein bestimmtes großes Einschlagsereignis, die Entstehung des Imbrium-Beckens, datieren, und so die Alter anderer Einschlagsbecken ungewiß machen (Hartmann u. a. , 2000). Eines der Ergebnisse dieser Untersuchungen ist, daß sich jüngere (als etwa 3.9 Milliarden Jahre) Oberflächengebiete mit Hilfe von Kraterstatistik datieren lassen, d. h. Geologen können relative und absolute Alter von größeren Flächen durch Kraterzählung bestimmen. Man hat so Werte über den gemittelten Fluß der „Projektile“ seit den kataklysmischen Ereignissen des „late heavy bombardment“ gewonnen, und kennt dadurch bis auf einen gewissen Unsicherheitsfaktor die Einschlagsrate, bedingt durch erdnahe Asteroiden, sogar von noch unbeobachteten Teilen der Population. Solche theoretischen Interpretationen setzen jedoch voraus, daß man in der Lage ist, aus Kratergrößen die des Impaktors abzuleiten (die Geschwindigkeiten folgen aus anderen Betrachtungen, wie den Eigenschaften der Verteilung der Bahnelemente). Die numerische Simulation der Kraterentstehung ist der einzige Weg, um die gebräuchlichen empirischen Skalierungsgesetze zu testen, die den Effekt eines Einschlags in Form der Kratergröße parametrisieren. Ansonsten kann man solche Skalierungsgesetze mit Hilfe der Daten aus viel kleineren Labortests oder Nuklearexplosionen extrapolieren (Roddy u. a., 1977). Die älteren hydrodynamischen Simulationen für Mondkrater (O’Keefe und Ahrens , 1975, 1976) sind mit dem Programm HELP (Hagemann und Walsh , 1970) entstanden, und es gibt kaum neuere Versuche. Für andere Himmelskörper wie den Mars oder Asteroiden verfügt man noch nicht über radioaktive Altersbestimmungen, und die Kraterstatistik kann nur relative Alter ergeben, es sei denn, man macht zusätzliche Annahmen über den Impaktor-Fluß in anderen Regionen des Sonnensystems.

Es gibt interessante Fragen, die erst durch Vorbeiflüge von Raumsonden an Asteroiden aufgeworfen wurden. Bei den Asteroiden ist z.B. die Rolle

der Eigengravitation bei Kraterentstehung und Fragmentation schwer zu beantworten. Ebenso sind die Alter von beobachteten Asteroiden-Oberflächen regelmäßig Gegenstand von Debatten. Weiterhin ist die maximal erreichbare Kratergröße und die Verteilung der Auswurfgeschwindigkeit wichtig. Die Skale, bei der gravitative Effekte beginnen, die Kratergröße zu begrenzen, ist bisher stark modellabhängig. Bisherige hydrodynamische Simulationen erfolgten mit Methoden, die erhebliche numerische Dissipation beinhalten, sodaß Aussagen zur Endphase, wo die nach dem Durchgang der Stoßwelle erreichten Rest-Geschwindigkeiten die Größenordnung der gravitativen Fluchtgeschwindigkeit auf der Oberfläche erreichen, von numerischen Fehlern abhängen. Einige Asteroiden besitzen natürliche Satelliten, die Teile des Auswurfmaterials sein könnten. Diese Satelliten sind überraschend groß und deuten auf ausreichende „Startgeschwindigkeit“ großer Fragmente hin.

Für den Mars erreichen aufgrund der dünnen Atmosphäre viel kleinere Körper die Oberfläche und verursachen dort Krater, im Vergleich mit der Erde oder mit Venus. Haben diese Vorgänge auch den Verlust einer vermuteten dichteren primordialen Marsatmosphäre bewirkt? Einige in der Antarktis gefundenen Meteorite stammen von der Marsoberfläche, wie Vergleiche der Edelgaskonzentrationen in Einschlüssen mit Daten der Marsatmosphäre ergaben. Die Schock-Zustände der Gesteine, d. h. die maximal erreichten Drücke in diesen Meteoriten lassen Rückschlüsse über den Auswurfprozeß zu. Allein die Tatsache ihrer Existenz sowie ihr Strahlungs-Expositionsalter erlauben Abschätzungen zur Natur und Häufigkeit des „Startvorgangs“.

Seit den Missionen von Voyager und Galileo sind die Jupitermonde gut kartographiert, und die Krater auf ihren Oberflächen sind die wichtigsten Zeugen für Einschlagsvorgänge im äußeren Sonnensystem. Auf ihren Oberflächen sollten sich aber, gebundene Rotation vorausgesetzt, Unterschiede der Kraterdichte von Vorderseite und Rückseite (in Bewegungsrichtung) bemerkbar machen. Solche Asymmetrien lassen sich gut theoretisch, mittels einiger Erweiterungen der Methode von Öpik berechnen (Zahnle u. a. , 2001). Beobachtete Asymmetrien erreichen nicht die wesentlich höheren theoretischen Werte. Ohne sich in Spekulationen zu verlieren, kann man dazu nur bemerken, daß entweder die Voraussetzung der gebundenen Rotation nicht stimmen kann, oder daß keine Produktionsverteilung von Kratern beobachtet wurde. Andere Vorstellungen führen eine hypothetische planetozentrische Population ein, die über einen längeren Zeitraum im Jupitersystem gebunden war, denn nur Körper von außerhalb des Jupitersystems rufen die sogenannte Apex-Antapex-Asymmetrie hervor. Diese Vorstellungen sind aber bisher nicht auf einem plausiblen Einfangmechanismus für diese Population gestützt, noch existieren Untersuchungen zur dynamischen Entwicklung, d.h. der Stabilität solcher Bahnen, wie auch Vergleiche mit den Einschlags-

raten „direkter“ Einschläge von außerhalb des Jupitersystems fehlen. Weiterhin gibt es sehr stark divergierende Altersschätzungen für die Oberflächen der galileischen Satelliten des Jupiter, je nach der Natur und Dynamik der angenommenen Impaktoren, denn diese Populationen sind astronomisch nicht direkt beobachtbar (mit einer Ausnahme - dem Einschlag von Fragmenten des Kometen Shoemaker-Levi 9 auf Jupiter. Jedoch ist so ein Ereignis etwa 10^4 mal häufiger als ein Einschlag eines vergleichbaren Kometen auf einem der galileischen Monde). Es wird deutlich, wie kompliziert die Interpretation der Kraterdichte im Einzelfall sein kann.

Das Ziel einer der interessantesten bevorstehenden Raumfahrtmissionen, „deep impact“, ist die Erzeugung eines Kraters von etwa 100 m Durchmesser auf einer Kometenoberfläche durch den Einschlag einer Masse von etwa 400 kg Kupfer. Das ist insofern eine Herausforderung an theoretische Modelle, da hier auch eine Wasserdampf-Wolke erzeugt wird, die mit der Koma wechselwirkt, und das Material des Kometen vorher nicht untersucht werden kann; weder Dichte noch chemische Zusammensetzung sind bekannt. Um beobachtbare Effekte zu verstehen, wären sehr langwierige hydrodynamische Simulationen bis zum Stillstand des Auswurfsprozesses notwendig. Eine Besonderheit beim Einschlag in Kometen ist die vermutete hohe Porosität des Materials, d.h. die Ausbreitung der Stoßwelle verläuft hier andersartig. Zur Interpretation der Ausbreitung der Stoßwelle in der Koma werden gute Strömungsmodelle für die aus Gas, Staub und Kondensaten bestehende innere Koma benötigt. Die Tatsache, daß der abkühlende Wasserdampf bei seiner Ausdehnung schnell kondensiert, macht die Behandlung der Wechselwirkung mit der Koma im Rahmen der Hydrodynamik allein unmöglich.

Kapitel 2

Mechanische Prozesse bei Einschlägen

2.1 Stoßwellen in Geomaterialien

Der Zusammenstoß zweier Körper und die dabei ablaufenden Austauschprozesse von Energie, Impuls, Drehimpuls und Masse ist ein zentrales Problem der Physik. Beim Zusammenstoß mikroskopischer Teilchen werden die Kräfte wie Elektromagnetismus, Kernkräfte und Gravitation durch Felder vermittelt, wobei die Quellen dieser Felder die Teilchen selbst sind. Zahlreiche klassische und quantenmechanische Lösungen der Bewegungsgleichungen in diesen Feldern sind bekannt (aber bereits die Bewegung dreier Körper in der Newtonschen Theorie der Gravitation ist ein klassisch nicht integrables Problem). Sind die Teilchen asymptotisch frei, so gelten Erhaltungsgesetze für Impuls, Energie und Drehimpuls. Wenn die kinetische Energie der Teilchen von der Größenordnung ihrer Bindungsenergie ist, werden Stöße inelastisch und sind mit der Produktion neuer Teilchen verbunden. Die dabei freigesetzte Energie wird in Strahlung und kinetische Energie umgewandelt, und erlaubt Rückschlüsse auf Bindungsenergien.

Beim Kontakt makroskopischer Körper aus kondensierter Materie erfolgt die Wechselwirkung durch Oberflächenkräfte wie Reibung und Druck. Im Festkörper werden Spannungen durch einen Tensor beschrieben, der Druck ist ein Drittel der Spur dieses Tensors. Die Kräfte hängen außer vom Deformationszustand noch von thermodynamischen Größen ab, z. B. der Temperatur. Die makroskopischen Bewegungsgleichungen im Inneren der Körper sind die Euler- oder Navier-Stokes Gleichungen der Hydrodynamik, im Falle des Festkörpers mit zusätzlichen Spannungskräften. Bei Energien und Dichten, die keine wesentliche Ionisation erlauben, haben elektromagnetische Wech-

selwirkungen eine untergeordnete Bedeutung. Meist ist die Annahme lokalen thermodynamischen Gleichgewichts ausreichend, wenn auch gewisse Prozesse wie Phasenübergänge zusätzliche Behandlung erfordern. Innerhalb des makroskopischen Körpers breitet sich die Wechselwirkung in Form einer Druckwelle aus, dabei ändern sich die thermodynamischen Zustandsgrößen und die hydrodynamische Geschwindigkeit stetig. Kleine Störungen breiten sich mit Schallgeschwindigkeit aus, soweit sie lokal adiabatisch ablaufen, und die Wellen werden durch Dispersion geformt. Bei größeren Störungen treten abrupte, nichtadiabatische Übergänge, sogenannte Stoßwellen (engl. shock wave) auf, wobei die räumliche Skala der Veränderung über kinetische Prozesse (also thermodynamisches Nichtgleichgewicht) bestimmt wird. Für Einschläge von Asteroiden oder Kometen kann man die dabei entstehenden Stoßwellen als unendlich dünne Fronten behandeln, wenn keine unmittelbare mikroskopische Betrachtung der Veränderungen in Mineralien notwendig ist. Die Ausbreitung der Wechselwirkung bei Hochgeschwindigkeitseinschlägen erfolgt kausal: nichts kann schneller als die primäre Stoßwelle sein. Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Stoßwellen und Schallgeschwindigkeiten hängen von der thermodynamischen Zustandsgleichung ab. Das heißt, für alle auftretenden Temperaturen und Dichten muß eine vollständige thermodynamische Beschreibung der Materialien vorhanden sein. Die Forderung der Kausalität liefert eine wesentliche Einschränkung der Zustandsgleichung (welche von vielen für Simulation von Einschlägen populären Zustandsgleichungen nicht erfüllt wird): Das Quadrat der Schallgeschwindigkeit

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\epsilon + \frac{P}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial \epsilon} \right)_\rho \quad (2.1)$$

muß positiv bleiben, wenn P den Druck, ρ und ϵ die Dichte und die massenspezifische innere Energie darstellen. In der Thermodynamik ist die calorische Zustandsgleichung $P = P(T, \rho)$ gebräuchlicher, in solchem Falle benötigt man noch eine Beziehung der Art $\epsilon = \epsilon(T, \rho)$, und es folgt

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T + \frac{T}{\rho c_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2, \quad (2.2)$$

wobei $c_V = (\partial \epsilon / \partial T)_\rho$ die spezifische Wärme bei konstantem Volumen bedeutet. Die Kausalität ist eine Folge der thermodynamischen Stabilität. So lautet eine Stabilitätsbedingung $(\partial^2 \epsilon / \partial s^2)_\rho = 0$ (Landau und Lifshitz, 1983), wobei s die spezifische Entropie ist. Dies ist wegen des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik äquivalent zu $(\partial T / \partial s)_\rho > 0$, oder auch $c_V / T > 0$. Weiterhin existiert eine Stabilitätsbedingung für die spezifische freie Energie f , $(\partial^2 f / \partial v^2)_T > 0$, wobei $v = 1/\rho$ das spezifische Volumen (pro Masse) bedeutet (Landau und Lifshitz, 1983). Da $(\partial f / \partial v)_T = -P$ ist, folgt

$v^2(\partial(-P)/\partial v)_T = (\partial P/\partial \rho)_T > 0$, und damit sind beide Terme auf der rechten Seite in Gl.(2.2) positiv. Die Positivität des Quadrates der Schallgeschwindigkeit führt dazu, daß die hydrodynamischen Gleichungen ein hyperbolisches System bilden, d. h. die Eigenwerte der Jacobi-Matrix der partiellen Ableitungen der Flußfunktionen nach den hydrodynamischen Variablen sind reell und Störungen breiten sich mit endlicher Geschwindigkeit aus.

Eine weitere Anforderung, welche trivial erscheinen mag, lautet, daß beim Übergang zu kleinen Dichten und ausreichend hoher Ausgangstemperatur, oder äquivalent hoher spezifischer innerer Energie, der Grenzfall eines idealen Gases erreichbar ist.

Festkörper und Flüssigkeiten können einem gewissen negativen Druck widerstehen, ihr Gleichgewichtszustand entspricht einem Minimum der Bindungsenergie der Atome bzw. Moleküle bei gegebener Temperatur (atmosphärische Drücke sind nahezu vernachlässigbar in ihrer Wirkung auf den Gleichgewichtsabstand der Atome). Bei adiabatischer Kompression haben Festkörper und Flüssigkeiten die Eigenschaft, wieder in ihren Ausgangszustand zurückzukehren, dies ist nach dem Durchgang einer Schallwelle zu beobachten. Jedoch nach dem Durchgang einer Stoßwelle ist die Reaktion nicht adiabatisch, Teile der Energie werden in Wärme umgewandelt, und zur Umordnung von Bindungen verbraucht. Bei sehr hohen Energien der Stoßwelle können Phasenübergänge einsetzen, so verdampft z. B. ein Teil des Materials. Eine Besonderheit von Hochgeschwindigkeits-Einschlägen sind die Wechselwirkungen der Stoßwellen mit Oberflächen. Diese Oberflächen sind entweder Mediengrenzen zum jeweils anderen festen Körper, einem atmosphärischen Gas, oder Grenzen zum Vakuum. Es gibt zahlreiche experimentelle Methoden zur Messung der Reaktion solcher Grenzflächen. Ihr Bewegungszustand nach Reflexion oder Brechung der Stoßwelle ist stark von der Zustandsgleichung $P = P(\rho, \epsilon)$ abhängig. Experimentelle Methoden zur Bestimmung der Zustandsgleichung werten diese Information unter Einschlagsbedingungen aus, wo in statischen Experimenten keine vergleichbaren Drücke erreicht werden können; siehe z. B. [Eliezer \(1991\)](#) zur Beschreibung statischer und dynamischer Hochdruck-Experimente.

Während die Seismologie seit langer Zeit die Reaktionen der Geomaterialien beim Durchgang elastischer Wellen, also weitgehend adiabatische Vorgänge untersucht, wurden die Eigenschaften der Zustandsgleichungen im Gebiet starker Stoßwellen etwa seit dem Ende der 50iger Jahre erforscht. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse zu Zustandsgleichungen und Schallgeschwindigkeiten von Mineralien unter hohem Druck ermöglichten die Entwicklung realistischer Modelle des inneren Aufbaus der Planeten. Sie sind sogar ausreichend genau, um die mögliche chemische Komposition im Inneren von Planeten einzugrenzen (Übersichtsartikel von McQueen in [Eliezer \(1991\)](#)). Nur

aufgrund solcher Modelle konnte auch die chemische Zusammensetzung der größten Planetenmonde, wie der Galileischen Satelliten verstanden werden.

Theoretische quantenmechanische Zustandsgleichungen wurden bisher lediglich für einige Elemente und Verbindungen, vorwiegend Metalle und kondensierte Phasen von Wasserstoff und einigen Edelgasen berechnet. Sie gelten hauptsächlich jenseits der in kosmischen Einschlägen erreichbaren Drücke, wo das Thomas-Fermi Modell des Atoms eine gute Approximation darstellt. Geomaterialien sind sehr viel komplizierte Mischungen aus einzelnen Mineralien, die aus Körnern mit kristalliner oder amorpher Struktur aufgebaut sind. Daher werden zur Beschreibung des Verhaltens unter hohen Drücken, wie sie in Stoßwellen auftreten, ausschließlich phänomenologische Zustandsgleichungen verwendet. Es existieren auch empirische Regeln, welche gestatten, Zustandsgleichungen von Mischungen aus denen ihrer Bestandteile zu berechnen.

Die in hydrodynamischen Simulationen von Einschlagsprozessen für technologische und geophysikalische Anwendungen derzeit gebräuchlichen Zustandsgleichungen sind weitgehend Produkte der Forschung von Gruppen am Los Alamos National Laboratory der USA, so die analytische ANEOS (Thompson und Lauson, 1972) und die tabellierte SESAME-Datensammlung (SESAME '83 Report, 1983). ANEOS ist eine Sammlung von Unterprogrammen in FORTRAN, welche Druck und spezifische innerere Energie bei gegebener Dichte und Temperatur berechnen, auch Ableitungen zur Berechnung der Schallgeschwindigkeit werden ausgegeben. Allerdings ist der Aufwand für hydrodynamische Anwendungen beträchtlich, erfordern diese doch eine Inversion der Beziehung zwischen innerer Energie, Dichte und Temperatur, welche nicht in der ANEOS Bibliothek enthalten ist. Außerdem ist es bisher nicht gelungen, für die Gasphase wesentliche Prozesse wie Dissoziation und Rekombination von Molekülen einzubeziehen, sodaß keine realistische Verdampfung von Geomaterialien beschreibbar ist. Die tabellierte Datensammlung SESAME hat nur einfache (REAL*4) Genauigkeit, was für numerische Stabilität sehr einschränkend ist. Außerdem ist die Portabilität der Bibliothek unzureichend, da sie auf einem veraltetem FORTRAN Standard beruht, und ursprünglich Datenbänder als Eingabemedium verlangte. Diese Bibliothek wurde vom Author umgeschrieben, um sie mit modernen Rechnern und Compilern nutzen zu können. Anschließend konnten für ausgewählte Materialien Diagramme von verschiedenen Zustandsgrößen über zu erwartende Intervalle geplottet werden. Dabei zeigte sich, daß im Bereich unter Normaldichten gerade viele in der Geophysik interessante Materialien über weite Gebiete keine physikalische Schallgeschwindigkeit aufwiesen. Offensichtlich richtete sich die Anstrengung der Entwickler vor allem darauf, die experimentellen Daten zur Hugoniot-Kurve, ausgehend von Normaldichte, gut zu

reproduzieren. Das heißt, SESAME-Daten ergeben zwar realistische Drücke in der Stoßwelle, welche nach einem Hochgeschwindigkeitseinschlag entsteht, aber für geringe Dichten, wie sie nach adiabatischer Entspannung einer starken Stoßwelle oder bei der Wechselwirkung am Rand erreicht werden, ist die SESAME Datensammlung nur bedingt geeignet. In den Kommentaren zu den Datensätzen finden sich vereinzelt auch Hinweise zu den Grenzen der Anwendbarkeit. Eine einfache analytische Zustandsgleichung, welche keine langwierigen Berechnungen erfordert, wurde von J. H. Tillotson 1962 eingeführt (Melosh, 1989). Sie besitzt insbesondere einen vernünftigen Übergang zum idealen Gas, und erlaubt einen zweiparametrischen Fit experimentell gemessener Hugoniot-Kurven. Allerdings sind Gebiete von Phasemischungen unterhalb der kritischen Temperatur des gasförmigen Zustandes nicht gut approximiert; dort kann man keine thermodynamische Konsistenz erwarten. Die Tillotson-Zustandsgleichung kann in Abhängigkeit von ihren Parametern auch unphysikalische Bereiche (mit negativem Quadrat der Schallgeschwindigkeit) enthalten, d.h. es lassen sich Adiabaten konstruieren, mit Anfangszuständen, wie sie in einem Zustand nach dem Durchgang einer Stoßwelle existieren, und diese enden in einem Gebiet mit $c_s^2 < 0$ (sog. van der Waals loop). In dieser Hinsicht verhalten sich jedoch die nach Angaben ihrer Entwickler physikalisch „konsistenten“ ANEOS- und SESAME-Zustandsgleichungen kaum besser. Falls es zu Verdampfung beim Einschlag kommt, folgt auf die Phase mit hoher Dichte eine nahezu adiabatische Entspannung auf geringe Dichten, und es ist klar, daß für viele physikalische Fragestellungen realistische Annahmen zum Verlauf der Adiabate notwendig sind. So ist beispielsweise für die Größe und chemische Zusammensetzung von Kondensat-Tröpfchen der genaue Wert des Adiabaten-Exponenten wichtig. In ANEOS wird die unrealistische Annahme eines einatomigen Gases gemacht. Die SESAME-Daten besitzen für viele Materialien gar keine Maxwell-Konstruktion für die Koexistenzregion von Flüssigkeit und Gasphase. Da die Vollständigkeit der thermodynamischen Zustandsgleichung über den gesamten Bereich interessierender Dichten und Temperaturen auch in ANEOS (Thompson und Lauson, 1972) und SESAME nicht garantiert ist, stellen diese keine große Verbesserung, z. B. gegenüber der Tillotson-Gleichung dar. In dem Buch von Bushman (1993) werden semianalytische Zustandsgleichungen für hohe Drücke, hauptsächlich für Metalle, beschrieben. Die Methode ähnelt stark der von Thompson und Lauson (1972). Allerdings kann man dem Buch von Bushman (1993), nicht alle Parameter für die jeweilige analytische Zustandsgleichung entnehmen; es sind insbesondere keine Daten für Geomaterialien vorhanden. Diese Zustandsgleichungen verursachen ähnliche Probleme wie SESAME oder ANEOS bei Verwendung in einem numerischen Hydrodynamik-Programm, und deshalb wird darauf nicht weiter eingegangen.

Die Schwierigkeit für die Entwicklung moderner numerischer Methoden besteht darin, daß sie die Existenz einer reellen Schallgeschwindigkeit erfordern. Wegen der komplizierten Iteration in einer (auch nur genäherten) Godunov-Methode ist der Zeitaufwand bei der Berechnung der Zustandsgleichung ein Grund für den Verzicht auf komplizierte Zustandsgleichungen. Jedoch wird außerdem in dieser Arbeit ein „konventioneller“ hydrodynamischer Multi-Material-Algorithmus (SOVA) benutzt, der robuster auf die Zustandsgleichung reagiert, als eine Godunov-Methode.

2.2 Hydrodynamik und Kontinuumsmechanik

In diesem Abschnitt werden kurz die Besonderheiten der hydrodynamischen Behandlung von Hochgeschwindigkeitseinschlägen dargestellt. Da die Materialien sich nicht wie in der Dynamik idealer Gase beliebig durchdringen können, besitzt lokal jede Sorte eine eigene Volumenfraktion und eine Dichte. Das heißt, es findet keine Diffusion der „Flüssigkeiten“ untereinander statt. Weiterhin wird die Annahme gemacht, daß es nur eine einzige hydrodynamische Geschwindigkeit gibt, welche für alle Materialien gleich ist. Beide Postulate zusammen legen die Form der hydrodynamischen Gleichungen weitgehend fest. Eigentlich sind sie nur für kondensierte Materie korrekt, und in der Gasphase kann es zur Durchmischung kommen. Sind auch unterschiedliche Geschwindigkeiten der Materialsorten untereinander möglich, so spricht man von Multi-Fluid-Methoden, sonst von Multi-Material-Methoden der Hydrodynamik.

Die Materialgrenzen werden als unendlich dünne Übergangszonen idealisiert. Für solche Phänomene wie Krater-Entstehung interessieren Strömungsvorgänge auf Längenskalen, wo die Materialgrenzen makroskopisch sind, d. h. die zeitliche Änderung ihres Verlaufs ist eine der interessierenden Größen. Da die Masse jeder Materialsorte eine Erhaltungsgröße darstellt, erfüllt das Produkt aus Volumenfraktion (Volumenkonzentration) und Dichte jedes Materials eine separate Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial(f_m \rho_m)}{\partial t} + \frac{\partial(f_m \rho_m u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.3)$$

wobei ρ_m und f_m Dichte und Volumenfraktion des Materials m darstellen, und u_i sind die Komponenten der hydrodynamischen Geschwindigkeit, der Einfachheit halber wurden kartesische Koordinaten angenommen. Auf der rechten Seite von Gl.(2.3) würden zusätzliche Terme auftreten, wenn chemische Reaktionen stattfinden, dies wird hier ausgeschlossen. Die Volumenfrak-

tionen sind normiert,

$$\sum_m f_m = 1, \quad (2.4)$$

und die Gesamtdichte ist die gewichtete Summe

$$\rho := \sum_m f_m \rho_m. \quad (2.5)$$

Der Unterschied zu einer Mischung idealer Gase besteht im Auftreten der Volumenfraktionen in der letzten Gleichung. Aufgrund der Annahme einer einheitlichen hydrodynamischen Geschwindigkeit u_i ist die Impulserhaltung äquivalent zur gewöhnlichen Euler-Gleichung

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{s}_{i,k}}{\partial x_k} \right] = 0. \quad (2.6)$$

Hierbei bezeichnet P den Gesamtdruck und $\hat{s}_{i,k}$ ist der deviatorische (spurfreie) Spannungstensor, falls das Material Spannungen besitzt (die Einstein'sche Summenkonvention gilt, d. h. über paarweise auftretende Indizes ist zu summieren). Außerdem können noch äußere Kräfte wie Gravitation auftreten, dann steht ihre Kraftdichte pro Masseneinheit auf der rechten Seite der letzten Gleichung. Offensichtlich benötigt man einen Zusammenhang zwischen dem Gesamtdruck und den einzelnen Drücken. Für die weiteren Betrachtungen sind Annahmen über den Energieaustausch der Materialien notwendig. Wir werden sehen, daß dies auf das Gesetz für den Gesamtdruck führt. Für die nachfolgende Diskussion werden zunächst Spannungen im Material vernachlässigt, was in der Frühphase der Kraterentstehung zulässig ist.

Die für Einschlagsprozesse charakteristischen Längen- und Zeitskalen sind derart, daß kein Energieaustausch über Wärmeleitung berücksichtigt werden muß. Materialien können dann nur adiabatisch über Druckkräfte bzw. Spannungen miteinander wechselwirken. Der erste Hauptsatz der Thermodynamik lautet

$$T_m ds_m = d\epsilon_m - \frac{P_m}{\rho_m^2} d\rho_m, \quad (2.7)$$

hierbei bezeichnen ϵ_m und s_m die massenspezifische innere Energie und Entropie des Materials m , man beachte die unterschiedlichen Temperaturen T_m . Die obige Annahme des adiabatischen Energieaustauschs bedeutet $ds_m = 0$ entlang der Stromlinien. Die kontinuumsmechanische Form der obigen Gleichung lautet dann

$$\frac{\partial \epsilon_m}{\partial t} + u_i \frac{\partial \epsilon_m}{\partial x_i} = \frac{P_m}{\rho_m^2} \left[\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho_m}{\partial x_i} \right]. \quad (2.8)$$

Unter Ausnutzung der Kontinuitäts- und der Euler-Gleichung (2.3,2.6) erhält man daraus nach einigen algebraischen Umformungen

$$\frac{\partial f_m E_m}{\partial t} + \frac{\partial (f_m E_m u_i)}{\partial x_i} = -\frac{f_m \rho_m}{\rho} u_i \frac{\partial P}{\partial x_i} - P_m \left[\frac{\partial f_m}{\partial t} + \frac{\partial (f_m u_i)}{\partial x_i} \right], \quad (2.9)$$

wobei E_m die Größe

$$E_m := \rho_m \left(\frac{u_i^2}{2} + \epsilon_m \right), \quad (2.10)$$

ist. Für die totale Energiedichte

$$E = \sum_m f_m E_m, \quad (2.11)$$

muß eine Bilanzgleichung in konservativer Form entstehen:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial [(E + P) u_i]}{\partial x_i} = 0. \quad (2.12)$$

Da sich die Massenfraktionen $f_m \rho_m / \rho$ zu Eins summieren, wird also

$$\sum_m P_m \left[\frac{\partial f_m}{\partial t} + \frac{\partial (f_m u_i)}{\partial x_i} \right] = P \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (2.13)$$

gefordert. Offensichtlich genügen die bisherigen Beziehungen noch nicht, um alle Zustandsgrößen auszurechnen, es muß noch eine weitere Evolutionsgleichung für die Volumenfraktionen angegeben werden. Diese wird in der Form

$$\frac{\partial f_m}{\partial t} + \frac{\partial (f_m u_i)}{\partial x_i} = f_m \kappa_m \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (2.14)$$

angesetzt, κ_m ist hier zunächst ein phänomenologischer Parameter, siehe weiter unten. Hieraus folgt auch eine Normierung: $\sum_m f_m \kappa_m = 1$. Dann ergibt sich aus den Gln. (2.9,2.13) das folgende Additionsgesetz für den Gesamtdruck

$$P = \sum_m f_m \kappa_m P_m. \quad (2.15)$$

Es wird betont, daß die Forderung der Gesamt-Energieerhaltung zwingend zu diesem Additionsgesetz für die Drücke führt. Falls zusätzlich die Annahme des lokalen Druckgleichgewichts zwischen allen Materialien gemacht wird ($P_m = P_n$, $m \neq n$), ist die Energieerhaltung trivialerweise erfüllt. Die bisherige Herleitung war unabhängig von der Art der Funktionen κ_m . Die einfachste Annahme stellt die sogenannte Colour-Advektion dar, d. h. $\kappa_m = 1$ für alle m . Dann ist $P = \sum_m f_m P_m$ und wegen Gl.(2.14) gleichbedeutend mit

$$\frac{\partial f_m}{\partial t} + u_i \frac{\partial f_m}{\partial x_i} = 0. \quad (2.16)$$

Obwohl die Entwicklung eines hydrodynamischen Algorithmus auf dieser Basis eine einfache Multi-Material-Methode darstellt, ist sie nicht ganz befriedigend, da sie dazu führt, daß alle Materialvolumen sich gleichartig in einer vorgegebenen Strömung deformieren. Folglich ergeben sich bei einer numerischen Realisierung dieser Variante der Multi-Material-Methode unphysikalische Aufheizungen, wenn die Kompressibilitäten zweier benachbarter Materialien sehr stark differieren.

Es wurden deshalb alternative Formen der Funktionen κ_m vorgeschlagen, z.B. lauten sie in der sogenannten „mixture theory“ (Miller und Puckett, 1996)

$$\kappa_m = \frac{\rho c^2}{\rho_m c_m^2}, \quad (2.17)$$

wobei zwischen den Schallgeschwindigkeiten c_m der Einzelmaterialien und der Schallgeschwindigkeit c der Mischung der Zusammenhang

$$\frac{1}{\rho c^2} = \sum_m \frac{f_m}{\rho_m c_m^2}, \quad (2.18)$$

besteht, letzterer ist Konsequenz der Normierungsbedingung für κ_m . Die physikalische Basis der letzteren Formel ist die Vorstellung, daß alle beteiligten Materialien lokal mikroskopisch vermischt sind, im Gegensatz zur Annahme einer makroskopischen Materialgrenze. Außerdem ist sie nicht robust genug für die numerische Anwendung. Miller und Puckett (1996) leiten sie aus der zusätzlichen Bedingung des lokalen Druckgleichgewichts ab, was hier wiederholt werden soll. Die Evolutionsgleichung für P_m lautet:

$$\frac{\partial P_m}{\partial t} + u_i \frac{\partial P_m}{\partial x_i} = c_m^2 \left[\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho_m}{\partial x_i} \right], \quad (2.19)$$

eine gleichartige Beziehung gilt aber auch für den Gesamtdruck, falls man - und das ist entscheidend - die Annahme der Existenz einer Gesamtschallgeschwindigkeit c macht:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + u_i \frac{\partial P}{\partial x_i} = c^2 \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right]. \quad (2.20)$$

Daraus wird wegen der Gleichheit aller Drücke

$$c_m^2 \left[\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho_m}{\partial x_i} \right] = c^2 \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right] = -\rho c^2 \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (2.21)$$

Multiplikation mit f_m , und Benutzung der Kontinuitätsgleichung für Sorte m , Gl.(2.3) ergibt daraus die behauptete Beziehung

$$\frac{\partial f_m}{\partial t} + \frac{\partial(f_m u_i)}{\partial x_i} = f_m \frac{\rho c^2}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (2.22)$$

Summation über alle Sorten m auf beiden Seiten ergibt schließlich Gl.(2.18). Es muß aber kein Druckgleichgewicht angenommen werden, es reicht lediglich Benutzung von Gl.(2.18) und des verallgemeinerten Druckadditionsgesetzes, gemeinsam mit der letzten Gl. zur Berechnung der Evolution der Volumenfraktionen, auch dann ist die Gesamt-Energieerhaltung erfüllt.

2.3 Kontakt, Kompression und Excavation

Bei Hochgeschwindigkeitseinschlägen von Meteoriten kann man verschiedene Phasen des Ablaufs unterscheiden, in denen unterschiedliche physikalische Vorgänge entscheidend sind. Für genügend große Körper findet keine Fragmentation des Asteroiden oder Kometen beim Durchlaufen einer eventuell vorhandenen Atmosphäre statt. Diese Größenschwelle ist stark materialabhängig. Zum Beispiel wurde der in Arizona gelegene Barringer-Krater mit 1.2 km Durchmesser durch einen Eisenmeteoriten mit einem Durchmesser von nur etwa 30 Metern erzeugt (Melosh, 1989). Für gewöhnliche Chondriten, einem relativ verbreiteten Typ von Meteoriten, liegt die Schwelle für Zerstörung beim Durchgang der Erdatmosphäre wesentlich höher, d. h. bei einigen hundert Metern Durchmesser. In dieser Arbeit sollen keine Fragen zur Wechselwirkung kleiner Meteoriten mit der Atmosphäre untersucht werden, wenn auch der Durchgang durch eine Planetenatmosphäre nicht ganz vernachlässigt werden kann: es wird ein Strömungsfeld um den Einschlagskörper erzeugt.

Die Frühphase der Wechselwirkung von Einschlagskörper und Bodenmaterial bezeichnet man als Penetration. Diese dauert etwa bis zu dem Zeitpunkt, bis die im Projektil zurücklaufende Stoßwelle den hinteren Rand desselben erreicht (O'Keefe und Ahrens, 1993). Energietransport ist nur durch die Stoßwelle in Projektil und Boden möglich. Die Größe der im Boden durchlaufenen Region entspricht etwa den linearen Dimensionen des Projektils, je nach Materialzusammensetzung. Daher ist die gesamte Einschlagsenergie während der Frühphase in einer solchen Region konzentriert. Die Geometrie der Ausbreitung der Stoßwelle ist außerdem in guter Näherung eindimensional, bis auf Randzonen, wo es zum sogenannten „jetting“ kommen kann. Daher lassen sich die Werte der physikalischen Zustandsvariablen gut mittels eines eindimensionalen Riemann-Problems, der sog. planaren Impakt-

Approximation abschätzen. Das wird kurz erläutert. Die spezifische innere Energie beträgt nach dem Durchgang der Stoßwelle

$$\epsilon = \epsilon_0 + \frac{P + P_0}{2\rho_0} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right), \quad (2.23)$$

wobei alle Zustandsvariablen mit einem Index Null deren Anfangswerte markieren. Weiterhin ergibt sich die hydrodynamische Geschwindigkeit in der Stoßwelle aus (die hydrodynamische Geschwindigkeit im „Projektil“ ist in einem mit der Einschlags-Geschwindigkeit bewegten Bezugssystem zu verstehen)

$$u^2 = \frac{P - P_0}{\rho_0} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right), \quad (2.24)$$

und falls beide Körper aus dem gleichen Material bestehen, ist u die halbe Einschlagsgeschwindigkeit. Kombiniert man die beiden letzten Gleichungen, so folgt

$$\epsilon = \epsilon_0 + \frac{u^2}{2} + \frac{P_0}{\rho_0} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right), \quad (2.25)$$

und wegen des vernachlässigbaren Anfangswertes des Drucks P_0 ist die Erhöhung der inneren Energie etwa $u^2/2 = u_{imp}^2/8$. Bei gegebenem u wird die Gl.(2.24) dazu benutzt, die unbekannte Dichte ρ zu erhalten. Eine Newton-Methode benötigt lediglich die Ableitung ihrer rechten Seite

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left[\frac{P - P_0}{\rho_0} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) \right] = \frac{P - P_0}{\rho^2} + \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} + \frac{P_0}{\rho^2} \frac{\partial P}{\partial \epsilon} \right), \quad (2.26)$$

wobei noch Gl.(2.25) benutzt wurde. Nach jedem Iterationsschritt liefert die Newton-Methode eine neue Dichte ρ , und mit Hilfe von Gl.(2.25) wird auch die spezifische Energie modifiziert (falls $P_0 = 0$ gilt, ist dies nicht notwendig). Die folgenden Beispiele gelten für die ANEOS-Zustandsgleichung (Thompson und Lauson, 1972) und Dunit (chemische Formel Mg_2SiO_4 , Normaldichte $\rho_0 = 3.32 \text{ g cm}^{-3}$).

| u_{imp} km/s | ρ g cm ⁻³ | P GPa | ϵ kJ/g | T K |
|-------------------|------------------------------|------------|--------------------|--------|
| 5.0 | 4.760 | 68.623 | 3.489 | 718 |
| 7.5 | 5.290 | 125.377 | 7.396 | 2787 |
| 10.0 | 5.671 | 200.214 | 12.865 | 6199 |
| 12.5 | 6.049 | 287.474 | 19.896 | 7800 |
| 15.0 | 6.399 | 388.113 | 28.490 | 9934 |
| 17.5 | 6.686 | 504.946 | 38.647 | 15734 |
| 20.0 | 6.972 | 633.875 | 50.366 | 21588 |
| 22.5 | 7.251 | 775.069 | 63.647 | 27622 |
| 25.0 | 7.522 | 928.644 | 78.491 | 33999 |

Bei Geschwindigkeiten, wie sie beim Einschlag auf der Erde vorkommen, reicht die innere Energie nach Durchgang der Stoßwelle dafür aus, um Gesteine zu verdampfen, und der Druck erreicht Werte von einigen hundert GPa. Je nach Materialkombination und tatsächlichem Wert der Einschlagsgeschwindigkeit reicht die innere Energie dazu aus, bis zu einige Projektilmassen an Material zu verdampfen. Beim Zusammenstoß im Asteroidengürtel (~ 5 km/s Relativgeschwindigkeit) hingegen wird niemals vollständige Verdampfung erreicht, jedoch ein gewisser Teil an Gasen freigesetzt (die Schwelle für das Einsetzen der Verdampfung von Granit liegt bei etwa 3.5 kJ/g, siehe Melosh 1989).

Die Drücke liegen stets um mehrere Größenordnungen über der Scherfestigkeit (maximale Differenz zweier Eigenwerte des spurfreien, deviatorischen Spannungstensors), und Scherspannungen sind anfangs vernachlässigbar. Es reicht die (ideale) Hydrodynamik aus, und die Zustandsgleichung $P = P(\rho, \epsilon)$ spielt die entscheidende Rolle. Das Gas hat jedoch anfangs eine Dichte, wie sie bei der Kompression in der Stoßwelle erreicht wird, also erheblich über der Normaldichte der kondensierten Phase. Dieser Temperatur- und Druckbereich ist für die meisten Geomaterialien kaum experimentell zugänglich, sodaß genaue thermodynamische und chemische Modelle fehlen. Die hydrodynamische Geschwindigkeit im Projektil ist nach Durchgang der Stoßwelle derart gerichtet, daß zunächst im ruhenden System eine weitere Abwärtsbewegung resultiert. Allmählich wird das Projektil dabei flacher, und das Strömungsfeld im Boden nimmt einen mehr sphärisch-symmetrischen Charakter an (O'Keefe und Ahrens, 1975, 1976). Hat die Stoßwelle den hinteren Rand des Projektils erreicht, beginnt es sich aufgrund der von der Oberfläche zurückkommenden Verdünnungswelle auszudehnen. Danach entweicht es aus der im Boden entstandenen Höhlung im Aggregatzustand eines extrem dichten Gases, der obere Rand der Höhlung dehnt sich ebenfalls aus und strömt als dichtes Gas oder Flüssigkeit ab (Zel'dovich und

Raizer , 1967). Dabei bekommt das Strömungsfeld nach und nach eine kompliziertere Form. Die Stoßwelle löst sich vom Rand der Höhlung ab und breitet sich weiterhin halbkugelförmig aus. Außer den auf der Planetenoberfläche zurückbleibenden Kratern, falls diese erhalten bleiben, sind die einzigen geologischen Relikte nach einem großen Einschlag oft winzige Einschlüsse von Kondensaten aus der Gaswolke, welche sich großräumig verteilen. Eine genauere theoretische thermodynamische und chemische Modellierung ist wünschenswert, jedoch kaum versucht worden. Im Fall des Chicxulub-Kraters sind die Auswurfs-Materialien der Kreide-Tertiär-Grenze an siderophilen Elementen angereichert, und durch Isotopenanomalien läßt sich ein extraterrestrischer Ursprung nachweisen. Die physikalischen Anfangsbedingungen, wie Geschwindigkeit, innere Energie und Dichte werden für die Wolke des Auswurfsmaterials in der Frühphase des Einschlags bestimmt.

Die anschließende Phase wird in der Literatur als Aushub (engl.: excavation) bezeichnet, hier findet weiteres Wachstum des Kraters statt. Bedingt durch die Geometrie der Ausbreitung, verteilt sich die Energie der Stoßwelle im Boden auf größere Gebiete, und der Druck nimmt ab. Dabei kann die innere Energie noch immer ausreichend für Phasenübergänge wie Verdampfung oder Schmelzen sein. Es existieren einfache semianalytische (jedoch ungenaue) Modelle für die Ausbreitung der Wolke des Auswurfmaterials und für das Abklingen der Stoßwelle im Boden; diese Modelle entstanden vor der Entwicklung genügend ausgereifter Hydrodynamik-Programme. Für die Kraterentstehung und den Transport von festem Material am Kraterrand ist die Wechselwirkung der Stoßwelle mit der freien Oberfläche wichtig. Die Reflexion der Stoßwelle an der Oberfläche erzeugt eine Restgeschwindigkeit des Auswurfmaterials, welche etwa der doppelten hydrodynamischen Geschwindigkeit hinter der Stoßwelle entspricht (in linearer Näherung). Wenn die innere Energie nicht mehr für Phasenumwandlungen ausreicht, bestimmt die Festigkeit der Materialien gegenüber Spannungen wesentlich die Geschwindigkeit der Auswurfbewegung. Daher müssen diese Spannungen numerisch modelliert werden, ebenso wie Abweichungen vom linear-elastischen Verhalten, mit rheologischen Modellen, die weit über die ideale Hydrodynamik hinausgehen. Es ist offensichtlich technisch schwierig, diese zusätzlichen physikalischen Mechanismen in ein numerisches Programm zur Multi-Material Hydrodynamik zu integrieren. Jedoch ist von Vorteil, daß keine sehr großen Kompressionen mehr auftreten, und die Geschwindigkeiten zunehmend kleiner als die Schallgeschwindigkeit werden. Zu einem noch späteren Zeitpunkt handelt es sich vom hydrodynamischen Standpunkt aus um eine nahezu inkompressible Unterschallströmung mit Scherspannungen. In dieser Arbeit wird versucht, möglichst mit idealer numerischer Hydrodynamik auszukommen. Das Ziel ist dabei, den Strömungsverlauf, die Materialgrenzen und die Energiepartitionen

ausreichend genau zu berechnen, solange es sich um kompressible Hydrodynamik handelt, und Drücke und Spannungen wesentlich oberhalb der Festigkeitsgrenze von Geomaterialien liegen. Dies ist eine gute Näherung, wenn man z.B. Fragen nach dem Anteil des verdampften und flüssigen Materials stellt, sowie die Größe des „transienten“ Kraters abschätzen möchte.

2.4 Deformation von Gesteinen

Im linearen Bereich der Elastizitätstheorie ist ein festes Material durch das Hooke'sche Gesetz, einem Proportionalitätsgesetz zwischen Deformations- und Spannungstensor beschrieben, die Proportionalitätskonstanten lassen sich im (einfachsten) isotropen Fall auf den Youngschen Modul und den Schermodul reduzieren. Der lineare Bereich der Elastizitätstheorie wird jedoch bei Einschlagvorgängen verlassen, und die Reaktion des Materials ist nicht mehr adiabatisch. Es muß dann durch ein sogenanntes elasto-plastisches Modell beschrieben werden (d.h. eine nichtlineare Variante der Elastizitätstheorie), wodurch die elastischen „Konstanten“ selbst vom Spannungszustand und der Vorgeschichte abhängen. Das bedeutet z. B., daß nach Entspannung der Elastizitätsmodul und auch die Scherfestigkeit andere Werte haben, d. h. das Material ist entweder „weicher“ oder auch „härter“. Die Entwicklung des Spannungszustands außerhalb des linear-elastischen Bereichs ist singulär in dem Sinne, daß die möglichen Spannungszustände auf einer Fläche (yield surface) im Raum der Spannungstensor-Komponenten liegen, dies ist sehr schwer in einer numerischen Methode mit Advektion der Größen auf einem Gitter zu beschreiben, nur reine Lagrange- oder finite-Elementen-Methoden sind dazu in der Lage (diese haben aber andere Nachteile). Es gibt eine Vielzahl von elasto-plastischen Materialmodellen, und ihre korrekte Kopplung mit numerischer Hydrodynamik ist problematisch, wenn lange Zeiten und große Deformationen simuliert werden sollen. In dieser Arbeit wird deshalb davon abgesehen, elasto-plastische Spannungsmodelle mit Hydrodynamik zu koppeln. In Multi-Material-Problemen hätte zudem jedes Material einen gesonderten Spannungstensor (d. h. mehrere zusätzliche Zustandsvariablen), und die Wechselwirkung der Materialien untereinander ist äußerst kompliziert. Ein weiteres Problem ist die Tatsache, daß Reißentstehung und Auseinanderbrechen teils mikroskopisch und teils makroskopisch im Vergleich zur Gitterauflösung ablaufen. Für Geomaterialien ist die Scherfestigkeit eine Funktion des Drucks und der Temperatur, siehe z. B. [Wünnemann und Ivanov \(2003\)](#). Daher müßte im Rahmen der numerischen Hydrodynamik auch immer eine Temperatur berechnet werden können, was ganz besondere Anforderungen an die Zustandsgleichung stellt. Im Extremfall starker Deh-

nung kann das Material keinerlei Spannungen mehr aushalten und verhält sich wie Staub, aber auch bei starker Kompression kann es zum Verlust der elastischen „Steifigkeit“ der Deformations-Spannungs-Abhängigkeit kommen (d.h. der Schermodul wird Null). In solchem Fall spricht man von Zerstörung (engl.: damage). In der vorliegenden Arbeit soll nur die Eigenschaft fester Materialien, eine gewisse maximale Spannung auszuhalten, einbezogen werden (d.h. ein rein hydrodynamisches Spannungslimit). Dies wird innerhalb der Zustandsgleichung behandelt, jedoch wird auf Berechnung von deviatorischen Spannungen verzichtet. Das ist eine Näherung für die Anfangsphase des Einschlags, wo Drücke um mehrere Größenordnungen über der Scherfestigkeit liegen.

2.5 Modifikation und Kollaps von Kratern

Die in der beobachtete Form von Kratern ist nicht nur auf die kurzzeitigen Vorgänge während des Einschlags des Projektils zurückzuführen. Im Gravitationsfeld finden Bewegungen lange nach Durchgang der Stoßwelle statt. Diese Bewegungen dauern auf Planetenoberflächen im Prinzip über geologische Zeiträume an. Aber bereits unmittelbar nachdem der Krater seine maximale Größe erreicht hat, findet unter dem Einfluß der Gravitation eine Kollapsbewegung statt, wobei nahe dem Zentrum anfangs eine aufwärtsgerichtete Strömung auftritt, und an den Wänden beginnt die Höhlung zu kollabieren. Modifikation von Kratern findet auf Planeten erst ab einer bestimmten Mindestgröße statt, man bezeichnet Krater unterhalb dieser Größe als einfache (engl.: simple) Krater, im Kontrast zu komplexen Kratern. Die letzteren besitzen im Inneren oft konzentrische Strukturen, wie zentrale Wälle oder Gruben, Terrassen usw. Noch größere Krater weisen außerhalb ihres Randes u. U. noch Ringstrukturen auf, wie die sogenannten Multiring-Becken auf dem Mond ([Melosh, 1989](#)). Langzeitbewegungen und isostatische Ausgleichvorgänge können das Innere großer Krater in geologischen Zeiträumen wieder auffüllen, und den Kraterboden weitgehend abflachen. In dieser Arbeit werden keine Vorgänge über geologische Zeiten untersucht, und mit den hier entwickelten numerischen Methoden (d.h. kompressibler Hydrodynamik) ist eine Untersuchung des Kollapses von Kratern kaum möglich. Ein numerisches Modell zum Krater-Kollaps wurde zwar auf Grundlage des modifizierten Programms SALE von K. Wünnemann und B. A. Ivanov entwickelt ([Wünnemann und Ivanov, 2003](#)), es genügt jedoch nicht modernen Anforderungen an numerische Hydrodynamik (Impulsadvektion problematisch, Energieerhaltung nicht garantiert). Der Autor hat selbst mit SALE erste Erfahrungen gesammelt ([Ivanov, de Niem, Neukum, 1997](#)) und eine

Multi-Material-Erweiterung versucht, diese jedoch als unvollkommen empfunden. Die Zeitskalen für die volle Ausbildung des transienten Kraters und den gravitativen Kollaps sind für komplexe Krater auf erdähnlichen Planeten vergleichbar. Deshalb waren z. B. [Wünnemann und Ivanov \(2003\)](#) in der Lage, bis zum Kollaps von Mondkratern zu rechnen. Auf einem kleinen Asteroiden oder Kometen sind wegen der geringen Gravitation beide Zeiten sehr unterschiedlich. So beträgt z. B. für den Einschlag eines „Projektiles“, welches einen Krater von ~ 100 m Durchmesser auf einem Asteroiden erzeugt, die Zeitskala des transienten Kraters nur einige Millisekunden, während die gravitative Frei-Fall-Zeit für die entsprechende Kratertiefe einige zehn bis hundert Sekunden ergibt (bei entsprechend niedriger Gravitationsbeschleunigung). Daher ist es kaum möglich, hier bis zum Ende der Bewegung unter dem Einfluß des Schwerfeldes zu rechnen. Auch ist der auflösende Geschwindigkeitsbereich extrem: von einigen Kilometern pro Sekunde (Einschlagsgeschwindigkeit) bis zu einigen (zehn) Zentimetern pro Sekunde (gravitative Fluchtgeschwindigkeit).

2.6 Skalierung und Ähnlichkeit

Eine immer wiederkehrende Frage ist die folgende: Ein Hochgeschwindigkeitseinschlag wird mit absolut gleichen Materialien und Formen der beteiligten Körper wiederholt, lediglich die räumlichen Dimensionen werden verändert. Wie verhalten sich die Größen der „transienten“ Krater ? Erweiterungen der Fragestellung lauteten: Welche Dimension hat der Krater bei veränderter Einschlagsgeschwindigkeit ? Welche Größe hatte das „Projektile“ bei gegebener Geschwindigkeit und bekannter Kratergröße ? Die wesentlichen physikalischen Parameter diese Problems sind:

- Einschlagsgeschwindigkeit v_i
- Projektilmasse m
- Dichte des Projektils ρ_p
- Dichte des Bodenmaterials ρ_t
- Bruchfestigkeit des Bodenmaterials S
- Gravitationsbeschleunigung g

Diese sechs Parameter bestimmen den Anfangszustand (bei kleinen Dimensionen des Kraters gegenüber dem Planetenradius) und parametrisieren die

äußeren Kräfte (Gravitation) sowie das Materialmodell (Bruchfestigkeit). Dabei ist die Definition von S etwas unklar, weil die makroskopische Bruchfestigkeit von Geomaterialien von ihrer Größe abhängt. Die gesuchte Kratergröße D ist also eine allgemeine Funktion von sechs Parametern

$$D = F(v_i, m, \rho_p, \rho_t, S, g). \quad (2.27)$$

Es handelt sich allerdings nur dann immer um die selbe Funktion, wenn man eine universelle Zustandsgleichung für alle Materialien annimmt. Es ist möglich, aus den sechs dimensionsbehafteten Parametern des physikalischen Problems sowie der Kratergröße genau vier unabhängige dimensionslose Kombinationen zu bilden. Das folgt daraus, daß die sechs Parameter und der Kraterdurchmesser zusammen nur drei unabhängige physikalische Einheiten besitzen: Masse, Zeit und Länge. Eine derartige dimensionslose Kombination für Einschlagsvorgänge ist die Froude-Zahl

$$Fr = \frac{v_i^2}{gD_p} =: 1/\pi_2, \quad (2.28)$$

mit D_p als Projektilgröße. Eine weitere dimensionslose Zahl ist

$$\pi_3 = \frac{S}{\rho_p v_i^2}. \quad (2.29)$$

Schließlich hat man noch die dimensionslosen Parameterkombinationen

$$\pi_D := D \left(\frac{\rho_t}{m} \right)^{1/3}, \quad (2.30)$$

sowie $\pi_4 := \rho_t/\rho_p$. Die Funktion aus Gl.(2.27) hat nun die Form des folgenden Ähnlichkeitsgesetzes

$$\pi_D = F(\pi_2, \pi_3, \pi_4). \quad (2.31)$$

Es wird von ihren Entdeckern Schmidt und Housen als „pi-group scaling“ bezeichnet. Zwei Einschläge sind dann ähnlich, wenn sie die selben Werte für (π_2, π_3, π_4) besitzen. Die Ursache der Ähnlichkeit ist die Eigenschaft des betreffenden hydrodynamischen Gleichungssystems mit Materialmodell, nach Transformation auf eine dimensionslose Form lediglich die drei auf der rechten Seite der Gleichung (2.31) auftauchenden Parameter (π_2, π_3, π_4) zu enthalten. Falls der Krater so groß wird, daß die Gravitation dominiert, ist das Argument π_3 zu vernachlässigen. Die Größe π_4 ist irrelevant, wenn immer die gleiche Materialkombination verwendet wird. Aus experimentellen Daten läßt sich schließen, daß dann der Zusammenhang

$$\pi_D = F(\pi_2), \quad (2.32)$$

über viele Größenordnungen einem Potenzgesetz folgt (Melosh, 1989): $\pi_D \propto \pi_2^\alpha$. Im anderen Grenzfall, wo die Gravitation vernachlässigbar ist, handelt es sich ebenfalls um ein Potenzgesetz. Allerdings sind die Skalierungsformeln nicht universell: Proportionalitätsfaktor und Exponent variieren von Material zu Material. Weil die makroskopische Bruchfestigkeit S großer Körper schwer theoretisch vorhersagbar ist, haben diese Potenzgesetze heftige Diskussionen in der Frage nach der Schwellenenergie zur Zerstörung von Asteroiden ausgelöst. Im Zwischengebiet, wo sowohl Gravitation als auch Bruchmechanik das Kraterwachstum beeinflussen, ist eine Interpolation zwischen beiden Potenzgesetzen üblich (Housen und Holsapple, 1990).

Für den asymptotischen Strömungsverlauf existiert eine gewisse Analogie zwischen einem Einschlag und einer konzentrierten Explosion, mit dem Unterschied, daß der Gesamtimpuls bei einer Explosion Null ist. Aus der Zeit der unterirdischen Kernwaffentests stammen auch Skalierungsgesetze, die sich auf Krater anwenden lassen. Diese sind allerdings nicht so universell wie das „pi-group scaling“, da beim Vergleich mit einer unterirdischen Explosion eine „äquivalente Tiefe“ DOB (engl.: depth of burial) angegeben werden muß, in der die Energie des Einschlags freigesetzt wird (Roddy u. a., 1977). Einerseits wird bei einem Hochgeschwindigkeitseinschlag nicht sämtliche Energie so konzentriert freigesetzt, wie bei der nahezu punktförmigen Detonation einer Atombombe, und andererseits ist die Kratergröße von solchen Atomtests, die zu Kratern führten, eine empfindliche und nichtlineare Funktion der Tiefe, DOB. Der Vergleich mit Einschlagskratern von Asteroiden oder Kometen ist nur bedingt nützlich.

Jedoch können bestimmte Daten, wie z.B. das Gesetz des räumlichen Abklingens der Geschwindigkeit hinter einer Stoßwelle in Gestein von Nutzen sein. Betrachten wir zunächst ausreichend kleine Krater, wo die Gravitation noch nicht dominiert. Nehmen wir an, daß die hydrodynamische Geschwindigkeit hinter der Stoßwelle wie

$$u_p = \frac{1}{2} v_i \left(\frac{R_p}{r} \right)^{3/2+\epsilon}, \quad (r \geq R_p), \quad (2.33)$$

abklingt, hierbei ist R_p der Projektilradius und r die radiale Koordinate. Ein Exponent von $3/2$, d.h. $\epsilon = 0$ entspricht Energieerhaltung innerhalb des von der Stoßwelle umschlossenen Gebiets, so gilt dieser Exponent z.B. für die Sedov-Taylor-Lösung einer starken Gasexplosion. Die hydrodynamische Geschwindigkeit in einer elastischen Welle, welche eine Spannungsamplitude in der Größenordnung der Bruchfestigkeit S erreicht, ist $(S/\rho_t)^{1/2}$. Wo die Geschwindigkeit u_p auf diesen Wert abfällt, dort ist in etwa die Kratergröße

erreicht, also gilt

$$\frac{S}{\rho_t} \sim \frac{1}{4} v_i^2 \left(\frac{D_p}{D} \right)^{3+2\epsilon}, \quad (2.34)$$

bzw.

$$\frac{D}{D_p} \sim \left(\frac{\rho_t}{\rho_p} \frac{1}{4} \frac{\rho_p v_i^2}{S} \right)^{1/(3+2\epsilon)} = \left(\frac{1}{4} \frac{\pi_4}{\pi_3} \right)^{1/(3+2\epsilon)}. \quad (2.35)$$

Das Verhältnis D/D_p auf der linken Seite läßt sich durch π_D und π_4 ausdrücken. Diese einfache Betrachtung liefert bereits eine Erklärung des Potenzgesetzes. Der Exponent entspricht ebenfalls gut dem „Experiment“, bei kleiner Dämpfung ϵ der Stoßwelle gegenüber einer mit Energieerhaltung $\epsilon = 0.15 - 0.2$. Die kinetische Energie eines kugelförmigen Projektils ist

$$E_p = \frac{\pi}{12} \rho_p D_p^3 v_i^2, \quad (2.36)$$

das ergibt

$$D \sim D_p^{2\epsilon/(3+2\epsilon)} \left(\frac{\rho_t}{\rho_p} \frac{3}{\pi} \frac{E_p}{S} \right)^{1/(3+2\epsilon)}. \quad (2.37)$$

Die Kratergröße skaliert also nicht nur mit der Energie E_p , sondern zusätzlich schwach mit dem Projektildurchmesser. Außerdem skaliert sie mit einem Exponenten der kinetischen Energie E_p kleiner als $1/3$. Wenn man allerdings v_i in Gl.(2.35) konstant hält, so skaliert D exakt mit der $1/3$ ten Potenz der kinetischen Energie des Projektils (die dann nur noch von D_p abhängt).

Nun betrachte man den Fall, wo die Arbeit im Gravitationsfeld den entscheidenden Beitrag zum Aushub eines Kraters leistet. Die kinetische Energie hinter der Stoßwelle in einem Abstand von $D/2$ vom Zentrum muß ausreichend sein, um im Gravitationsfeld etwa einen Höhenunterschied der Größenordnung des Kraterradius zu überwinden

$$\frac{1}{2} u_p^2 \sim g \frac{D}{2}, \quad (2.38)$$

dies ergibt

$$\frac{D}{D_p} \sim \left(\frac{v_i^2}{4gD_p} \right)^{1/(4+2\epsilon)} = \left(\frac{1}{4\pi_2} \right)^{1/(4+2\epsilon)}. \quad (2.39)$$

Das bestätigt das empirische Gesetz, wonach im gravitationsdominierten Gebiet die rechte Seite mit einer Potenz der Froude-Zahl skaliert. Aus Gründen der logischen Einfachheit muß man auch fordern, daß die konstanten Vorfaktoren der Potenzgesetze der Skalierung, Gln.(2.35, 2.39), wenn man sie mit Hilfe der π_i beschreibt, von der Größenordnung Eins sind, sonst würde wahrscheinlich ein wesentlicher physikalischer Prozeß nicht beachtet.

Kapitel 3

Die Gaswolke: Dynamik und Kondensation

3.1 Einleitende Betrachtungen

Bei den hohen Einschlagsgeschwindigkeiten von Asteroiden und Kometen auf Planetenoberflächen wird der größte Teil der Masse des „Projektils“ und ein mehrfaches dieser Masse an Bodenmaterial verdampft. In numerischen Simulationen, siehe z.B. [Pierazzo u. a. \(1998\)](#), hat man allerdings eine Zustandsgleichung für thermodynamisches Gleichgewicht ([Thompson und Lauson , 1972](#)) benutzt, welche in der flüssig-gasförmigen Koexistenzregion auf der Maxwell-Konstruktion beruht. Dadurch wird Kondensation nur im Grenzfall des Gleichgewichts behandelt.

Für Fragen nach der Menge an kondensiertem Material, der Kondensat-Größenverteilung und den thermodynamischen Bedingungen während der Bildung von Tropfen der kondensierten Phase ist ein anderer Zugang notwendig. Der Anteil kondensierten Materials mit Korngrößen von einigen bis einigen hundert Mikrometern ist ein wesentlicher Parameter, um das Auftreten der Auslöschung eines Großteils der Arten zu verstehen ([Alvarez u. a. , 1980](#); [Toon u. a. , 1997](#)), jedoch wird die Hypothese des Aussetzens der Photosynthese wegen der Staubkonzentration in der Hochatmosphäre neuerdings bezweifelt, siehe z. B. [Pope \(2002\)](#). Globale Waldbrände, welche Ascheteilchen produzierten, werden ebenso aufgetreten sein ([Kring und Durda , 2001](#)).

Die Kreide-Tertiär Grenzschrift (K/T boundary) wurde aufgrund des erhöhten Anteils von Iridium und anderer Elemente der Platingruppe mit einem kosmischen Einschlag assoziiert ([Alvarez u. a. , 1980](#)), lange bevor der zugehörige Einschlagskrater Chicxulub ([Hildebrand u. a. , 1991](#)) entdeckt war. Siderophile Elemente sind in den Hochtemperatur-Kondensaten vor-

handen, die sich aus den Verdampfungsprodukten bilden (Kyte und Bohor , 1995). Es gibt noch weitere, mit einem großen Einschlag assoziierte Grenzschichten, so die Perm-Trias Grenze (P/T boundary), und erst in jüngster Zeit wurde mit der Bedout-Struktur vor der australischen Küste möglicherweise der Einschlagskrater gefunden. Auch hier sind vor allem Kondensate Relikte mit einer großräumigen Verbreitung. Ihre Verbreitung ist erklärlich, weil anfangs die größten Geschwindigkeiten in der expandierenden Gaswolke erreicht werden (nahe und über der gravitativen Fluchtgeschwindigkeit) und die Kondensate als kleine Tropfen entstehen, die effektiv von der Gasströmung mitgenommen werden können. Dagegen müssen größere flüssige oder feste Bestandteile des Auswurfsmaterials nach dem Start am Boden gegen die Reibung im Gas der darüberliegenden Schichten ankommen, um weite Distanzen zu überwinden. Es existieren wenige Arbeiten zur Kinetik der Kondensation in Einschlags-erzeugten Gaswolken (Raizer , 1959; O’Keefe und Ahrens , 1982), jedoch wird dort die Hydrodynamik mit stark vereinfachten analytischen Lösungen beschrieben, und die kinetische Theorie der Kondensation nur in einfachster Näherung behandelt.

Ein weiterentwickeltes Modell mit ebenfalls semi-analytischer Hydrodynamik, jedoch numerischer Lösung der Gleichungen der kinetischen Theorie (de Niem , 2002a) wirft etwas Licht auf die Entwicklung der Kondensat-Größenverteilung. Es wird im folgenden Abschnitt beschrieben. Ein Ergebnis dieses Modells ist, daß eine multi-modale (hierarchische) Größenverteilung entsteht, wobei die Abweichung vom thermodynamischen Gleichgewicht einen intermittierenden Charakter hat. Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht, d.h. Übersättigung oder Unterkühlung des Dampfes, steuern die spontane Keimbildung, dabei kann sich die Entstehung von Kondensationskeimen mehrfach wiederholen. Bisherige numerische Simulationen der Entstehung des Chicxulub-Kraters haben die ANEOS Zustandsgleichung (Thompson und Lauson , 1972) für Dunit, Mg_2SiO_4 , zur Beschreibung des einschlagenden Asteroiden und auch des Erdmantels verwendet. Darum wird hier zunächst die Kondensation mit einer van der Waals Zustandsgleichung für Mg_2SiO_4 behandelt, allerdings ohne Dissoziationsgleichgewicht in der Gasphase. Danach wird untersucht, welche Konsequenzen die Dissoziation von verdampftem Mg_2SiO_4 für die Zustandsgleichung und das Problem der Kondensation hat. Die so gefundenen Temperaturen und Dichten, bei denen die Kondensation beginnt, lassen nur flüssige Phasen zu und erlauben keine direkte Entstehung von Mineralien wie Forsterit aus der Gasphase. Daher muß die Chemie der Kondensation der entstehenden Flüssigkeiten gesondert behandelt werden, mit Hilfe eines sehr allgemeinen Gleichgewichts aus vielen elementaren und molekularen Verbindungen in der Gasphase und einer ebenso allgemeinen chemischen Zusammensetzung des Kondensats. Um in

der Lage zu sein, damit echte hydrodynamische Simulationen, und nicht nur chemische Gleichgewichtsrechnungen durchzuführen, wurde ein hinreichend schneller numerischer Algorithmus für eine Zustandsgleichung aus 26 elementaren und 183 molekularen Substanzen (in der Gasphase) entwickelt.

3.2 Phasenübergänge im Feuerball

3.2.1 Entwicklung der Gaswolke: analytische Näherung

Eine semi-analytische hydrodynamische Lösung für die Entwicklung der beim Einschlags erzeugten Dampf- und Gaswolke als van der Waals Gas ist nützlich für Abschätzungen zur Dynamik (de Niem, 2002a). Zwar kann so nicht die Wechselwirkung mit der Stoßwelle in der Atmosphäre erfaßt werden, jedoch dient diese Lösung als „Hintergrund“ für die Beschreibung der Kondensation mit Hilfe der kinetischen Theorie. Diese Lösung ist gültig, wenn sich die Materie in der Gasphase oder bei Temperaturen über dem kritischen Punkt befindet. Wird das Gebiet der Zweiphasen-Koexistenz zwischen Dampf und Flüssigkeit erreicht, und bleibt die Kondensat-Massenfraktion noch gering, so stellt diese Lösung noch eine gute Approximation für die Hydrodynamik dar. Die Annahme von sphärischer Symmetrie und ein Ansatz der Radialgeschwindigkeit als

$$v_r = \dot{R} \frac{r}{R}, \quad (3.1)$$

und der Massendichte in der Form

$$\rho = \frac{\mu(\eta)}{R^3}, \quad (3.2)$$

wobei $R(t)$ eine zeitabhängige Funktion und $\eta := r/R(t)$ eine dimensionlose Variable (Ähnlichkeitsvariable) sind, legen die Lösung nahezu fest, lediglich die Funktion $\mu(\eta)$ ist durch die Kontinuitätsgleichung unbestimmt (Zel'dovich und Raizer, 1967). Eine in r lineare Geschwindigkeit Gl.(3.1) wird in guter Näherung auch bei numerischen Simulationen erhalten, welche mit einem dichten homogenen Anfangszustand innerhalb einer Halbkugel beginnen, abgesehen von einer Stoßwelle, welche am Außenrand der Gaswolke in der umgebenden Atmosphäre entsteht, siehe Abbildungen 3.16 in diesem Kapitel und 4.14 im folgenden. Hier wird μ als konstant angenommen, sodaß eine Halbkugel vom Radius $R(t)$ die Masse $M = (2\pi/3)\mu$ besitzt. Der Druck wird aus der Zustandsgleichung

$$P = \frac{R_g T \rho}{1 - b\rho} - a\rho^2, \quad (3.3)$$

bestimmt, wobei R_g die Gaskonstante ist, und sich die van der Waals Parameter a und b mit Hilfe von Druck und Temperatur am kritischen Punkt, P_c und T_c , ergeben

$$P_c = \frac{a}{27b^2}, \quad T_c = \frac{8a}{27bR_g}, \quad (3.4)$$

siehe z. B. [Landau und Lifshitz \(1983\)](#). Ein van der Waals Gas ist besser als ein ideales Gas zur Beschreibung früher und sehr dichter Zustände der Gaswolke geeignet, wenn es auch gegenüber einer exakteren Zustandsgleichung eine Vernachlässigung darstellt. Bei konstanter spezifischer Wärme c_V des Gases ist die innere Energie $\epsilon = c_V T - a\rho$. Der erste Hauptsatz der Thermodynamik

$$Tds = d\epsilon - \frac{P}{\rho^2}d\rho, \quad (3.5)$$

liefert dann die folgende Gleichung für die spezifische Entropie s

$$\ln s = (p + a\rho^2)b^\gamma \left(\frac{1}{b\rho} - 1 \right)^\gamma, \quad (3.6)$$

bis auf eine additive Konstante (die aber noch eine Funktion von t und η sein kann) und γ ist durch

$$\gamma = 1 + \frac{R_g}{c_V}, \quad (3.7)$$

gegeben. Die Energie-Gleichung ist äquivalent zur Erhaltung der spezifischen Entropie $\partial s(t, \eta)/\partial t = 0$, bei einer linearen radialen Abhängigkeit der Geschwindigkeit, d. h. s ist zeitunabhängig. Damit ist die Integrationskonstante eine unbestimmte Funktion von η und

$$P = \frac{A(\eta)}{b^\gamma} \left(\frac{1}{b\rho} - 1 \right)^{-\gamma} - a\rho^2. \quad (3.8)$$

Die Euler-Gleichung liefert nach Einsetzen von v_r und einigen algebraischen Umformungen

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = -\frac{1}{\rho R \eta} \frac{\partial P}{\partial \eta}, \quad (3.9)$$

Setzt man hier den Druck nach Gl.(3.8) ein, so bestimmt das die unbekanntete Funktion $A(\eta) = C(1 - \eta^2)$, mit einer Konstanten C . Der Druck an der äußeren Grenze ist gleich $-a\rho^2$, und die Temperatur ist dort Null. Die Randbedingung ist nicht realistisch, in Wirklichkeit tritt dort eine Kontaktzone

zur umgebenden Atmosphäre auf, und diese besitzt eine geringe Temperatur. Gl.(3.9) besitzt ein erstes Integral, nach Einsetzen des Drucks aus Gl.(3.8):

$$\frac{\dot{R}^2}{2} = -\frac{2C}{3(\gamma-1)b^{\gamma-1}} \left(\frac{R^3}{b\mu} - 1 \right)^{-(\gamma-1)} + \frac{1}{2}v_\infty^2. \quad (3.10)$$

Der erste Term auf der rechten Seite verschwindet bei $\rho = 0$, somit ist v_∞ die asymptotische Geschwindigkeit an der Grenze $\eta = 1$. Für nichtverschwindende rechte Seite von Gl.(3.10) zum Anfangszeitpunkt ergibt sich

$$1 - \frac{4(1-b\rho_0)(P_0+a\rho_0^2)}{3(\gamma-1)\rho_0v_\infty^2} \geq 0, \quad (3.11)$$

wobei alle Größen mit Indizes 0 Werte im Zentrum der Wolke und zu Beginn (t_0) bedeuten. Das liefert die maximale Temperatur im Zentrum

$$R_gT_0 \leq R_gT_{0,max} = (\gamma-1)(\epsilon_0+a\rho_0) = \frac{3(\gamma-1)}{4}v_\infty^2. \quad (3.12)$$

Weiterhin gilt zu jedem Zeitpunkt die folgende Identität für die Gesamtenergie E innerhalb des Radius R

$$\frac{E}{M} + a\rho = \frac{3}{10}v_\infty^2, \quad (3.13)$$

falls die Wolke anfangs keine radiale Geschwindigkeit hat. Eine Herleitung ist etwas langwierig und verläuft unter Benutzung von Gl.(3.10). Weil die Dichte ρ mit der Zeit abnimmt, ergibt sich ein asymptotischer Wert von $E/M \rightarrow (3/10)v_\infty^2$.

Das vorliegende Modell ist dazu gedacht, die Verdampfung des „Projektils“ zu untersuchen, und nicht detailliert genug, um Gasentwicklung aus dem Bodenmaterial zu erfassen. Um ein konkretes Beispiel zu haben, werden Materialparameter verwendet, wie sie für den Chicxulub-Einschlag gelten. Es existieren umfangreiche Simulationen zur Kraterentstehung und Verdampfung bei realistischer Geometrie (Pierazzo u. a. , 1998), welche einen Asteroiden mit 10 km Durchmesser aus Dunit annahmen, beschrieben mit Hilfe der ANEOS-Zustandsgleichung (Thompson und Lauson , 1972). Chemisch ist Dunit Mg_2SiO_4 , und die ANEOS-Zustandsgleichung (mit den veröffentlichten Parametern) liefert einen kritischen Druck von $\sim 6.5\text{GPa}$ sowie eine kritische Temperatur von 13070K, was $a = 620.2m^5kg^{-1}s^{-2}$ und $b = 5.95 \times 10^{-5}m^3kg^{-1}$ für die van der Waals Parameter ergibt. Wegen der wechselnden molekularen Zusammensetzung der Gasphase ist die Bestimmung von γ und der mittleren Molekülmasse nicht ganz einfach, in Wirklichkeit ist γ auch nicht konstant. Abbildung 3.1 zeigt die temperaturabhängige Zu-

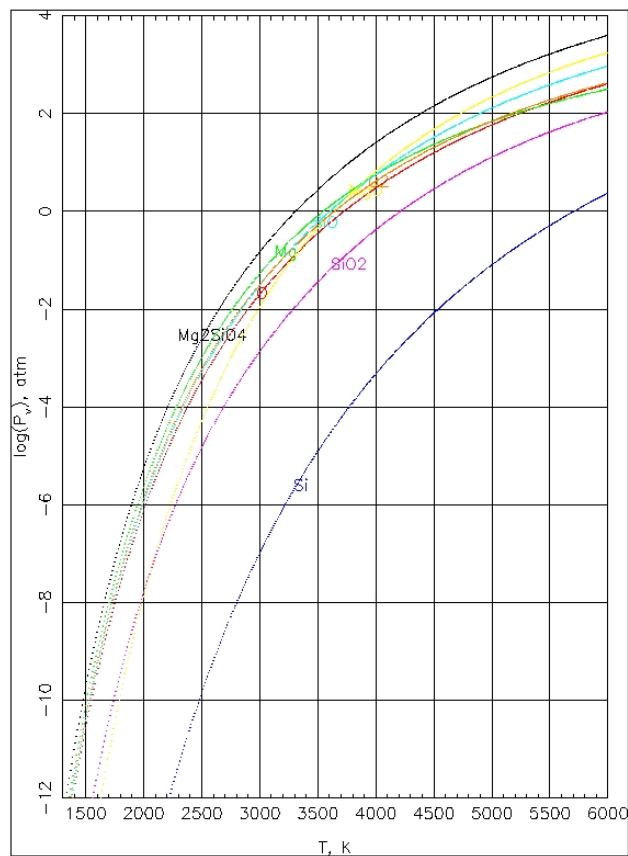


Abbildung 3.1: Partialdrücke der Bestandteile der Gasphase bei Verdampfung von Forsterit: O (rot), Mg (grün), Si (blau), SiO (türkis), SiO_2 (violett), MgO (gelb), O_2 (braun). Obere Kurve: Sättigungsdruck von Forsterit Mg_2SiO_4 (schwarz).

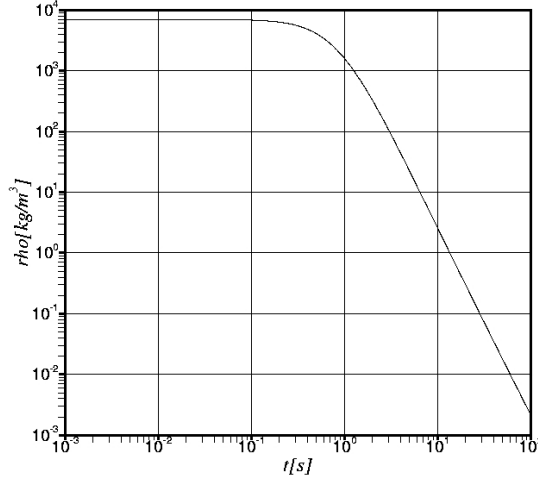


Abbildung 3.2: Entwicklung der Dichte, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung.

sammensetzung der Gasphase von Mg_2SiO_4 (für den gesättigten Dampf). Die Hauptbestandteile oberhalb von 4000K sind Mg , MgO , O_2 , O , SiO ; bis auf einen gewissen Anteil von atomarem Sauerstoff und Magnesium zweiatomige Moleküle. Die spezifische Wärme von zweiatomigen Gasen ist $7/2R_g$ bzw. $29.1kJmol^{-1}K^{-1}$, im Limes hoher Temperaturen (kT groß im Vergleich zu Energiedifferenz von Schwingungsniveaus), dem entspricht ein Wert von $\gamma = 1.4$. Melosh (1989) empfiehlt den etwas niedrigeren empirischen Wert von $c_V = 27kJmol^{-1}K$, daraus folgt $\gamma \sim 1.308$. Es wird eine mittlere molare Masse des Gases von 35.173×10^{-3} kg verwendet, dies ist ein Kompromiß aufgrund der variablen chemischen Zusammensetzung und entspricht 1/4 der molaren Masse von Mg_2SiO_4 . In Wirklichkeit sind weder c_V , γ noch die molare Masse constant, wenn Dissoziation einbezogen wird, siehe Abschnitt 3.3. Die Anfangswerte für die Lösung sind Melosh und Pierazzo (1997) entnommen: $\epsilon_0 = 3.71 \times 10^7$ J kg^{-3} und $c_s = 3.3$ km s^{-1} für die Schallgeschwindigkeit. Die obige Schallgeschwindigkeit wird hier mit dem folgenden Mittelwert identifiziert

$$\overline{c_s^2(t_0)} = \frac{2\pi}{M} \int_0^{R_0} r^2 (\rho c_s^2)(t_0) dr, \quad (3.14)$$

und nach einer etwas längeren Rechnung erhält man

$$\overline{c_s^2(t_0)} = \frac{2}{5} \frac{\gamma(\gamma - 1)(\epsilon_0 + a\rho_0)}{(1 - b\rho_0)^2} - 2a\rho_0. \quad (3.15)$$

Dies ergibt einen Anfangswert der Dichte von $\rho_0 = 6990.98 \text{ kg m}^{-3}$, der höher als die Normaldichte von Dunit (3320 kg m^{-3}) liegt, sodaß der Anfangsradius $R(t_0)$ entsprechend skaliert wurde, um die Masse eines Asteroiden von 10 km Durchmesser zu erhalten. Die Abbildung 3.2, zeigt die Entwicklung der Dichte, Abb. 3.3 die des Drucks, Abb. 3.4 der Temperatur und Dichte, sowie Abb. 3.5 die der Geschwindigkeit, wobei die Euler-Gleichung, Gl.(3.9) numerisch integriert wurde. Für die verwendeten Werte hat der Dampf die Grenze zum Gebiet der Zweiphasenmischung nach 10.12 Sekunden erreicht. Danach setzt die Kondensation ein. Interessant ist, bei welchem Zustand (ρ, T) dies beginnt: die Dichte ($\rho = 2.466 \text{ kg m}^{-3}$) ist etwa um einen Faktor 2 größer als die der Erdatmosphäre, die Temperatur liegt bei 3955 K, und der Druck beträgt $2.3 \times 10^6 \text{ Pa}$. Ein Vergleich mit der ANEOS Zustandsgleichung (Thompson und Lauson, 1972) für Dunit ist sehr nützlich. Dazu wurde zunächst mit Hilfe der planaren Einschlags-Approximation (planar impact approximation, siehe Melosh (1989) bzw. die Tabelle in Kapitel 2, Abschnitt 3) der Anfangszustand für 20 km/s Einschlagsgeschwindigkeit berechnet. Beim Durchgang der Stoßwelle, welche sich mit der halben Geschwindigkeit 10 km/s bewegt, hat das „Projektile“ einen Druck von $P = 633.87 \text{ GPa}$, eine Temperatur von $T = 21588 \text{ K}$, und eine Dichte $\rho = 6971.6 \text{ kg m}^{-3}$ (wenn der Boden auch aus Dunit bestünde). Anschließend integriert man die Adiabate unter Benutzung der ANEOS-Zustandsgleichung numerisch, bis die Koexistenzkurve erreicht wird, dort ergeben sich Werte von $\rho = 1.8 \text{ kg m}^{-3}$ und $T = 3901 \text{ K}$ (diese Werte gelten für die neueste, von H.J. Melosh verbesserte Version der ANEOS, mit Eingabeparametern für Dunit, B. A. Ivanov, pers. Mitteilung. In der alten ANEOS-Version trat die Adiabate durch die Grenze zur flüssigen Phase in das Koexistenzgebiet ein, sodaß Sieden einer überhitzten Flüssigkeit auftrat, aber niemals Kondensation, auch nicht für noch höhere Einschlagsgeschwindigkeiten über 25 km/s). Damit simuliert das viel einfachere van der Waals Gas die Adiabate einer im Gebiet hoher Drücke adäquaten Zustandsgleichung hinreichend gut, allerdings ist die Anfangstemperatur unrealistisch (mit nur zwei Parametern a, b kann man nicht drei Zustandsvariablen am kritischen Punkt festlegen, und konstantes c_V ist eine schlechte Näherung). Diese Werte gelten im Zentrum der Gaswolke, die Temperatur fällt nach außen hin ab. Sowohl die einfache van der Waals Zustandsgleichung, als auch Berechnungen mit ANEOS ergeben übereinstimmend, daß die thermodynamischen Bedingungen der Kondensation extrem sind, siehe Abb. 3.4. Es bilden sich Hochtemperatur-Kondensate,

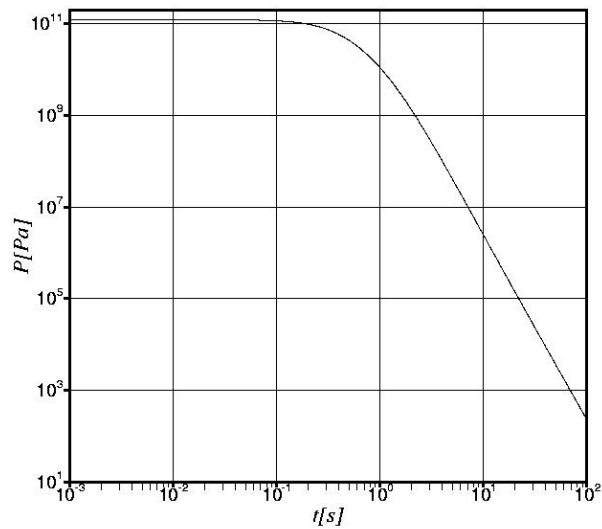


Abbildung 3.3: Entwicklung des zentralen Drucks, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung.

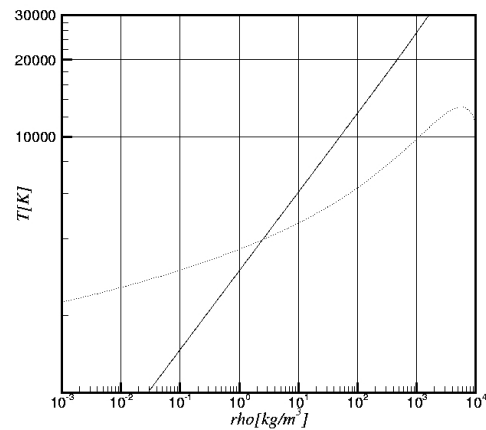


Abbildung 3.4: Thermodynamischer Weg im T - ρ -Diagramm, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung. Gebiet unter der Koexistenzkurve (punktirt) entspricht Flüssigkeits-Gas-Mischung.

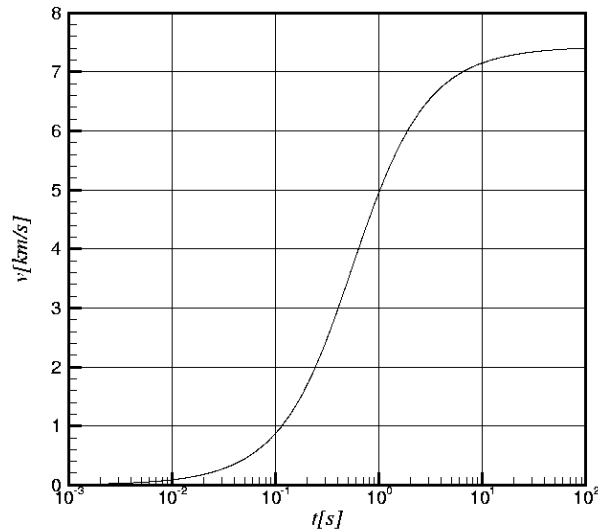


Abbildung 3.5: Entwicklung der Geschwindigkeit am äußeren Rand, \dot{R} , bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung.

welche bei Dichten und Drücken auftreten, die um viele Größenordnungen über denen liegen, die bei der Entstehung der Mineralien im solaren Urnebel vorherrschten (Grossman , 1972). Wenn der Dampf die Grenzkurve zum Bereich der Koexistenz von Gas und Flüssigkeit erreicht, wird der gasförmige Zustand metastabil. Im thermodynamischen Gleichgewicht würde sich eine Zweiphasen-Mischung aus Flüssigkeitstropfen und Gas bilden (dabei stimmt die Zustandsgleichung nicht mehr; es muß die Maxwell-Konstruktion benutzt werden, siehe z. B. Guggenheim (1957) oder Landau und Lifshitz (1983)). Numerische Simulationen von Hochgeschwindigkeitseinschlägen haben bisher immer nur Zustandsgleichungen für thermodynamisches Gleichgewicht verwendet, bzw. auf die thermodynamisch korrekte Beschreibung der kondensierenden Gaswolke ganz verzichtet. Dies ist üblich, wenn die Entstehung des Kraters und die Wechselwirkungen im Bodenmaterial im Vordergrund stehen. Jedoch verläuft die Expansion des Gases lokal so schnell, daß erhebliche Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht entstehen (Raizer , 1959; Zel'dovich und Raizer , 1967), und das Gas nie vollständig kondensiert. Im nächsten Abschnitt wird ein entsprechend erweitertes Modell mit Nichtgleichgewichts-Kondensation beschrieben.

3.2.2 Kondensations-Kinetik I: van der Waals Gas

Die Bildung von Flüssigkeitstropfen in einem übersättigten Dampf ist ein Phasenübergang erster Art. Die kinetische Theorie solcher Phasenübergänge wurde von [Becker und Döring \(1935\)](#), [Volmer \(1939\)](#) und [Zel'dovich \(1942\)](#) entwickelt, und man bezeichnet sie als klassische homogene Keimbildungstheorie (eine recht vollständige Darstellung enthält die Monographie von [Abraham \(1974\)](#)). Diese Theorie behandelt die Entstehung des „kritischen“ Keims, z.B. eines wachstumsfähigen Flüssigkeitstropfens. Wesentliches Merkmal der homogenen Keimbildung ist die Abwesenheit von „fremden“ Kondensationskeimen. Die anfänglichen Temperaturen und Dichten sind so hoch, daß Staubteilchen und andere Kondensationskeime nicht vorhanden sind, daher wird zuerst homogene Keimbildung auftreten. Wenn keine Instabilitäten vorhanden sind, wird der starke, nach außen gerichtete Druckgradient Diffusion von Aeorsolen und anderen „Verunreinigungen“ in die dichte Gaswolke verhindern. Schließlich ist zum Zeitpunkt, wenn niedrigere Dichten erreicht werden, die Expansionsbewegung schnell genug, daß keine später während der Kraterentstehung gebildeten Staubteilchen in die oberen Teile der Wolke eindringen können. Dies schließt natürlich nicht aus, daß auch kompliziertere heterogene Rekondensation von verdampftem Bodenmaterial vorkommt. Hier soll jedoch nur homogene Keimbildung untersucht werden.

Die Becker-Döring-Theorie beschreibt die Kinetik eines Phasenübergangs erster Art (Schmelzen, Erstarren, Verdampfen, Kondensation) als eine Hierarchie von Reaktionen mit Anlagerung bzw. Abtrennung eines einzelnen Monomers (der kleinsten molekularen Einheit mit der Stöchiometrie der kondensierten Phase). Die stationäre Lösung für die Keimbildungsrate gibt die Anzahl der kritischen Keime pro Dampfmolekül und pro Zeiteinheit als

$$J = 4\pi r_{cr}^2 n v_{th} \kappa \exp\left(-\frac{4\pi\sigma r_{cr}^2}{3k_B T}\right), \quad (3.16)$$

wobei n und v_{th} die Teilchenzahldichte und thermische Geschwindigkeit des Dampfes, r_{cr} der kritische Keim-Radius und σ die Oberflächenspannung der kondensierten Phase sind. Es gilt weiterhin

$$v_{th} = \left(\frac{k_B T}{2\pi m}\right)^{1/2}, \quad (3.17)$$

wobei m die molekulare Masse bezeichnet und

$$\kappa = \left(\frac{\sigma}{k_B T}\right)^{1/2} \frac{\Omega}{2\pi r_{cr}^2}, \quad (3.18)$$

ist der Zeldovich-Faktor, mit Ω als dem Volumen der Flüssigkeit pro Monomer-Einheit. Der Radius der kritischen Keime r_{cr} ist eine Funktion des Nichtgleichgewichtsparameters, der Unterkühlung θ

$$r_{cr} = \frac{2\sigma\Omega}{\lambda m\theta}, \quad \theta := 1 - \frac{T}{T_S}, \quad (3.19)$$

oder der Übersättigung S

$$r_{cr} = \frac{2\sigma\Omega}{k_B T S}, \quad S := \ln\left(\frac{P}{P_S}\right). \quad (3.20)$$

Hierbei ist λ die Verdampfungsenthalpie pro Masseneinheit, und T_S ist die Temperatur des gesättigten Dampfes bei der Dichte des metastabilen Gases. Der Dampfdruck im Gleichgewicht P_S ist eine Funktion der Temperatur allein und für kompliziertere Zustandsgleichungen leichter zu berechnen als T_S , allerdings nimmt beim planetaren Einschlag und darauf einsetzender Kondensation die Übersättigung nur recht geringe Werte an (im Vergleich zu Laborexperimenten zur Keimbildung), sodaß die Unterkühlung ein etwas anschaulicherer Parameter ist. Die kritische Keimabmessung ist in der sogenannten Kapillar-Approximation gegeben, wo die Oberflächenspannung unabhängig von der Keimgröße und gleich ihrem makroskopischen Wert ist. Der kritische Radius r_{cr} gehört zu einem instabilen Maximum der freien Energie: Keime mit Abmessungen größer als r_{cr} wachsen, während kleinere sich auflösen. Der Zeldovich-Faktor κ in Gl.(3.16) ist ein Maß für die Breite der Verteilung der unterkritischen Keime (Zel'dovich, 1942). Der Exponentialterm ist die Wahrscheinlichkeit von thermischen Fluktuationen, die zur Entstehung der kritischen Keime führen. Die weiteren Vorfaktoren in Gl.(3.16) sind ein Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit von Zusammenstößen der Dampfmoleküle mit einem kritischen Tröpfchen. Die genaue Form der Vorfaktoren ist relativ unbedeutend gegenüber der freien Energie an der kritischen Schwelle, welche im Exponentialterm auftaucht.

Neuere Theorien der Keimbildung beruhen auf Monte-Carlo Simulationen oder Molekulardynamik und führen nicht auf einfache analytische Formeln für die Keimbildungsrate J (siehe z.B. Senger u. a. (1999)). Solche Modelle sind zu anspruchsvoll in der dynamischen Situation eines planetaren Einschlags, weil sie zeitraubende Berechnungen für jeden Punkt des thermodynamischen Zustandsraumes erfordern. Jedoch ist eine Verallgemeinerung für kompliziertere Tröpfchenmodelle, wie die im DLR von Dillmann und Meier (1991) entwickelten, welche einen Spezialfall der allgemeinen Form in McClurg und Flanagan (1998) darstellen, sehr einfach: die freie Energie der

Entstehung kritischer Keime ΔF wird als Funktion der Anzahl der Monomere n geschrieben, dann ist der Exponentialterm

$$\exp\left(-\frac{\Delta F(n_{cr})}{k_B T}\right)$$

und der Zeldovich-Faktor κ berechnet sich aus

$$\kappa^2 = -\frac{1}{2\pi k_B T} \left(\frac{\partial^2 \Delta F(n_{cr})}{\partial n_{cr}^2} \right), \quad (3.21)$$

sowie der kritische Radius ist das Extremum

$$\left(\frac{\partial \Delta F(n_{cr})}{\partial n_{cr}} \right) = 0, \quad (3.22)$$

wobei für sphärische Tröpfchen $n_{cr} = (4\pi/3)r_{cr}^3 \Omega$ gilt.

Die Kopplung von Hydrodynamik und Kinetik benötigt jedoch noch zwei andere Bestandteile: eine modifizierte Energie-Gleichung zur Temperaturentwicklung und eine makroskopische Beschreibung des Wachstums der Tropfen. Das letztere Problem wurde von [Frenkel \(1946\)](#) gelöst, und die Wachstumsgeschwindigkeit ist

$$\frac{da}{dt} = \frac{\rho^v}{\rho^c} v_{th} \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{k_B T} \frac{\partial \Delta F(n)}{\partial n}\right) \right], \quad (3.23)$$

hierbei ist n die Anzahl der Monomere, a der Tröpfchenradius, (nicht zu verwechseln mit dem van der Waals Parameter aus dem vorigen Abschnitt) ρ^v die Massendichte des Dampfes und ρ^c die der kondensierten Phase. Diese Gleichung berücksichtigt die Konkurrenz von Adsorption und Verdampfung. Wie man sieht, ist die Wachstumsrate bei der kritischen Abmessung genau Null, denn dort verschwindet das Argument der Exponentialfunktion. In der Kapillar-Näherung ergibt sich

$$\frac{\partial \Delta F(n)}{\partial n} = k_B T S \left(1 - \frac{r_{cr}}{a} \right), \quad (3.24)$$

wobei $S = \ln(P/P_S)$ die Übersättigung ist. Damit erhält man

$$\frac{da}{dt} = \frac{\rho^v}{\rho^c} v_{th} \left[1 - \left(\frac{P_S}{P} \right)^{(1-r_{cr}/a)} \right], \quad (3.25)$$

und offensichtlich gilt für große Tröpfchen $a \gg r_{cr}$ sodaß die rechte Seite unabhängig vom Radius a wird. In bisherigen astrophysikalischen Anwendungen (siehe etwa [Deguchi \(1980\)](#) oder [Chigai u. a. \(1999\)](#)) wurde der Exponentialterm in Gl.(3.23) ganz vernachlässigt, jedoch überschätzt dies

die Wachstumsrate, wenn S recht klein (d.h. P sehr nahe bei P_S) ist. Hier muß er beibehalten werden, allerdings mit der Näherung $(1 - r_{cr}/a) \rightarrow 1$.

Als nächstes wird die modifizierte Energie-Gleichung benötigt, um den Temperaturverlauf zu berechnen. Die Herleitung folgt [de Niem \(2002a\)](#). Die Massenfraktion des kondensierten Anteils sei x , dann ist die Entropie pro Masseneinheit additiv

$$s = s_1(1 - x) + s_2x, \quad (3.26)$$

wobei Index 1 die Gasphase bezeichnet. Die Energie-Gleichung folgt aus der Tatsache, daß die spezifische Entropie der Phasemischung längs einer Stromlinie konstant bleibt. Weiterhin gilt für das spezifische Volumen (hier $v = 1/\rho$)

$$v = v_1(1 - x) + v_2x, \quad (3.27)$$

sodaß v_1 eliminiert werden kann. Die vollständige Differential der ersten Gleichung, multipliziert mit der Temperatur, lautet

$$\begin{aligned} Tds = & (c_{V,1}(1 - x) + c_{V,2}x)dT + T \left(\frac{\partial P_1}{\partial T} \right) dv + \\ & + xT \left[\left(\frac{\partial P_2}{\partial T} \right) - \left(\frac{\partial P_1}{\partial T} \right) \right] dv_2 + \\ & + \left[T(s_2 - s_1) + T \left(\frac{\partial P_1}{\partial T} \right) (v_1 - v_2) \right] dx, \end{aligned} \quad (3.28)$$

wobei $c_{V,i} = T(\partial s_i / \partial T)_v$ eingesetzt, sowie

$$dv = (1 - x)dv_1 + xdv_2 + (v_2 - v_1)dx, \quad (3.29)$$

und die Maxwellsche Beziehung

$$\frac{\partial s_1}{\partial v_1} = \frac{\partial P_1}{\partial T} \quad (3.30)$$

benutzt wurden. Weiterhin reicht es aus, die kondensierte Phase als inkompressibel $dv_2 = 0$ anzunehmen. Nun bilden wir die Zeitableitung längs einer Stromlinie der Dampf-Kondensat-Mischung

$$\begin{aligned} T \frac{Ds}{Dt} = 0 = & (c_{V,1}(1 - x) + c_{V,2}x) \frac{DT}{Dt} + T \left(\frac{\partial P_1}{\partial T} \right) \frac{Dv}{Dt} + \\ & + \left[T(s_2 - s_1) + T \left(\frac{\partial P_1}{\partial T} \right) (v_1 - v_2) \right] \frac{Dx}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Dies ist die gesuchte Energie-Gleichung, und sie ist ganz allgemein (ohne Bezug auf die Zustandsgleichung $P_1 = P_1(T, \rho_1)$ des Gases) gültig. Die Differenz

$T(s_2 - s_1)$ ist wegen der Nähe zum Gleichgewicht auch durch $\Delta h = h_2 - h_1$ zu ersetzen, weiterhin gilt

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla, \quad (3.32)$$

jedoch wegen des speziellen Ansatzes Gl.(3.1) für die Geschwindigkeit wird D/Dt zur gewöhnlichen Zeitableitung. Schließlich ist mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{v}. \quad (3.33)$$

Es muß nur noch die Änderungsgeschwindigkeit des Kondensationsgrades x (d.h. der Massenfraktion des Kondensats) bekannt sein. Diese berechnet man mit Hilfe der Keimbildungsrate nach [Zel'dovich und Raizer \(1967\)](#)

$$x(t) = \int_0^t J(t_0) \frac{4\pi}{3\Omega} a(t, t_0)^3 dt_0. \quad (3.34)$$

Der im Integranden auftretende Tröpfchenradius $a(t, t_0)$ ist eine Lösung der Gl.(3.23) mit der Anfangsbedingung $a(t_0, t_0) = r_{cr}(t_0)$. Da letztere Differentialgleichung (mit Hilfe unserer Näherung) die Variable a nicht mehr auf der rechten Seite enthält, kann man durch viermalige Differentiation nach der Zeit aus der Integralgleichung (3.34) ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen erhalten, welches auf [Deguchi \(1980\)](#) zurückgeht. Das Differentialgleichungssystem lautet

$$\frac{dx}{dt} = J \frac{4\pi}{3\Omega} r_{cr}^3 + x_2 \frac{da}{dt}, \quad (3.35)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = J \frac{4\pi}{\Omega} r_{cr}^2 + x_1 \frac{da}{dt}, \quad (3.36)$$

$$\frac{dx_1}{dt} = J \frac{8\pi}{\Omega} r_{cr} + x_0 \frac{da}{dt}, \quad (3.37)$$

$$\frac{dx_0}{dt} = J \frac{8\pi}{\Omega}, \quad (3.38)$$

mit der Definition

$$x_i := \int_0^t \frac{8\pi}{i! \Omega} a(t, t_0)^i J(t_0) dt_0, \quad i = 0, \dots, 3 \quad (3.39)$$

wobei $x_3 = x$ die Massenfraktion der kondensierten Phase ist. Die Quotienten

$$\overline{a^i} := i! \frac{x_i}{x_0} \quad (3.40)$$

haben außerdem eine physikalische Interpretation als i -tes Moment der Größenverteilung der bis zum Zeitpunkt t ausgereiften Tropfen. Diese Informationen sind ausreichend, um Mittelwert und Varianz der Größenverteilung zu jedem Zeitpunkt zu berechnen.

Strenggenommen gilt die semi-analytische Lösung aus dem vorigen Paragraphen nur unter Vernachlässigung der Kondensation. Es ist möglich, die Euler-Gleichung (3.9) in etwas anderer Form zu schreiben (die Herleitung ist etwas langwierig, jedoch trivial)

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = \frac{4\pi}{3M} R^2 (P + a\rho^2)_{r=0}, \quad (3.41)$$

wobei M die Gesamtmasse innerhalb $R(t)$ bezeichnet. Rechts tritt der thermische Druck im Zentrum auf ($-a\rho^2$ ist der „kalte Druck“), da die Dichte räumlich konstant ist, und nur die Temperatur ortsabhängig. Nun wird die zeitabhängige Temperatur im Zentrum mit Hilfe der Energie-Gleichung (3.31) berechnet, und P aus der van der Waals Zustandsgleichung für den metastabilen Dampf erhalten. Die Gesamtdichte ist eine bekannte Funktion des Maßstabsfaktors ($\rho \sim R^{-3}$). Die Hierarchie der Differentialgleichungen für die Momente $x_i, i = 0, \dots, 3$ muß ebenfalls integriert werden, und dabei handelt es sich um ein „steifes“ Differentialgleichungssystem (Oran und Boris, 1987), weil die Keimbildung explosionsartig erfolgt. Nur ein spezieller hochgenauer Integrator kann dieses Problem lösen, in unserem Fall der Neville-Algorithmus. Ein technisches Problem ist noch die Berechnung des Sättigungsdrucks eines van der Waals Gases bei gegebener Temperatur. Die dazu benutzte Prozedur liefert auch noch die Dichte an der Koexistenzkurve der Phasen, $\rho_i(T)$, $i = 1, 2$ und sowie Differenz der Enthalpie. Eine entsprechende FORTRAN-Subroutine führt die Berechnungen sinnvollerweise nur in dimensionslosen „kritischen“ Einheiten durch, und die Lösung funktioniert in einem Bereich von etwa 20 Größenordnungen in der Gasdichte, wobei eine Kombination aus Newton-Methode und Iterationsverfahren verwendet wird. Eine hohe Genauigkeit ist wünschenswert, nicht zuletzt, weil die Keimbildungsrate exponentiell von der Übersättigung abhängt.

Es wurden wieder die selben Anfangswerte und Parameter für den Chicxulub-Einschlag aus dem vorigen Abschnitt verwendet. Die einzigen zusätzlichen Parameter sind die spezifische Wärmekapazität $c_{V,2}$ der kondensierten Phase und die Oberflächenspannung $\sigma = 0.3 \text{ J m}^{-2}$ von Mg_2SiO_4 . Etwas problematisch sind solche Größen wie Ω , weil kein „Forsterit-Molekül“ in der Gasphase existiert. Wir verwenden hier die Faustregel, daß 3.5 zweiatomige Moleküle das aus 7 Atomen bestehende Forsterit-Monomer bilden. Somit ist das Volumen pro Atom in der kondensierten Phase mit 3.5 multipliziert worden, um Ω zu erhalten. Die spezifische Wärme pro Atom muß am kritischen

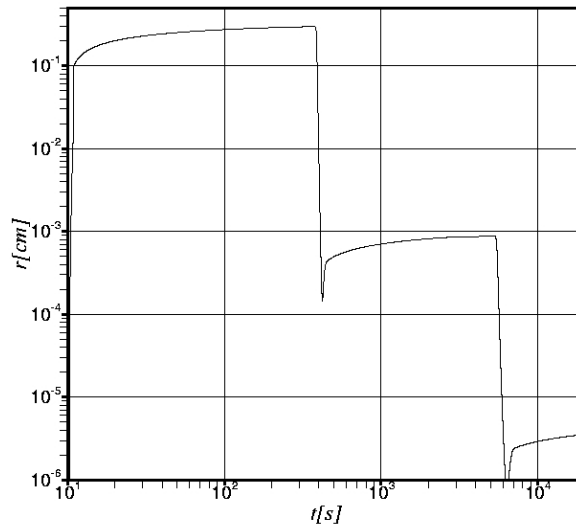


Abbildung 3.6: Zweites Moment der Größenverteilung der Kondensattröpfchen, $\sqrt{r^2}$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie.

Punkt für beide Phasen gleich werden. Dies wird hier so interpretiert, daß aufgrund der Konstanz von c_V beide Phasen den gleichen Wert für c_V bekommen. Es zeigte sich auch, daß der genaue Wert von $c_{V,2}$ von untergeordneter Bedeutung ist. Abbildung 3.6 zeigt die Entwicklung des zweiten Moments der Größenverteilung der Kondensattröpfchen. Nach etwa 10.32 Sekunden findet zum ersten Mal Keimbildung statt, und Temperatur, Dichte und Druck sind 3883.9K, 2.3245 kg m^{-3} und $2.131 \times 10^6 \text{ Pa}$.

Die Tröpfchen wachsen innerhalb der folgenden Minuten bis auf einige Millimeter an. Etwa 6 Minuten später tritt ein weiteres Mal eine ausreichende Übersättigung auf (siehe Abbildung 3.7, sodaß neue überkritische Tröpfchen gebildet werden. Währenddessen ist der Durchmesser der Gaswolke schon auf einige Tausend Kilometer angewachsen. Die Temperatur hat immer noch Werte über 1600 K. Aufgrund der hohen Anzahl der neugebildeten Tröpfchen sinkt der mittlere quadratische Radius (Abb. 3.6) abrupt ab, was nicht bedeutet, daß die bereits vorhandenen, einige Millimeter großen Tropfen der „ersten Generation“ verschwinden. Es handelt sich dabei nicht um einen Artefakt des theoretischen Modells, da sowohl das Wachstum bereits ausgereifter wie auch der neu hinzukommenden berücksichtigt wird. Die

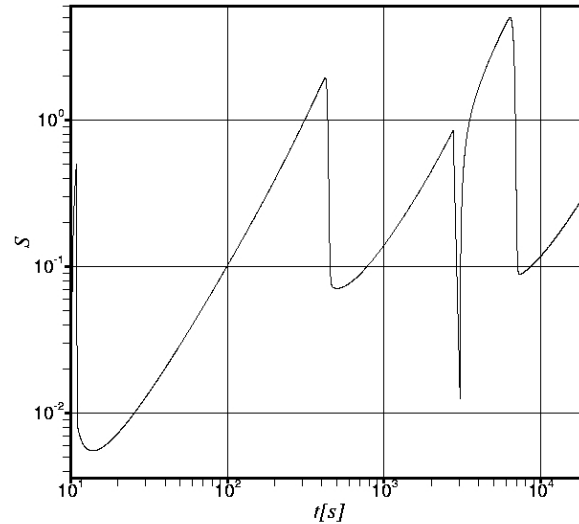


Abbildung 3.7: Übersättigung $S = \ln P/P_S$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie.

zweite Generation der Tröpfchen besitzt viel weniger Masse als die erste, da das Wachstum proportional zur Oberfläche ist, und die Massendichte bereits sehr geringe Werte erreicht hat (siehe Abb. 3.9). Nach etwa 1.5 – 2 Stunden tritt eventuell noch eine dritte Generation von Kondensaten auf, die jedoch nur Submikrometergröße erreicht, aber wiederum zahlreicher als die vorangegangene ist.

Während dieser Zeit haben Teile der Gaswolke bereits das Schwerfeld verlassen, oder wären auf die oberen Atmosphärenschichten zurückgefallen (die Umlaufzeit in einem niedrigen kreisförmigen Orbit ist gerade von dieser Größenordnung). Die Bewegung unter dem Einfluß der Gravitation sprengt aber den Rahmen dieses einfachen Modells. Die Kondensationstemperatur der dritten Generation (etwas über 1000 K) führt zur Entstehung von Submikrometer-Staubteilchen, und die Abmessungen -jedoch nicht die Anzahl- dieser Teilchen sind geeignet, Änderungen in der Opazität der Hochatmosphäre zu verursachen. Abbildung 3.8 zeigt die Temperaturentwicklung, wobei deutlich erkennbar ist, daß auf jede Stufe der Keimbildung eine kurzzeitige Erwärmung folgt, aufgrund der Freisetzung latenter Wärme während des Kondensationsvorgangs. Weiterhin ersieht man die Kondensationstempera-

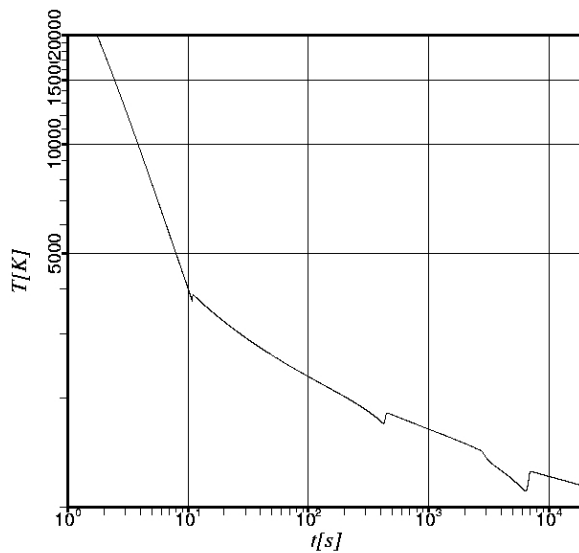


Abbildung 3.8: Temperatur T , bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie.

turen (und die zugehörigen Massendichten aus Abb. 3.9), wenn auch wegen des logarithmischen Maßstabes genaue Werte schwer ablesbar sind. Bei der erheblichen Verdünnung, die das Gas erfährt, werden jedoch noch andere Wechselwirkungen (z.B. mit geladenen Teilchen und der Sonnenstrahlung) wichtig, von denen hier abgesehen wurde, und außerdem ist die Schwerkraft für die Dynamik entscheidend, sobald der Druck wesentlich nachläßt. Damit ist das Modell weit von einer genauen quantitativen Theorie entfernt.

Das Phänomen einer Hierarchie von Kondensationen mit auf logarithmischer Zeitskala regelmäßiger Wiederkehr, welches hier zum ersten Mal in einem theoretischen Modell beobachtet wird, ist sehr allgemeiner Natur und sollte bei allen Phasenübergängen, die mit der Becker-Döring-Theorie beschrieben werden können, auftreten. Grundvoraussetzung ist lediglich eine schnelle adiabatische Expansion der Materie. Als Folge des Phasenübergangs tritt eine hierarchische Größenverteilung auf, wobei charakteristische Dimensionen „ausgewachsener“ Kondensate auf jeder nachfolgenden Stufe viel kleiner und ihre Anzahl viel größer sind. So etwas Ähnliches beobachtet man bei der Materieverteilung im Universum, und es existieren eine große Zahl kosmologischer Modelle, in denen die „gewöhnliche“ Materie in Phasenübergängen

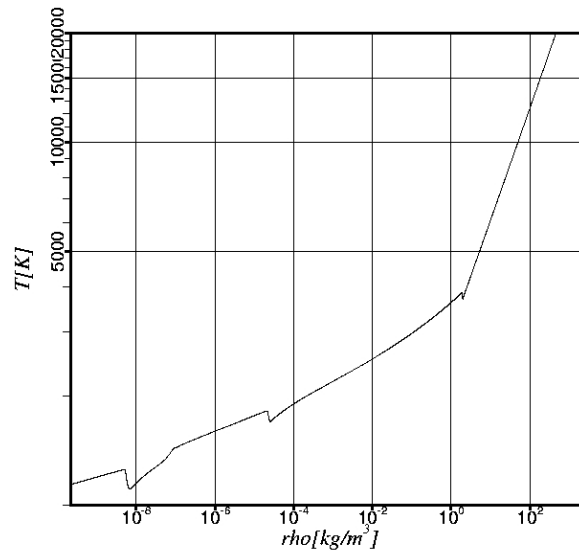


Abbildung 3.9: Thermodynamischer Weg im T - ρ -Diagramm, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit van der Waals Zustandsgleichung und klassischer Keimbildungstheorie.

erster Art gebildet wird. Vielleicht ist der Effekt des „hierarchical clustering“ der Materie im Universum ebenfalls ein Phasenübergangs-Phänomen.

3.3 Chemische Gleichgewichte

3.3.1 Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf

Im vorigen Abschnitt wurde von der chemischen Zusammensetzung und molekularer Dissoziation völlig abgesehen. Außerdem hatte die Zustandsgleichung eine konstante Wärmekapazität c_V zur Voraussetzung. Einschlags-erzeugte Dämpfe sind komplizierte Mischungen aus vielen molekularen Gasen, und dies wurde in bisherigen Simulationen nicht berücksichtigt. Auch dort, wo die Bestandteile als ideale Gase beschrieben werden können, erzeugt das chemische Gleichgewicht solcher Gase ein nichtideales Verhalten, insbesondere ist die Wärmekapazität eine stark variierende Funktion der Temperatur und Dichte, siehe Abb. 3.10. Ein Verständnis des „thermodynamischen Weges“ bis zur Kondensation erfordert mehr Aufwand für die Zustandslei-

chung.

Am Beispiel des recht häufigen Minerals, Forsterit (Mg_2SiO_4), soll nun eine Zustandsgleichung für die Gasphase entwickelt werden. In den vorigen Abschnitten wurde klar, daß zum Zeitpunkt der Kondensation keine sehr hohen Dichten mehr vorlagen. Dann ist die Beschränkung auf ideale Gase für die einzelnen chemischen Bestandteile gerechtfertigt.

Wenn man die molekularen Verbindungen in der Gasphase auf folgende beschränkt: O_2 , SiO , SiO_2 , MgO , so ergeben sich drei Massenbilanzgleichungen (im allgemeinen Fall siehe Gl.(3.69) im übernächsten Abschnitt) für die atomaren Bestandteile Si , Mg und O , als Funktion ihrer Partialdrücke P_{Si} , P_{Mg} , P_O

$$\frac{1}{7} \frac{RT\rho}{M} = P_{Si}(1 + K_1(T)P_O + K_2(T)P_O^2), \quad (3.42)$$

$$\frac{2}{7} \frac{RT\rho}{M} = P_{Mg}(1 + K_3(T)P_O), \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \frac{4}{7} \frac{RT\rho}{M} = & P_{Si}(K_1(T)P_O + 2K_2(T)P_O^2) + \\ & + P_{Mg}K_3(T)P_O + P_O(1 + 2K_4(T)P_O), \end{aligned} \quad (3.44)$$

wobei $K_1(T), \dots, K_4(T)$ die (temperaturabhängigen) Konstanten des Massenwirkungsgesetz der Dissoziation der Moleküle SiO , SiO_2 , MgO bzw. O_2 in ihre atomaren Bestandteile bezeichnen. Die Funktionen $K_i(T)$ werden aus den JANAF-Tabellen gewonnen, ([NIST Chemistry Webbook](#), 2003) dort sind Enthalpie und Entropie als Funktionen der Temperatur parametrisiert. Weiterhin ist M die molare Masse von Forsterit, R die universelle Gaskonstante und ρ die Gesamt-Massendichte. Dieses Gleichungssystem führt auf eine einzige nichtlineare Gleichung für den Partialdruck P_O :

$$\frac{2}{7} \frac{RT\rho}{M} = P_O \frac{t_1 t_3 t_4}{(t_1 + t_2 t_3)}, \quad (3.45)$$

mit den Abkürzungen

$$t_1 := 2 + 2K_1(T)P_O + 2K_2(T)P_O^2, \quad (3.46)$$

$$t_2 := 2 + K_1(T)P_O, \quad (3.47)$$

$$t_3 := 1 + K_3(T)P_O, \quad (3.48)$$

$$t_4 := 1 + 2K_4(T)P_O, \quad (3.49)$$

Weiterhin ist der Gesamtdruck die Summe der Partialdrücke, und mit Hilfe der Massenbilanzgleichungen können Partialdrücke von S_i , Mg und ihrer Oxide eliminiert werden, es verbleibt

$$P = \frac{3}{7} \frac{RT\rho}{M} + P_O + K_4(T)P_O^2. \quad (3.50)$$

Im Programm wird bei gegebener Dichte ρ und Temperatur T zunächst eine Anfangsschätzung für P_O berechnet

$$P_O^{(0)} = \frac{4}{7} \frac{RT\rho}{M}, \quad (3.51)$$

(wäre exakt im Grenzfall vollständiger Dissoziation). Die quadratische Gl.(3.50), sowie Gl.(3.45) führen noch auf folgende Beziehung

$$P = \frac{1}{2}P_O + \frac{1}{7} \frac{RT\rho}{M} \left(3 + \frac{1}{t_3} + \frac{t_2}{t_1} \right). \quad (3.52)$$

Mit Hilfe der letzten Gleichung und des aktuellen Wertes für P_O wird in jeder Iterationsstufe ein neuer Wert für P bestimmt. Anschließend liefert die Lösung der in P_O quadratischen Gl.(3.50) bei gegebenem P eine neue Approximation für P_O (falls $K_4(T)$ verschwindet, ist es nur eine lineare Gleichung). Mit diesem neuen Wert geht man wieder in Gl.(3.52) usw. Nach wenigen Schritten konvergiert das Verfahren innerhalb von Maschinengenauigkeit.

Neben der Zustandsgleichung $P(T, \rho)$ werden die partiellen Ableitungen von P nach T und ρ benötigt (z.B. die Temperatur-Ableitung in der Energiegleichung). Dazu kann das vollständige Differential von Gl.(3.50) berechnet werden, wobei P_O als dritte unabhängige Variable angesehen wird. Danach bildet man auch das vollständige Differential auf beiden Seiten von Gl.(3.45) und löst den entstehenden Ausdruck nach dP_O auf. Die so erhaltene Form dP_O bezüglich der Basis $(dT, d\rho)$ wird in den Differentialausdruck dP eingesetzt. Somit ist dP eine Differentialform in $(dT, d\rho)$, und die Koeffizienten sind die gesuchten partiellen Ableitungen des Drucks. Die Berechnung gelingt sehr schnell mit Hilfe von Maple V Computeralgebra, wobei aus den erhaltenen Ausdrücken automatisch eine FORTRAN-Subroutine erzeugt werden kann.

Weiterhin wird die innere Energie pro Masse ϵ als Funktion von T und ρ benötigt, als Funktion der Partialdrücke ergibt sich

$$\epsilon = \frac{1}{RT\rho} \sum_a (H_a(T) - RT)P_a, \quad (3.53)$$

wenn H_a die molare Enthalpie der Substanz a bedeutet. Diese Formel ist nicht unbedingt offensichtlich. Die innere Energie pro Masse kann auch wie folgt berechnet werden

$$\epsilon = \frac{1}{Nm} \sum_a N_a \epsilon_a, \quad (3.54)$$

wobei N_a die Anzahl der Teilchen (Atome oder Moleküle) der Sorte a , N die Gesamtzahl der Atome, m die mittlere Masse pro Atom, und ϵ_a die innere Energie pro Teilchen der Sorte a sind. Nun werden Zähler und Nenner mit $(k_B N_A T/V)$ multipliziert

$$\epsilon = \frac{1}{k_B N_A T (Nm/V)} \sum_a \frac{k_B T N_a}{V} N_A \epsilon_a, \quad (3.55)$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante und N_A die Avogadro'sche Zahl, sowie V das Volumen sind. Die Partialdrücke P_a sind durch die Zustandsgleichung eines idealen Gases gegeben: $P_a = k_B T N_a/V$, für die Massendichte gilt $\rho = mN/V$, weiterhin ist $R = k_B N_A$ die universelle Gaskonstante. In den JANAF-Tabellen ([NIST Chemistry Webbook](#), 2003) wird die molare Enthalpie der Substanzen $H_a(T)$ angegeben, und aus dieser kann die innere Energie pro Mol berechnet werden:

$$N_A \epsilon_a := E_a = H_a(T) - RT. \quad (3.56)$$

Somit ergibt sich die Gl.(3.53). Leider sind explizite Ausdrücke für partielle Ableitungen von ϵ zu lang, hier angegeben zu werden, und wieder muß Computeralgebra eingesetzt werden. Man bildet zuerst das vollständige Differential $d\epsilon$, wobei auch P_O als unabhängige Variable angesehen wird, d. h. es gibt einen Koeffizienten bei dP_O . Anschließend wird das aus Gl.(3.45) gewonnene Differential dP_O eingesetzt (siehe weiter oben), und somit werden die Koeffizienten von $d\epsilon$ in $(dT, d\rho)$ erhalten. Die Ableitungen $dH_a(T)/dT = C_{P,a}$ sind die ebenfalls in den JANAF-Tabellen angegebenen spezifischen Wärmen bei konstantem Druck. Maple kann auch danach wieder eine FORTRAN-Subroutine mit allen Berechnungen generieren. Der folgende Maple-Quellcode wurde verwendet:

```
> restart: with(linalg): with(codegen): with(diffforms): readlib(cost):
> deform(P0=0,T=0,rho=0,Z1=0,Z2=0,Z3=0,Z4=0,H1=0,H2=0,H3=0,H4=0,H5=0,H6
> =0,H7=0,R=const,R2m=const):
> t1:=2*(1+Z1(T)*P0+Z2(T)*P0^2);
```

2

$$t1 := 2 + 2 Z1(T) P0 + 2 Z2(T) P0$$

```
> t2:=2+Z1(T)*P0;
```

$$t2 := 2 + Z1(T) P0$$

72 KAPITEL 3. DIE GASWOLKE: DYNAMIK UND KONDENSATION

> t3:=1+Z3(T)*P0;

$$t3 := 1 + Z3(T) P0$$

> t4:=1+2*Z4(T)*P0;

$$t4 := 1 + 2 Z4(T) P0$$

> dP:=d(P0+Z4(T)*P0^2+3/7*R2m*T*rho):

> eq1:=2/7*R2m*T*rho=P0*t4*t1*t3/(t1+t2*t3);

$$eq1 := \frac{2}{7} R2m T rho = P0 (1 + 2 Z4(T) P0)$$

$$\frac{(2 + 2 Z1(T) P0 + 2 Z2(T) P0^2) (1 + Z3(T) P0)}{2 + 2 Z1(T) P0 + 2 Z2(T) P0^2 + (2 + Z1(T) P0) (1 + Z3(T) P0)}$$

> Y:=array(1..7): H:=array(1..7,[seq(H.i(T),i=1..7)]):

> ptmp:=2/7*R2m*T*rho:

> PMg:=ptmp/t3: PSi:=ptmp/t1:

> Y[1]:=P0: # 0

> Y[2]:=PMg: # Mg

> Y[3]:=PSi: # Si

> Y[4]:=PSi*Z1(T)*P0: # Si0

> Y[5]:=PSi*Z2(T)*P0^2:# Si02

> Y[6]:=PMg*Z3(T)*P0: # Mg0

> Y[7]:=Z4(T)*P0^2: # 02

> epsilon:=sum(simplify(Y[i]*(H[i]/(R*T)-1)/rho),i=1..7);

$$\epsilon := - \frac{P0 (-H1(T) + R T)}{R T rho} - \frac{2}{7} \frac{R2m (-H2(T) + R T)}{(1 + Z3(T) P0) R} - \frac{2}{7} \frac{R2m (-H3(T) + R T)}{(2 + 2 Z1(T) P0 + 2 Z2(T) P0^2) R}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{2}{7} \frac{R_{2m} Z_1(T) P_0 (-H_4(T) + R T)}{(2 + 2 Z_1(T) P_0 + 2 Z_2(T) P_0)^2 R} \\
& - \frac{2}{7} \frac{R_{2m} Z_2(T) P_0^2 (-H_5(T) + R T)}{(2 + 2 Z_1(T) P_0 + 2 Z_2(T) P_0)^2 R} \\
& - \frac{2}{7} \frac{R_{2m} Z_3(T) P_0 (-H_6(T) + R T)}{(1 + Z_3(T) P_0) R} - \frac{Z_4(T) P_0^2 (-H_7(T) + R T)}{R T \rho}
\end{aligned}$$

```

> dE:=d(epsilon):
> dP0:=collect(solve(d(eq1),d(P0)),[d(T),d(rho)]):
> dP1:=collect(subs(d(P0)=dP0,dP),[d(T),d(rho)]):
> dE1:=collect(subs(d(P0)=dP0,dE),[d(T),d(rho)]):
> dpe:=array(1..6):
> dpe[1]:=P0+Z4(T)*P0^2+3/7*R2m*T*rho:
> dpe[2]:=epsilon:
> dpe[3]:=coeff(dP1,d(rho)):
> dpe[4]:=coeff(dP1,d(T)):
> dpe[5]:=coeff(dE1,d(rho)):
> dpe[6]:=coeff(dE1,d(T)):
> cost(optimize(dpe));

```

452 additions + 1325 multiplications + 10 divisions + 33 functions

+ 6 subscripts + 273 assignments

```

> dpesub:=makeproc(dpe,parameters=[T,rho,P0],globals=[R2m,R]):
> fortran(dpesub,mode=double,optimized,filename='c:/deniem/science/dpesu
> b.f');

```

Die Programmzeile 'cost(optimize(dpe))' berechnet den numerischen Aufwand in der erzeugten FORTRAN-Subroutine dpesub. Man sieht, daß bereits ein chemisches Gleichgewicht von nur 3 atomaren und 4 molekularen Substanzen in der Gasphase von Forsterit einen erheblichen Rechenaufwand für

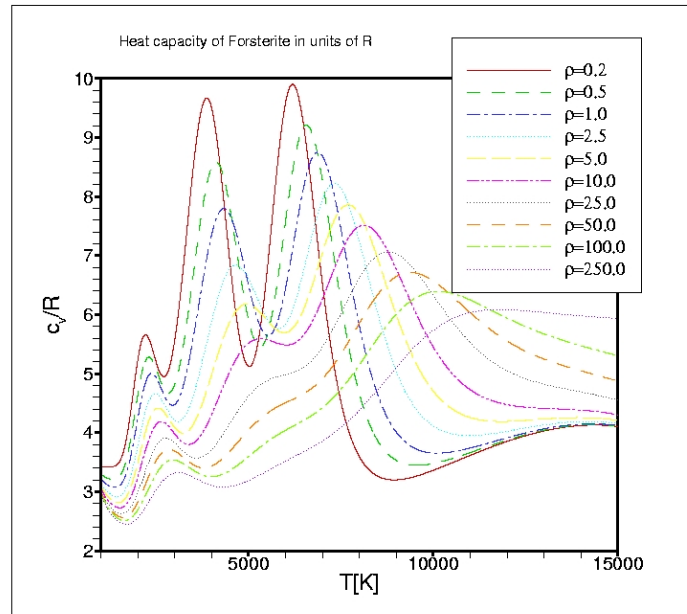


Abbildung 3.10: Molare spezifische Wärme von Forsterit-Dampf, berechnet mit der Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht, Massendichte als Parameter. Dargestellte Kurven gelten nur in der Gasphase, unterhalb der Kondensationstemperatur würde im Gleichgewicht eine Phasemischung auftreten, was hier nicht berücksichtigt ist.

die Zustandsgleichung bedeutet, wenn man bedenkt, daß darin noch nicht die Berechnungen für das chemische Gleichgewicht enthalten sind, und daß in einem eventuellen numerischen Hydrodynamik-Programm noch eine Inversion von $\epsilon(T, \rho)$ nach der Temperatur bei gegebener Dichte ρ notwendig wird. Die Zeitdauer eines einzigen Aufrufs ist jedoch mit dem für die ANEOS etwa vergleichbar (aber diese Zustandsgleichung ist wesentlich „glatter“; ANEOS ist nur in REAL Genauigkeit implementiert); so kann man ohne weiteres die hier entwickelte Zustandsgleichung für numerische Simulationen benutzen (siehe weiter unten eine numerische hydrodynamische Lösung).

Mit dem so entwickelten Programm läßt sich die spezifische Wärme berechnen: sie ist die partielle Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur. Abbildung 3.10 zeigt die Variation der molaren spezifischen Wärme c_v in Einheiten der universellen Gaskonstante R , als Funktion der Temperatur mit der Dichte als Parameter. Man sieht, daß sich verdampftes Mg_2SiO_4 keinesfalls wie ein perfektes Gas verhält. Auffällig ist das nichtmonotone Verhalten mit einigen Extrema, sowie die große Variation. Allgemein ist die

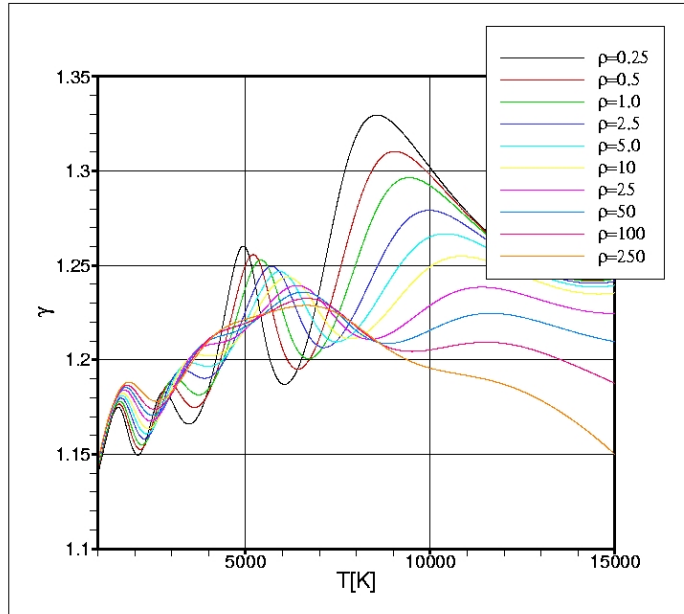


Abbildung 3.11: Adiabaten-Exponent $\gamma := (\partial \ln(P)/\partial \ln(\rho))_s$ von Forsterit-Dampf, berechnet mit der Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht, Massendichte als Parameter. Dargestellte Kurven gelten nur in der Gasphase, unterhalb der Kondensationstemperatur würde im Gleichgewicht eine Phasenmischung auftreten.

adiabatische Variation der Temperatur mit der Dichte als $T \sim \rho^\Gamma$ mit dem Grüneisen-Parameter

$$\Gamma := \frac{1}{c_V \rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho, \quad (3.57)$$

gegeben. Wo Γ klein gegen Eins bzw. c_V groß ist, erfordert adiabatische Abkühlung eine starke Reduktion der Massendichte. Somit wird die Abkühlung in Gebieten mit großem c_V langsamer vorangehen. Der Adiabatenexponent der Druckabhängigkeit von der Dichte ist γ

$$\gamma := \left(\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right)_s, \quad (3.58)$$

wobei die Ableitung bei konstanter Entropie erfolgt. Auch diese Größe ist im interessierenden Temperatur- und Dichte-Gebiet sehr variabel, wie Abbildung 3.11 zeigt. Eine hydrodynamische Simulation der Dynamik von Einschlags-erzeugten Dämpfen muß offenbar solche Besonderheiten der Zustandsgleichung berücksichtigen, sonst resultieren unrealistische Temperaturen und

Zeitskalen in der Gasphase. Verdampftes Mg_2SiO_4 in exakt stöchiometrischer Zusammensetzung ist natürlich nur ein stark einfaches Beispiel für die Produkte von Einschlägen, jedoch hat auch eine allgemeinere Zustandsgleichung für „meteoritischen“ Dampf die gezeigten Charakteristika.

3.3.2 Kondensationskinetik II: Forsterit-Dampf

Mit der gerade entwickelten Zustandsgleichung soll nun erneut die Kondensation untersucht werden. Zwar hat diese Zustandsgleichung bei den zu erwartenden Dichten und Temperaturen, wo die Kondensation beginnt, realistische Eigenschaften, jedoch nicht bei hohen Drücken. Dies erschwert die Konstruktion eines geeigneten Anfangszustandes für kosmische Einschläge.

Daher werden van der Waals Terme hinzugefügt. $P_{th}(T, \rho)$ bezeichne den Druck des im chemischen Gleichgewicht mit idealen Gasen als Komponenten berechneten Mg_2SiO_4 -Dampfes, ebenso $\epsilon_{th}(T, \rho)$ seine innere Energie, aus dem vorigen Abschnitt. Dann verallgemeinern wir die Zustandsgleichung wie folgt

$$P = \frac{P_{th}(T, \rho)}{1 - b\rho} - a\rho^2, \quad (3.59)$$

$$\epsilon = \epsilon_{th}(T, \rho) - a\rho. \quad (3.60)$$

Bei kleiner Dichte ($\rho \ll 1/b$) ist so die Zustandsgleichung nicht wesentlich verändert, jedoch bei hohen Drücken und Dichten ergibt sich die entsprechend hohe Kompressibilität der Flüssigkeit. Die spezifische Wärme $c_V = \partial\epsilon/\partial T$ bleibt dagegen ungeändert (gegenüber dem vorigen Abschnitt). Für die van der Waals Parameter a und b werden wieder die alten Werte (die ja für Dunit galten) benutzt. Um die Sättigungskurve von Mg_2SiO_4 zu konstruieren, fehlt noch ein wesentliches Detail: Es muß ein thermodynamisches Modell für das Kondensat vorhanden sein, aus dem die freie Enthalpie G berechnet werden kann. Im Fall des van der Waals Gases war die kondensierte Phase Bestandteil der Zustandsgleichung, jedoch soll der Forsterit-Dampf mit Dissoziations- Gleichgewicht hier nur die Gasphase beschreiben.

Für kondensiertes Mg_2SiO_4 ist das Modell von Ghiorso u. a. (1983) geeignet, die angegebenen Funktionen hängen noch vom Druck ab und gelten bis zu 99 Atmosphären. Die molare freie Enthalpie von Forsterit ist (in J)

$$G_{Fo} = H_{Fo} - TS_{Fo} + V_{Fo}, \quad (3.61)$$

mit den Abkürzungen

$$H_{Fo} = H_0 + K_0(T - T_r) + 2K_1(T^{1/2} - T_r^{1/2}) - K_2\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r}\right) - \frac{1}{2}K_3\left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{T_r^2}\right), \quad (3.62)$$

$$S_{Fo} = S_0 + K_0 \ln(T/T_r) - 2K_1(T^{-1/2} - T_r^{-1/2}) - \frac{1}{2}K_2 \left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{T_r^2} \right) - \frac{1}{3}K_3 \left(\frac{1}{T^3} - \frac{1}{T_r^3} \right), \quad (3.63)$$

$$V_{Fo} = V_0 \left[\left(\frac{1}{2}V_1 - V_2 \right) (P^2 - P_r^2) + \frac{1}{3}V_2(P^3 - P_r^3) + \left(1 - V_1 + V_2 + V_3(T - T_r) + V_4(T - T_r)^2 \right) (P - P_r) \right], \quad (3.64)$$

wobei die Referenztemperatur $T_r = 298\text{K}$ und der Referenzdruck $P_r = 1 \text{ atm}$ sind. Die Parameter haben folgende Werte

| | | | |
|-------|--------------------------|-------|-------------------------|
| H_0 | -2174420.0 | K_0 | 238.64 |
| K_1 | -20.013×10^2 | K_2 | 0 |
| K_3 | -11.624×10^7 | S_0 | 94.01 |
| V_0 | 4.366 | V_1 | -0.791×10^{-6} |
| V_2 | 1.351×10^{-12} | V_3 | 29.464×10^{-6} |
| V_4 | 88.633×10^{-10} | | |

und die Temperatur T ist in Kelvin, der Druck P in Atmosphären. Die Zustandsgleichung der kondensierten Phase ist in dem Sinne enthalten, daß $\partial G/\partial P = v(T, P)$ das molare Volumen ergibt, jedoch nicht zur Extrapolation geeignet, weil bei zu hohem Druck das molare Volumen negativ werden kann. Daher wird bei $P > 100 \text{ atm}$ das Argument P in den approximierenden Ausdrücken als gleich 100 atm gesetzt (dort wird die Berechnung von G_{Fo} aber nicht benötigt, da es bei so hohem Druck noch nicht zur Kondensation kommt). Das Massenwirkungsgesetz für die Bildung von Forsterit kann nun als (Partialdrücke in Atmosphären)

$$P_{Si}P_{Mg}^2P_O^4 = \exp \left(\frac{G_{Fo}(P_S, T) - 4G_O^{(0)}(T) - 2G_{Mg}^{(0)}(T) - G_{Si}^{(0)}(T)}{RT} \right), \quad (3.65)$$

geschrieben werden, wobei P_S der Gesamtdruck des gesättigten Dampfes ist, und $G_O^{(0)}$, $G_{Mg}^{(0)}$, $G_{Si}^{(0)}$ die entsprechenden freien Enthalpien der atomaren Substanzen in der Gasphase sind (bei einer Atmosphäre), letztere entnimmt man den JANAF-Tabellen. Der Ausdruck auf der rechten Seite ist die Reaktionskonstante der Bildung von Mg_2SiO_4 aus atomaren Bestandteilen (dies ist aber keineswegs der wahrscheinlichste Reaktionsweg, s.u.). Daraus läßt sich die Zusammensetzung gesättigten Mg_2SiO_4 -Dampfes bei gegebener Temperatur finden. Man benötigt nur noch die Verhältnisse $r_{Mg} := P_{Mg}/P_O$ und

$r_{Si} := P_{Si}/P_O$, welche man aus den Massenbilanzgleichungen erhält, bei bekanntem P_O (die Dichte ρ tritt nicht mehr auf). Damit kann man aus

$$P_O^7 = \frac{1}{r_{Si} r_{Mg}^2} \exp\left(\frac{G_{Fo} - 4G_O^{(0)} - 2G_{Mg}^{(0)} - G_{Si}^{(0)}}{RT}\right), \quad (3.66)$$

P_O finden, und den Druck des gesättigten Dampfes P_S (Summe aller Partialdrücke) in der Gasphase berechnen. Dies ergibt ein stabiles Iterationsverfahren. Abb. 3.1 (weiter oben) zeigt die so erhaltene Lösung für die Partialdrücke an der Sättigungskure.

Andererseits ist der aktuelle Druck als Funktion von T und ρ gegeben. Falls Übersättigung, also $P > P_S$ auftritt, ist das Gas metastabil. Um mit dem vorigen semi-analytischen Modell vergleichen zu können, wird die Euler-Gleichung als

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = \frac{4\pi}{3M} R^2 \left(T \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{r=0}, \quad (3.67)$$

geschrieben; für die van der Waals Zustandsgleichung war dies der Gl.(3.41) äquivalent, und die entsprechende partielle Ableitung auf der rechten Seite ist bekannt. Die Temperatur-Entwicklung folgt bei bekannter Zustandsgleichung des metastabilen Dampfes aus der Energie-Gleichung Gl.(3.31). Die numerische Lösung der Momentengleichungen bereit keine Schwierigkeit.

Um einem kosmischen Einschlag zu entsprechen, wurde mit der erweiterten Zustandsgleichung ein planares Einschlagsproblem gelöst (planar impact approximation, Melosh (1989)), unter Verwendung der in Kapitel 2, Abschnitt 3 abgeleiteten Gleichungen). Dazu wurden $\rho_0 = 3320 \text{ kg m}^{-3}$ und $T_0 = 600\text{K}$ als Anfangszustand angenommen. Die Werte entlang der auf diese Weise erhaltenen Hugoniot-Kurve sind

| u_{imp} km/s | ρ kg m ⁻³ | P GPa | ϵ 10 ⁶ J/kg | T K |
|-------------------|------------------------------|------------|------------------------------------|--------|
| 10.0 | 13502 | 103.668 | 7.535 | 13612 |
| 12.5 | 13625 | 165.075 | 14.562 | 16102 |
| 15.0 | 13873 | 239.103 | 23.147 | 18233 |
| 16.795 | 14082 | 299.950 | 30.275 | 19548 |
| 17.5 | 14164 | 325.611 | 33.294 | 20022 |
| 20.0 | 14446 | 424.673 | 45.004 | 21546 |

wobei die Dichte allerdings nicht realistisch ist (eine Schwäche der van der Waals Formulierung), aber Druck und Temperatur plausible Werte haben. Für die Simulation wurde 16.795 km/s Einschlagsgeschwindigkeit gewählt. Diese Geschwindigkeit ist kleiner als die für den Chicxulub-Einschlag verwendete (20km/s), jedoch ist die von Melosh und Pierazzo (1997) angegebene spezifische Energie des verdampften Materials von $37.1 \times 10^6 \text{ J/kg}$

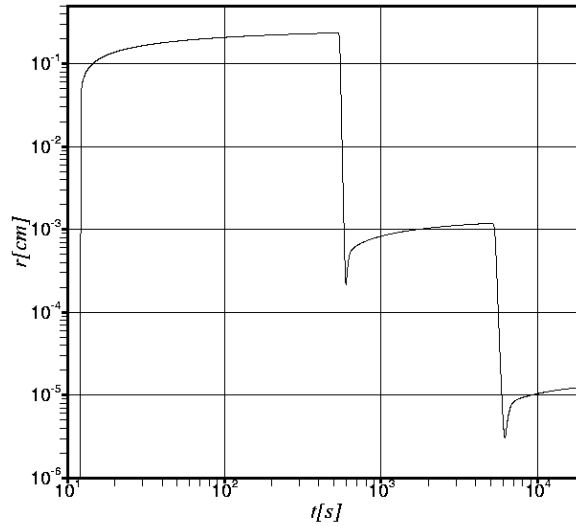


Abbildung 3.12: Zweites Moment der Größenverteilung der Kondensattröpfchen, $\sqrt{r^2}$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie.

auch niedriger, und entspricht einem späteren Zustand. Der Nullpunkt der spezifischen Energie ist für diese Zustandsgleichung verschoben (gegenüber ANEOS); man würde bei 20 km/s etwa $u_{imp}^2/8 = 5 \times 10^7$ J/kg erwarten. Die anfängliche spezifische Energie im Zentrum ist mit 30.275×10^6 J/kg etwa um diese Differenz kleiner als 37.1×10^6 J/kg (ANEOS). Parameter der Keimbildungstheorie, wie die Oberflächenspannung und Ω entsprechen denen der numerischen Simulation mit der „reinen“ van der Waals Zustandsgleichung, die Differenz der Entropien, welche in die Energie-Gleichung eingeht, sowie die spezifischen Wärmen der Phasen werden in der FORTRAN-Subroutine der Zustandsgleichung berechnet (mit Hilfe von JANAF-Daten und dem obigen Modell von [Ghiorso u. a. \(1983\)](#) für Mg_2SiO_4).

Der Zeitpunkt des Beginns der Kondensation liegt aufgrund der etwas geringeren Anfangs-Energie und der verzögerten Abkühlung (c_V teilweise sehr groß) bei 12.125 s (im Vergleich zu ~ 10 s bei Vernachlässigung des Dissoziationsgleichgewichts). Dichte, Temperatur und Druck sind dabei 1.848 kg m^{-3} , 3990 K und 1.857×10^6 Pa. Der Wert der asymptotischen Geschwindigkeit ~ 7.6 km/s ist vergleichbar zum vorherigen Fall. Trotz des anderen

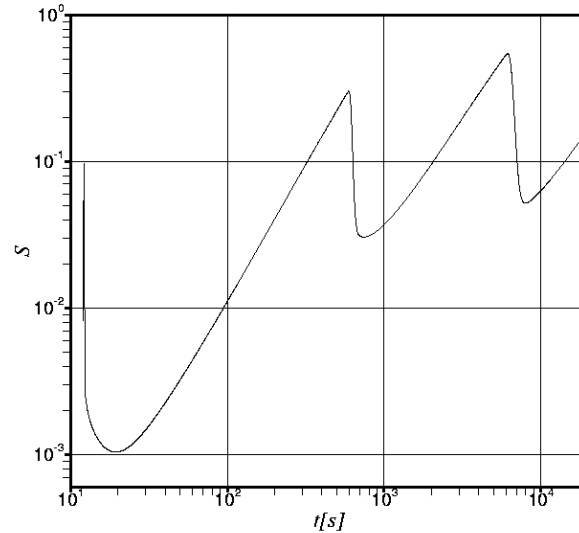


Abbildung 3.13: Übersättigung $S = \ln P/P_S$, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie.

Verhaltens von c_V im Vergleich zum Fall mit konstanter Wärmekapazität und ohne Dissoziationsgleichgewicht ist die Temperaturentwicklung bis auf die Anfangswerte sehr ähnlich, siehe Abb. 3.14.

Abb. 3.12 zeigt das zweite Moment der Größenverteilung, es werden ähnliche Werte für den Kondensat-Radius wie im vorigen Fall erhalten, d. h. die nach einigen Minuten gebildeten großen Tröpfchen der „ersten Generation“ haben mehrere Millimeter Radius. Den Verlauf der Übersättigung zeigt Abb. 3.13, es treten wiederum mehrere Maxima auf. Den Temperaturverlauf entnimmt man Abb. 3.14, und den thermodynamischen Weg in ρ - T -Diagramm Abb. 3.15. Das Phänomen der hierarchischen Größenverteilung und der mehrmaligen Keimbildung ist ebenso vorhanden. Da auf diese Weise die Hydrodynamik nur sehr grob approximiert wurde, stellte sich die Frage, wie eine numerische Lösung der hydrodynamischen Gleichungen aussieht. Dazu wurde das Problem mit den obigen Anfangswerten für ρ und T in sphärischer Symmetrie numerisch untersucht, mit Hilfe des SOVA-Algorithmus (siehe dazu Kapitel 3, eine Godunov-Methode wäre angesichts der Zustandsgleichung zu anspruchsvoll), wobei natürlich keine Kondensationskinetik berücksichtigt werden kann. Dementsprechend wurden nur 15 Sekunden realer Zeit

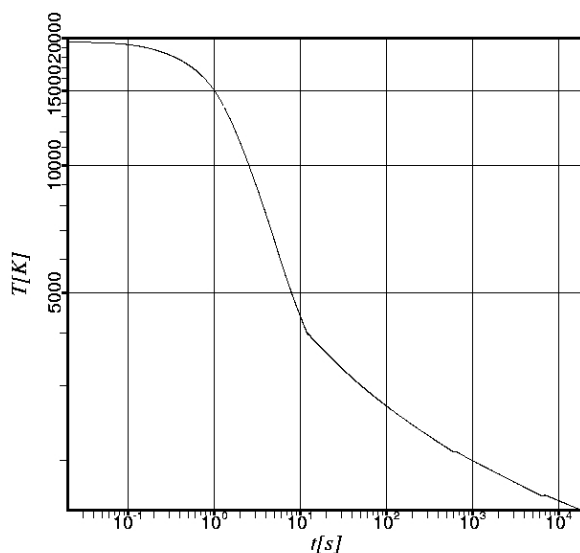


Abbildung 3.14: Temperatur T , bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie.

simuliert. Die anfangs homogene halbkugelförmige Dampf Wolke ist von einer Atmosphäre mit $\rho = 1 \text{ kg m}^{-3}$ und einem Druck von 1 atm umgeben. Die Temperatur der Atmosphäre ist mit 574 K zwar unrealistisch (bei dieser chemischen Zusammensetzung sollte sie kondensieren), jedoch wird vermieden, eine Multi-Material-Methode einzusetzen, bei der die Atmosphäre mit einer anderen Zustandsgleichung behandelt würde.

Die Zustandsgleichung für Mg_2SiO_4 -Dampf mußte zusätzlich noch bei gegebenem $\epsilon(T, \rho)$ nach der Temperatur invertiert werden, um P zu berechnen, dies geschah mit Hilfe der Newton-Methode. Trotzdem dauert eine Simulation entsprechend 15 Sekunden realer Zeit und bei Auflösung von 100 km in radialer Richtung mit 500 Zellen nur etwa 20 Minuten, auf einem mäßig schnellen (450 MHz) PC. Im Unterschied zur semi-analytischen Behandlung wird hier die Stoßwelle im Gas der Atmosphäre mit berücksichtigt.

Das Geschwindigkeitsfeld ist nach kurzer Zeit linear in r (siehe Abb. 3.16), abgesehen von den Strukturen in der Stoßfront, diese gehören aber zum Atmosphärgas. Die Verläufe von Temperatur und Druck für verschiedene Zeiten zeigen Abbildungen 3.17 und 3.18. Aus Abb. 3.19 erkennt man, daß Sättigung ($P > P_S$) am inneren Rand der Stoßwellen-Struktur beginnt,

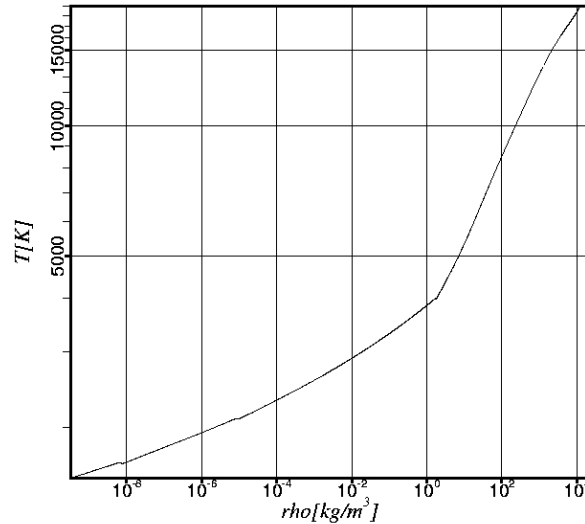


Abbildung 3.15: Thermodynamischer Weg im T - ρ -Diagramm, bei semi-analytischer Behandlung der Hydrodynamik mit Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht von Mg_2SiO_4 und klassischer Keimbildungstheorie.

nahe der relativ kalten Kontakt-Unstetigkeit, welche Atmosphäre und meteoritischen Dampf voneinander trennt. Der Zeitpunkt von 12 s stimmt recht genau mit der semi-analytischen Theorie überein. Am Ende der Simulation, bei ~ 15 s, hat die Übersättigung das Zentrum der Wolke erreicht. Die Werte des Dampfdrucks innerhalb der Stoßfront sind irrelevant, da die dort vorhandene atmosphärische Luft eigentlich mit einer anderen Zustandsgleichung beschrieben werden sollte (dies erfordert jedoch Multi-Material Verfahren).

Eine Keimbildungstheorie für komplizierte Verbindungen wie Forsterit stößt auf Probleme, da die verwendete Theorie eigentlich nur für Monomergase der selben Zusammensetzung wie die kondensierte Phase gilt. Es ist zwar plausibel, wie die freie Energie der Bildung kritischer Keime von der Übersättigung abhängt, und an dieser Stelle wird wahrscheinlich der geringste Fehler begangen; auch der Zeldovich-Faktor behält seine Gestalt bei. Jedoch sind die kinetischen Vorfaktoren des Ausdrucks für die Keimbildungsrate J nichttrivial, so muß eigentlich der Reaktionsweg zum Aufbau des Minerals Mg_2SiO_4 bekannt sein, siehe z.B. [Chigai u. a. \(1999\)](#). Nach der Theorie von [Chigai u. a. \(1999\)](#) bestimmt die Stoßfrequenz einer sogenannten „Schlüssel“-Substanz (key species) die Reaktionsrate. Welche dies ist, und

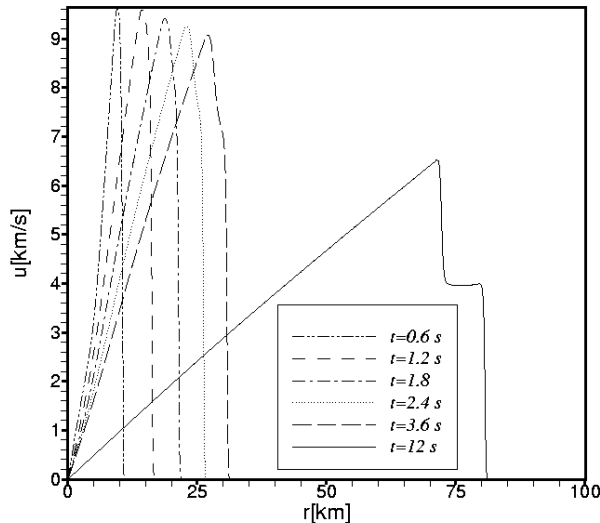


Abbildung 3.16: Entwicklung der radialen Geschwindigkeit für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Anfangsbedingung: Temperatur und Dichte entsprechend Einschlag mit 16.795 km/s, siehe Text.

welche Reaktionen die Hauptrolle spielen, hängt außerdem von der Temperatur ab. Als Folge tritt noch ein Vorfaktor in der Keimbildungsrate auf, der ein Verhältnis von Partialdrücken ist. Diesen Faktor haben wir hier stillschweigend Eins gesetzt. Angesichts der Schwierigkeiten der Keimbildungstheorie allgemein (siehe [Abraham \(1974\)](#) oder [McGraw und Laaksonen \(1996\)](#)) spielen jedoch solche Vorfaktoren eine untergeordnete Rolle, da das Verhalten des Exponentialterms dominiert. Die vorliegende Arbeit hat keine genaue Theorie zur Klärung dieses Problems zum Inhalt. Die betrachtete Zustandsgleichung für Dissoziationsgleichgewicht ist bei den Drücken und Temperaturen zum Zeitpunkt der Kondensation sicher eine adäquate Beschreibung, wenn auch nicht bei den anfänglich sehr hohen Drücken. Aber es ist fraglich, ob Mg_2SiO_4 überhaupt als eine der ersten Substanzen kondensiert. Daher untersuchen der nächste und übernächste Abschnitt die chemische Zusammensetzung der frühesten Kondensate.

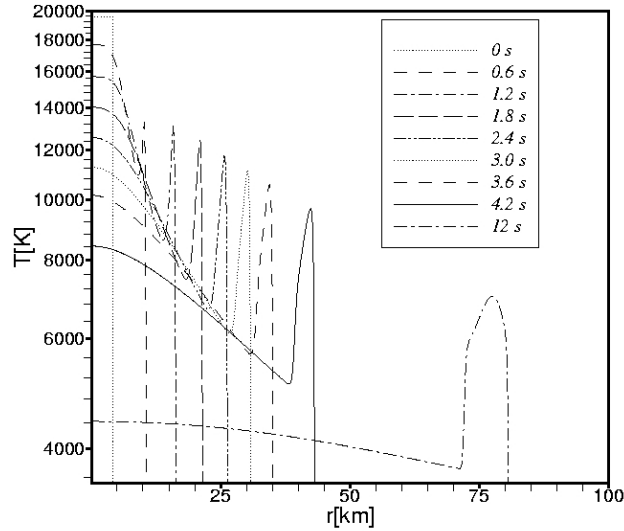


Abbildung 3.17: Entwicklung der Temperatur für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Anfangsbedingung: Temperatur und Dichte entsprechend Einschlag mit 16.795 km/s, siehe Text.

3.3.3 Zustandsgleichung für meteoritischen Dampf

Beim Einschlag verdampfte Materialien werden ein Gas bilden, das eine Mischung aus Projektil- und Bodenmaterial darstellt. Sei \hat{N}_a die Gesamtzahl der Atome des Elements a , so gilt in der Gasphase folgende Massenbilanz (eigentlich Teilchenzahlbilanz, jedoch so genannt in der physikalischen Chemie)

$$\hat{N}_a = N_a + \sum_b \nu_{ba} N_b, \quad (3.68)$$

hierbei ist N_a die Teilchenzahl im einatomigen Gas des Elements a und die N_b sind die Anzahlen der Moleküle der Sorte b , welche ν_{ba} Atome (des Elements a) enthalten. Die Anzahl der molekularen Sorten übersteigt bei nicht zu hohen Temperaturen die der atomaren um ein Vielfaches. Es gelte hier die Konvention, daß ein Index b molekulare Sorten bezeichnet. Mit Hilfe der Zustandsgleichung für ideale Gase, $P_a = k_B T N_a / V$ (analog für Sorte b) kann

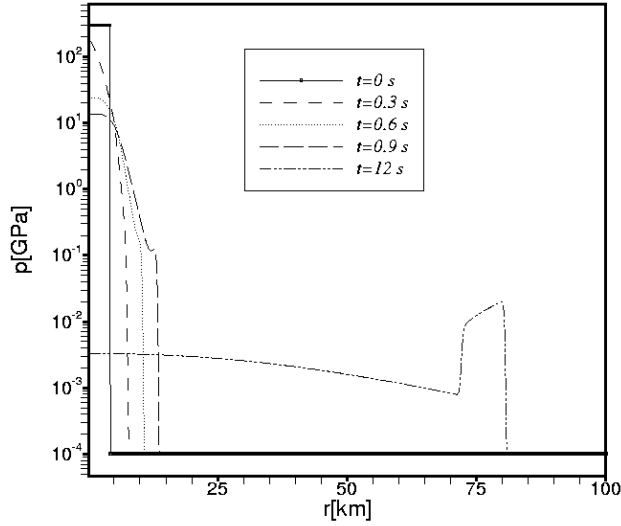


Abbildung 3.18: Entwicklung des Drucks für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Anfangsbedingung: Temperatur und Dichte entsprechend Einschlag mit 16.795 km/s, siehe Text.

man die Massenbilanz auch als Funktion der Partialdrücke schreiben

$$\frac{RT\rho}{M}c_a = P_a + \sum_b \nu_{ba}P_b, \quad (3.69)$$

wobei c_a die Häufigkeit des Elements a , summiert über alle Teilchenarten (Moleküle, Atome) ist, eine Erhaltungsgröße bei chemischen Reaktionen. Die links auftauchende Größe M ist die mittlere Masse pro Mol-Atom, sie bleibt bei chemischen Reaktionen invariant

$$M := \sum_a c_a M_a, \quad (3.70)$$

weiterhin ist M_a die molare Masse des Elements a . Der Partialdruck des molekularen Gases der Sorte b wird im chemischen Gleichgewicht durch das Massenwirkungsgesetz der Dissoziationsreaktion in atomare Bestandteile bestimmt, siehe [Landau und Lifshitz \(1983\)](#)

$$P_b = K_b(T) \prod_a P_a^{\nu_{ba}}, \quad (3.71)$$

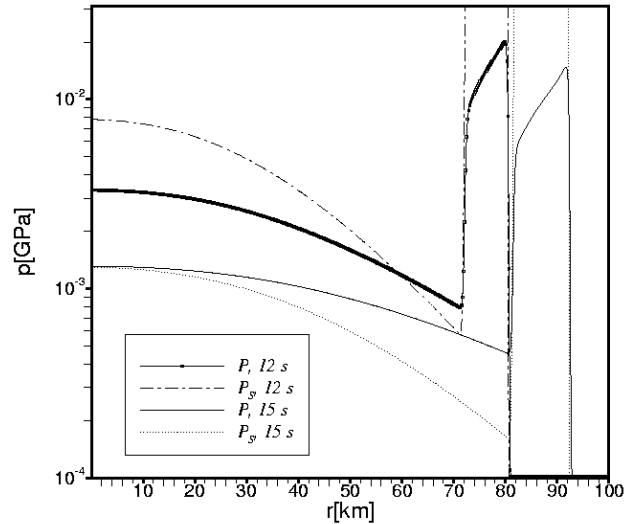


Abbildung 3.19: Verteilungen des Gasdrucks P und des Sättigungsdrucks P_s im Vergleich für numerische Simulation mit SOVA-Algorithmus und Zustandsgleichung für Forsterit-Dampf im Dissoziationsgleichgewicht. Übersättigung ($P > P_s$) setzt von außen nach ~ 12 s ein und erreicht das Zentrum nach ~ 15 s.

wobei diese Form mit rein temperaturabhängigem $K_b(T)$ nur aufgrund der Annahme idealer Gase gilt; diese Annahme ist eine starke Einschränkung, für solche Substanzen, die in hohen Konzentrationen auftreten. Allenfalls für die thermodynamischen Zustände kurz vor und während der Kondensation ist diese Approximation zu rechtfertigen. Andererseits ist die Beschaffung der thermodynamischen Parameter bei der großen Anzahl der verwendeten atomaren und molekularen Verbindungen das hauptsächliche Problem. Beispielsweise würde die Erweiterung auf van der Waals, Redlich-Kwong oder andere Zustandsgleichungen aus der Virialentwicklung (siehe Prausnitz (1969)) die Kenntnis der kritischen Punkte aller Verbindungen erfordern, und darüberhinaus müßten noch Mischungsmodelle (für die zusätzlichen Parameter der Zustandsgleichung als Funktion der chemischen Zusammensetzung) konstruiert werden (Prausnitz, 1969). Es wird an dieser Stelle betont, daß sich eine Mischung von idealen Gasen im chemischen Gleichgewicht keinesfalls wie ein ideales Gas verhält. Bekanntlich kann man reale Gase mit jeder denkbaren Zustandsgleichung als eine Mayer-Entwicklung nach Gruppen von

chemisch im Gleichgewicht befindlichen idealen Gasen auffassen (Landau und Lifshitz, 1983). In der Phänomenologie realer Gase und Flüssigkeiten wird oft die chemische Interpretation angewendet, d.h. nichtideales Verhalten wird durch Bildung von Dimeren, Ionen und quasi-freien Elektronen beschrieben (siehe etwa Luo (1997)). In diesem Sinne wäre ein Schritt in Richtung auf eine realistische Zustandsgleichung, für die wesentlichen Substanzen noch einige ideale Gase ihrer Dimere und Trimere hinzuzufügen, sowie für kleine Dichten und hohe Temperaturen Ionisation zu berücksichtigen.

In hydrodynamischen Anwendungen werden die partiellen Ableitungen des Gesamtdrucks benötigt, dieser ist im chemischen Gleichgewicht nur eine Funktion von Temperatur und Dichte. Dazu bildet man das vollständige Differential der Summe der Partialdrücke und benutzt die explizite Form des Massenwirkungsgesetzes

$$dP = \sum_a dP_a + \sum_b \sum_a \nu_{ba} \frac{P_b}{P_a} dP_a + \sum_b P_b d[\ln(K_b(T))]. \quad (3.72)$$

Weiterhin kann das vollständige Differential der Massenbilanz dazu benutzt werden, die dP_a zu eliminieren:

$$c_a \left(\frac{RT\rho}{M} \right) \left(\frac{dT}{T} + \frac{d\rho}{\rho} \right) = dP_a + \sum_b \nu_{ba} \sum_{a'} \nu_{ba'} \frac{P_b}{P_{a'}} dP_{a'} + \sum_b \nu_{ba} P_b d[\ln(K_b(T))]. \quad (3.73)$$

Um letztere Gleichung in den dP_a explizit zu erhalten, muß man offensichtlich die folgende Jacobi-Matrix der Massenbilanz invertieren:

$$\mathcal{M}_a^{a'} := \delta_a^{a'} + \sum_b \nu_{ba} \nu_{ba'} \frac{P_b}{P_{a'}}. \quad (3.74)$$

Zweckmäßigerweise wurden alle benötigten algebraischen Ausdrücke mit Hilfe von Computeralgebra (Maple V) erzeugt und daraus FORTRAN-Subroutinen gewonnen, jedoch läßt sich eine numerische Inversion der Matrix $\mathcal{M}_a^{a'}$ nicht vermeiden (in dem früheren Beispiel für Forsterit war dies analytisch möglich). Für Elemente, die in allen Molekülsorten der Gasphase nur einfach vorkommen, vereinfacht sich die Lösung der Massenbilanz noch etwas; ihre Partialdrücke sind explizite Funktionen derjenigen der übrigen atomaren Sorten:

$$P_a = \frac{RT\rho}{M} c_a \left(1 + \sum_b \nu_{ba} K_b \prod_{a' \neq a} P_{a'}^{\nu_{ba'}} \right)^{-1}. \quad (3.75)$$

Sharp und Hübner (1990) geben ein für Gleichgewichtskondensation im solaren Urnebel geeignetes System von 26 Elementen und 183 molekularen

Verbindungen dieser an, welches bemerkenswerterweise die Eigenschaft hat, daß 13 der Elemente (Mg, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Sr, Y, Zr) nur einfach in Molekülen auftreten. Damit verbleiben trotz einer Zahl von 26 berücksichtigten Elementen nur 13 nichtlineare Massenbilanzen, was die Geschwindigkeit der Berechnungen und die Konvergenz wesentlich verbessert. Praktisch dauert so eine Lösung des chemischen Gleichgewichts in der Gasphase (der Hauptanteil der Rechenzeit zur Auswertung der Zustandsgleichung) nur einige zehn Mikrosekunden auf einem mäßig schnellen LINUX-Rechner (450MHz). Abbildung 3.20 illustriert die so gefundene Lösung für die Partialdrücke P_a der Elemente als Funktion der Temperatur, bei einer Dichte von 1 kg m^{-3} (die Kondensation beginnt bei Dichten um diese Größenordnung, bzw. etwas unterhalb).

Ein weiterer Bestandteil der Zustandsgleichung ist die spezifische innere Energie ϵ , als Funktion der Temperatur und Massendichte. Sie läßt sich aus der spezifischen Enthalpie bilden, welche die folgende mit Partialdrücken gewichtete Summe ist

$$h = \frac{1}{RT\rho} \left(\sum_a P_a H_a + \sum_b P_b H_b \right), \quad (3.76)$$

wobei

$$h = \epsilon + \frac{P}{\rho}, \quad (3.77)$$

gilt (siehe dazu die Diskussion für die Zustandsgleichung von Forsterit-Dampf). Hierbei bezeichnen H_a und H_b die molaren Enthalpien der Sorten a , b , welche für ein ideales Gas nur Funktionen der Temperatur sind. Die H_a für die Elemente sind als Polynom-Approximation aus den JANAF-Tabellen erhältlich, für H_b wird $\Delta H_b := H_b - \sum_a \nu_{ba} H_a$ aus der Gleichgewichtskonstanten $K_b(T)$ durch Differentiation erhalten:

$$K_b(T) = \exp \left(-\frac{\Delta G_b(T)}{RT} \right), \quad (3.78)$$

$$T \frac{d \ln(K_b(T))}{dT} = \frac{\Delta H_b}{RT}, \quad (3.79)$$

wobei die Gleichgewichtskonstanten in der Parametrisierung von [Sharp und Hübner \(1990\)](#) verwendet werden. Die logarithmischen Ableitungen in Gl.(3.79) werden auch bei der Berechnung der partiellen Ableitungen des Druck benötigt; sie müssen aus Konsistenzgründen überall gleichartig berechnet werden. Ein gewisses Problem ist, daß beide Approximationen, d. h. [NIST Chemistry](#)

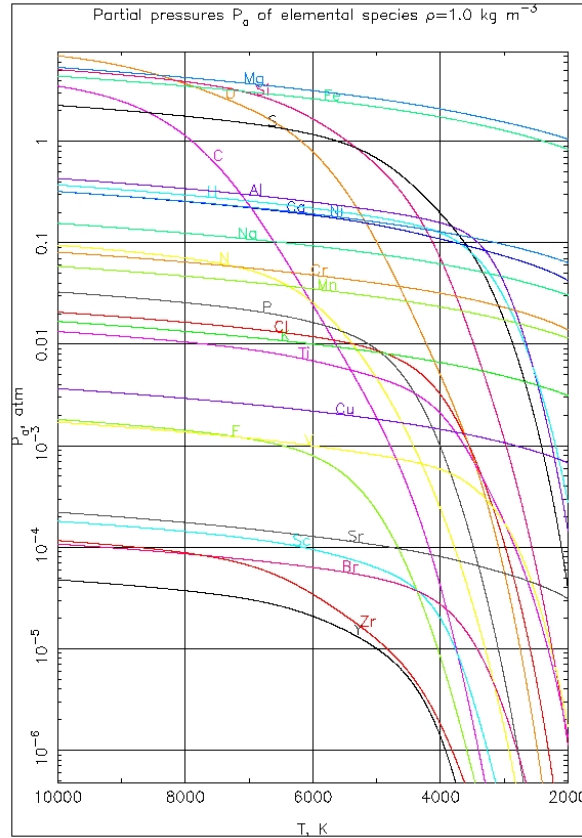


Abbildung 3.20: Partialdrücke, in Atmosphären, für Gasmisch aus 26 Elementen im Dissoziations-Gleichgewicht mit 183 Molekülen entsprechend [Sharp und Hübner \(1990\)](#). Elementenhäufigkeit für CI-Chondriten nach [McDonough und Sun \(1995\)](#), jedoch $O/Fe = 1.7$.

[Webbook \(2003\)](#) und [Sharp und Hübner \(1990\)](#) verträglich sein sollten; so sind nahezu alle $K_b(T)$ der 183 verwendeten Molekülsorten ursprünglich unter Benutzung der JANAF Tabellen erzeugt worden, wenn auch die Approximation eine andere funktionale Form hat. Setzt man in die Formel für h die Massenbilanz ein, so folgt

$$h = \sum_a \frac{c_a H_a}{M} + \sum_b \frac{\Delta H_b(T)}{RT\rho} P_b. \quad (3.80)$$

Nun differenziert man diesen Ausdruck nach T und P_a . Die Ableitung nach ρ wird nicht benötigt, da die folgende Beziehung gilt:

$$\left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho}\right)_T = \frac{1}{\rho^2} \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \right]. \quad (3.81)$$

Die partielle Ableitung nach T (mit $P_a, \rho = \text{const}$) ist

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_{\rho, P_a} &= \sum_a \frac{c_a}{M} c_{p,a} + \sum_b \frac{P_b}{RT\rho} \Delta c_{p,b} + \\ &+ \sum_b \frac{\Delta H_b(T)}{RT\rho} P_b \left(\frac{d \ln(K_b(T))}{dT} - \frac{1}{T} \right), \end{aligned} \quad (3.82)$$

wobei das Massenwirkungsgesetz benutzt wurde, um P_b nach T zu differenzieren, und die Abkürzung

$$\Delta c_{p,b} := \frac{d\Delta H_b}{dT} = c_{p,b} - \sum_a \nu_{ba} c_{p,a}, \quad (3.83)$$

bedeutet. Da in der Parametrisierung von [Sharp und Hübner \(1990\)](#) $\ln(K_b(T))$ eine algebraische Funktion ist, läßt sich $\Delta c_{p,b}$ explizit berechnen

$$\Delta c_{p,b} = RT \frac{d \ln(K_b(T))}{dT} + RT \frac{d}{dT} \left(T \frac{d \ln(K_b(T))}{dT} \right), \quad (3.84)$$

was allerdings auf zweimalige Differentiation des approximierenden Ausdrucks führt (und das war ursprünglich nie vorgesehen, es muß hier aber wegen der Konsistenz so gehandhabt werden). Für die partielle Ableitung nach P_a finden wir

$$\left(\frac{\partial h}{\partial P_a}\right)_{T, \rho} = \sum_b \frac{\Delta H_b}{RT\rho} \nu_{ba} \frac{P_b}{P_a}. \quad (3.85)$$

Die gesuchte Ableitung der spezifischen Energie nach T ist danach

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T}\right)_\rho &= \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_\rho - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho = \sum_a \frac{c_a}{M} c_{p,a} + \sum_b \frac{P_b}{RT\rho} \Delta c_{p,b} + \\ &+ \sum_b \frac{\Delta H_b(T)}{RT\rho} P_b \left[\frac{d \ln(K_b(T))}{dT} - \frac{1}{T} + \sum_a \frac{\nu_{ba}}{P_a} \left(\frac{\partial P_a}{\partial T}\right) \right] - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right). \end{aligned} \quad (3.86)$$

Nun wird wieder das Computeralgebra-Programm Maple V verwendet, mit anschließender Erzeugung von FORTRAN-Subroutinen. Die partiellen Ableitungen

$$\left(\frac{\partial P_a}{\partial T}\right)_\rho, \quad \left(\frac{\partial P_a}{\partial \rho}\right)_T,$$

folgen durch numerische Lösung der Gl.(3.73) mit Hilfe des Inversen der Matrix $\mathcal{M}_a^{a'}$.

FORTTRAN-Subroutinen zur Berechnung der nur temperaturabhängigen thermochemischen Parameter der molekularen Verbindungen wurden sehr effektiv mit dem folgenden Maple-Quellcode erzeugt. Zuerst wird die Stöchiometrie-Matrix ν_{ba} aus der Datei „stoimatx.dat“ gelesen, die zweite Eingabedatei „sharphub.dat“ enthält die Koeffizienten der Approximation von $K_b(T)$, (daraus folgen $\Delta H_b(T)/RT$ sowie $\Delta c_{p,b}$). Wenn mehr Moleküldaten bekannt sind, kann man so leicht das Programm erweitern.

```
> restart: with(linalg): with(codegen):
> M:=183: N:=26:
> K:=array(1..M): TDK:=array(1..M): CPB:=array(1..M):
> nu:=array(1..M,1..N): nub:=array(1..M):
> fd:=fopen('stoimatx.dat',READ):
> for k from 1 to M do
>   s:=fscanf(fd,"%d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d %d
> %d %d %d %d %d %d %d %d"):
>   nub[k]:=-1:
>   for i from 1 to N do
>     nu[k,i]:=s[i]:
>     nub[k]:=nub[k]+nu[k,i]:
>   od:
> od:
> fclose(fd):
> fd:=fopen('sharphub.dat',READ):
> for k from 1 to M do
>   txt:='txt':
>   C_A:='C_A': C_B:='C_B': C_C:='C_C': C_D:='C_D': C_E:='C_E':
>   s:=fscanf(fd,"%8s %f %f %f %f %f"):
>   txt:=s[1]: TSUJI:=false:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(CaH,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(CrH,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(CuH,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(CuS,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(MnH,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(NiH,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(SrH,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(MnO,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(MnS,txt,1..3)<>0:
>   TSUJI:=TSUJI or SearchText(TiN,txt,1..3)<>0:
```

```

> TSUJI:=TSUJI or SearchText(NiO,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(ScO,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(YO,txt,1..2)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(ScS,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(TiS,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(YS,txt,1..2)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(ZrS,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(SiH2,txt,1..4)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(ScO2,txt,1..4)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(YO2,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(C3H,txt,1..3)<>0:
> TSUJI:=TSUJI or SearchText(SiH3,txt,1..4)<>0:
> TSUJI:=TSUJI and SearchText(SiH3Cl,txt,1..6)=0:
> TSUJI:=TSUJI and SearchText(SiH3F,txt,1..5)=0:
> C_A:=s[2]:
> C_B:=s[3]:
> C_C:=s[4]:
> C_D:=s[5]:
> C_E:=s[6]:
> if (TSUJI) then
>   K[k]:=exp(-(C_A+C_B*TH+C_C*TH2+C_D*TH3+C_E*TH4)*DLN10+
>   nub[k]*DLAT):
>   TDK[k]:=(C_B*TH+2*C_C*TH2+3*C_D*TH3+4*C_E*TH4)*DLN10:
>   CPB[k]:=-(2*C_C*TH2+6*C_D*TH3+12*C_E*TH4)*(DLN10*RGAS*CALOR):
> else
>   K[k]:=exp(-(C_A/T2+C_B/T+C_C+C_D*T+C_E*T2)/RGAS):
>   TDK[k]:=(2*C_A/T2+C_B/T-C_D*T-2*C_E*T2)/RGAS:
>   CPB[k]:=-(2*C_A/T2+2*C_D*T+6*C_E*T2)*CALOR:
> fi:
> od:
> fclose(fd):
> tini1:=makeproc(K,parameters=[T,T2,RGAS]):
> tini2:=makeproc(TDK,parameters=[T,T2,RGAS]):
> tini3:=makeproc(CPB,parameters=[T,T2,RGAS,CALOR]):
> fortran(tini1,mode=double,filename='c:/deniem/science/tini1.f'):
> fortran(tini2,mode=double,filename='c:/deniem/science/tini2.f'):
> fortran(tini3,mode=double,filename='c:/deniem/science/tini3.f'):

```

Für einige der Moleküle wird eine Interpolationsformel nach Tsuji verwendet, siehe dazu [Sharp und Hübner \(1990\)](#), daher trifft das Programm eine Unterscheidung. Die so erzeugten FORTRAN-Subroutinen sind noch nicht ganz

fertig, es muß (manuell) Quelltext eingefügt werden, um $T2 := T^2$ sowie $TH := 5040/T$, $TH2 := TH^2$, $TH3 := TH^3$ und $TH4 := T^4$ zu berechnen, weiterhin ist $DLN10 := \ln(10)$. Das geschah hauptsächlich, weil von Maple optimierter FORTRAN-Code unleserlich ist, und mehrfache oder aufgrund ungewollter Divisionen ungenaue Berechnungen von Potenzen der Temperatur vermieden werden sollten. Desweiteren werden alle thermochemischen Parameter in COMMON-Blöcken zusammengefaßt, diese befinden sich in gesonderten include-Dateien (manuell erzeugt). Die am häufigsten aufgerufene Subroutine des chemischen Gleichgewichts benötigt nur die $K_b(T)$, deshalb sind diese in einer getrennten FORTRAN-Subroutine. Nicht bei jedem Aufruf der Zustandsgleichung sind auch partielle Ableitungen notwendig (aber z.B. wenn die Schallgeschwindigkeit im Hydrodynamik-Löser abgefragt wird); daher sind auch die $\Delta c_{p,b}(T)$ in einer getrennten Subroutine. Die ebenfalls benötigten thermochemischen Parameter der 26 Elemente wurden halbautomatisch aus den JANAF-Tabellen gewonnen. Dazu wurden die Web-Seiten aller Elemente aus dem Nist Chemistry Webbook ([NIST Chemistry Webbook](#), 2003) mit den thermodynamischen Parametern im Textformat gespeichert. Ein in FORTRAN geschriebenes Program (hier nicht wiedergegeben) kann diese Information lesen und eine Ausgabe-Datei mit FORTRAN-Anweisungen zur Berechnung von $c_{p,a}$, H_a , S_a und G_a schreiben.

Ein weiterer Maple-Quellcode erzeugt den wesentlichen Teil des FORTRAN-Quellcodes für die Berechnung der Zustandsgleichung und ihrer partiellen Ableitungen (hier nicht wiedergegeben). Die folgenden partiellen Ableitungen

$$\left(\frac{\partial P_a}{\partial T} \right)_\rho, \quad \left(\frac{\partial P_a}{\partial \rho} \right)_T,$$

werden durch numerische Lösung der Gl.(3.73) mit Hilfe des Inversen der Matrix $\mathcal{M}_a^{a'}$ (s.o) gefunden. Einige Teile mußten daher noch manuell programmiert werden.

Wie schon im vorherigen Beispiel von Forsterit-Dampf, ist eine Darstellung des Temperaturverhaltens thermodynamischer Größen wie c_V interessant. Im nächsten Beispiel wird die Elementen-Häufigkeit von [McDonough und Sun \(1995\)](#), Tabelle 2, für CI-Chondriten benutzt, um Eigenschaften „chondritischen“ Dampfes zu erhalten. Diese Tabelle listet auch die Ergebnisse anderer Studien auf. Allerdings fehlen in der Tabelle 2 von [McDonough und Sun \(1995\)](#) Angaben für Sauerstoff und Wasserstoff. Wie sich jedoch noch herausstellen wird, ist gerade der Sauerstoff-Anteil ein entscheidender Faktor für die Chemie der Kondensate.

Abbildung 3.21 zeigt c_V in Einheiten von R als Funktion der Temperatur, die Massendichte (in kgm^{-3}) ist Parameter. Auffällig ist die stark nichtmono-

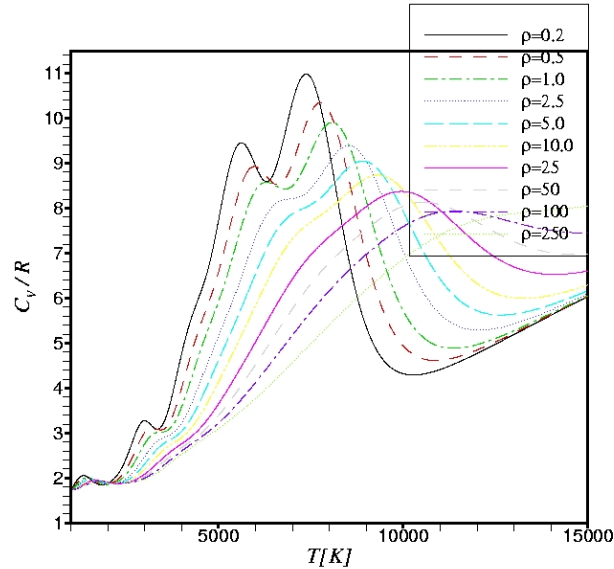


Abbildung 3.21: Molare spezifische Wärme c_V , in Einheiten der universellen Gaskonstante R , berechnet mit der Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht, 26 Elementen und 183 molekularen Verbindungen, entsprechend Sharp und Hübner (1990). Elementenhäufigkeit für CI-Chondriten nach McDonough und Sun (1995), jedoch $O/Fe = 1.7$. Dargestellte Kurven gelten nur in der Gasphase, oberhalb der Sättigungskurve.

Die Veränderlichkeit von c_V , und die lokalen Maxima sind erstaunlich hoch, was auf Temperaturbereiche deutet, wo sich der Dampf nur langsam abkühlt. Je geringer die Dichte, um so ausgeprägter ist die Veränderlichkeit von c_V mit T . Mit Änderung der Dichte verschieben sich die Maxima zwar, aber das Monotonieverhalten bleibt qualitativ ähnlich. Für ein Rechenbeispiel zur numerischen Hydrodynamik mit der hier vorgestellten Zustandsgleichung siehe das folgende Kapitel 4, Abschnitt 4.3.8 (Abbildungen 4.14 bis 4.16). Dort wurde bis zu einem Endzustand nahe dem Einsetzen der Kondensation gerechnet, siehe Abbildungen 4.15 und 4.16 für Temperatur- und Druckverlauf.

3.3.4 Chemisches Gleichgewicht mit flüssigen Phasen

Flüssige Phasen bei der Kondensation werden hier als Lösungen beschrieben. Sei $\nu_{ca}^{(l)}$ die Stöchiometrie-Matrix der möglichen flüssigen Substanzen, d. h. ein Molekül (der Fall einatomiger Substanzen ist eingeschlossen) der Sub-

stanz c besteht aus $\nu_{ca}^{(l)}$ Atomen des Elements a . Dann sind im chemischen Gleichgewicht die Partialdrücke der Gasphase P_a den folgenden zusätzlichen Bedingungen unterworfen

$$\prod_a \left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\nu_{c,a}^{(l)}} = \frac{N_c^{(l)}}{N^{(l)}} \exp \left[\frac{\mu_c^{(l)}(T, P) - \sum_{a=1}^n \nu_{c,a}^{(l)} \mu_a^{(g)}(T, 0)}{RT} \right], \quad (3.87)$$

wobei $N_c^{(l)}$ die molare Anzahl der Substanz c bedeutet, $N^{(l)} := \sum_c N_c^{(l)}$ ist die Summe (siehe Prausnitz, 1969). Die chemischen Potentiale $\mu_c^{(l)}$ der flüssigen Phase hängen auch noch (meist schwach) vom Druck ab, und die $\mu_a^{(g)}(T, 0)$ sind die chemischen Potentiale der einatomigen Gase der Elemente bei Standard-Druck P_0 (1 atm). Das Raoult'sche Gesetz, Gl.(3.87) gilt nur für ideale Lösungen, und auf dieses Lösungsmodell beschränken wir uns im Folgenden. An der Grenzkurve des gesättigten Dampfes ist der Kondensationsgrad der Flüssigkeit Null, d.h. die Stoffmenge der flüssigen Phase spielt keine Rolle in der Massenbilanz Gl.(3.69). Die einzige Bedingung, die sich so ergibt, ist die Normierung der molaren Konzentrationen in der Flüssigkeit

$$\sum_c \frac{N_c^{(l)}}{N^{(l)}} = 1. \quad (3.88)$$

Diese Bedingung, als Funktion der Partialdrücke der Elemente P_a geschrieben, lautet

$$\sum_{c=1}^p \frac{1}{A_c(T)} \prod_a P_a^{\nu_{c,a}^{(l)}} = 1, \quad (3.89)$$

wobei die Aktivität der Substanz c eingeführt wurde

$$A_c(T) := P_0^{\nu_c^{(l)}} \exp \left[\frac{\mu_c^{(l)}(T, P) - \sum_{a=1}^n \nu_{c,a}^{(l)} \mu_a^{(g)}(T, 0)}{RT} \right], \quad (3.90)$$

und $\nu_c^{(l)} := \sum_a \nu_{ca}^{(l)}$ gilt. Die Massenbilanz Gl.(3.69) enthält noch die Dichte ρ des gesättigten Dampfes, diese kann mit Hilfe von Gl.(3.89) eliminiert werden. Zweckmäßigerweise bildet man Verhältnisse der Partialdrücke P_a zu dem eines recht häufigen Elements, z.B. Sauerstoff O , und dividiert die übrigen $N - 1$ (bei N Elementen) Massenbilanz-Gleichungen auf der rechten Seite mit der des N -ten Elements (z.B. O). Dadurch fällt die Dichte ρ auf der linken Seite der Gl.(3.69) heraus. Danach ist die N -te noch fehlende Bedingung Gl.(3.89) eine algebraische Gleichung des Partialdrucks des „separierten“ Elements (z.B. O) und der $N - 1$ Druckverhältnisse. Das so gebildete Gleichungssystem ist mit Hilfe einer Newton-Methode numerisch lösbar. Zweckmäßigerweise wurde es wieder halbautomatisch mit Hilfe von

Computeralgebra erzeugt, und Maple V bildet die Jacobi-Matrix des Gleichungssystems für die Anwendung in der Newton-Methode. Ist die Lösung gefunden, so kann man die Komposition der Flüssigkeit $Z_c := N_c^{(l)}/N^{(l)}$ aus Gl.(3.87) erhalten.

In der Literatur sind zwar erweiterte Lösungsmodelle, meist reguläre Lösungen mit einigen wenigen Endgliedern vorhanden, jedoch nicht für die Vielfalt der hier erforderlichen Elemente und Verbindungen. Außerdem sind diese nicht für die hier herrschenden hohen Temperaturen und teilweise wenig Silikate enthaltenen Kompositionen geeignet. So hat z.B. das bekannte Programm MELTS ein allgemeineres Lösungsmodell, (Ghiorso und Sack, 1995) jedoch bei hohen Temperaturen und metallreichen Kompositionen, die untersucht wurden, konvergierte der MELTS-Algorithmus nicht, d.h. er fand kein thermodynamisches Gleichgewicht.

Es mag einschränkend erscheinen, daß nur eine einzige flüssige Phase betrachtet wird, die „alles enthält“. Wenn jedoch weitere Phasen hinzukommen, so darf der Kondensationsgrad, bzw. die Stoffmenge dieser zusätzlichen Phasen nicht verschwinden, als Konsequenz der Gibbs'schen Phasenregel. Jede separate flüssige Phase würde eine Normierungsbedingung nach Art von Gl.(3.89) erzeugen, dadurch wäre das Gleichungssystem überbestimmt. Also muß man zusätzlich nichtverschwindende kondensierte Stoffmengen in die Massenbilanz einführen und ebensoviele Variablen, z.B. Kondensationsgrade wie, zusätzliche Bedingungen. Daher werden kompliziertere Gleichgewichte erst dann entscheidend, wenn schon eine gewisse Menge von Gas durch Kondensation konsumiert wurde. Für die globale chemische Zusammensetzung der frühen Kondensate ist das nicht entscheidend. Wegen der sehr schnellen adiabatischen Expansion verbleibt die Trajektorie der Dampf-Kondensat-Mischung im Zustandsraum auch später sehr nahe an der Sättigungskurve. So ist zu erwarten, das bei schneller Expansion keine chemische Zusammensetzung auftritt, die weit entfernt von der Koexistenzkurve gilt. Dies ist anders, als bei langsamer quasistatischer Abkühlung (z.B. im frühen Sonnensystem). Kondensierte mineralische Phasen mit konstanter Stöchiometrie sind ein Sonderfall, und es könnten natürlich noch sehr viele solche Phasen auftreten. Ein Spezialfall war die Berechnung für Forsterit (s.o.). Auch hier müßten aber bei mehr als einer Phase Kondensationsgrade in die Massenbilanz eingeführt werden. Die so erhaltenen Lösungen haben die Eigenart, daß bestimmte kondensierte Substanzen mit einem Gas gegebener Zusammensetzung nur innerhalb eines bestimmten Gebiets (der Stabilitätsregion) koexistieren. Die dazu notwendigen Berechnungen sind sehr aufwendig. Glücklicherweise vollzieht sich aber die Kondensation hier bei Temperaturen weit über dem Solidus bekannter Hochtemperatur-Mineralien. Daher ist die Beschränkung auf nur eine flüssige Lösung gerechtfertigt.

Als ein Anwendungsbeispiel soll die chemische Zusammensetzung der Flüssigkeit bei verschiedenen Kondensationstemperaturen berechnet werden. Dabei wird wieder die Elementenhäufigkeit für CI-Chondriten nach [McDonough und Sun \(1995\)](#) verwendet (was einen „primitiven“ Asteroiden als „Projektil“ simuliert). Zusätzlicher Parameter ist die Sauerstoffhäufigkeit. Diese wird als freier Parameter betrachtet, da Angaben in der Literatur zu Meteoriten relativ ungenau sind, ebenso muß H geschätzt werden, jedoch ist dies nicht so problematisch. Geochemiker sprechen von der Sauerstoff-Fugazität als einem entscheidendem Parameter, jedoch ergibt sich diese erst infolge der Gleichgewichtsrechnungen, und ist darum keine primäre Eingabegröße. Ebenso ist es schwer möglich, aus dem gemessenen Sauerstoff-Anteil und Oxidationszustand von Meteoritenmaterial, welches sich schon lange Zeit auf der Erdoberfläche befand, auf den ursprünglichen zu schließen. In der Literatur zu Meteoriten sind nur sehr wechselnde Angaben zum primordialen Sauerstoffanteil zu finden.

Die Kondensation beginnt nach den Erfahrungen in den vorangegangenen Abschnitten für bei terrestrischen Einschlägen übliche Geschwindigkeiten in einem Intervall von etwa 3500-4000 K. Dort ergaben sich die nun folgenden Konzentrationen bei einem Verhältnis von $O : Fe = 1.7$ (siehe die Tabelle auf der folgenden Seite). Sämtliche Konzentrationen sind in Mol-Prozent. Außer der Kondensationstemperatur wird auch jeweils die Gasdichte angegeben, diese ist nicht unabhängig sondern ergibt sich aus den Gleichgewichtsbedingungen. Wie man sieht, ändert sich im dem recht großen Temperaturbereich von 3500 bis 4000 K die Komposition nicht sehr stark. Als frühe Kondensate sind (bei dieser Häufigkeit von Sauerstoff und ansonsten CI-chondritischen Häufigkeiten im Dampf) also hauptsächlich Fe , mit 4.5 – 5% Ni und wenigen Prozent Ca -, Mg -, Fe -Verbindungen, sowie TiO , zu erwarten. Außerdem wird noch Si (bei 4000K etwa 5 Prozent, jedoch mit fallender Temperatur weniger) gelöst. Es so erklärlich, daß Fe und Ni enthaltende Kondensate als Rückstände bei der Ablation von Meteoriten in der Erdatmosphäre entstehen, die Dämpfe haben entsprechend hohe Entropie. Der verbreiteten Meinung, daß Fe/Ni -Einschlüsse notwendigerweise von Eisenmeteoriten stammen, wird hier widersprochen. In der idealen Lösung wurden folgende flüssigen Substanzen betrachtet: Die 26 Elemente aus der Arbeit von [Sharp und Hübner \(1990\)](#) außer atomares H , C , O , N , F , Cl , Br , sowie die Verbindungen AlN , CaO , CaS , CrN , CuO , FeO , FeS , MgO , MgS , TiN , VN , ZrN , NiS , TiO , VO , FeS_2 , NiS_2 , SiO_2 , TiO_2 , ZrO_2 , Al_2O_3 , Al_2S_3 , Cr_2O_3 , Fe_2O_3 , Mg_3N_2 , $MgSiO_3$, $MgTiO_3$, Ni_3S_2 , Ti_2O_3 , V_2O_3 , K_2SiO_3 , Na_2SiO , $ZrSiO_4$, $MgAl_2O_4$, Fe_3O_4 , Mg_2SiO_4 , V_2O_5 , Al_2SiO_5 , $MgTi_2O_5$, Ti_3O_5 , Ti_4O_7 , $Al_6Si_2O_{13}$, Fe_2SiO_4 .

| | $T = 4000 \text{ K}, \rho = 6.891 \text{ kg m}^{-3}$ | $T = 3500 \text{ K}, \rho = 1.798 \text{ kg m}^{-3}$ |
|---------|--|--|
| Na | 0.09251 % | 0.02658 % |
| Mg | 1.63538 % | 0.57775 % |
| Al | 2.09480 % | 1.42788 % |
| Si | 4.97570 % | 1.75696 % |
| P | 0.05543 % | 0.03405 % |
| S | 1.05808 % | 0.25542 % |
| K | 0.01315 % | |
| Ca | 0.40829 % | 0.16401 % |
| Ti | 0.26342 % | 0.19710 % |
| V | 0.11526 % | 0.14947 % |
| Cr | 0.59084 % | 0.57021 % |
| Mn | 0.17796 % | 0.09343 % |
| Fe | 68.68611 % | 67.21657 % |
| Ni | 4.47205 % | 4.96465 % |
| Cu | 0.02604 % | 0.02119 % |
| AlN | 0.01161 % | 0.01552 % |
| CaO | 2.23486 % | 2.81498 % |
| CaS | 3.83928 % | 8.78543 % |
| FeO | 1.57605 % | 1.34656 % |
| FeS | 3.56173 % | 3.71617 % |
| MgO | 1.92502 % | 1.85988 % |
| MgS | 0.42908 % | 0.50194 % |
| TiN | 0.03262 % | 0.03966 % |
| NiS | 0.10901 % | 0.09788 % |
| TiO | 1.32957 % | 2.46255 % |
| VO | 0.08587 % | 0.17019 % |
| SiO2 | 0.04624 % | 0.06901 % |
| TiO2 | 0.05911 % | 0.15781 % |
| Al2O3 | 0.04584 % | 0.29984 % |
| MgSiO3 | | 0.01493 % |
| MgTiO3 | | 0.01833 % |
| Ti2O3 | | 0.02217 % |
| MgAl2O4 | 0.01732 % | 0.13288 % |

Für die Elemente *Sc* und *Y*, welche nicht in den JANAF-Tabellen enthalten sind, wurden mit Hilfe einer Demo-Version des kommerziellen Programms COACH thermochemische Daten erhalten. Die anderen thermochemischen Daten stammen aus dem NIST Chemical Webbook (JANAF-Tabellen) und wurden mit einem dazu entwickelten FORTRAN-Programm automatisch verarbeitet, welches selbst wieder FORTRAN-Quelltext mit den Formeln für c_P , H , S und G (beim Referenzdruck) erzeugt. Dazu mußten jeweils

die Ergebnisse der Suche der thermochemischen Daten einer Substanz im Chemical Webbook als Text-Datei abgespeichert werden (für jede Substanz eine separate). Es ist einfach möglich, neue Substanzen hinzuzufügen. Bestandteil der Software ist außerdem eine Subroutine, welche die chemische Formel einer Verbindung liest und daraus die Stöchiometrie-Koeffizienten $\nu_{ca}^{(l)}$ bildet. Ein weiteres FORTRAN Programm extrahiert aus einer Tabelle physikalischer Daten aller Elemente (Webseite des National Institute of Standards) die molaren Massen der benötigten Elemente und bildet daraus FORTRAN-Quelltext (DATA-Anweisungen). Mit diesem Inventarium, und einigen in Maple geschriebenen Hilfsprogrammen zur Erzeugung des nicht-linearen Gleichungssystems der Massenbilanzen mit der Normierungsbedingung (3.89), kann die Datenbasis flexibel erweitert werden. Es wäre beispielsweise sehr interessant, die Elemente der Platingruppe *Pt, Ir Os Au* und einige ihrer Verbindungen mit aufzunehmen, um so ihre Konzentrationen in Kondensaten theoretisch vorherzusagen.

Nun wird ein anderes Beispiel betrachtet. Man mischt Sauerstoff derart hinzu (in der Gasphase), daß er ausreichen würde, um Fe_2O_3 und H_2O in bestimmtem Verhältnis zu bilden, würde aller Sauerstoff derart konsumiert. Man betrachte dazu schematisch die folgende Stoffmengenbilanz (dies ist keine chemische Reaktion)



was einer Parametrisierung des Verhältnisses $H_2O : Fe_2O_3 = x/(1 - x)$ entspricht (wenn x den Wertebereich $0 \dots 1$ durchläuft, ändert sich $H_2O : Fe_2O_3$ zwischen 0 und ∞). Die Häufigkeit von O relativ zu Fe wird daraus wie folgt erhalten $O : Fe = (3/2 - x)/(1 - x)$, und dies legt auch die von H relativ zu O fest, d. h. $H : O = 2x/(3/2 - x)$. Zunächst betrachten wir den Fall $x = 0.5$, siehe dazu die Tabelle auf der folgenden Seite. Es gibt zwar immer noch sehr viel Fe und Ni , jedoch sind jetzt wesentlich mehr Ca , Mg , und Al in Verbindungen vorhanden, zumindest bei der niedrigeren Kondensationstemperatur von 3500K. Man müßte in Gewichtsprozent umrechnen, um mit der von [Kyte und Bohor \(1995\)](#) (Tabelle 1) gefundenen chemischen Komposition der Spherulen vergleichen zu können, welche die K/T Schicht charakterisieren, und nach Entfernung von Lehm als refraktärer Bestandteil übrigbleiben. Diese enthalten 52.84 – 75.07 Massenprozent Fe_2O_3 . Es ist aber auch klar, daß metallisches Fe später oxydiert. Außerdem finden sich bis maximal 5.45 Massenprozent NiO (ursprünglich metallisches Ni wird auch oxydiert). Es gibt außerdem bis 13.6 – 21.6 Massenprozent MgO in den aus der Tiefsee stammenden K/T Spherulen, die aus Furlo in Italien enthalten etwa 9.8. Für Al_2O_3 fanden Kyte und Bohor 8.5 Massenprozent in Tiefsee-Bohrungen, sowie 3.5 in Italien. Jedoch, muß man den Al -Anteil

100 KAPITEL 3. DIE GASWOLKE: DYNAMIK UND KONDENSATION

in $MgAl_2O_4$ -Spinel und Al_2O_3 , z.B. bei 3500K, zusammenrechnen. Es ist nun zumindest plausibel, wie solche Kompositionen, wie sie in den Spherulen der K/T Schicht auftreten, bei der Kondensation entstehen. Allerdings wird die Vermutung von Kyte und Bohor, daß diese Materialien bei der Abkühlung einer silikatischen Schmelze entstanden, hier nicht geteilt.

| $x = 0.5$ | $T = 4000 \text{ K}, \rho = 6.041 \text{ kg m}^{-3}$ | $T = 3500 \text{ K}, \rho = 1.295 \text{ kg m}^{-3}$ |
|-----------|--|--|
| Na | 0.09845 % | 0.02376 % |
| Mg | 1.21556 % | 0.37187 % |
| Al | 1.23473 % | 0.67171 % |
| Si | 1.28914 % | 0.34221 % |
| P | 0.03260 % | 0.01571 % |
| S | 1.83159 % | 0.09654 % |
| K | 0.01388 % | |
| Ca | 0.27867 % | 0.09654 % |
| Ti | 0.08862 % | 0.04298 % |
| V | 0.06280 % | 0.04514 % |
| Cr | 0.54079 % | 0.44911 % |
| Mn | 0.18160 % | 0.08127 % |
| Fe | 56.10697 % | 45.18544 % |
| Ni | 4.88035 % | 4.47841 % |
| Cu | 0.02645 % | 0.01821 % |
| CaO | 6.08354 % | 7.32986 % |
| CaS | 4.53604 % | 8.99169 % |
| FeO | 5.13456 % | 4.00432 % |
| FeS | 5.03635 % | 4.34368 % |
| MgO | 5.70661 % | 5.29560 % |
| MgS | 0.55209 % | 0.56175 % |
| TiN | 0.01174 % | |
| NiS | 0.20592 % | 0.15352 % |
| TiO | 1.78402 % | 2.37520 % |
| VO | 0.18659 % | 0.22736 % |
| SiO2 | 0.19054 % | 0.26304 % |
| TiO2 | 0.31631 % | 0.67335 % |
| Al2O3 | 1.01029 % | 5.74404 % |
| MgSiO3 | 0.10078 % | 0.16204 % |
| MgTiO3 | 0.08480 % | 0.22273 % |
| Ti2O3 | 0.02685 % | 0.09122 % |
| MgAl2O4 | 1.13173 % | 7.24793 % |
| Mg2SiO4 | | 0.01075 % |

Schließlich wird noch ein Beispiel mit $x = 0.6$ gerechnet, siehe die Tabelle auf der folgenden Seite.

| $x = 0.6$ | $T = 4000 \text{ K}, \rho = 4.999 \text{ kg m}^{-3}$ | $T = 3500 \text{ K}, \rho = 0.8300 \text{ kg m}^{-3}$ |
|----------------------------------|--|---|
| Na | 0.08835 % | 0.01671 % |
| Mg | 0.93940 % | 0.22923 % |
| Al | 0.81667 % | 0.36394 % |
| Si | 0.56976 % | 0.11521 % |
| P | 0.02097 % | |
| S | 1.96710 % | 0.41517 % |
| K | 0.01233 % | |
| Ca | 0.19587 % | 0.05612 % |
| Ti | 0.03953 % | 0.01345 % |
| V | 0.02904 % | 0.01297 % |
| Cr | 0.45884 % | 0.30063 % |
| Mn | 0.16371 % | 0.05740 % |
| Fe | 44.44647 % | 27.91242 % |
| Ni | 4.43086 % | 3.15645 % |
| Cu | 0.02389 % | 0.01292 % |
| CaO | 8.42158 % | 8.60487 % |
| CaS | 3.42412 % | 4.88616 % |
| FeO | 8.01101 % | 4.99551 % |
| FeS | 4.28484 % | 2.50834 % |
| MgO | 8.68589 % | 6.59240 % |
| MgS | 0.45822 % | 0.32371 % |
| NiS | 0.20079 % | 0.10115 % |
| TiO | 1.56737 % | 1.50094 % |
| VO | 0.16992 % | 0.13196 % |
| SiO ₂ | 0.32668 % | 0.36117 % |
| TiO ₂ | 0.54732 % | 0.85932 % |
| Al ₂ O ₃ | 3.37672 % | 13.88903 % |
| MgSiO ₃ | 0.26298 % | 0.27697 % |
| MgTiO ₃ | 0.22333 % | 0.35386 % |
| Ti ₂ O ₃ | 0.04082 % | 0.07357 % |
| MgAl ₂ O ₄ | 5.75742 % | 21.81708 % |
| Mg ₂ SiO ₄ | 0.01813 % | 0.02288 % |
| MgTi ₂ O ₅ | | 0.01032 % |

Diese relativ kleine Änderung des Sauerstoff- (und Wasserstoff-) Anteils hat recht große Auswirkungen. Nun ist bei der geringeren Kondensationstemperatur von 3500 K die chemische Zusammensetzung nicht mehr vom Eisen und seinen Verbindungen dominiert, sondern es finden sich *Al-* *Mg-* und *Ca-* Verbindungen in größerer Konzentration. Leider ist das vorliegende Modell nicht dazu geeignet, vorherzusagen, welche Mineralien sich in der Flüssig-

keit bilden, nachdem sie abkühlt. Es fällt bei allen diesen Beispielen auf, daß nur ein geringer Teil an Silikaten in der Flüssigkeit auftritt. Jedenfalls werden diese nicht in den ersten Kondensaten vorhanden sein, was an dem hier untersuchten Temperaturbereich liegt. Bei niedrigeren Temperaturen muß man auch eine Vielzahl von festen Phasen berücksichtigen, und dafür ist das vorliegende Programm noch nicht geeignet. Die thermodynamischen Eigenschaften von „meteoritischem“ Dampf erlauben keine schnelle Abkühlung, und es dauert mehrere Minuten, bei einem Einschlag der Chicxulub-Skale, bis die Gastemperatur unter 2000 K gefallen ist.

Realistische thermodynamische Wege können ohne hydrodynamische Simulationen nicht berechnet werden, so sind die Angaben in diesem Abschnitt vorläufiger Natur (siehe jedoch Kapitel 4, Abschnitt 4.3.8 für eine hydrodynamische Simulation, allerdings ohne Kondensation). Es wurde deutlich, daß bestimmte chemische Zusammensetzungen (z.B. hohes Vorkommen von Fe) auf sehr einfache Weise beim Einschlag von Meteoriten mit CI-chondritischer Zusammensetzung zu erklären ist, wenn kein zusätzlicher Sauerstoff vorhanden war, und das eventuell hinzukommende Bodenmaterial ähnlich aufgebaut ist. Dies dürfte zur Zeit der Entstehung der terrestrischen Planeten der Fall gewesen sein. Die Fe - und Ni -haltigen Kondensattröpfchen werden bei der Akkretion der Planeten, wenn diese eine genügend hohe Masse erreicht haben, in großen Mengen gebildet. Kondensation bei Hochgeschwindigkeitseinschlägen ist ein Prozeß der chemischen Fraktionierung. Die zuerst gebildeten Kondensate haben eine größere Chance, wieder herunterzufallen, als zu späterem Zeitpunkt (und bei viel niedrigeren Gasdichten) entstehende. Sie wachsen auch zu Tropfen mit größerem Durchmesser an. Die Fallgeschwindigkeit an der Oberfläche der entstehenden Planeten, in Kombination mit der zufälligen Geschwindigkeit der Planetesimale sollte dafür aber zum Verdampfen ausreichen. Weiterhin ist die Bildung von Fe - und Ni -haltigen Spherulen eine Begleiterscheinung terrestrischer Einschläge von chondritischem Material, ohne daß ein Eisenmeteorit (oder -Asteroid) beteiligt gewesen sein muß.

Kapitel 4

Numerische Methoden

4.1 Exitierende Methoden: kritische Bestandsaufnahme

[Melosh \(2003\)](#) reflektiert über die Schwierigkeiten der numerischen Behandlung von Hochgeschwindigkeits-Einschlägen: „It has taken squadrons of physicists in the United States, Russia and elsewhere nearly 50 years to come up with computers and three-dimensional computer codes that can adequately treat the effects of impacts and explosions under relatively simple conditions in which self-gravity is not important..“.

Eine historische Betrachtung der Entwicklung von numerischen Programmen zu Hochgeschwindigkeitseinschlägen findet man beispielsweise in den Übersichtsartikeln von [Johnson und Anderson \(1987\)](#), [Anderson \(1987\)](#) sowie in der Monographie „impact and explosion cratering“ ([Roddy u. a., 1977](#)), wenn auch dort Details der Verfahren nur kurz beschrieben werden. Dies ist verständlich, wurden doch mit ähnlichen Programmen Kernwaffentests ausgewertet, oder das Eindringverhalten ballistischer Projektile untersucht; so wird das vom Sandia National Laboratory in Albuquerque, New Mexico entwickelte Eulersche Multi-Material-Programm CTH ([McGlaun, Thompson, Elrick , 1990](#)) heute als „legacy“ (Hinterlassenschaft) eingestuft. Diese Programm ist als eine Art Standard für Eulersche Multi-Material Hydrodynamik bei Hochgeschwindigkeits-Strömungen anzusehen. Dabei wurde während der letzten vierzehn Jahre CTH hauptsächlich auf Supercomputer portiert, ohne den Algorithmus grundsätzlich zu verändern (soweit dies aus sekundären Publikationen ersichtlich ist, z. B. [Littlefield und Oden \(2004\)](#)) und man hat viel Aufwand in Parallelisierung der Software, in spezielle Materialmodelle und Zustandsgleichungen investiert. Allgemein werden solche Programme

als „hydrocode“ bezeichnet, wenn auch inzwischen über die reine Hydrodynamik hinausgehende physikalische Effekte wie Plastizität und Materialzerstörung berücksichtigt werden. Mit CTH und seinem Vorgängerprogramm CSQ (Thompson , 1988) ist beispielsweise die Entstehung des Chicxulub-Kraters sehr detailliert simuliert worden (Pierazzo u. a. , 1998; Pierazzo und Melosh , 1999). Jedoch wurden keine sehr langen Zeiten erreicht (ca. 60 charakteristische Zeiten D/v_i , wenn D den Durchmesser des Impaktors und v_i die Einschlagsgeschwindigkeit bedeuten), d.h. nicht bis zum Beginn des Krater-Kollapses. Längere Simulationszeiten mit CTH erreichten kürzlich O’Keefe u. a. (2001), wobei auch komplizierte Materialmodelle einbezogen wurden.

Die ersten umfangreichen Berechnungen planetarer Einschläge auf dem Mond findet man nach den bemannten Mondlandungen in den siebziger Jahren (O’Keefe und Ahrens , 1975, 1976). Dabei wurde schon eine Multi-Material-Methode (das Programm HELP) verwendet, welche eine Eulersche Formulierung benutzt (Hagemann und Walsh , 1970), allerdings ist keine Publikation zum Algorithmus in referierten Zeitschriften zu finden. Numerische Methoden zur Lösung der hydrodynamischen Gleichungen existieren zwar schon seit der Anfangszeit der Computer, z. B. (Godunov , 1959), jedoch stellen komplizierte nichtlineare Zustandsgleichungen, Hyperschallströmungen und bewegliche Materialgrenzen, wie sie bei der Simulation von kosmischen Einschlägen auftreten, eine Häufung von Komplikationen dar. Mit wenigen Ausnahmen sind allenfalls Grundprinzipien der numerischen Verfahren veröffentlicht worden. Das Programm SALE (Hirt, Amsden, Cook , 1997) fand eine gewisse Verbreitung, es handelt sich dabei jedoch um keine Multi-Material- Methode, und frühe Anwendungen benutzten den Lagrange-Modus (Nolan u. a. , 1996). Multi-Material Behandlung im Euler-Modus wurde später von B.A. Ivanov in SALE implementiert (Wünnemann und Ivanov , 2003), und damit sind ausgedehnte Berechnungen zum Krater-Kollaps entstanden. Probleme der Diffusivität der Impuls-Advektion in SALE sind lange bekannt (Benson , 1992). Dadurch werden Geschwindigkeiten des Auswurfmaterials schwer bestimmbar, besonders in einer Multi-Material-Variante an Gitterpunkten, welche von wenig dichtem Material umgeben sind. SALE verwendet künstliche Viskosität und neigt wie alle Verfahren mit Stützstellen der Geschwindigkeit and den Eckpunkten der Zellen zur sogenannten „hourglass“-Instabilität. Der Autor hat selbst mit SALE begonnen (Ivanov, de Niem, Neukum , 1997) und eine Multi-Material-Erweiterung des Algorithmus versucht, jedoch mit unbefriedigendem Ergebnis. SALE besitzt bereits die Fähigkeit, tensorielle Spannungskräfte und plastisches Verhalten zu simulieren, und neue Materialmodelle erfordern vergleichsweise minimalen Aufwand. Man muß allerdings verstehen, daß elastoplastische Materialmodelle bereits bei vergleichsweise geringer Deformation (einige 10^{-2}) nichtlineare

Spannungen erzeugen. Wegen der „hourglass“-Moden und anderer Unzulänglichkeiten in der Behandlung der plastischen Zwangsbedingungen sind die numerischen Fehler größer als der gesamte Variationsbereich der nichtlinearen Deformations-Spannungs-Beziehung in Materialmodellen.

Anlässlich des spektakulären Eintretens von Fragmenten des Kometen Shoemaker-Levy 9 in die Jupiter-Atmosphäre erprobten verschiedene Gruppen die Tauglichkeit allgemein zugänglicher Hydrodynamik-Methoden aus der Astrophysik, wie ZEUS3D (Mac Low und Zahnle , 1994) und SPH-Algorithmen (Takata u. a. , 1994). Die wenigen Eulerschen Multi-Material Simulationen (Crawford u.a. , 1994; Nemtchinov u.a. , 1997) sind jedoch wieder mit einer Ausnahme (siehe Shuvalov, Artem'eva und Kosarev (1999)) mit undokumentierten Methoden geschehen, und außerdem ist die Fragestellung nicht unbedingt mit der Kraterentstehung in einem viel dichteren Medium zu vergleichen.

Bei Hochgeschwindigkeits-Einschlägen handelt es sich um Hydrodynamik mit freien Oberflächen. Sowohl an der Oberfläche des getroffenen, als auch an der des einschlagenden Körpers finden Wechselwirkungen statt, welche entweder zu Phasenübergängen wie Verdampfung und Schmelzen (siehe Kapitel 3) oder, bei niedrigen Energien, zu Spallation, Kavitation und anderen Phänomenen unter Spannung führen. Es treten wenigstens zwei verschiedene kompressible Medien auf, und bei Gasentstehung oder in Anwesenheit einer Planetenatmosphäre berühren sich bewegliche Mediengrenzen mit enormen Unterschieden in der Kompressibilität (typischerweise bis zu 4 Größenordnungen, bei einem Einschlag auf Kometen sogar bis zu 12 Größenordnungen). Bei Berührung zweier Medien mit unterschiedlicher Dichte tritt unter Beschleunigung die bekannte Rayleigh-Taylor-Instabilität auf, welche im Laufe der Zeit eine komplexe Form der Grenzen mit selbstähnlicher Struktur und chaotischem Charakter bildet (siehe z.B. Koryzansky, Zahnle, Mac Low (2002)). Wegen der finiten Kantenlänge des numerischen Gitters, oder, wie bei Gitter-freien Methoden (z.B. SPH, Gingold und Monaghan (1977)) wegen der wenigen repräsentativen Teilchen, wird jede numerische Simulation an gewisse Grenzen stoßen. Es herrscht eine ähnliche Situation wie bei Turbulenz-Phänomenen, und turbulente Strömungsfelder treten ebenfalls auf. Der Bereich der Strömungsgeschwindigkeiten in einer numerischen Lösung des Kraterentstehungsproblems reicht von mehrfachem Überschall (in bezug auf die Schallgeschwindigkeit im Bodenmaterial) bis zu Endgeschwindigkeiten im Bereich einiger Zentimeter pro Sekunde für Auswurfsmaterial. Wenn auch lokal Gleichgewichts-Thermodynamik angenommen werden kann, und Wärmeleitung, Diffusion und chemische Reaktionen weitgehend vernachlässigt werden (Miller und Puckett , 1996), so handelt es sich trotzdem um einen sehr großen Variabilitätsbereich der thermodynamischen

Größen. Die thermodynamische Zustandsgleichung muß im gesamten Variationsbereich von Dichte und innerer Energie gewisse Konsistenzbedingungen erfüllen (vgl. Kapitel 2), und außerdem verschiedene Phasen beschreiben.

Diese Bemerkungen mögen genügen, um die Schwierigkeit der mathematischen Behandlung mit numerischer Hydrodynamik aufzuzeigen. Es ist zwar einleuchtend, daß man mindestens Zwei-Material-Hydrodynamik zur Beschreibung eines Einschlagsvorgangs benötigt (auch Vakuum wie an der Mondoberfläche ist in diesem Sinne ein „Material“), jedoch sind einige Prinzipien numerischer Methoden davon unabhängig, und diese sollen zunächst beschrieben werden. In einem späteren Abschnitt werden die Besonderheiten der Multi-Material-Hydrodynamik behandelt.

4.2 Ein-Material-Probleme

4.2.1 Gitter-basierte und Gitter-freie Methoden, Euler, Lagrange und ALE Formulierung

Eine numerische Lösung der hydrodynamischen Gleichungen berechnet Approximationen der Werte der Zustandsvariablen an bestimmten diskreten Punkten (Knoten) bzw. ihre Mittelwerte in sogenannten Zellen. Neben Eulerschen Verfahren mit unbeweglichem Gitter gibt es Lagrange-Methoden, wo sich das Gitter mit der lokalen hydrodynamischen Geschwindigkeit mitbewegt. Eine Zwischenstellung nehmen die sogenannten ALE (Arbitrary Lagrangean Eulerian) Methoden ein, wo nach einem oder mehreren Schritten des Lagrange-Verfahrens ein neues festehendes Eulersches Gitter erzeugt wird (automatisch oder Benutzer-unterstützt), letzteres bezeichnet man als „rezone“ oder „re-map“, siehe z. B. [Hirt, Amsden, Cook \(1997\)](#). Diese Verfahren erlauben eine beliebige Eigengeschwindigkeit des Gitters. Die ALE-Technik ist auch ein nützliches Vehikel, um die Flußfunktionen bzw. die Diskretisierung rein Eulerscher Methoden abzuleiten, falls unterschiedliche Materialien innerhalb der Gitterzelle betrachtet werden.

Es ist immer möglich, aus einer beliebigen zweidimensionalen Punktmenge ein Gitter aus Dreiecken aufzubauen, man spricht dabei von Triangulation; die geometrisch optimale Delaunay-Triangulation ist die bekannteste für aerodynamische Anwendungen ([Preparta und Shamos, 1985](#)). So erhält man ein unstrukturiertes Gitter. Vor allem für technische Umströmungsprobleme und Belastungsanalysen mit finiten Elementen sind heute unstrukturierte Gitter üblich. Dynamische nichtlineare Methoden mit finiten Elementen werden in der Industrie zu Deformationsanalysen beim starken Verformungen, z.B. für den Crash-Test bei Fahrzeugen (und das Entfalten von Airbags) und

in der Luft- und Raumfahrt eingesetzt (Hallquist, 1998). Starke Deformationen bei diesen Problemen sind denen bei einem planetaren Einschlag noch nicht vergleichbar, werden doch (Luft-) Fahrzeuge nicht bis zum Verdampfen oder dem Auftreten einer Rayleigh-Taylor-Instabilität beansprucht (wenigstens sollte dies beim kontrollierten Wiedereintritt eines Raumfahrzeugs nicht geschehen). Auch das zur Triangulation duale Gitter, in dem Elementarzellen aus den Seitenhalbierenden der Dreiecke gebildet werden, ist gebräuchlich, die kleinsten Bausteine nennt man Voronoi-Zellen, und die sogenannte Free-Lagrange Methode (Howell und Ball, 2002) beruht auf solch einer Konstruktion. Die Free-Lagrange Methode nimmt eine Art Zwischenstellung ein und ähnelt trotz des vorhandenen Gitters Methoden mit Pseudo-Teilchen. Sie wäre besonders geeignet, wenn Eigengravitation eine Rolle spielt, so für das von Michel u. a. (2001) untersuchte Problem der Asteroiden-Kollision. Da es sich außerdem um eine finite Volumen Methode handelt, und keine künstliche Dissipation vorhanden ist, wäre eine Simulation zur Einschlagstheorie für die Entstehung des Mondes mit Free-Lagrange Methoden von hohem Interesse.

Die traditionelle Diskretisierung partieller Differentialgleichungen in der Hydrodynamik verwendet reguläre Gitter mit konstanter Topologie, d.h. ein Knotenpunkt hat immer gleiche Anzahl von Nachbarn, siehe z.B. Hirsch (1988). Mit Hilfe von konformen Abbildungen kann man aus einem äquidistanten rechteckigen Gitter in kartesischen Koordinaten ein beliebiges krummliniges, jedoch lokal orthogonales Netz erzeugen. Lokal orthogonale Gitter haben weitaus bessere Approximationseigenschaften als unstrukturierte. Mit dieser Technik haben Nolan u. a. (1996) das reguläre Gitter des Programms SALE verändert, um Einschläge auf Asteroiden zu untersuchen. Gitter-freie Methoden verwenden repräsentative Teilchen, und wurden für planetare Einschläge zuerst von Benz und Asphaugh (1994) verwendet. Diese Pseudo-Teilchen wechselwirken über künstliche Zweikörperkräfte und bilden dadurch ein der Hydrodynamik äquivalentes Verhalten nach. Dies wurde von den Protagonisten der Methode seit Langem behauptet (Gingold und Monaghan, 1977), erst kürzlich ist die Konvergenz im Sinne der Approximation der Lösung der hydrodynamischen Gleichungen durch ein Vielteilchen-System mit künstlicher Zweier-Wechselwirkung mathematisch bewiesen worden (Ben Moussa und Vila, 2000). Für Gitter-basierte Methoden existieren hingegen zahlreiche mathematische Untersuchungen zur Konvergenz, und insbesondere zur Approximation von sogenannten schwachen Lösungen, d.h. Stoßwellen und Kontakt-Unstetigkeiten. Jedoch belegen numerische Experimente die Fähigkeit der SPH-Methoden, Stoßwellen zu beschreiben, zumindest bei entsprechend hoher Auflösung (Monaghan und Gingold, 1983). Ein großer Vorteil der Pseudo-Teilchen ist die einfache Behandlung von Eigengravitation, daher ist die Methode inzwischen in der Astrophysik recht verbreitet,

so zur Simulation von Galaxien-Entstehung und der Wechselwirkung kollidierender Neutronensterne und anderer kompakter Objekte, zur Berechnung der Erzeugung von Gravitationswellen (Faber und Rasio , 2002) usw. Leider besitzen SPH-Algorithmen die sogenannte Spannungs-Instabilität (tension instability, Sweegle, Hicks und Attaway (1994)), welche sich kaum auf einfache Weise beseitigen läßt, ohne daß Benz und Asphaugh (1994) oder Michel u. a. (2001) dies berücksichtigten. Die besten Algorithmen der Berechnung der Zweierwechselwirkungen bedeuten einen Rechenaufwand (operation count) der Ordnung $N \ln(N)$ bei N Teilchen, jedoch wird dabei nur ein Bruchteil aller Teilchenpaare exakt ausgewertet, ähnlich einer Stichprobe bei Meinungsumfragen. Das muß angesichts des langreichweitigen Charakters der Gravitationskräfte die globale Energie- und Impulserhaltung z.B. bei der Simulation der Kollision von Asteroiden (siehe Michel u. a. (2001)) stark beeinflussen. Sehr kleine Energiepartitionen in Langzeit-Simulationen dominieren aber das Skalierungsverhalten bei der Zerstörung von Asteroiden, d. h. den Übergang von Festigkeits-dominiertem zu Gravitations-dominiertem Skalierungsverhalten (strength to gravity transition). Letzteres ist ein permanentes Problem beim Verständnis der Größenverteilung von Asteroiden (de Niem und Werner , 2002b) und Kuiper-Gürtel Objekten (KBO).

4.2.2 Explizite und implizite Methoden, dimensionale Zerlegung, finite Volumen

In dieser Arbeit werden ausschließlich Eulersche Verfahren mit regulärem Gitter und konstanter Topologie betrachtet. Außer beim Vorhandensein von Eigengravitation ist dadurch die bestmögliche Approximation und Auflösung bei ausreichend langen Simulationszeiten gegeben. Verfahren zur Lösung der hydrodynamischen Differentialgleichungen sind entweder explizit oder implizit. Bei expliziten Verfahren sind Approximationen der Lösungsgrößen zu einem Anfangszeitpunkt gegeben, und während eines Zeitschritts werden nur gegebene Werte in den Gitterpunkten und am Rand des Rechengebiets benutzt, um die numerischen Flußfunktionen zu berechnen. Im Gegensatz dazu enthalten in impliziten Methoden die numerischen Operatoren während eines Zeitschritts auch Werte für die numerischen Größen auf dem Gitter zum nächsten Zeitpunkt, siehe z. B. Oran und Boris (1987). Es ist damit mindestens noch eine Iteration (Prediktor-Korrektor-Verfahren) oder aber eine Lösung von Differenzgleichungen zweiter Ordnung im Raum verbunden. Implizite Verfahren erlauben längere Zeitschritte und sind robuster, bei geringfügig höherem Aufwand (Oran und Boris , 1987). In dieser Arbeit werden beide Arten von Verfahren betrachtet. Da es sich bei Einschlägen immer

um räumlich mehrdimensionale Vorgänge handelt, muß man minimal zwei räumliche Koordinaten verwenden. Wie schon von [Yanenko \(1971\)](#) gezeigt wurde, kann man für mehrdimensionale Probleme die numerischen Operatoren in getrennten Zeitschritten für jede Dimension einzeln und nacheinander anwenden, ohne damit sehr große Fehler zu erzeugen. Allerdings muß zur Vermeidung von Asymmetrien die Reihenfolge der einzelnen Richtungen bei jedem Zeitschritt entsprechend vertauscht werden. Die Alternative dazu, auch als 'dimensionally unsplit' bezeichnet, erfordert in der Regel weitaus mehr Aufwand. Beispielsweise ist in impliziten Methoden ein schwach besetztes (sparse) Gleichungssystem zu lösen, welches über alle diskreten räumlichen Koordinatenwerte läuft (siehe z.B. [Oran und Boris \(1987\)](#)). Auch in expliziten Methoden ist oft der logisch viel einfachere 'dimensionally split approach' erfolgreicher. So existieren keine mehrdimensionalen Lösungen von Riemann-Problemen, wie sie die Godunov-Methode benötigt ([LeVeque , 1997](#)).

Innerhalb der Gitter-basierten Verfahren zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen kann man wieder drei Gruppen unterscheiden: Finite Differenzen (siehe z. B. [Hirsch \(1988\)](#)), finite Volumen ([LeVeque , 1990](#)) oder finite Elemente (eine Übersicht gibt [Benson \(1992\)](#)). Methoden mit finiten Differenzen approximieren die partiellen Differentialquotienten an gewissen Stützstellen mit Hilfe von elementaren numerischen Operatoren, wobei sogenannte Vorwärts-, Rückwärts-, zentrale und auch kompakte Differenzen vorkommen. Ein Vorteil dieser Formulierung ist die Möglichkeit sehr weitgehender Analysen zur Stabilität und Genauigkeit der Algorithmen. Jedoch werden physikalische Erhaltungssätze unter Umständen verletzt. Finite-Volumen-Methoden gehen von der Vorstellung aus, daß die Mittelwerte (und eventuell auch Gradienten) physikalischer Lösungsgrößen in Gitterzellen oder Kontrollvolumen (control volume) vorgegeben sind, und daraus wird ihr Verhalten „rekonstruiert“. Da es sich bei der Hydrodynamik (für ein Material) um ein konservatives Gleichungssystem handelt, entsprechen den numerischen Werten räumliche Integrale der Dichten der Erhaltungsgrößen im Gebiet einer Gitterzelle, und die Beschreibung ist der Physik besser angepaßt. Außerdem enthält nur die integrale Formulierung der Hydrodynamik Lösungen mit Diskontinuitäten wie Stoßwellen und Kontakt-Unstetigkeiten ([LeVeque , 1990](#)). Die erwähnten Arten der Diskretisierung sind in der Weise äquivalent, daß sich Stabilitätskriterien z.B. von einer Finite-Differenzen in eine Finite-Volumen-Formulierung übertragen lassen.

Der Übersichtsartikel von [Benson \(1992\)](#) beschreibt sehr gründlich die Methode der finiten Elemente für „hydrocodes“, und darüber hinaus kann man wesentliche Details über andere Methoden entnehmen, die in rein Eulerschen oder Lagrange-Verfahren wichtig sind, wie z.B. Advektionsverfahren mit dualen Gittern. Funktionen physikalischer Größen innerhalb der Zelle,

hier als Element bezeichnet, sind als Interpolation in einer Entwicklung nach Basisfunktionen gegeben, wobei Stützstellen nicht nur an den Eckpunkten, sondern auch auf Oberflächen liegen können. Daher gibt es sehr viele Typen von möglichen „Elementen“, dieses Auswahlproblem ist noch nicht entschieden (Hallquist , 1998). Das Ziel, die Werte an den Stützstellen über einen Zeitschritt zu propagieren, wird dadurch erreicht, daß man eine integrale Form der hydrodynamischen Gleichungen bildet, wobei vor der Integration mit einer „beliebigen“ Funktion multipliziert wird. Das führt auf ein Variationsprinzip (Hallquist , 1998), und unter Ausnutzung der Orthogonalität der Basisfunktionen entsteht ein diskretes Gleichungssystem aus gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Zeitabhängigkeit, welches allerdings nicht automatisch in expliziter Form ist. Diese Methoden eignen sich sehr viel besser, um Probleme jenseits der idealen Hydrodynamik mit tensoriellen Spannungen und elastisch-plastischen Materialmodellen zu behandeln, jedoch müssen alle Materialien noch vergleichbare Dichten (d.h. die der kondensierten Phase) haben. Starke Stoßwellen stellen besondere Anforderungen und Einschlagsprobleme erfordern außerdem spezielle Techniken, weil unterschiedliche Körper individuelle Gitter aus Elementen besitzen. Durch sogenannte sliding interfaces muß verhindert werden, daß sich Elementen-Gitter zweier verschiedener Körper (Impaktor und Bodenmaterial) durchdringen (Benson und Okazawa , 2004). Wenn in der Frühphase eines kosmischen Einschlags Verdampfung und Schmelzen dominieren, sind diese Methoden kaum anwendbar, und daher fand keine Entscheidung zur Verwendung finiter Elemente statt.

4.3 Verfahren für Lösungen mit Stoßwellen

4.3.1 Godunov-Methoden

Konservative Godunov-Methoden haben sich mittlerweile zu einem Standard in der numerischen Hydrodynamik für aerodynamische und Verbrennungsprobleme mit Stoßwellen in Gasen entwickelt (LeVeque , 1990). Ihr besonderer Vorteil für Einschlagsprozesse besteht darin, daß keine numerische Viskosität benötigt wird, und außerdem vollständige Konservativität garantiert ist. Wo genaue Energie-Partitionen von Interesse sind, und Stoßwellen einen wesentlichen Teil der Energie transportieren, ist eine Godunov-Methode alternativen Verfahren überlegen. Godunovs ursprüngliche Methode war nur von erster Ordnung in der Approximation der Lösungsvariablen im Raum (Godunov , 1959), jedoch Methoden höherer räumlicher Genauigkeit wurden entwickelt, unter Beibehaltung der wesentlichen Idee, d. h. der Interpretation des nume-

rischen Flusses als Effekt der Ausbreitung von nichtlinearen Wellen, die aus einer beliebigen Unstetigkeit in den Lösungsvariablen an der Grenze zweier Gitterzellen entstehen. In einer Dimension lautet ein hyperbolisches System von Erhaltungsgleichungen (siehe z.B. [Warneke \(1999\)](#))

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0, \quad (4.1)$$

dabei sind x und t die räumliche und zeitliche Koordinate, und im Fall der Hydrodynamik ist der Zustandsvektor durch

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u, E), \quad (4.2)$$

gegeben, wobei ρ , u und $E = \rho(u^2/2 + \epsilon)$ die Massendichte, die Geschwindigkeit und die Energiedichte bedeuten, ϵ ist die spezifische innere Energie. Die (hydrodynamische) Flußfunktion lautet

$$\mathbf{F} = (\rho u, \rho u^2 + p, (E + p)u), \quad (4.3)$$

vervollständigt durch die Zustandsgleichung für den Druck $p = p(\rho, \epsilon)$. Die numerische Lösung als finite Volumen Methode wird dadurch erhalten, daß man zur integralen Schreibweise übergeht

$$\begin{aligned} & \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathbf{U}(t^{(n+1)}, x) dx - \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathbf{U}(t^{(n)}, x) dx = \\ & = \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \mathbf{F}(t, x_i) dt - \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \mathbf{F}(t, x_{i+1}) dt, \end{aligned} \quad (4.4)$$

wobei x_i und x_{i+1} die Knoten oder Grenzen einer Gitterzelle und $t^{(n)}$ und $t^{(n+1)}$ der Anfangs- und Endzeitpunkt sind. Mittelwerte der Zustandsgrößen kann man als zellenzentriert ansehen, und tragen halbzahlige Indizes. Sind die Mittelwerte der Zustandsgrößen in einer Gitterzelle durch

$$\mathbf{U}_{i+1/2} = \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathbf{U}(t^{(n)}, x) dx, \quad (4.5)$$

am Anfangszeitpunkt $t^{(n)}$ gegeben, ergeben sich also ihre Mittelwerte zum Ende des Zeitschritts $t^{(n+1)}$ durch die zeitgemittelte Flußdifferenz. Da der Fluß \mathbf{F} nur eine Funktion des Zustandsvektors \mathbf{U} ist, werden lediglich die Zustandsgrößen längs der Strahlen $x = x_i$ bzw. $x = x_{i+1}$ im Intervall $(t^{(n)}; t^{(n+1)})$ benötigt. Falls man eine (genäherte) Lösung des Problems besitzt, ist so eine numerische Flußfunktion dadurch zu konstruieren, daß man die Abhängigkeit der Näherungslösung an den Zellgrenzen als Funktion der Mittelwerte in endlich vielen Nachbarzellen $\mathbf{U}_{i-1/2+k}$, ($k = -p \dots p + 1$) „rekonstruiert“ ([LeVeque, 1990](#)). Es sollen aber nicht nur glatte, d.h. stetig-differenzierbare

Lösungen gut approximiert werden, sondern auch schwache (oder maßwertige) mit Diskontinuitäten (in physikalischer Terminologie solche mit Stoß- und Verdünnungswellen oder Kontakt-Unstetigkeiten).

Eine bekannte Näherungslösung mit der Eigenschaft, auch schwache Lösungen zu approximieren, ergibt sich aus dem sogenannten Riemann-Problem, mit einer Anfangsverteilung beliebiger Unstetigkeit der Zustandsgrößen an den Zellgrenzen x_i bzw. x_{i+1} , und konstanten Werten auf beiden Seiten der Diskontinuität. Auch Verallgemeinerungen für andere hyperbolische Systeme von Erhaltungsgrößen wurden entwickelt (LeVeque, 1997). Der spezielle Vorteil der Approximation mittels des Riemann-Problems ist, daß es eine Zeitintegration überflüssig macht, weil seine Lösung entlang von Strahlen ($(x - x_i)/t = \text{const}$) konstant bleibt: sie ist selbstähnlich bezüglich der Variablen $\eta = (x - x_i)/t$, siehe z. B. Hirsch (1988). Eine exakte (und trotzdem noch iterative) Lösung des Riemann-Problems ist zwar für die Zustandsgleichung eines perfekten Gases ($p = (\gamma - 1)\rho\epsilon$, $\gamma = \text{const}$) möglich, aber für nur geringfügig allgemeinere Zustandsgleichungen muß man sich mit Approximationen begnügen. Die Wellenausbreitungsmethoden (wave propagation methods) wurden meist für den näherungsweise Riemann-Löser von Roe (eine Quasi-Linearisierung, Roe (1981)) in der Gasdynamik dargestellt, siehe z. B. LeVeque (1997). Jedoch erfordert eine Erweiterung der Methode für die viel allgemeineren Zustandsgleichungen von Geomaterialien eine echte nichtlineare Lösung des Riemann-Problems, bei der keine quasi-lineare Darstellung der Jacobi-Matrix ($\partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{U}$) mehr möglich ist. Ein bekannter näherungsweise Riemann-Löser ist die HLLC-Methode (Toro, Spruce und Speares, 1994), welche in dieser Arbeit verwendet wird. Diese reproduziert nicht nur Stoß- und Verdünnungswellen, sondern auch Kontakt-Unstetigkeiten ohne Oszillationen in der numerischen Lösung. Materialgrenzen sind letztlich nichts anderes als Kontaktunstetigkeiten, so ist die HLLC-Methode besonders für Multi-Material-Verfahren geeignet. Bisher existieren allerdings keine praktisch verwendbaren (d. h. robusten und schnellen) Riemann-Löser für nichtkonvexe Zustandsgleichungen, d. h. solche mit wechsender Monotonie längs der Hugoniot-Kurve oder der Isentrope in p - ρ -Koordinaten, sodaß die Godunov-Methode noch nicht universell genug ist, etwa Prozesse mit Verdünnungsstößen (Zel'dovich und Raizer, 1967; Melnikoff und Plohr, 1989) zu beschreiben.

Die exakte Lösung des Riemann-Problems der Euler-Gleichungen besteht aus drei nichtlinearen Wellen (siehe z.B. LeVeque (1997)), getrennt durch Wellenfronten (siehe Abb. 4.1), welche sich mit den charakteristischen Geschwindigkeiten ($\lambda_L \leq \lambda_C \leq \lambda_R$) ausbreiten. Letztere sind im Fall glatter Lösungen Eigenwerte der Jacobi-Matrix ($\partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{U}$), d. h. Wurzeln des charak-

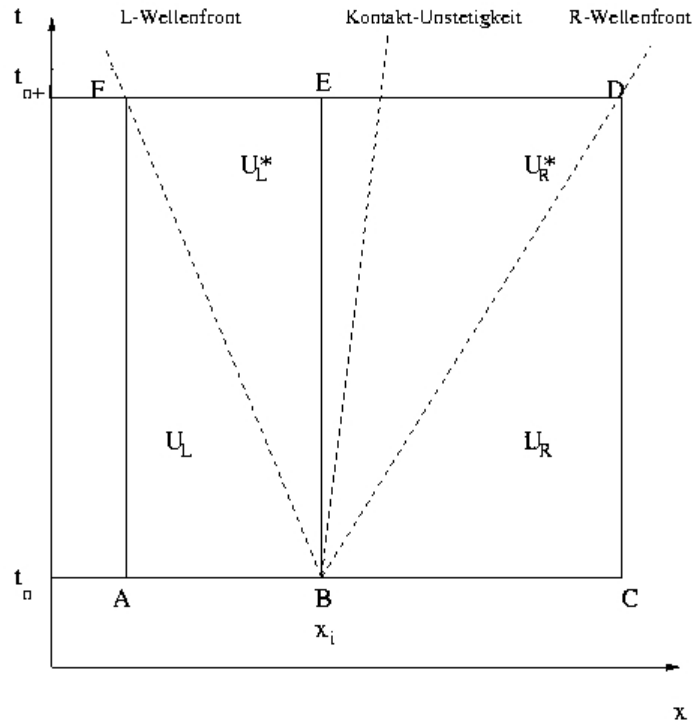


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Annahmen für das genäherte Riemann-Problem im HLLC-Löser von [Toro, Spruce und Speares \(1994\)](#).

teristischen Polynoms

$$(\lambda - u)((\lambda - u)^2 - c^2) = 0, \quad (4.6)$$

wobei c die Schallgeschwindigkeit ist. Für schwache Lösungen tritt an die Stelle von c^2 das Quadrat der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Stoßwelle relativ zur Strömung, d^2 . Die mittlere Wellenfront ($\lambda_C = u$) ist immer eine Kontakt-Unstetigkeit, hingegen sind die „linke“ und „rechte“ Front entweder Stoßwellen oder Verdünnungswellen. Man betrachte nun die „linke“ Welle. Handelt es sich um eine Verdünnungswelle, so ist ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit $\lambda_L = u_L - c_L$, wobei ein Index L sich auf die Anfangswerte am „linken“ Rand bezüglich der Anfangs-Unstetigkeit am Ort x_i bezieht. Im einfachsten Fall wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit mit Hilfe des Zustandsvektors $U_L := U_{i-1/2}$, d. h. des Mittelwertes in der „linken“ Zelle ausgerechnet. Bei einer Stoßwelle ist $\lambda_L = u_L - d_L$, wobei die Geschwindigkeit d_L der Stoßwelle geeignet abgeschätzt werden muß, was [Toro, Spruce und Speares \(1994\)](#) nur für ideale Gase angeben. Der Vektor des „Zwischen-

zustandes“ innerhalb der „linken“ Welle wird mit \mathbf{U}_L^* bezeichnet, und die HLLC-Methode nimmt ihn konstant an. Falls $\lambda_L \leq 0$ ist, gilt ein diskretes Erhaltungsgesetz (die Rankine-Hugoniot-Beziehungen); man betrachte dazu den geschlossenen Integrationsweg A-B-E-F-A für ein Linienintegral der hydrodynamischen Gln.(4.1) in Abbildung 4.1.:

$$\lambda_L(\mathbf{U}_L - \mathbf{U}_L^*) = \mathbf{F}_L - \mathbf{F}_L^*, \quad (4.7)$$

wobei $\mathbf{F}_L := \mathbf{F}(\mathbf{U}_L)$ (und entsprechend für den Zwischenzustand) gilt. Dies ist eine algebraische Gleichung für die Werte der Zustandsvariablen in der „linken“ Welle, falls λ_L bekannt ist. Diese Lösungen werden hier angegeben, um später mit Multi-Material Varianten vergleichen zu können, die erste Komponente entspricht der Massenerhaltung und ergibt

$$\rho_L^* = \rho_L \left(\frac{u_L - \lambda_L}{u_L - \lambda_C} \right), \quad (4.8)$$

außerdem setzt dies die Annahme $u_L^* = \lambda_C$ voraus. Die zweite Komponente führt auf den Wert des Drucks links der Kontakt-Unstetigkeit

$$p_L^* = p_L + \rho_L(\lambda_C - u_L)(\lambda_L - u_L), \quad (4.9)$$

und die Energiedichte ergibt sich aus der dritten Komponente der Gl.(4.7)

$$E_L^* = \frac{u^* p_L^* - u_L p_L + E_L(\lambda_L - u_L)}{\lambda_L - \lambda_C}, \quad (4.10)$$

und das ist mit Hilfe des Ausdrucks für p_L^* der Gleichung der Stoßadiabate (oder Hugoniot-Kurve)

$$\epsilon_L^* = \epsilon_L + \frac{1}{2}(p_L^* + p_L) \left(\frac{1}{\rho_L} - \frac{1}{\rho_L^*} \right), \quad (4.11)$$

äquivalent. Wie man sieht, werden Verdünnungswellen in Analogie zu Stoßwellen behandelt, dabei liegt der Zustandsvektor \mathbf{U}_L^* nicht „on shell“, d. h. erfüllt nicht die Zustandsgleichung, was keineswegs zu verharmlosen ist (u.U. Ursache für unphysikalische negative spezifische innere Energie in starken Verdünnungswellen). Analog dazu, wird in der HLLC-Methode die „rechte“ Welle betrachtet, d. h. auch hier gilt im Fall $\lambda_R \geq 0$

$$\lambda_R(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_R^*) = \mathbf{F}_R - \mathbf{F}_R^*, \quad (4.12)$$

wobei $\lambda_R = u_R + c_R$ für Verdünnungswellen bzw. $\lambda_R = u_R + d_R$ für Stoßwellen ist, und im einfachsten Fall bedeutet $\mathbf{U}_R := \mathbf{U}_{i+1/2}$ den Mittelwert des

Zustandsvektors in der „rechten“ Zelle. Wieder ergeben sich Lösungen der algebraischen Gl.(4.12),

$$\rho_R^* = \rho_R \left(\frac{u_R - \lambda_R}{u_R - \lambda_C} \right), \quad (4.13)$$

wobei stillschweigend $u_R^* = \lambda_C (= u_L^*)$ vorausgesetzt wurde und der Druck „rechts“ der Kontakt-Unstetigkeit ist

$$p_R^* = p_R + \rho_R(\lambda_C - u_R)(\lambda_R - u_R), \quad (4.14)$$

sowie die Energiedichte

$$E_R^* = \frac{u^* p_R^* - u_R p_R + E_R(\lambda_R - u_R)}{\lambda_R - \lambda_C}. \quad (4.15)$$

Es gilt auch hier für ϵ_R^* die Gleichung einer Stoßadiabate

$$\epsilon_R^* = \epsilon_R + \frac{1}{2}(p_R^* + p_R) \left(\frac{1}{\rho_R} - \frac{1}{\rho_R^*} \right). \quad (4.16)$$

Bereits Abschätzungen für $\lambda_{L,C,R}$ reichen aus, um dann die numerische Flußfunktion mit Hilfe dieser algebraischen Beziehungen zu erhalten. Die Originalarbeit (Toro, Spruce und Speares, 1994) macht Vorschläge für solche Abschätzungen, allerdings nur für ideale Gase.

In der exakten Lösung des Riemann-Problems gilt außerdem noch die Sprungbedingung an der Kontakt-Unstetigkeit

$$\lambda_C(\mathbf{U}_L^* - \mathbf{U}_R^*) = \mathbf{F}_L^* - \mathbf{F}_R^*, \quad (4.17)$$

wegen der weiter oben gemachten Voraussetzung $u_L^* = \lambda_C = u_R^*$ ist die erste Komponente trivial, die zweite Komponente zu $p_L^* = p_R^*$ äquivalent, und die dritte ist danach identisch erfüllt. Wenn man dies zusätzlich fordert, entsteht ein Gleichungssystem zur Bestimmung von p^* und $u^* := \lambda_C$ (Godunov, 1959)

$$u^* = \frac{p_L - p_R + u_L A_L + u_R A_R}{A_L + A_R}, \quad (4.18)$$

$$p^* = \frac{p_R A_L + p_L A_R + A_L A_R (u_L - u_R)}{A_L + A_R}, \quad (4.19)$$

mit den Abkürzungen

$$A_L := \rho_L(u_L - \lambda_L), \quad A_R := \rho_R(\lambda_R - u_R). \quad (4.20)$$

Dies befreit zumindest davon, eine Abschätzung für λ_C zu konstruieren, außerdem hat es noch einige nützliche Eigenschaften zur Folge (siehe weiter

unten). Wenn man aber für Stoßwellen die Gültigkeit der Zustandsgleichung fordert, ist ein Iterationsverfahren notwendig (s.u.), welches nur endliche numerische Genauigkeit erreicht, und es ist klar, daß Aufrufe der Zustandsgleichung bei realen Materialien sehr viel Zeit kosten.

Wie (Toro, Spruce und Speares, 1994) zeigten, muß man für Überschallströmungen eine der Relationen (4.7, 4.12) durch eine kompliziertere ersetzen, z. B. im Fall $\lambda_L < \lambda_C < \lambda_R < 0$ gilt

$$\begin{aligned} (\lambda_R - \lambda_C)\mathbf{F}_R^* &= \lambda_R \left[1 - \frac{\lambda_C}{\lambda_R} \mathbf{F}_L^* \right] + \\ &+ \lambda_C \left[\lambda_R (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L) + \frac{\lambda_R}{\lambda_L} \mathbf{F}_L - \mathbf{F}_R \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die andere Relation Gl.(4.7) ist nach wie vor gültig, und dadurch ergibt sich

$$(\lambda_R - \lambda_C)\mathbf{F}_R^* = \lambda_C [\lambda_R \mathbf{U}_R - \mathbf{F}_R] + \lambda_R [\mathbf{F}_L^* - \lambda_C \mathbf{U}_L^*]. \quad (4.22)$$

Diese algebraische Relation ist sehr unbequem. Etwas besser wäre es, eine einfache Korrekturformel für \mathbf{U}_R^* zu erhalten, wir finden diese nach etwas langwierigen algebraischen Umformungen

$$\tilde{\mathbf{U}}_R^* = \begin{pmatrix} \rho_R^* \\ \rho_R^* \lambda_C \\ E_R^* \end{pmatrix} + \frac{[p_L^* - (p_R + \rho_R(u_R - \lambda_R)(u_R - \lambda_C))]}{\lambda_R - \lambda_C} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \lambda_C \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

wobei ρ_R^* , und E_R^* mit Hilfe von der Gln.(4.13, 4.15) berechnet werden, ebenso ist p_L^* mit Hilfe von Gl.(4.9) gegeben. Man beachte, daß der Zusatzterm proportional zur Differenz $p_L^* - p_R^*$ ist. Damit kann nun auf einfache Weise die Flußfunktion \mathbf{F}_R^* innerhalb der Region $(\lambda_C \leq (x - x_i)/t \leq \lambda_R)$ erhalten werden:

$$\mathbf{F}_R^* - \mathbf{F}_R = \lambda_R (\tilde{\mathbf{U}}_R^* - \mathbf{U}_R). \quad (4.24)$$

Dies „restauriert“ die algebraische Einfachheit der Methode, weil Gl.(4.7) nach wie vor gültig ist. Es wird betont, daß man für eine Godunov-Methode erster Ordnung die Gln.(4.23, 4.24) nicht braucht, da für nach links laufende Überschall-Lösungen der Godunov-Fluß mit Hilfe von \mathbf{F}_R gebildet wird. Aber für Approximationen höherer Ordnung oder weitergehende Betrachtungen ist die Kenntnis von $\tilde{\mathbf{U}}_R^*$ notwendig. Außerdem läßt sich zeigen, daß der modifizierte Zustandsvektor $\tilde{\mathbf{U}}_R^*$ in Kombination mit \mathbf{U}_L^* nun auch die Rankine-Hugoniot-Beziehung an der Kontakt-Unstetigkeit, Gl.(4.17) erfüllt.

Die Beziehung im noch offenen Fall $0 < \lambda_L < \lambda_C < \lambda_R$ kann durch Permutation der Indizes $L \rightarrow R$ erhalten werden, weil alle Formeln eine solche Symmetrie enthalten, sodaß der redefinierte Zustandsvektor

$$\tilde{\mathbf{U}}_L^* = \begin{pmatrix} \rho_L^* \\ \rho_L^* \lambda_C \\ E_L^* \end{pmatrix} + \frac{[p_R^* - (p_L + \rho_L(u_L - \lambda_L)(u_L - \lambda_C))]}{\lambda_L - \lambda_C} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \lambda_C \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

ist, wobei ρ_L^* und E_L^* mit Hilfe der Gln.(4.8, 4.10) berechnet werden, und p_R^* Gl.(4.14) erfüllt. Der Vektor $\tilde{\mathbf{U}}_L^*$ genügt wieder einer Rankine-Hugoniot Beziehung, die dann die numerische Flußfunktion \mathbf{F}_L^* innerhalb der Region $(\lambda_L \leq (x - x_i)/t \leq \lambda_C)$ ergibt:

$$\mathbf{F}_L^* - \mathbf{F}_L = \lambda_L (\tilde{\mathbf{U}}_L^* - \mathbf{U}_L). \quad (4.26)$$

Die Gln.(4.23, 4.24, 4.25, 4.26) sind nicht in der Literatur zu finden, daher mußten sie hier angegeben werden.

Es verbleibt noch, Abschätzungen für die Wellengeschwindigkeiten zu finden. Ein Iterationsverfahren braucht Startwerte, diese werden nach [Toro, Spruce und Speares \(1994\)](#) gewählt:

$$u^* = \frac{1}{2}(u_L + u_R) - \frac{1}{2} \frac{p_R - p_L}{\bar{\rho} \bar{c}}, \quad (4.27)$$

$$p^* = \frac{1}{2}(p_L + p_R) - \frac{1}{2}(u_R - u_L)\bar{\rho} \bar{c}, \quad (4.28)$$

wobei die Mittelwerte wie folgt definiert sind

$$\bar{u} := \frac{1}{2}(u_L + u_R), \quad \bar{c} := \frac{1}{2}(c_L + c_R), \quad \bar{\rho} := \frac{1}{2}(\rho_L + \rho_R). \quad (4.29)$$

Wenn wenigstens eine der Wellen (L oder R) eine Stoßwelle ist, muß man iterativ weiterrechnen, sonst genügt offenbar schon Kenntnis der Schallgeschwindigkeiten. Für gegebene Werte von p^* und p_L bzw. p_R kann man die Stoßadiabate sowie die Zustandsgleichung benutzen, um ein ρ_L^* , bzw. ρ_R^* zu bestimmen. Das funktioniert für allgemeine Zustandsgleichungen nur numerisch, mit Hilfe einer Newton-Methode (für zwei Unbekannte, ϵ^* und ρ^*). Dann ergibt sich die Stoßwellengeschwindigkeit für die „linke“ Welle aus

$$\rho_L(u_L - \lambda_L) = \left(\frac{(p^* - p_L)\rho_L \rho_L^*}{\rho_L^* - \rho_L} \right)^{1/2} = A_L, \quad (4.30)$$

bzw. für die „rechte“ Welle aus

$$\rho_R(\lambda_R - u_R) = \left(\frac{(p^* - p_R)\rho_R \rho_R^*}{\rho_R^* - \rho_R} \right)^{1/2} = A_R, \quad (4.31)$$

und somit direkt die Koeffizienten A_L und A_R . Ansonsten (für Verdünnungswellen) hat man $A_L := \rho_L c_L$ bzw. $A_R := \rho_R c_R$. Nun wird ein neuer Wert für p^* in Gl.(4.19) bestimmt, und anschließend wiederholt man die Berechnung von A_L und A_R mehrmals. Ist die Näherungslösung ausreichend genau, d. h. ändert sich der Wert von p^* nicht mehr stark, kann man $\lambda_C = u^*$ aus Gl.(4.18) und die $\lambda_{L,R}$ berechnen:

$$\lambda_L = u_L - \frac{A_L}{\rho_L}, \quad \lambda_R = u_R + \frac{A_R}{\rho_R}. \quad (4.32)$$

Aufgrund der Gl.(4.19) sind danach auch die Gln.(4.9, 4.14) mit $p^* = p_L^* = p_R^*$ identisch erfüllt, wenn A_L und A_R zur gleichen Iterationsstufe gehören, und man kann anschließend aus algebraischen Relationen, d. h. den Gln.(4.8, 4.10, 4.13, 4.15) die Zwischenzustände erhalten. Eine grundlegende Annahme ist dabei die Konvexität der Zustandsgleichung, d. h. es sollte keine Anomalie auftreten, wo $p^* < p$ bei $\rho^* > \rho$ entlang der Hugoniot-Kurve bzw. der gewöhnlichen Adiabaten gilt. Nur dann genügt die numerische Lösung einem Entropie-Prinzip, welches unter den vielen möglichen schwachen Lösungen eindeutig auswählt. Leider existieren noch kaum praktikable Methoden für anomale Zustandsgleichungen (z.B. bei porösen Materialien). Daher wurden Godunov-Methoden bisher nur für sehr einfache Zustandsgleichungen veröffentlicht, wo die Konvexität garantiert ist, siehe z. B. [Miller und Puckett \(1996\)](#), bzw. es wurden lokal konvexe Approximationen verwendet.

Bei der Konstruktion des numerischen Flusses kann man den jeweiligen Zustandsvektor längs des Strahls $x = x_i$ für $(t^{(n)} \leq t \leq t^{(n+1)})$ auswählen, und entweder direkt in die nichtlineare Flußfunktion $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ einsetzen, oder aber eine der Rankine-Hugoniot-Relationen benutzen (falls es sich um einen der „Zwischenzustände“ handelt). Diese Betrachtungen genügen für eine Godunov-Methode erster Ordnung in der Verallgemeinerung für Zustandsgleichungen mit konvexer Hugoniot-Kurve und Adiabate. Für Methoden höherer Ordnung können zwei wesentliche Varianten unterschieden werden. Die erste ersetzt die Anfangswerte $\mathbf{U}_{L,R}$ „links“ und „rechts“ der Zellgrenze x_i durch Approximationen höherer Ordnung, wobei eine sogenannte Upwind-Interpolation mit Hilfe der Mittelwerte in den Nachbarzellen konstruiert wird ([Colella , 1990](#)). Das Ziel der Verfahren höherer Ordnung ist es, ohne Verschlechterung der Monotonie-Eigenschaften der Methode erster Ordnung (d. h. ohne Erzeugung zusätzlicher unphysikalischer Extrema) die Lösung in Bereichen mit glattem Verhalten zu verbessern. Die Monotonie der Interpolation wird mit Hilfe sogenannter Flux-Limiter oder auch Slope-Limiter erreicht ([LeVeque , 1990](#)). Dort, wo Stoßwellen auftreten, sind die verbesserten Methoden jedoch ebenfalls nur von erster Ordnung in der räumlichen Approximation ([LeVeque , 1990](#)). Die zweite Variante, von [LeVeque \(1997\)](#)

vertreten, konstruiert eine Interpolation höherer Ordnung, indem sie direkt die Flußfunktionen in weiteren Nachbarzellen betrachtet und geeignet zerlegt, in eine Entwicklung nach charakteristischen Geschwindigkeiten. Grundlage dieser Methode ist jedoch eine exakte Linearisierung in dem Sinne, daß an jeder Wellenfront Rankine-Hugoniot-Beziehungen für die genäherten Zustandsvektoren verlangt werden. Mehr noch, für mehrdimensionale Effekte muß außerdem eine Entwicklung der Differenz $\mathbf{U}_L - \mathbf{U}_R$ nach Eigenvektoren, sogenannten „waves“ erfolgen, daher der Name „wave propagation method“. Es zeigte sich, daß letztere Eigenschaft nicht für beliebige Zustandsgleichungen zu erreichen ist, und [LeVeque \(1997\)](#) hat seine Methode auch nur für ideale Gase demonstriert.

Mehrdimensionale Methoden benutzen im Zustandsvektor mehrere Komponenten für den Impuls und für jede räumliche Richtung eine Flußfunktion, z.B. für zweidimensionale kartesische Koordinaten

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E), \quad (4.33)$$

$$\mathbf{F}_x = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho v u, u(E + p)), \quad (4.34)$$

$$\mathbf{F}_y = (\rho v, \rho v^2 + p, \rho u v, v(E + p)), \quad (4.35)$$

wobei $E = \rho(u^2 + v^2)/2 + \rho \epsilon$ gilt, und die konservative Form der Erhaltungsgleichungen ist

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})_y}{\partial y} = 0. \quad (4.36)$$

Die einfachste Variante, auch „dimensional splitting“ oder „fractional steps“ ([Yanenko, 1971](#)) genannt, besteht darin, die eindimensionale Methode nacheinander für beide räumliche Richtungen anzuwenden. D. h. der Operator der Zeitentwicklung der Erhaltungsgleichungen

$$\exp \left\{ \int dt \left(\frac{\partial \mathbf{F}(\dots)_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}(\dots)_y}{\partial y} \right) \right\} \{ \mathbf{U} \},$$

(dem entspricht die Vorstellung, obiger formaler Operator propagiert das Erhaltungsgesetz über einen endlichen Zeitschritt) wird wie folgt approximiert:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \int dt \left(\frac{\partial \mathbf{F}(\dots)_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}(\dots)_y}{\partial y} \right) \right\} \{ \mathbf{U} \} &\sim \\ &\sim \exp \left\{ \int dt \left(\frac{\partial \mathbf{F}(\dots)_x}{\partial x} \right) \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \int dt \left(\frac{\partial \mathbf{F}(\dots)_y}{\partial y} \right) \right\} \{ \mathbf{U} \}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

Damit werden auch „Kreuz-Kopplungen“ erfaßt, d. h. gegenseitige Beeinflussung von Werten in Zellen, die nur einen Vertex miteinander teilen, jedoch keine Kante. Solche Effekte müssen in einem „dimensionally unsplit approach“ erst noch zusätzlich in die Flußfunktionen „eingebaut“ werden, was den besonderen Aufwand in der Arbeit von [Colella \(1990\)](#) ausmacht. Die Godunov-Methode ist prinzipiell eindimensionaler Natur, weil mehrdimensionale Lösungen für ein Riemann-Problem nicht existieren und die Wechselwirkung sämtlicher nichtlinearer hydrodynamischer Wellen in allen Richtungen sehr komplex ist. Um „aliasing“-Fehler, d. h. anomale Ausbreitung in bestimmten Richtungen zu vermeiden, ist die Reihenfolge der eindimensionalen Operationen bei jedem Zeitschritt zu vertauschen. Zu den „dimensionally unsplit“ Methoden ([Colella, 1990](#); [LeVeque, 1997](#)) sei nur bemerkt, daß der Aufwand sich wohl für Ein-Material-Probleme lohnt, jedoch werden hier später Multi-Material-Methoden betrachtet, wo sie sich bisher nicht durchgesetzt haben. Die Anwesenheit von transversalen Geschwindigkeitskomponenten im erweiterten Zustandsvektor für eine betrachtete Richtung (z. B. v ist transversal für den Schritt in der x -Richtung) stellt keine besondere Schwierigkeit im Riemann-Löser dar, denn transversale Geschwindigkeiten verlaufen durch alle Fronten stetig, bis auf die Kontaktunstetigkeit. Daher ist z.B. $u_{y,L}^* = u_{y,L}$ usw.

Da die Implementation des HLLC-Lösers stark von der Zustandsgleichung abhängt, wird noch die verwendete Tillotson-Zustandsgleichung ([O’Keefe und Ahrens, 1975](#); [Melosh, 1989](#)) angegeben. Sie unterscheidet drei Regionen: (i) für komprimierte ($\rho \geq \rho_0$) oder kalte ($\epsilon < \epsilon_{iv}$), und expandierte ($\rho < \rho_0$) Zustände ist $p^{(c)}$ nichtverschwindend

$$p^{(c)} = \left(a + \frac{b}{(\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1} \right) \epsilon \rho + A(\eta - 1) + B(\eta - 1)^2, \quad \eta := \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (4.38)$$

(ii) für expandierte und heiße Zustände, mit ($\rho < \rho_0$) und ($\epsilon > \epsilon_{cv}$) ist $p^{(h)}$ nichtverschwindend

$$p^{(h)} = \left(a + \frac{b \exp(-\alpha\mu^2)}{(\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1} \right) \epsilon \rho + A(\eta - 1) \exp(-\alpha\mu^2 - \beta\mu), \quad \mu := \frac{\rho_0}{\rho} - 1, \quad (4.39)$$

(iii) expandierte Zustände ($\rho < \rho_0$) im Übergangsbereich, wo ($\epsilon_{iv} < \epsilon < \epsilon_{cv}$) gilt die Interpolation

$$p = \frac{\epsilon - \epsilon_{iv}}{\epsilon_{cv} - \epsilon_{iv}} p^{(h)} + \frac{\epsilon_{cv} - \epsilon}{\epsilon_{cv} - \epsilon_{iv}} p^{(c)}, \quad (4.40)$$

wobei ϵ_{iv} und ϵ_{cv} die spezifische Energie für einsetzende bzw. vollständige Verdampfung bezeichnen. Die Konstanten ϵ_0 und ρ_0 sind gewisse Referenzwerte, und $\{\alpha, \beta, a, b, A, B\}$ konstante Parameter, siehe [O'Keefe und Ahrens \(1975\)](#) bzw. [Melosh \(1989\)](#). Die Schallgeschwindigkeit kann analytisch berechnet werden, und diese Zustandsgleichung besitzt einen Übergang zum Verhalten eines idealen Gases. Allerdings gibt es Zustände mit negativem Quadrat der Schallgeschwindigkeit, die sich nur vermeiden lassen, indem dort Glieder proportional zu A und B Null gesetzt werden, das erfordert einen Test. Die partiellen Ableitungen des Drucks der Tillotson-Zustandsgleichung werden auch im Newton-Verfahren für die Stoßadiabate benutzt:

$$\left(\frac{\partial p^{(c)}}{\partial \epsilon}\right)_\rho = \left(a + \frac{b}{((\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1)^2}\right) \rho, \quad (4.41)$$

$$\left(\frac{\partial p^{(c)}}{\partial \rho}\right)_\epsilon = \left(a + \frac{b(3(\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1)}{((\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1)^2}\right) \epsilon + \frac{A + 2B(\eta - 1)}{\rho_0} \quad (4.42)$$

$$\left(\frac{\partial p^{(h)}}{\partial \epsilon}\right)_\rho = \left(a + \frac{be^{-\alpha\mu^2}}{((\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1)^2}\right) \rho, \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p^{(h)}}{\partial \rho}\right)_\epsilon = & \left[a + \frac{be^{-\alpha\mu^2}}{(\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1} \left(\frac{3(\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1}{(\epsilon/\epsilon_0)\eta^{-2} + 1} + \frac{2\alpha\mu}{\eta} \right) \right] \epsilon + \\ & + \frac{A}{\rho_0} \left(1 - \frac{2\alpha\mu^2 + \beta\mu}{\eta} \right) e^{-\alpha\mu^2 - \beta\mu}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Die folgende Interpolationsformel kann für die Schallgeschwindigkeit in der Übergangsregion benutzt werden

$$c^2 = \frac{\epsilon - \epsilon_{iv}}{\epsilon_{cv} - \epsilon_{iv}} (c^{(h)})^2 + \frac{\epsilon_{cv} - \epsilon}{\epsilon_{cv} - \epsilon_{iv}} (c^{(c)})^2 + \frac{p}{\rho^2} \frac{p^{(h)} - p^{(c)}}{\epsilon_{cv} - \epsilon_{iv}}, \quad (4.45)$$

wobei $(c^{(c,h)})^2$ mit dem jeweiligen Druck $p^{(c,h)}$ gebildet wird. Ein Iterationsverfahren zur Bestimmung von p^* und u^* mit dieser Zustandsgleichung ist vertretbar, im Vergleich mit den ANEOS ([Thompson und Lauson, 1972](#)) oder SESAME Zustandsgleichungen. Für letztere erfordert eine Godunov-Methode ungleich höheren Aufwand, und die Iteration bedeutet ein großes Problem, daher wird zumindest in Godunov-Verfahren in dieser Arbeit meist die Tillotson-Zustandsgleichung verwendet.

4.3.2 Spezielle Probleme bei krummlinigen Koordinaten

In zwei Dimensionen und kartesischen Koordinaten läßt sich nicht einmal der senkrechte Einschlag eines kugelförmigen Impaktors berechnen. Da dreidimensionale hydrodynamische Simulationen ungleich kostspieliger sind (Speicher, Rechenzeit, Ausgabedaten), und spezielle Software und Hardware für die Analyse der Daten benötigen, ist für hohe räumliche Auflösung Axialsymmetrie und Verwendung von Zylinderkoordinaten eine preiswerte Alternative. Manchmal sollen auch sphärische Koordinaten benutzt werden, so für die Untersuchungen in Kap. 3. Für Godunov-Methoden mit nur einem Material läuft dies darauf hinaus, sogenannte Quellterme zu betrachten, so. z. B. im eindimensionalen Teilproblem in radialer Richtung

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial r} = \mathbf{S}, \quad (4.46)$$

$$\mathbf{S} = -\frac{(d-1)u}{r} [\mathbf{U} + (0, \dots, 0, p)], \quad (4.47)$$

mit $d = 2$ für Zylinderkoordinaten und $d = 3$ für sphärische Symmetrie, siehe z. B. [LeVeque \(1997\)](#). In Godunov-Methoden wird dieser Quellterm in jeder Gitterzelle mit Hilfe eines Prediktor-Korrektor-Verfahrens für gewöhnliche Differentialgleichungen integriert, dabei können auch halbe Zeitschritte symmetrisch zu einem Durchlauf (sweep) des eigentlichen Godunov-Verfahrens über das gesamte Gitter verwendet werden, letzteres bezeichnet man als Strang-Splitting ([Strang, 1968](#)). Singularitäten treten nicht auf, weil die Symmetrieachse $r = 0$ eine Zellgrenze ist, und die Approximation mit Hilfe eines Mittelwerts für r in der Zelle erfolgt. Zwar ist diese Variante verbreitet, siehe [LeVeque \(1997\)](#), jedoch spiegelt sich darin die Unmöglichkeit, ein Riemann-Problem für krummlinige Koordinaten korrekt einzubeziehen. Die Fronten im Riemann-Problem, welches man höchstens näherungsweise lösen kann, wären dabei in der r - t -Ebene gekrümmt, was bisher jegliche Verallgemeinerung verhindert hat. Bei Versuchen, eine Multi-Material-Variante zu formulieren, werden uns diese Schwierigkeiten wieder begegnen.

4.3.3 Der SOVA-Algorithmus als eine implizite Methode

Ein publiziertes Multi-Material Verfahren ist SOVA ([Shuvalov, 1999](#); [Shuvalov, Artem'eva und Kosarev, 1999](#)). Es ist ein traditionelles Schema, wobei die Zustandsgrößen auf einem sogenannten „staggered mesh“ (versetztes

Gitter) definiert sind, und keine Godunov-Methode, damit ähnelt es CTH (McGlaun, Thompson, Elrick, 1990) und auch ZEUS-2D (Stone und Norman, 1992). SOVA unterscheidet sich dadurch, daß der Lagrange-Schritt eine implizite Form hat. Weil die Methode nur skizzenhaft dargestellt wurde, ist eine genauere Betrachtung angebracht, auch im Hinblick auf später zu behandelnde Multi-Material-Aspekte, welche von Shuvalov (1999) und Shuvalov, Artem'eva und Kosarev (1999) lediglich verbal erwähnt werden.

Es ist nur notwendig, den Algorithmus in einer Dimension zu diskutieren, da „dimensional splitting“ benutzt wird. Es handelt es sich um eine Finite-Volumen-Methode, bei der jedoch für den Impuls ein duales Gitter verwendet wird (staggered mesh), wobei die Präsentation (Shuvalov, Artem'eva und Kosarev, 1999) mit Hilfe von primitiven Variablen (ρ, u, ϵ) erfolgt. Wie im vorigen Abschnitt, werden in einer Dimension die Zellgrenzen x_i mit ganzzahligen Indizes numeriert, und die Mittelwerte der Dichte $\rho_{i+1/2}$ und der inneren Energiedichte $(\rho\epsilon)_{i+1/2}$ tragen halbzahlige Indizes. Dagegen sind die Geschwindigkeiten u_i an den Kanten x_i definiert, bzw. auf einem dualen Gitter mit den Grenzen $x_{i\pm 1/2}$. Die konservative Variable Impuls muß dann mit Hilfe der Masse oder mittleren Dichte auf dem dualen Gitter gebildet werden. Der Algorithmus gehört zu der Klasse der Lagrange+Remap-Verfahren und besteht in jedem Zeitschritt aus einem Lagrange-Schritt sowie einem Eulerschen Projektions- oder auch Advektionsschritt.

Im Folgenden wird aus Platzgründen nicht immer explizit betont, daß es sich um Mittelwerte der Zustandsvariablen handelt, wenn numerische Variablen erwähnt werden. Während des Lagrange-Schritts ändert sich die Dichte wie folgt

$$\tilde{\rho}_{i+1/2}(\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i) = \rho_{i+1/2}^n(x_{i+1} - x_i), \quad (4.48)$$

wobei $\rho_{i+1/2}^n$ die Dichte zum Zeitpunkt t_n ist, und eine Tilde bezeichnet jeweils Werte am Ende des Lagrange-Schritts, $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. Die Gitterpunkte oder besser Kanten bewegen sich dabei entsprechend

$$\tilde{x}_i = x_i + \frac{1}{2}(u_i^n + \tilde{u}_i) \Delta t. \quad (4.49)$$

Hier ist u_i^n der anfängliche Wert der Geschwindigkeit bei t_n und \tilde{u}_i bezeichnet den Wert am Ende des Lagrange-Schritts. Letztere ergibt sich aus

$$\tilde{u}_i = u_i^n - \frac{(p_{i+1/2}^{n+1/2} - p_{i-1/2}^{n+1/2}) \Delta t}{\frac{1}{2} [\rho_{i+1/2}^n (x_{i+1} - x_i) + \rho_{i-1/2}^n (x_i - x_{i-1})]}, \quad (4.50)$$

wobei $p_{i+1/2}^{n+1/2}$ eine Abschätzung des Drucks in der Mitte des Zeitschritts, $(t_n + t_{n+1})/2$, bedeutet. Um diese Gleichung herzuleiten, definiert man eine Masse

auf dem dualen Gitter (mit den Kanten $x_{i\pm 1/2} := 1/2(x_{i\pm 1} + x_i)$) als

$$M_i := \rho_{i+1/2}^n (x_{i+1/2} - x_i) + \rho_{i-1/2}^n (x_i - x_{i-1/2}) = \frac{1}{2} \left[\rho_{i+1/2}^n (x_{i+1} - x_i) + \rho_{i-1/2}^n (x_i - x_{i-1}) \right]. \quad (4.51)$$

Diese Masse ist während des Lagrange-Schritts invariant, darum erhält man die Geschwindigkeit \tilde{u}_i , indem der Impuls durch die Masse M_i dividiert wird. So ist die diskrete Euler-Gl.(4.50) eigentlich eine konservative diskrete Impuls-Bilanz in Lagrangescher Formulierung, d. h. im lokal mitbewegten System, und $p_{i\pm 1/2}^{n+1/2}$ approximiert den zeitlich gemittelten Fluß des Impulses an der Kante $i \pm 1/2$ des dualen Gitters. Die Approximation für $p_{i+1/2}^{n+1/2}$ ist implizit in Bezug auf \tilde{u}_i :

$$p_{i+1/2}^{n+1/2} = (p + q)_{i+1/2}^n - \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \left(\frac{\tilde{u}_{i+1} - \tilde{u}_i}{x_{i+1} - x_i} \right) \frac{\Delta t}{2}, \quad (4.52)$$

wobei $(c_{i+1/2}^n)^2$ die quadratische Schallgeschwindigkeit ist, berechnet mit der Zustandsgleichung zum Zeitpunkt t_n , der zu $(c_{i+1/2}^n)^2$ proportionale Term hat die Wirkung einer linearen künstlichen Viskosität, und $q_{i+1/2}^n$ ist eine quadratische künstliche Viskosität, unter Benutzung der Geschwindigkeiten u_i^n am Beginn des Lagrange-Schritts (Siehe z.B. [Benson \(1992\)](#) für einen Vergleich zur Behandlung von schwachen Lösungen mit künstlicher Viskosität oder Godunov-Methoden. Benson motiviert interessanterweise die kombinierte linear-quadratische Form der künstlichen Viskosität mit Hilfe eines vereinfachten Riemann-Problems). Man eliminiert $p_{i\pm 1/2}^{n+1/2}$ in Gl.(4.50), und ein tridiagonales Gleichungssystem entsteht

$$-A_i \tilde{u}_{i+1} + B_i \tilde{u}_i - C_i \tilde{u}_{i-1} = D_i, \quad (4.53)$$

wobei

$$A_i = \frac{\Delta t}{2M_i} \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \frac{\Delta t}{(x_{i+1} - x_i)},$$

$$C_i = \frac{\Delta t}{2M_i} \rho_{i-1/2}^n (c_{i-1/2}^n)^2 \frac{\Delta t}{(x_i - x_{i-1})}, \quad (4.54)$$

$$B_i = 1 + A_i + C_i, \quad D_i = u_i^n - \frac{\Delta t}{M_i} \left((p + q)_{i+1/2}^n - (p + q)_{i-1/2}^n \right). \quad (4.55)$$

Dieses tridiagonale System wird mit Hilfe der sogenannten „double sweep“ Methode ([Oran und Boris , 1987](#)) gelöst, unter Benutzung der Randbedingungen an beiden Enden. Der Lagrange-Schritt ändert die Dichte der inneren

Energie $\rho\epsilon$ entsprechend

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{i+1/2} (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i) \tilde{\epsilon}_{i+1/2} &= \rho_{i+1/2}^n \epsilon_{i+1/2}^n (x_{i+1} - x_i) - \\ &\quad - p_{i+1/2}^{n+1/2} (u_{i+1}^* - u_i^*) \Delta t, \end{aligned} \quad (4.56)$$

mit der Abkürzung

$$u_i^* := \frac{1}{2} (\tilde{u}_i + u_i^n), \quad (4.57)$$

dies ist gleichzeitig eine Approximation für die zeitlich gemittelte Geschwindigkeit während des Lagrange-Schritts, und logischerweise ist der Beitrag der künstlichen Viskosität in $p_{i+1/2}^{n+1/2}$ enthalten. Hierbei ist $\tilde{\rho}_{i+1/2} \tilde{\epsilon}_{i+1/2}$ der Mittelwert der Dichte der inneren Energie nach dem Lagrange-Schritt, d. h. innerhalb des Gebiets $(\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1})$ zum Zeitpunkt t_{n+1} .

Es ist notwendig, zu zeigen, in welchem Sinne der Lagrange-Schritt konservativ für die totale Energiedichte $\rho(u^2/2 + \epsilon)$ ist. Die Änderung der kinetischen Energie an der Kante i findet man, wenn die Euler-Gl.(4.50) mit u_i^* multipliziert wird

$$M_i (\tilde{u}_i - u_i^n) \frac{1}{2} (\tilde{u}_i + u_i^n) = (p_{i-1/2}^{n+1/2} - p_{i+1/2}^{n+1/2}) u_i^* \Delta t. \quad (4.58)$$

Die Dichte der inneren Energie an der Kante i ist der folgende Mittelwert (konsistent mit Gl.(4.51) für M_i)

$$M_i \epsilon_i := \frac{1}{2} [M_{i-1/2} \epsilon_{i-1/2} + M_{i+1/2} \epsilon_{i+1/2}]. \quad (4.59)$$

Mit Hilfe von Gl.(4.56) führt das auf

$$M_i (\tilde{\epsilon}_i - \epsilon_i) = -\frac{\Delta t}{2} \left[p_{i-1/2}^{n+1/2} (u_i^* - u_{i-1}^*) + p_{i+1/2}^{n+1/2} (u_{i+1}^* - u_i^*) \right]. \quad (4.60)$$

Nach Umgruppierung von Termen ist die totale Energiedifferenz während des Lagrange-Schritts

$$\begin{aligned} &M_i \left(\frac{\tilde{u}_i^2}{2} + \tilde{\epsilon}_i - \frac{u_i^2}{2} - \epsilon_i \right) = \\ &= \left[\frac{1}{2} (u_{i-1}^* + u_i^*) p_{i-1/2}^{n+1/2} - \frac{1}{2} (u_i^* + u_{i+1}^*) p_{i+1/2}^{n+1/2} \right] \Delta t. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Die Gl.(4.61) ist in Fluß-Differenz-Form, also konservativ, wobei der totale Energiefluß an der Kante $(i+1/2)$ des dualen Gitters (wie sich diese Kanten bewegen, muß nicht spezifiziert werden) als

$$\frac{1}{2} (u_i^* + u_{i+1}^*) p_{i+1/2}^{n+1/2},$$

identifiziert werden kann, und der Term an der Kante $(i - 1/2)$ durch Indexverschiebung folgt. Da es sich um ein mehrdimensionales Verfahren handelt, existieren noch transversale Geschwindigkeitskomponenten, diese sind z. B. in zwei Raumdimensionen an der oberen $(x_{i+1/2}, y_{j+1})$ und unteren Kante $(x_{i+1/2}, y_j)$ der zweidimensionalen Gitterzelle gegeben, aber ändern sich während des eindimensionalen Lagrange-Schritts nicht. Daher haben sie keinen Einfluß auf die obige Betrachtung.

Der nächste Schritt des Verfahrens ist ein Eulerscher „remap“ oder Advektionsschritt. Eine Vorstellung dazu ist, daß die Kanten des Gitters eine Bewegung $x_i \rightarrow \tilde{x}_i$ ausgeführt haben, wobei Überlappungszonen mit dem ursprünglichen Eulerschen Gitter entstehen. Dem Remap-Schritt entspricht keine hydrodynamische Bewegung, wie die während des Lagrange-Schritts, sondern es handelt sich um eine rein geometrisch bedingte Umverteilung von integralen Zustandsgrößen zu einem festen Zeitpunkt. Es ist dazu nur notwendig, das Volumen einer Überlappungszone an der Kante x_i zu kennen, und einen Wert für die mittlere Dichte der jeweiligen Variable in diesem Gebiet abzuschätzen. Eine gewisse Komplikation stellen dabei krummlinige Koordinaten dar, darauf wird später eingegangen. Es dürfte klar sein, daß Impuls-Advektion auf dem dualen Gitter erfolgt, und sich dadurch von der Prozedur für skalare Variablen unterscheidet. Der Eulersche oder Advektionsschritt für die Dichte ist durch

$$\rho_{i+1/2}^{n+1} = \rho_{i+1/2}^n - \frac{\Delta t}{(x_{i+1} - x_i)} \left[\rho_{i+1}^* u_{i+1}^* - \rho_i^* u_i^* \right], \quad (4.62)$$

gegeben, wobei sogenannte Donor-Werte für ρ_i^* benutzt werden, mit Hilfe der Werte nach dem Lagrange-Schritt:

$$\rho_i^* := \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\rho}_{i-1/2}, \quad (u_i^* > 0) \\ \tilde{\rho}_{i+1/2}, \quad (u_i^* \leq 0) \end{array} \right\}. \quad (4.63)$$

Das Schema für die Dichte der inneren Energie nimmt die folgende Form an

$$\begin{aligned} \rho_{i+1/2}^{n+1} \epsilon_{i+1/2}^{n+1} &= \rho_{i+1/2}^n \epsilon_{i+1/2}^n - \frac{\Delta t}{(x_{i+1} - x_i)} p_{i+1/2}^{n+1/2} (u_{i+1}^* - u_i^*) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{(x_{i+1} - x_i)} \left[(\rho \epsilon)_{i+1}^* u_{i+1}^* - (\rho \epsilon)_i^* u_i^* \right], \end{aligned} \quad (4.64)$$

wobei der Donor-Wert $(\rho \epsilon)_i^*$ wie folgt definiert ist:

$$(\rho \epsilon)_i^* := \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{\rho \epsilon})_{i-1/2}, \quad (u_i^* > 0) \\ (\tilde{\rho \epsilon})_{i+1/2}, \quad (u_i^* \leq 0) \end{array} \right\}. \quad (4.65)$$

Die hier entwickelte Variante von SOVA folgt nicht der Darstellung in der Literatur ([Shuvalov , 1999](#)) für die Advektion auf dem dualen Gitter. Der

zeitlich gemittelte Massenfluß über die Kanten $(i + 1/2)$ des dualen Gitters wird durch

$$\Phi_{i+1/2} := \frac{1}{2} [\rho_{i+1}^* u_{i+1}^* + \rho_i^* u_i^*] \Delta t, \quad (4.66)$$

definiert, unter Benutzung der Donor-Werte für ρ_i^* . Der Eulersche Schritt ergibt dann für die Masse auf dem dualen Gitter

$$M_i^{n+1} = M_i^n - [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}], \quad (4.67)$$

kompatibel mit dem Advektionsschritt für die Dichte Gl.(4.62) und der Mittelungsformel für die Knotenmasse M_i , Gl.(4.51), siehe z. B. auch [Benson \(1992\)](#). Die konservative Impuls-Advektion in diskreter Form ist

$$M_i^{n+1} u_i^{n+1} = M_i^n \tilde{u}_i - [\Phi_{i+1/2} \hat{u}_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2} \hat{u}_{i-1/2}], \quad (4.68)$$

wobei $\hat{u}_{i+1/2}$ eine monotone Approximation zweiter Ordnung darstellt, mit Hilfe der Geschwindigkeiten nach dem Lagrange-Schritt. Die neue Geschwindigkeit u_i^{n+1} wird nach Division durch die Masse M_i^{n+1} erhalten. Die folgende Definition der interpolierten Geschwindigkeit $\hat{u}_{i+1/2}$ ist in SOVA implementiert:

$$\hat{u}_{i+1/2} = \left\{ \begin{array}{l} \tilde{u}_i + \Delta_{i+1/2} u \left(\frac{M_i - \Phi_{i+1/2}}{2M_i} \right), \quad \Phi_{i+1/2} > 0 \\ \tilde{u}_{i+1} - \Delta_{i+1/2} u \left(\frac{M_{i+1} + \Phi_{i+1/2}}{2M_{i+1}} \right), \quad \Phi_{i+1/2} \leq 0 \end{array} \right\}. \quad (4.69)$$

Die Differenz $\Delta_{i+1/2} u$ ist mit Hilfe eines Fluß-Limiters nach van Leer gebildet:

$$\Delta_{i+1/2} u := [\tilde{u}_i - \tilde{u}_{i-1}] \Psi \left(\frac{\tilde{u}_{i-1} - \tilde{u}_{i-2}}{\tilde{u}_i - \tilde{u}_{i-1}} \right), \quad \Phi_{i+1/2} > 0, \quad (4.70)$$

bzw.

$$\Delta_{i+1/2} u := [\tilde{u}_{i+1} - \tilde{u}_i] \Psi \left(\frac{\tilde{u}_i - \tilde{u}_{i-1}}{\tilde{u}_{i+1} - \tilde{u}_i} \right), \quad \Phi_{i+1/2} \leq 0, \quad (4.71)$$

hierbei ist Ψ die Limiter-Funktion. Ein monoton-zentrierter Fluß-Limiter wird in SOVA benutzt. Es ist notwendig, Gl.(4.69), welche nicht in den von [Benson \(1992\)](#) erwähnten Standardverfahren auftaucht, gesondert zu rechtfertigen. Man definiere dazu zunächst die folgende Geschwindigkeit

$$u_{i+1/2} := \left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta x}{M_i \Delta t} \Phi_{i+1/2}, \quad (\Phi_{i+1/2} > 0) \\ \frac{\Delta x}{M_{i+1} \Delta t} \Phi_{i+1/2}, \quad (\Phi_{i+1/2} \leq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.72)$$

und dies wird als Approximation der Geschwindigkeit entlang derjenigen Stromlinie betrachtet, welche die Position $x_{i+1/2}$ am Ende des Lagrange-Schritts erreicht hat. Für positive Werte von $\Phi_{i+1/2}$, ist die Einflußregion

das Intervall $(x_{i+1/2} - u_{i+1/2}\Delta t; x_{i+1/2})$, ansonsten $(x_{i+1/2}; x_{i+1/2} - u_{i+1/2}\Delta t)$. Die Interpolation des Geschwindigkeitsfeldes \tilde{u} sei linear, wobei $\Delta_{i+1/2}u$ ein „limitierter“ Gradient ist, wie oben erklärt

$$\tilde{u}(x) = \left\{ \begin{array}{l} \tilde{u}_i + \frac{x-x_i}{\Delta x} \Delta_{i+1/2}u, \quad (\Phi_{i+1/2} > 0) \\ \tilde{u}_{i+1} + \frac{x-x_{i+1}}{\Delta x} \Delta_{i+1/2}u, \quad (\Phi_{i+1/2} \leq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.73)$$

und x eine *Lagrangesche* (mitbewegte) Koordinate. Nun wird $\tilde{u}(x)$ über die Einflußzone gemittelt

$$\hat{u}_{i+1/2} := \left\{ \begin{array}{l} \int_{x_{i+1/2}-u_{i+1/2}\Delta t}^{x_{i+1/2}} \tilde{u}(x) dx / \left(\int_{x_{i+1/2}-u_{i+1/2}\Delta t}^{x_{i+1/2}} dx \right), \\ \quad (\Phi_{i+1/2} > 0) \\ \int_{x_{i+1/2}}^{x_{i+1/2}-u_{i+1/2}\Delta t} \tilde{u}(x) dx / \left(\int_{x_{i+1/2}}^{x_{i+1/2}-u_{i+1/2}\Delta t} dx \right), \\ \quad (\Phi_{i+1/2} \leq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.74)$$

und das Resultat für $(u_{i+1/2} > 0)$ ist

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i+1/2} &= \tilde{u} \left(x_i + \frac{1}{2}(\Delta x - u_{i+1/2}\Delta t) \right) = \\ &\quad \tilde{u}_i + \frac{M_i - \Phi_{i+1/2}}{2M_i} \Delta_{i+1/2}u. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Im anderen Fall (für $u_{i+1/2} \leq 0$) findet man

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i+1/2} &= \tilde{u} \left(x_{i+1} - \frac{1}{2}(\Delta x + u_{i+1/2}\Delta t) \right) = \\ &= \tilde{u}_{i+1} - \frac{M_{i+1} + \Phi_{i+1/2}}{2M_{i+1}} \Delta_{i+1/2}u. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Die letzten beiden Gleichungen reproduzieren die Formel für $\hat{u}_{i+1/2}$, Gl.(4.69). Transversale Geschwindigkeitskomponenten ändern sich zwar während des Lagrange-Schritts nicht (sofern keine äußeren Kräfte einwirken), da aber der Impuls eine Erhaltungsgröße ist, und die Masse M_i auf dem dualen Gitter durch Advektion verändert wird, betrifft die Advektion auch die transversalen Geschwindigkeitskomponenten. Dies bedarf einer kurzen Betrachtung. Die transversale Geschwindigkeitskomponente $v_{i+1/2,j}$ ist mit der unteren Kante der Zelle $(i+1/2, j+1/2)$ assoziiert, und j ist der Laufindex für die y -Richtung. Für den Advektionschritt wird ein Kontrollvolumen für $v_{i+1/2,j}$ als die Region $(x_i, x_{i+1}) \times (y_{j-1/2}, y_{j+1/2})$ definiert, wobei

$$y_{j\pm 1/2} = \frac{1}{2}(y_j \pm y_{j\pm 1}), \quad (4.77)$$

die y -Koordinaten der Zentren zweier vertikal angrenzender Zellen sind. Der Massenfluß in x -Richtung an der Kante $x_{i,j}$ dieses Kontrollvolumens ist

$$\Phi_{i,j} := \frac{1}{2}(\Phi_{i,j+1/2} + \Phi_{i,j-1/2}), \quad (4.78)$$

und die Knotenmasse bei $(i + 1/2, j)$

$$M_{i+1/2,j} := \frac{1}{2}(M_{i+1/2,j+1/2} + M_{i+1/2,j-1/2}), \quad (4.79)$$

als Funktion der Zellmassen (diese Definitionen setzen ein äquidistantes Netz in der y -Richtung voraus). Dann sind die diskreten Advektionsgleichungen für diese Massen und den assoziierten Impuls durch

$$M_{i+1/2,j}^{n+1} = M_{i+1/2,j}^n + \Phi_{i,j} - \Phi_{i+1,j}, \quad (4.80)$$

$$M_{i+1/2,j}^{n+1} v_{i+1/2,j}^{n+1} = M_{i+1/2,j}^n v_{i+1/2,j}^n + (\Phi_{i,j} \hat{v}_{i,j} - \Phi_{i+1,j} \hat{v}_{i+1,j}), \quad (4.81)$$

gegeben wobei wieder $\hat{v}_{i,j}$ eine monoton-limitierte Interpolation analog zu Gl.(4.69) ist.

4.3.4 SOVA-Z: Zylinderkoordinaten

Der SOVA-Algorithmus muß für Zylinderkoordinaten modifiziert werden, dies ist keineswegs trivial, jedoch sind Betrachtungen dazu nicht in der Arbeit von [Shuvalov, Artem'eva und Kosarev \(1999\)](#) enthalten. Hier werden die entsprechenden Modifikationen dargestellt, auch im Hinblick auf die spätere Erweiterung für mehrere Materialien, diese Version wird SOVA-Z genannt.

Es wird die zuerst radiale Richtung betrachtet, da hier eine Reihe von Änderungen auftreten. Die Koordinaten der radialen Gitterkanten sind r_i , anstelle der Gl.(4.48) tritt

$$\tilde{\rho}_{i+1/2}(\tilde{r}_{i+1}^2 - \tilde{r}_i^2) = \rho_{i+1/2}^n(r_{i+1}^2 - r_i^2), \quad (4.82)$$

und während des Lagrange-Schritts ändern sich die r_i wie folgt

$$\tilde{r}_i = r_i + \frac{1}{2}(u_i^n + \tilde{u}_i) \Delta t. \quad (4.83)$$

Die radiale Geschwindigkeit \tilde{u}_i am Ende des Lagrange-Schritts ergibt sich aus

$$\tilde{u}_i = u_i^n - \frac{r_i (p_{i+1/2}^{n+1/2} - p_{i-1/2}^{n+1/2}) \Delta t}{\frac{1}{2} [\rho_{i+1/2}^n (r_{i+1/2}^2 - r_i^2) + \rho_{i-1/2}^n (r_i^2 - r_{i-1/2}^2)]}. \quad (4.84)$$

Gl.(4.84) ist nicht konservativer Form, jedoch so formuliert, daß keine Beschleunigung für konstanten Druck in beiden angrenzenden Zellen auftreten kann. Die Definition der Masse (abgesehen von einem Faktor Δz) für das duale Gitter läßt sich daraus ablesen

$$M_i := \frac{1}{2} \left[\rho_{i+1/2}^n (r_{i+1/2}^2 - r_i^2) + \rho_{i-1/2}^n (r_i^2 - r_{i-1/2}^2) \right], \quad (4.85)$$

mit $r_{i+1/2} := (r_{i+1} + r_i)/2$. Die Approximation für $p_{i+1/2}^{n+1/2}$ lautet

$$p_{i+1/2}^{n+1/2} = (p + q)_{i+1/2}^n - \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \left(\frac{r_{i+1} \tilde{u}_{i+1} - r_i \tilde{u}_i}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} \right) \frac{\Delta t}{2}, \quad (4.86)$$

und enthält wieder eine quadratische künstliche Viskosität $q_{i+1/2}^n$. Die Approximation der Divergenz auf der rechten Seite wird später gerechtfertigt. Das tridiagonale Gleichungssystem Gl.(4.53) enthält etwas andere Koeffizienten

$$A_i = \frac{\Delta t}{2M_i} \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \frac{r_i r_{i+1} \Delta t}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)}, \quad (4.87)$$

$$C_i = \frac{\Delta t}{2M_i} \rho_{i-1/2}^n (c_{i-1/2}^n)^2 \frac{r_i r_{i-1} \Delta t}{r_{i-1/2} (r_i - r_{i-1})}, \quad (4.88)$$

$$B_i = 1 + \frac{\Delta t}{2M_i} \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \frac{r_i r_i \Delta t}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} + \frac{\Delta t}{2M_i} \rho_{i-1/2}^n (c_{i-1/2}^n)^2 \frac{r_i r_i \Delta t}{r_{i-1/2} (r_i - r_{i-1})}, \quad (4.89)$$

$$D_i = u_i^n - \frac{r_i \Delta t}{M_i} \left((p + q)_{i+1/2}^n - (p + q)_{i-1/2}^n \right). \quad (4.90)$$

Der Lagrange-Schritt ändert die Zustandsvariable $\rho \epsilon$ gemäß

$$\tilde{\rho}_{i+1/2} \tilde{\epsilon}_{i+1/2} \left(\tilde{r}_{i+1}^2 - \tilde{r}_i^2 \right) / 2 = \rho_{i+1/2}^n \epsilon_{i+1/2}^n \left(r_{i+1}^2 - r_i^2 \right) / 2 - \rho_{i+1/2}^{n+1/2} \left(r_{i+1} u_{i+1}^* - r_i u_i^* \right) \Delta t, \quad (4.91)$$

wobei es scheint, daß man besser

$$r_i^{n+1/2} := r_i + \frac{1}{2} u_i^* \Delta t, \quad (4.92)$$

anstelle der „falschen“ r_i im Divergenz-Term auf der rechten Seite in Gl.(4.91) verwenden müßte. Jedoch würde dies zu einem Konflikt bei der Energieerhaltung führen, da auch die Gl.(4.84) nur r_i als Vorfaktor der Druckdifferenz

enthält. Die Vernachlässigung gewisser Terme der Ordnung Δt^2 ist notwendig, wenn ein in den \tilde{u}_i lineares tridiagonales Gleichungssystem erhalten werden soll. Für nichtlineare Differenzgleichungen zweiter Ordnung gibt es keine schnell konvergierenden Verfahren.

Der Beweis der Konservativität der Gesamtenergie auf dem dualen Gitter ist analog zum Fall mit kartesischen Koordinaten, die Änderung der kinetischen Energie lautet

$$M_i (\tilde{u}_i - u_i^n) \frac{1}{2} (\tilde{u}_i + u_i^n) = r_i (p_{i-1/2}^{n+1/2} - p_{i+1/2}^{n+1/2}) u_i^* \Delta t. \quad (4.93)$$

Wegen der Definition der Masse auf dem dualen Gitter ist die innere Energie durch (siehe dazu die Betrachtung zu Gl.(4.101) weiter unten)

$$M_i \epsilon_i := \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) M_{i-1/2} \epsilon_{i-1/2} + \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) M_{i+1/2} \epsilon_{i+1/2} \right], \quad (4.94)$$

gegeben. Wegen Gl.(4.91) folgt daraus

$$M_i (\tilde{\epsilon}_i - \epsilon_i) = -\frac{\Delta t}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) p_{i-1/2}^{n+1/2} (r_i u_i^* - r_{i-1} u_{i-1}^*) + \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) p_{i+1/2}^{n+1/2} (r_{i+1} u_{i+1}^* - r_i u_i^*) \right], \quad (4.95)$$

und die Differenz der Gesamtenergie ist (nach Umgruppierung von Termen)

$$\begin{aligned} & M_i \left(\frac{\tilde{u}_i^2}{2} + \tilde{\epsilon}_i - \frac{u_i^2}{2} - \epsilon_i \right) = \\ & = \left[\frac{1}{2} \left(r_{i-1} u_{i-1}^* \left(1 + \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) + r_i u_i^* \left(1 - \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) \right) p_{i-1/2}^{n+1/2} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left(r_i u_i^* \left(1 + \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) + r_{i+1} u_{i+1}^* \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) \right) p_{i+1/2}^{n+1/2} \right] \Delta t. \quad (4.96) \end{aligned}$$

Damit ist Gl.(4.96) in Fluß-Differenz-Form mit der Flußfunktion bei $(i+1/2)$

$$\frac{1}{2} \left(r_i u_i^* \left(1 + \frac{\Delta r}{4r_{i+1/2}} \right) + r_{i+1} u_{i+1}^* \left(1 - \frac{\Delta r}{4r_{i+1/2}} \right) \right) p_{i+1/2}^{n+1/2},$$

und der Term bei $(i-1/2)$ folgt mittels Indexverschiebung. Diese Demonstration erfolgte nur zum Zweck des Nachweises der Konservativität, keine der Formeln ab Gl.(4.93) wird im Programm benötigt.

Im Advektionsschritt könnte man die Flußfunktion konstruieren, indem der Donor-Wert mit $r_i u_i^* \Delta t$ multipliziert wird, das heißt der Massen-Fluß (multipliziert mit Δt) wäre

$$\Phi_i = \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\rho}_{i-1/2} r_i^{n+1/2} u_i^* \Delta t, \quad (u_i^* > 0) \\ \tilde{\rho}_{i+1/2} r_i^{n+1/2} u_i^* \Delta t, \quad (u_i^* \leq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.97)$$

und analog für $(\rho\epsilon)$. Dies setzt voraus, daß Massendichte und Dichte der inneren Energie nach dem Lagrange-Schritt räumlich gemittelt werden. Aber die Deformationsrate ist r -abhängig, sodaß es besser ist, die Einflußzone vor dem Advektionsschritt zu betrachten, d. h. das Intervall $(r_i - \hat{u}_i \Delta t; r_i)$. Hierbei ist \hat{u}_i die Geschwindigkeit entlang derjenigen Stromlinie, welche r_i am Ende des Zeitschritts erreicht, diese lautet

$$\hat{u}_i := \left\{ \begin{array}{l} \frac{u_i^*}{\left[1 + (u_i^* - u_{i-1}^*) \frac{\Delta t}{\Delta x}\right]}, \quad u_i^* > 0 \\ \frac{u_i^*}{\left[1 + (u_{i+1}^* - u_i^*) \frac{\Delta t}{\Delta x}\right]}, \quad u_i^* \leq 0 \end{array} \right\}. \quad (4.98)$$

Das Volumen der Einflußregion ist dann

$$\frac{1}{2} (r_i^2 - (r_i - \hat{u}_i \Delta t)^2) = \left(r_i - \frac{1}{2} \hat{u}_i \Delta t \right) \hat{u}_i \Delta t, \quad (4.99)$$

und die Masse innerhalb des Gebiets bleibt erhalten. Somit ist eine alternative Definition der Funktion Φ_i

$$\Phi_i = \left\{ \begin{array}{l} \rho_{i-1/2} \left(r_i - \frac{1}{2} \hat{u}_i \Delta t \right) \hat{u}_i \Delta t, \quad (u_i^* > 0) \\ \rho_{i+1/2} \left(r_i - \frac{1}{2} \hat{u}_i \Delta t \right) \hat{u}_i \Delta t, \quad (u_i^* \leq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.100)$$

wobei nun der Donor-Wert der Dichte *vor dem Lagrange-Schritt* auftritt. In kartesischen Koordinaten sind beide Konstruktionen von Φ_i äquivalent, weil Substitutionen $r_i^{n+1/2} \rightarrow 1$ und $r_i - \hat{u}_i \Delta t / 2 \rightarrow 1$ erfolgen und dann die Identität $\tilde{\rho}_{i+1/2} (1 + (u_{i+1}^* - u_i^*) \Delta t / \Delta x) = \rho_{i+1/2}$ gilt. Der Wert der spezifischen Energie nach dem Lagrange-Schritt wird mit Hilfe der Invarianz der Masse einer mitbewegten Gitterzelle und den Gln.(4.82, 4.91) gefunden, und der Advektions-Fluß ergibt sich, indem man Φ_i mit dem Donor-Wert $\tilde{\epsilon}_{i-1/2}$ bzw. $\tilde{\epsilon}_{i+1/2}$ multipliziert.

Die Impuls-Advektion in der radialen Richtung ist etwas komplizierter, durch die Definition der Masse M_i , Gl.(4.85). Eine etwas andere Form ergibt sich, wenn man M_i in Gl.(4.85) durch die Massen in den angrenzenden Zellen ausdrückt

$$M_i = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) M_{i-1/2} + \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) M_{i+1/2} \right], \quad (4.101)$$

mit $M_{i+1/2} := \rho_{i+1/2} r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)$. Wird der Massenfluß Φ_i während des Advektionsschritts wie oben berechnet, so ändern sich die Massen in der Zelle des Eulerschen Gitters entsprechend

$$M_{i+1/2}^{n+1} = M_{i+1/2}^n + \Phi_i - \Phi_{i+1}, \quad (4.102)$$

Wendet man die Mittelungsformel der Masse des dualen Gitters Gl.(4.101) vor und nach dem Advektionsschritt an, dann entsteht nach einigen trivialen algebraischen Umformungen

$$\begin{aligned} M_i^{(n+1)} = M_i^{(n)} + \\ + \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) \Phi_{i-1} + \left(1 - \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) \Phi_i \right] - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) \Phi_i + \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) \Phi_{i+1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.103)$$

Das erlaubt es, den advektiven Massenfluß auf dem dualen Gitter, bei $r_{i+1/2}$ mit

$$\Phi_{i+1/2} := \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) \Phi_i + \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) \Phi_{i+1} \right], \quad (4.104)$$

zu identifizieren. Damit gilt nun auch wieder Gl.(4.68) für die Impuls-Advektion. Die Geschwindigkeiten $\hat{u}_{i\pm 1/2}$ ergeben sich dabei wie in kartesischen Koordinaten aus Gl.(4.69). Letzteres ist vielleicht nicht ganz befriedigend. Eine Modifikation, analog der Betrachtungen zur Herleitung der Gl.(4.69) im vorigen Abschnitt (bei der Integration im Einflußgebiet tritt ein zusätzlicher Faktor r auf) ergibt, nach einigen algebraischen Umformungen

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i+1/2} = \tilde{u}_i + \\ + \left[\frac{M_i - \Phi_{i+1/2}}{2M_i} + \frac{\Phi_{i+1/2}^2 \Delta r}{6M_i(2M_i r_{i+1/2} - \Phi_{i+1/2} \Delta r)} \right] \Delta_{i+1/2} u, \end{aligned} \quad (4.105)$$

für $\Phi_{i+1/2} > 0$ bzw.

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i+1/2} = \tilde{u}_{i+1} - \\ - \left[\frac{M_{i+1} + \Phi_{i+1/2}}{2M_{i+1}} - \frac{\Phi_{i+1/2}^2 \Delta r}{6M_{i+1}(2M_{i+1} r_{i+1/2} - \Phi_{i+1/2} \Delta r)} \right] \Delta_{i+1/2} u, \end{aligned} \quad (4.106)$$

für $\Phi_{i+1/2} \leq 0$. Die transversalen Geschwindigkeiten, $v_{i+1/2,j}$ werden mit der Unterkante der Gitterzelle $(i+1/2, j+1/2)$ assoziiert. Während des Advektionsschritts in radialer Richtung gibt es keine Modifikation des Verfahrens gegenüber kartesischen Koordinaten. Dies ist so, weil beide sich an der Unterkante berührenden Zellen die selben Grenzen in radialer Richtung haben.

Die Masse des Kontrollvolumens an der Unterkante ist darum einfach die mit $1/2$ gewichtete Summe der Massen angrenzender Zellen.

Anschließend muß das Verfahren noch für die z -Richtung diskutiert werden. Zur Veranschaulichung ist es besser, in einem um 90 Grad gedrehten Koordinatensystem zu denken. Die einzige Änderung gegenüber kartesischen Koordinaten ist der Advektionsschritt für die transversale Geschwindigkeitskomponente, in diesem Fall die radiale Komponente $u_{i,j+1/2}$. Das Kontrollvolumen ist die Region $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (z_j, z_{j+1})$. Der Massenfluß bei $r_{i,j}$ ergibt sich zu

$$\Phi_{i,j} := \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\Delta r_{i-1/2}}{4r_{i-1/2}} \right) \Phi_{i-1/2,j} + \left(1 - \frac{\Delta r_{i+1/2}}{4r_{i+1/2}} \right) \Phi_{i+1/2,j} \right], \quad (4.107)$$

wobei der Massenfluß auf dem primären Gitter die Form

$$\Phi_{i+1/2,j} = \rho_{i+1/2,j} r_{i+1/2} \hat{v}_{i+1/2,j} \Delta t, \quad (4.108)$$

mit Donor-Werten (in j -Richtung) für $\rho_{i+1/2,j}$. Die diskrete Advektion von Masse und Impuls im Kontrollvolumen für die radiale Komponente der Geschwindigkeit beim Schritt in z -Richtung sind nun durch

$$M_{i,j+1/2}^{n+1} = M_{i,j+1/2}^n + \Phi_{i,j} - \Phi_{i,j+1}, \quad (4.109)$$

$$M_{i,j+1/2}^{n+1} u_{i,j+1/2}^{n+1} = M_{i,j+1/2}^n u_{i,j+1/2}^n + (\Phi_{i,j} \hat{u}_{i,j} - \Phi_{i,j+1} \hat{u}_{i,j+1}), \quad (4.110)$$

gegeben, wobei $\hat{u}_{i,j}$ wieder analog zu Gl.(4.69) berechnet wird.

4.3.5 SOVA-S: sphärische Symmetrie

Es wird auch eine Variante in sphärischer Symmetrie benötigt, also quasi-eindimensional, z. B. für die Betrachtungen zur Expansion von beim Einschlag erzeugten Dämpfen (siehe Kap. 3). Diese eigenständige Modifikation wird hier als SOVA-S bezeichnet. Die Euler-Gleichung für die radiale Geschwindigkeit u lautet

$$\frac{du}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r}, \quad (4.111)$$

und sie kann nicht in eine konservative Form für die Impulsdichte gebracht werden. Bei der Diskretisierung beziehen sich die Druckwerte jetzt auf irgendwelche Positionen $R_{i+1/2}$ und die Grenzen der Zellen liegen bei r_i , dort will man die Beschleunigung berechnen. Man kann nun nach einer Idee von [Oran und Boris \(1987\)](#) dieses Problem so lösen, daß ein fiktiver Druck p_i^* bei r_i derart bestimmt wird, daß die Beschleunigung in der linken Hälfte

zwischen $R_{i-1/2}$ und r_i mit der in der rechten Hälfte zwischen r_i und $R_{i+1/2}$ übereinstimmt

$$\frac{p_i^* - p_{i-1/2}}{\rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2})} = \frac{p_{i+1/2} - p_i^*}{\rho_{i+1/2}(R_{i+1/2} - r_i)}, \quad (4.112)$$

dies führt zunächst auf p_i^* :

$$p_i^* = \frac{p_{i-1/2}\rho_{i+1/2}(R_{i+1/2} - r_i) + p_{i+1/2}\rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2})}{\rho_{i+1/2}(R_{i+1/2} - r_i) + \rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2})}. \quad (4.113)$$

Als nächstes wird p_i^* in Gl.(4.112) eingesetzt, so gilt in der linken Hälfte ($R_{i-1/2}; r_i$)

$$\frac{p_i^* - p_{i-1/2}}{\rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2})} = \frac{p_{i+1/2} - p_{i-1/2}}{\rho_{i+1/2}(R_{i+1/2} - r_i) + \rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2})}, \quad (4.114)$$

und in der rechten Hälfte ergibt sich genau der selbe Wert der Beschleunigung. Man diskretisiert also die Euler-Gleichung als

$$\frac{\tilde{u}_i - u_i^n}{\Delta t} = - \frac{p_{i+1/2}^{n+1/2} - p_{i-1/2}^{n+1/2}}{\rho_{i+1/2}(R_{i+1/2} - r_i) + \rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2})}, \quad (4.115)$$

wobei $p_{i+1/2}^{n+1/2}$ eine Abschätzung des Drucks zum Zeitpunkt $t_n + \Delta t/2$ ist; diese Abschätzung wird impliziter Art sein, siehe weiter unten. Bisher sind die $R_{i+1/2}$ noch nicht festgelegt, und [Oran und Boris \(1987\)](#) geben keine Begründung ihrer speziellen Wahl an. Die $R_{i+1/2}$ sind jedoch noch weiteren Bedingungen unterworfen. Dazu betrachtet man den Eulerschen Advektionschritt, wo die Impuls-Advektion konservativ sein soll. Um den Impuls zu berechnen, kann man eine Masse bei r_i definieren (die Notwendigkeit dieser Definition folgt später auch wegen der Erhaltung der Gesamtenergie während des Lagrange-Schritts)

$$M_i := r_i^2 \left(\rho_{i+1/2}(R_{i+1/2} - r_i) + \rho_{i-1/2}(r_i - R_{i-1/2}) \right). \quad (4.116)$$

Diese ist ein gewichtetes Mittel der tatsächlichen Massen in den angrenzenden Zellvolumen,

$$M_{i+1/2} = \rho_{i+1/2} r_{i+1/2}^2 \left(1 + \frac{1}{12} \xi_{i+1/2}^2 \right) \Delta r, \quad (4.117)$$

mit $\Delta r := r_{i+1} - r_i$, als Koordinatendifferenz (eigentlich muß Δr einen halbzahlichen Index tragen, aber nur bei nichtäquidistantem Gitter), $r_{i+1/2} := (r_{i+1} + r_i)/2$ als geometrischem Mittelwert, sowie der Abkürzung $\xi_{i+1/2} := \Delta r/r_{i+1/2}$; die Formel für $M_{i+1/2}$ ergibt sich in sphärischer Symmetrie (bis auf

einen Faktor $4\pi/3$, welcher jedoch immer fortgelassen wird). Die weitere Idee ist, daß sich die Massen $M_{i+1/2}$ während des Advektions-Schritts konservativ ändern, also mit Hilfe einer numerischen Flussfunktion Φ_i , so daß

$$M_{i+1/2}^{n+1} = M_{i+1/2}^n + \Phi_i - \Phi_{i+1}, \quad (4.118)$$

und daraus muß sich mit auch eine konservative Form der Änderung von M_i ergeben, wobei die neue Flußfunktion bei $(i + 1/2)$ eine gewichtete Summe von Φ_i und Φ_{i+1} ist, dies macht die $R_{i+1/2}$ eindeutig. Bemerkenswerterweise taucht dieser Gedankengang nicht in der Literatur auf. Wir beweisen nun, daß der Ansatz

$$R_{i+1/2} = r_{i+1/2} \left(1 + \frac{1}{12} \xi_{i+1/2}^2 \right), \quad (4.119)$$

das Problem löst. Damit ergibt sich für M_i nach expliziter Rechnung

$$M_i = \frac{1}{2} \left\{ \rho_{i+1/2} r_{i+1/2}^2 \left(1 + \frac{\xi_{i+1/2}^2}{12} - \frac{5\xi_{i+1/2}}{6} \left(1 - \frac{\xi_{i+1/2}^2}{20} \right) \right) \Delta r + \right. \\ \left. + \rho_{i-1/2} r_{i-1/2}^2 \left(1 + \frac{\xi_{i-1/2}^2}{12} + \frac{5\xi_{i-1/2}}{6} \left(1 - \frac{\xi_{i-1/2}^2}{20} \right) \right) \Delta r \right\}. \quad (4.120)$$

Als Funktion der Massen der angrenzenden Zellen entspricht dem

$$M_i = \frac{1}{2} \left\{ M_{i+1/2} (1 - \zeta_{i+1/2}) + M_{i-1/2} (1 + \zeta_{i-1/2}) \right\}, \quad (4.121)$$

mit der Abkürzung

$$\zeta_{i+1/2} := \frac{5}{6} \xi_{i+1/2} \frac{\left(1 - \frac{\xi_{i+1/2}^2}{20} \right)}{\left(1 + \frac{\xi_{i+1/2}^2}{12} \right)}. \quad (4.122)$$

Die Diskretisierung der Advektionsgleichung ergibt sich als

$$M_i^{n+1} = M_i^n + \frac{1}{2} \left\{ (1 - \zeta_{i+1/2}) (\Phi_i - \Phi_{i+1}) + \right. \\ \left. + (1 + \zeta_{i-1/2}) (\Phi_{i-1} - \Phi_i) \right\}. \quad (4.123)$$

Durch Umordnung einiger Terme wird daraus

$$M_i^{n+1} = M_i^n + \left\{ \frac{1}{2} \left[(1 + \zeta_{i-1/2}) \Phi_{i-1} + (1 - \zeta_{i-1/2}) \Phi_i \right] - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left[(1 + \zeta_{i+1/2}) \Phi_i + (1 - \zeta_{i+1/2}) \Phi_{i+1} \right] \right\}. \quad (4.124)$$

Nun ist erkennbar, daß die numerische Flußfunktion der Masse bei $(i + 1/2)$ wie folgt lautet:

$$\Phi_{i+1/2} := \frac{1}{2} \left[(1 + \zeta_{i+1/2}) \Phi_i + (1 - \zeta_{i+1/2}) \Phi_{i+1} \right], \quad (4.125)$$

und damit

$$M_i^{n+1} = M_i^n + (\Phi_{i-1/2} - \Phi_{i+1/2}), \quad (4.126)$$

in (konservativer) Fluß-Differenz Form ist. Jede andere Konstruktion der $R_{i+1/2}$ zerstört die Konservativität in Gl.(4.124), was hier jedoch nicht bewiesen werden soll. Weiterhin wird die diskrete Form der Eulerschen Impuls-Advektionsgleichung wie vorher nach Gl.(4.68) gebildet

$$M_i^{n+1} u_i^{n+1} = M_i^n \tilde{u}_i + (\Phi_{i-1/2} \hat{u}_{i-1/2} - \Phi_{i+1/2} \hat{u}_{i+1/2}) \quad (4.127)$$

wobei \tilde{u}_i der Wert der Geschwindigkeit am Ende des Lagrange-Schrittes und die $\hat{u}_{i\pm 1/2}$ wieder monotonisierte lineare Upwind-Interpolationen der \tilde{u}_i nach Gl.(4.69) sind.

Bei sphärischer Symmetrie ergeben sich einige Änderungen in der Energiegleichung, so ist beispielsweise die Divergenz der Geschwindigkeit

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{\partial u}{\partial r} + 2 \frac{u}{r}, \quad (4.128)$$

in geeigneter Form zu berechnen. Dazu nimmt man an, daß das Geschwindigkeitsfeld in der Zelle linear verläuft

$$u(r) = u_i + \frac{r - r_i}{\Delta r} (u_{i+1} - u_i). \quad (4.129)$$

Weiterhin ist aus dem vorigen Abschnitt bekannt, daß sich Größen mit halbzahligem Indizes wie z.B. der Druck auf die Positionen $R_{i+1/2}$ beziehen. Die Divergenz der Geschwindigkeit wird also bei $R_{i+1/2}$ benötigt, die einzelnen Terme sind mit Hilfe von Gln.(4.119,4.129)

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{u_{i+1} - u_i}{r_{i+1} - r_i}, \quad (4.130)$$

$$\frac{u(R_{i+1/2})}{R_{i+1/2}} = \frac{1}{2} \frac{(r_{i+1/2} + \Delta r/6)u_{i+1} - (r_{i+1/2} - \Delta r/6)u_i}{r_{i+1/2}R_{i+1/2}}, \quad (4.131)$$

und durch explizite Rechnung ergibt sich

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u}{\partial r} + 2 \frac{u(R_{i+1/2})}{R_{i+1/2}} = \\ & = \frac{(r_{i+1/2} + \Delta r/2)^2 u_{i+1} - (r_{i+1/2} - \Delta r/2)^2 u_i}{r_{i+1/2} R_{i+1/2} \Delta r} = \\ & = \frac{r_{i+1}^2 u_{i+1} - r_i^2 u_i}{r_{i+1/2} R_{i+1/2} \Delta r}. \end{aligned} \quad (4.132)$$

Der Nenner im Ausdruck auf der rechten Seite ist gerade das Zellvolumen (bis auf einen Faktor $4\pi/3$). Man beachte, daß jede andere Wahl für $R_{i+1/2}$, als Gl.(4.119), diese einfache Form des Ausdrucks für die Divergenz zerstören würde, was nachträglich die Festlegung von $R_{i+1/2}$ im vorigen Paragraphen rechtfertigt (diese Wahl war ohnehin zwingend, siehe die Betrachtung zur Impuls-Advektion). Nun läßt sich eine konsistente Diskretisierung der Bilanzgleichung für die innere Energie angeben

$$\begin{aligned} \rho_{i+1/2}^n \tilde{\epsilon}_{i+1/2} r_{i+1/2} R_{i+1/2} \Delta r &= \rho_{i+1/2}^n \epsilon_{i+1/2}^n r_{i+1/2} R_{i+1/2} \Delta r - \\ &\quad - p_{i+1/2}^{n+1/2} (r_{i+1}^2 u_{i+1}^* - r_i^2 u_i^*) \Delta t, \end{aligned} \quad (4.133)$$

und dies ist die Änderung beim Lagrange-Schritt. Man beachte, daß Geschwindigkeit und Druck Approximationen zum Zeitpunkt $t_n + \Delta t/2$ darstellen. Bei der Herleitung wurde die Invarianz der Masse benutzt, daher steht auf der linken Seite das Produkt von Dichte und Volumen zum Zeitpunkt t_n .

Die Gesamtenergie bleibt während des Lagrange-Schrittes erhalten; der Beweis wird hier fortgelassen, es wird lediglich das Ergebnis angegeben

$$\begin{aligned} M_i \left(\frac{\tilde{u}_i^2}{2} + \tilde{\epsilon}_i - \frac{u_i^2}{2} - \epsilon_i \right) &= \\ &= \left[\frac{1}{2} (r_{i-1}^2 u_{i-1}^* (1 + \zeta_{i-1/2}) + r_i^2 u_i^* (1 - \zeta_{i-1/2})) p_{i-1/2}^{n+1/2} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} (r_i^2 u_i^* (1 + \zeta_{i+1/2}) + r_{i+1}^2 u_{i+1}^* (1 - \zeta_{i+1/2})) p_{i+1/2}^{n+1/2} \right] \Delta t. \end{aligned} \quad (4.134)$$

Dies ist in Fluß-Differenz-Form und damit konservativ.

Um höhere Stabilität und Genauigkeit zu erreichen, sollen die Geschwindigkeiten am Ende des Lagrange-Schrittes wieder mit Hilfe einer impliziten Methode berechnet werden, siehe dazu [Shuvalov \(1999\)](#) oder [Oran und Boris \(1987\)](#). Dazu wird die diskrete Euler-Gleichung, Gl.(4.115) in der Form

$$\tilde{u}_i = u_i - \frac{\Delta t}{(\rho \Delta r)_i} (p_{i+1/2}^{n+1/2} - p_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (4.135)$$

mit der Definition

$$(\rho \Delta r)_i := \rho_{i+1/2} (R_{i+1/2} - r_i) + \rho_{i-1/2} (r_i - R_{i-1/2}), \quad (4.136)$$

geschrieben, und der Druck zum halben Zeitschritt wird mit Hilfe von

$$p_{i+1/2}^{n+1/2} = (p + q)_{i+1/2}^n - \rho_{i+1/2}^n (\epsilon_{i+1/2}^n)^2 \frac{(r_{i+1}^2 \tilde{u}_{i+1} - r_i^2 \tilde{u}_i) \Delta t}{r_{i+1/2} R_{i+1/2} \Delta r} \frac{\Delta t}{2}, \quad (4.137)$$

approximiert, wobei $c_{i+1/2}^n$ die adiabatische Schallgeschwindigkeit zum Anfangszeitpunkt t_n darstellt und $q_{i+1/2}^n$ ist der quadratische Anteil der künstlichen Viskosität. Man beachte, daß die Divergenz der Geschwindigkeit hier wie in der Energiegleichung, Gl.(4.133) angesetzt wurde, jedoch als Funktion der Geschwindigkeiten zum Ende des Lagrange-Schrittes, \tilde{u}_i . Es ergibt sich wieder das tridiagonale System für die \tilde{u}_i , Gl.(4.53) mit den Koeffizienten

$$A_i := \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho \Delta r)_i} \frac{r_{i+1}^2 \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \Delta t}{r_{i+1/2} R_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)}, \quad (4.138)$$

$$B_i := 1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho \Delta r)_i} \left[\frac{r_i^2 \rho_{i+1/2}^n (c_{i+1/2}^n)^2 \Delta t}{r_{i+1/2} R_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} + \frac{r_i^2 \rho_{i-1/2}^n (c_{i-1/2}^n)^2 \Delta t}{r_{i-1/2} R_{i-1/2} (r_i - r_{i-1})} \right], \quad (4.139)$$

$$C_i := \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho \Delta r)_i} \frac{r_{i-1}^2 \rho_{i-1/2}^n (c_{i-1/2}^n)^2 \Delta t}{r_{i-1/2} R_{i-1/2} (r_i - r_{i-1})}, \quad (4.140)$$

$$D_i := u_i^n - \frac{\Delta t}{(\rho \Delta r)_i} ((p+q)_{i+1/2}^n - (p+q)_{i-1/2}^n). \quad (4.141)$$

Der Eulersche Remap- oder Advektionsschritt von skalaren Variablen wie $\rho_{i+1/2}$ und $\rho_{i+1/2} \epsilon_{i+1/2}$ nach dem Lagrange-Schritt ist analog wie in Zylinderkoordinaten konstruiert (siehe die entsprechende Betrachtung für SOVA-Z), lediglich die numerische Flußfunktion Φ_i für die Masse muß bekannt sein. Hierzu wird die Einflußregion an der Kante i wie in SOVA-Z konstruiert, d.h. mit Hilfe von \hat{u}_i nach Gl.(4.98), lediglich das Volumen der Einflußregion ist gegenüber Gl.(4.99) etwas verändert:

$$\frac{1}{3} (r_i^3 - (r_i - \hat{u}_i \Delta t)^3) = \left(r_i (r_i - \hat{u}_i \Delta t) + \frac{1}{3} (\hat{u}_i \Delta t)^2 \right) \hat{u}_i \Delta t, \quad (4.142)$$

sodaß endlich der Remap-Fluß der Masse Φ

$$\Phi_i = \left\{ \begin{array}{l} \rho_{i-1/2} \left(r_i (r_i - \hat{u}_i \Delta t) + \frac{1}{3} (\hat{u}_i \Delta t)^2 \right) \hat{u}_i \Delta t, \quad (u_i^* > 0) \\ \rho_{i+1/2} \left(r_i (r_i - \hat{u}_i \Delta t) + \frac{1}{3} (\hat{u}_i \Delta t)^2 \right) \hat{u}_i \Delta t, \quad (u_i^* \leq 0), \end{array} \right\}, \quad (4.143)$$

lautet, wobei der Donor-Wert *vor dem Lagrange-Schritt* für die Dichte auftritt. Für die Energie-Advektion wird Φ_i mit $\tilde{\epsilon}_{i\pm 1/2}$ multipliziert, wie in SOVA-Z.

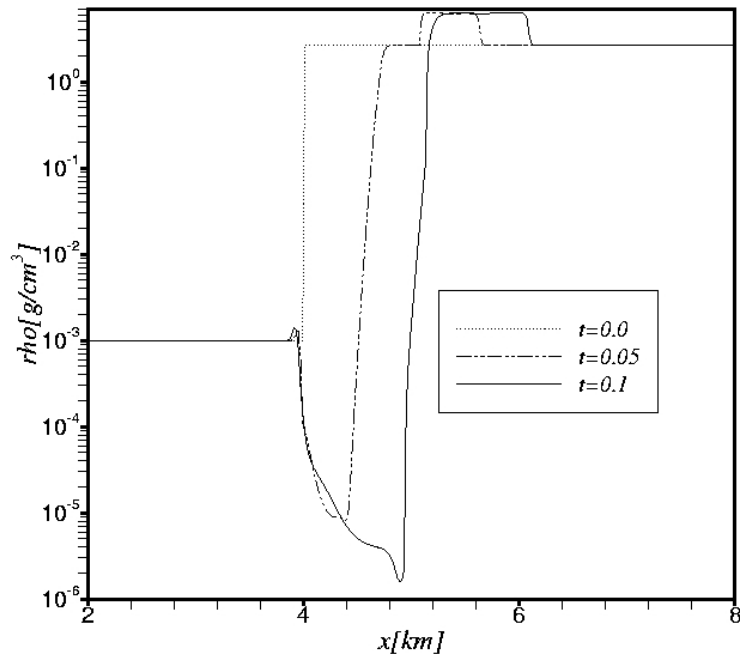


Abbildung 4.2: Dichte ρ für eindimensionales Einschlagsproblem.

4.3.6 Beispiel 1: Eindimensionales Einschlagsproblem

Als Testproblem für die Godunov-Methode wurde ein eindimensionaler Einschlag untersucht. Ein Projektil aus Granit von 1km Länge trifft mit 20km/s auf einen ruhenden Block aus dem selben Material, die Dichte ist in beiden Fällen 2.68gcm^{-3} . Der Impaktor bewegt sich nach rechts, und bei $t = 0$ ist die Kontaktzone bei 5km. Hinter dem Projektil befindet sich eine Atmosphäre, wo die Dichte 0.001g cm^{-3} beträgt, siehe Abb. 4.2. Der Anfangswert des Drucks ist überall gleich 10^5Pa ($= 10^{-4}\text{GPa}$), siehe Abb. 4.3. Das Projektil wird zum Zeitpunkt $t = 0$ „gestartet“, d. h. anfangs ist die Strömungsgeschwindigkeit hinter dem Impaktor Null, vgl. Abb. 4.4, und dadurch wird eine Kavität erzeugt. Dies ist unrealistisch, aber zugleich ein Test für die Robustheit der Methode. In Wirklichkeit entsteht ein Vakuum, wenn sich ein Kolben mit $u > 2c/(\gamma - 1)$ in einem mit Gas gefüllten Behälter herausbewegt. Die Abbildungen 4.2 bis 4.5 zeigen das Ergebnis der Simulation bis zu einer Zeit von 0.1 Sekunden. Aufgrund der Ein-Material-Beschreibung wird

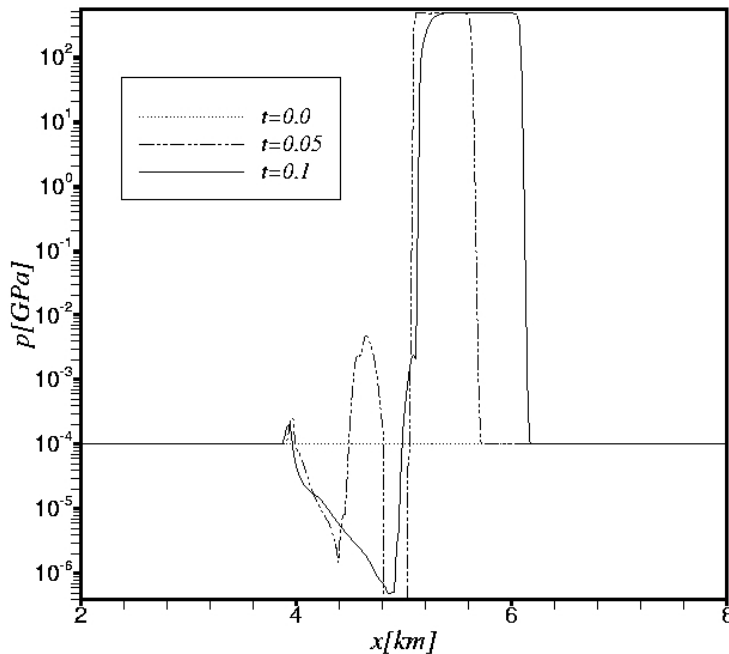


Abbildung 4.3: Druck p für eindimensionales Einschlagsproblem.

überall die Tillotson-Zustandsgleichung verwendet. Die Atmosphäre ähnelt trotzdem einem perfekten Gas, wegen des asymptotischen Verhaltens der Tillotson-Zustandsgleichung bei kleiner Dichte (vgl. Abschnitt 4.3.1). In Abbildung 4.2 ist der vordere Rand der Stoßwelle sehr deutlich zu erkennen. Außerdem ist nach 0.1 Sekunden am hinteren Rand des Projektils ein Gebiet mit Dichte weit unter dem “atmosphärischen” Wert entstanden. Der Druck, vgl. Abb. 4.3, ist sowohl im Impaktor als auch in dem Bereich, wo sich die Stoßwelle in das “Bodenmaterial” ausgebreitet hat, weitgehend konstant. Das Geschwindigkeitsprofil zeigt Abb. 4.4. Weiterhin ist die spezifische innere Energie in Abb. 4.5. zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Die Berechnung erfolgte mit einer Methode 2.Ordnung, wobei der Minmod-Limiter (siehe [LeVeque \(1990\)](#)) zur monotonisierten Interpolation verwendet wurde. Die Gitterauflösung betrug 50 Zellen pro Kilometer. Parameter der Tillotson-Zustandsgleichung sind [Melosh \(1989\)](#) entnommen. Zum Zeitpunkt $t = 0.1$ Sekunden hat die im Projektil zurücklaufende Stoßwelle bereits den hinteren

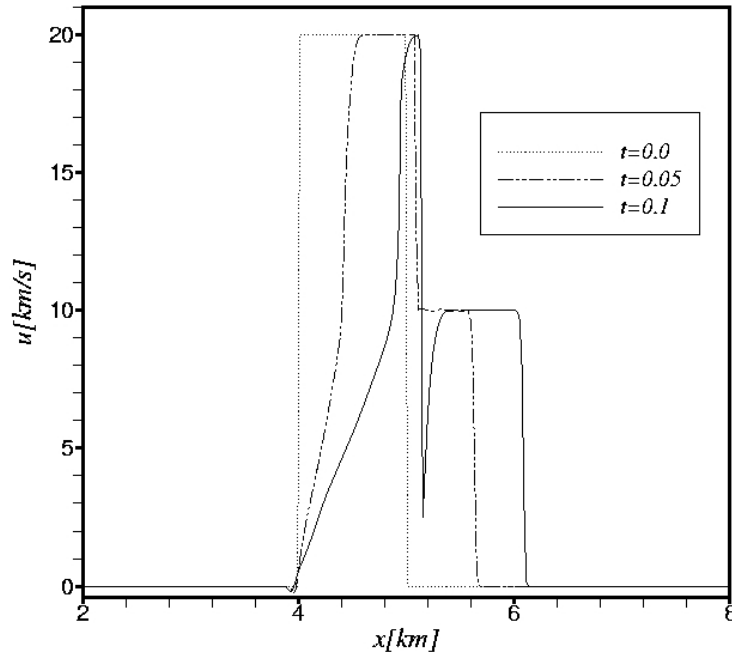


Abbildung 4.4: Geschwindigkeit u für eindimensionales Einschlagsproblem.

Rand desselben erreicht, und es beginnt sich eine Verdünnungswelle auszubreiten. Letzteres kann man auch aus Abb. 4.2. entnehmen. Die spezifische Energie im sehr dünnen Gas der Kavitätsregion wird danach erhöht, weil sich auch dort eine Stoßwelle ausbreitet. Wenn die Rechnungen noch weiter laufen, wird deutlich, daß der Impaktor verdampft, jedoch ist es wegen der Ein-Material-Behandlung schwer, atmosphärisches Gas von den Verdampfungsprodukten zu unterscheiden. Der HLLC Riemann-Löser erreicht eine gute Approximation der Kontakt-Unstetigkeit zwischen Projektil und Bodenmaterial, d. h. der Druck ist dort stetig. Dagegen ändert sich die spezifische innere Energie innerhalb der Zone zwischen den beiden divergierenden Stoßwellen stark, solange der Impaktor noch hohe Dichten hat. Bei der weiteren Ausbreitung der Stoßwelle heizt sich die Atmosphäre im Gebiet geringer Dichten stark auf, d.h. dort wächst der Maximalwert der spezifischen Energie zwischen $t = 0.1$ und $t = 0.11$ Sekunden plötzlich um ca. 1.5 Größenordnungen an, siehe Abb.4.5. Dies ist problematisch, weil dann der Zeitschritt des

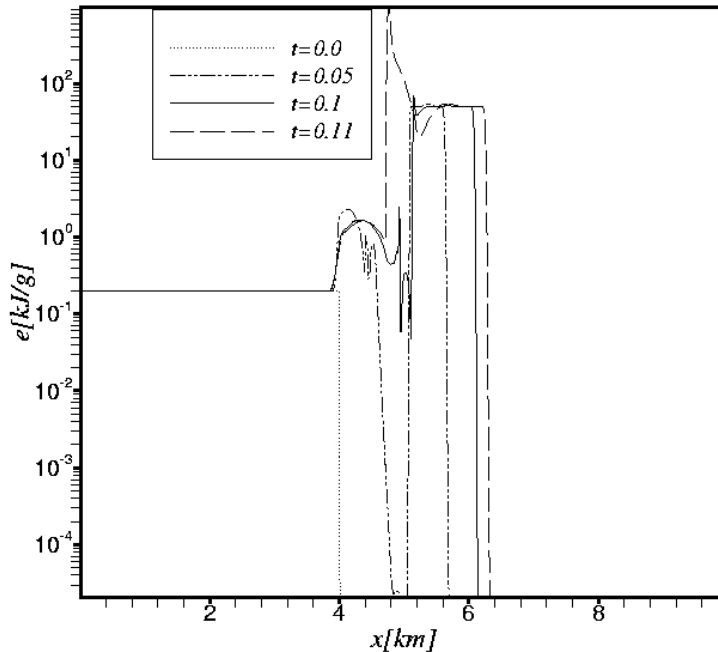


Abbildung 4.5: Spezifische innere Energie ϵ für eindimensionales Einschlagsproblem.

Verfahrens sehr klein werden muß. Dieses Problem wird uns noch in allen Varianten der Multi-Material Verfahren mit Godunov-Methode begegnen

4.3.7 Beispiel 2: Zweidimensionaler Einschlag, Zylinderkoordinaten

Die Godunov-Methode für nur ein Material ist nicht unbedingt geeignet, um eine realistische Kraterentstehung zu simulieren. Es ist jedoch auch möglich, mehrere Materialien hydrodynamisch zu beschreiben, ohne eine Volumenfraktion einzuführen, und dabei eine Godunov-Methode mit Riemann-Löser vom HLLC-Typ zu verwenden. Dazu wird die Gesamtdichte als lineare Summe der Einzeldichten der Materialien definiert,

$$\rho = \sum_m \rho^{(m)}, \quad (4.144)$$

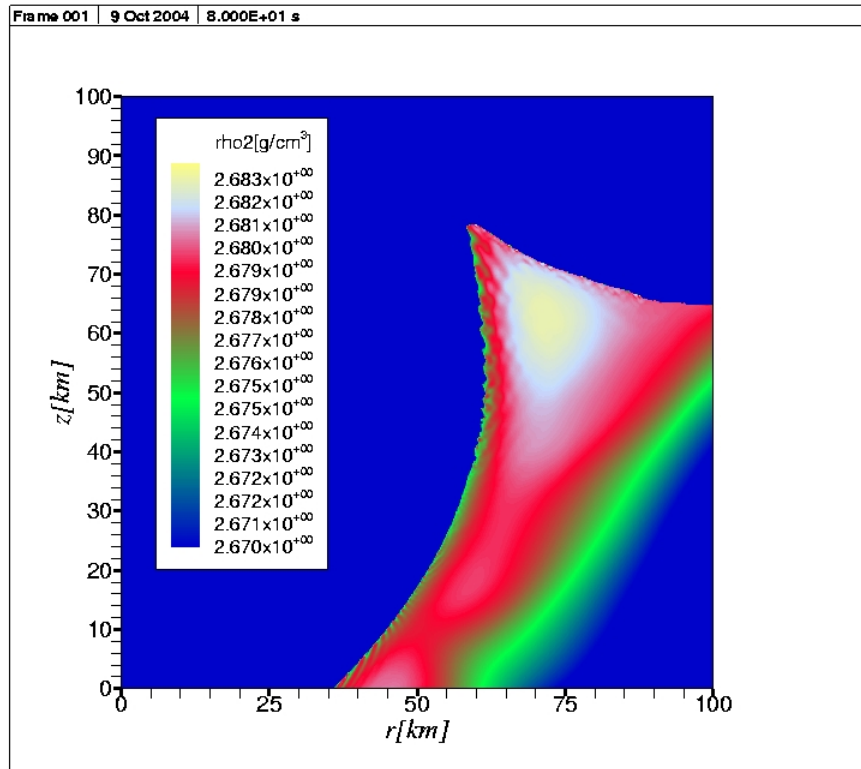


Abbildung 4.6: Dichte des Bodenmaterials nach 80 Sekunden, nur geringer Variationsbereich der Dichte dargestellt, siehe Text.

und ein analoges Gesetz für den Druck postuliert

$$p = \sum_m p^{(m)}, \quad (4.145)$$

damit entsteht formal eine Situation, wie in Gemischen idealer Gase. Die einzelnen Materialien erfüllen Massenbilanzen der Art (in einer Dimension)

$$\frac{\partial \rho^{(m)}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho^{(m)} u)}{\partial x} = 0, \quad (4.146)$$

und die Kontinuitätsgleichung für die Gesamtdichte ergibt sich aus der Summe dieser Gleichung über Materialsorten. Lokal sind alle Materialien vermischt, und man kann keine Materialgrenzen unterscheiden, sodaß ein diffusives Bild der Materialverteilung resultiert. Da alle Materialien die selbe

hydrodynamische Geschwindigkeit besitzen, gilt eine Euler-Gleichung in konservativer Form für den Gesamtimpuls

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + P)}{\partial x} = 0. \quad (4.147)$$

Die Energie-Gleichungen der für die Energiedichte der individuellen Materialien, $E^{(m)} := \rho^{(m)}(u^2/2 + \epsilon^{(m)})$ lauten

$$\frac{\partial E^{(m)}}{\partial t} + \frac{\partial(E^{(m)}u)}{\partial x} = -p^{(m)}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\rho^{(m)}}{\rho}u\frac{\partial p}{\partial x}, \quad (4.148)$$

wenn sich die einzelnen Materialien lokal adiabatisch verhalten. Eine Summation über Materialsorten ergibt daraus unter Benutzung des Additionsgesetzes der Drücke die konservative Form der Energiegleichung für die totale Energiedichte, $E = \sum_m E^{(m)}$,

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(E + p)u}{\partial x} = 0. \quad (4.149)$$

Weiterhin bildet man nun die folgende Differenz

$$\Delta E^{(m)} := E^{(m)} - \frac{\rho^{(m)}}{\rho}E, \quad (4.150)$$

welche die kinetische Energie nicht enthält (die total spezifische Energie ist $\epsilon = \sum_m (\rho^{(m)}/\rho)\epsilon^{(m)}$). Bei M Materialien sind nur $(M - 1)$ der Differenzen $\Delta E^{(m)}$ unabhängig, da ihre Summe über Materialsorten Null ergibt, wie man sich leicht überzeugt. Durch elementare Umformungen kann man zeigen, daß die Differenz $\Delta E^{(m)}$ der Bilanzgleichung

$$\frac{\partial \Delta E^{(m)}}{\partial t} + \frac{\partial(\Delta E^{(m)}u)}{\partial x} = \left(p \frac{\rho^{(m)}}{\rho} - p^{(m)} \right) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (4.151)$$

genügt, welche bis auf den Quellterm auf der rechten Seite in konservativer Form ist. Da die einzelnen Massendichten $\rho^{(m)}$, der Gesamtimpuls ρu , und die totale Energiedichte E konservative Bilanzgleichungen erfüllen, bietet es sich an, im Zustandsvektor $(M - 1)$ Energiedifferenzen $\Delta E^{(m)}$ und die Gesamtenergiedichte E als Energie-Komponenten zu verwenden.

Dies ist eine hybride Beschreibung, da nicht alle Materialien gleich behandelt werden. Bei drei unterschiedlichen Materialien, $m = 1$ für den Impaktor, $m = 2$ für das Bodenmaterial und $m = 3$ für die Atmosphäre, kann man z.B. anstelle $\Delta E^{(3)}$ als dritte Energievariable E im Zustandsvektor verwenden (natürlich kann im Programm $E^{(3)}$ ausgerechnet werden, wegen

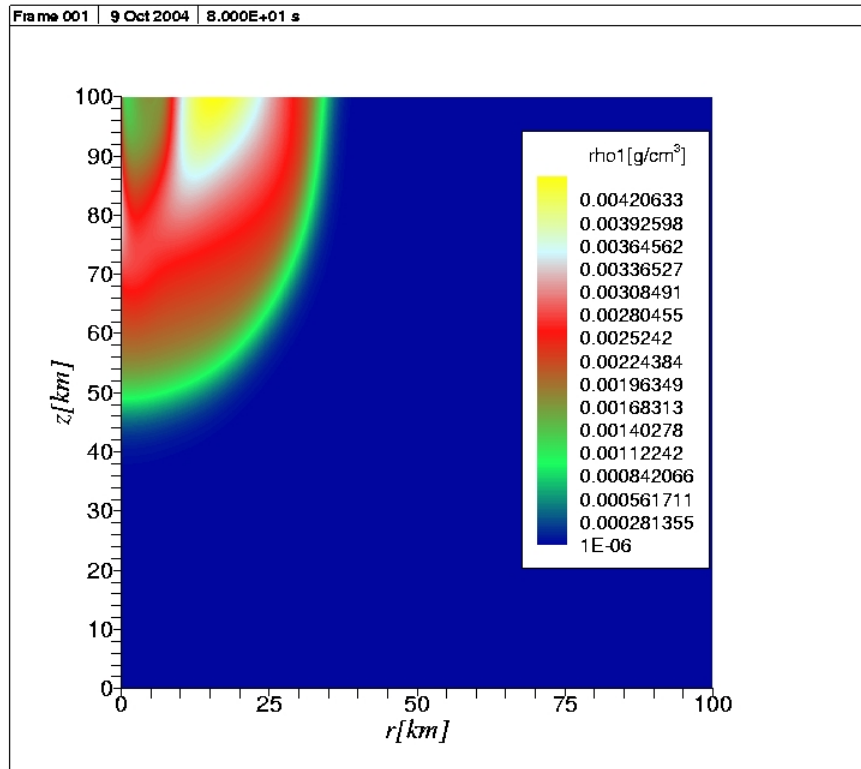


Abbildung 4.7: Dichte des Materials des Asteroiden nach 80 Sekunden.

$\sum_m \Delta E^{(m)} = 0$). Der nichtkonservative Term auf der rechten Seite der Bilanzgleichungen für die $\Delta E^{(m)}$ ist ein sogenannter Quellterm. In Zylinderkoordinaten ergeben sich ohnehin in sämtlichen Komponenten Quellterme, vergleiche dazu Abschnitt 4.3.2, wobei man die zeitliche Integration mit einer Prediktor-Korrektor-Methode behandelt.

Auf den konservativen Anteil der hydrodynamischen Gleichungen kann man eine gewöhnliche Godunov-Methode vom HLLC-Typ anwenden, wenn bekannt ist, wie die Größen $p^{(m),*}$ und u an der Kontakt-Unstetigkeit berechnet werden. Es handelt sich außerdem noch um ein effektives Ein-Material-Riemann-Problem. Dies wird weiter unten in Abschnitt 4.4.2 erläutert, es resultiert Gl.(4.181), welche gelöst werden kann, falls eine Abschätzung für den Gesamtdruck p^* an der Kontakt-Unstetigkeit aus einer vorherigen Iterationsstufe bekannt ist. Weiterhin wird dort auch gezeigt, daß individuelle spezifische Energien links und rechts der Kontakt-Unstetigkeit im Riemann-Problem der Gleichung der Stoßadiabate für das jeweilige Material genügen.

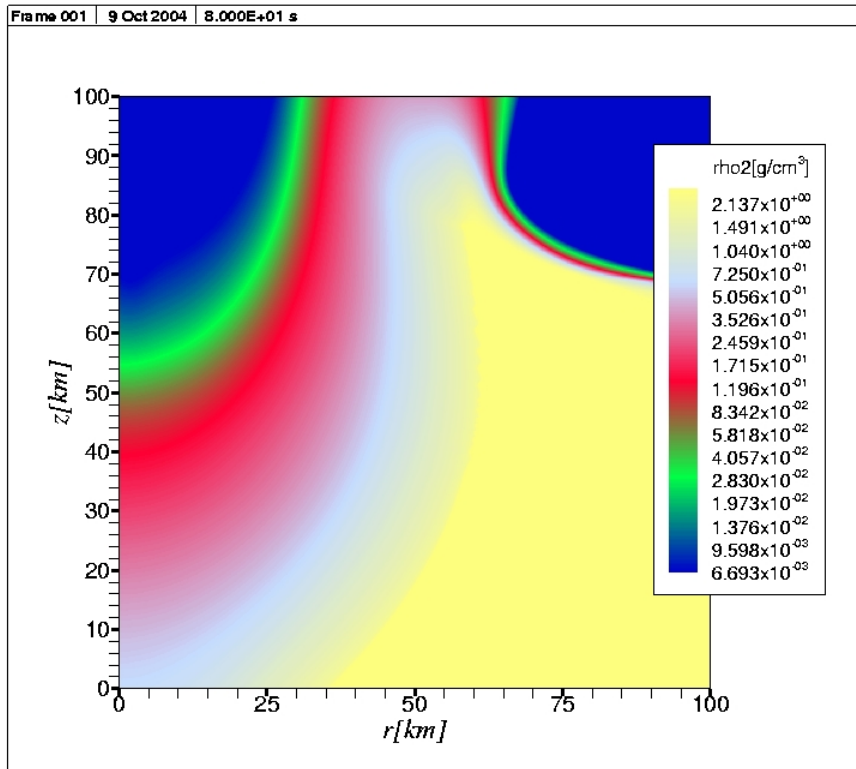


Abbildung 4.8: Dichte des Bodenmaterials nach 80 Sekunden, logarithmischer Maßstab.

Die unbekannt Dichten $\rho_{L,R}^{(m),*}$ links der Kontakt-Unstetigkeit ergeben sich aus Gl.(4.179) in Abschnitt 4.4.2, eine analoge Beziehung gilt rechts der Kontakt-Unstetigkeit. Damit ist klar, wie man das Riemann-Problem in HLLC-Approximation löst.

Im vorliegenden Beispiel wurde der senkrechte Einschlag eines Asteroiden mit 10 km Durchmesser auf einer Oberfläche aus Granit simuliert. Asteroid und Bodenmaterial werden mit Hilfe der gleichen Zustandsgleichung nach Tillotson für Granit, siehe Melosh (1989) beschrieben. Jedoch werden die Materialien bewußt unterschieden, damit ein Bild des Materialtransports entsteht. Als Atmosphäre wurde ein perfektes Gas mit $\gamma = 1.4$, einem konstanten Druck von 10^5 Pa und einer Dichte von 1 kg m^{-3} angenommen. Die Einschlagsgeschwindigkeit beträgt 15 km/s, was nahe der unteren Grenze für senkrechte terrestrische Einschläge liegt. Das Gitter hat eine Ausdehnung von 100×100 km in der r - z -Ebene, wobei die Planetenoberfläche bei einer Koordinate $z = 65$ km lag, und eine Auflösung von 200 Metern (500×500

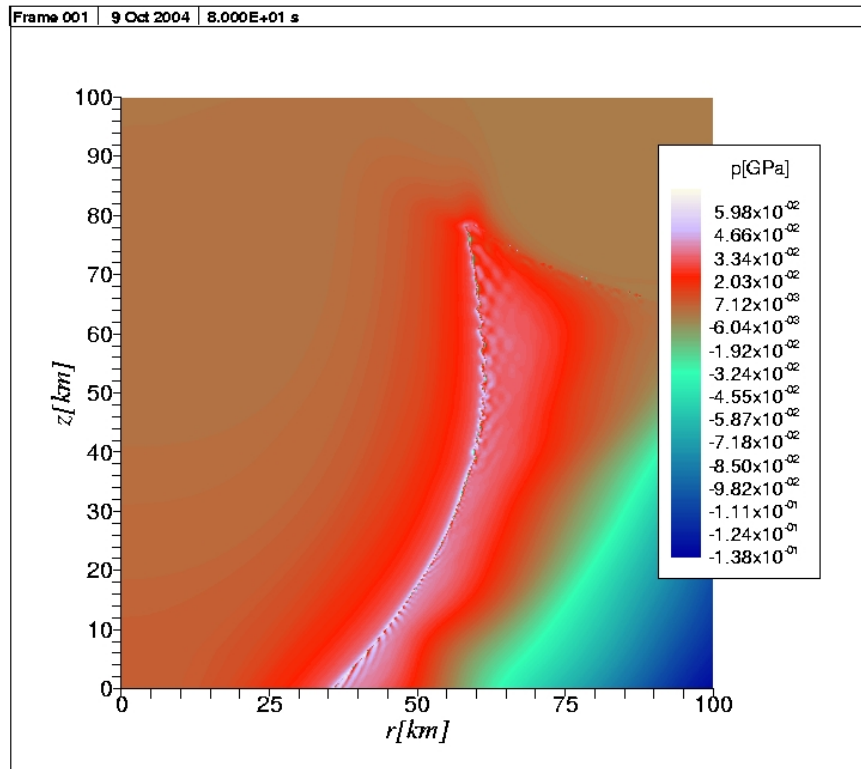


Abbildung 4.9: Druck nach 80 Sekunden, linearer Maßstab.

Zellen).

Abbildung 4.6 zeigt die Dichteverteilung des Bodenmaterials nach 80 Sekunden simulierter Zeit, d.h. 120 charakteristischen Zeiten D/u_i . Absichtlich werden nur Dichten in einem sehr geringen Variationsbereich um den Wert der Normaldichte, $\rho_0 = 2.68 \text{ g cm}^{-3}$, gezeigt, weil sonst in dem nahezu inkompressiblen Teil des Material, welches die Stoßwelle durchlaufen hat, kaum Strukturen erkennbar wären. Allerdings sind die Unterdichten in der Nähe der unteren rechten Ecke des Bildes durch teilweise Reflexion der Stoßwelle am Rand bedingt. Das sollte nicht auftreten, und obwohl die Randbedingungen „transmittierend“ angenommen wurden, gibt es offenbar bei sehr nichtlinearen Zustandsgleichungen Reflexionseffekte. Dieses Problem ist lange bekannt, jedoch bisher nur für Gase hinreichend gut gelöst, und kann für reale Materialien nur mit erheblichem Aufwand beseitigt werden. Man könnte eventuell das Rechengebiet vergrößern, sodaß die Stoßwelle noch nicht den Rand erreicht hat, oder aber eine reale Lithologie mit dichterem Material des

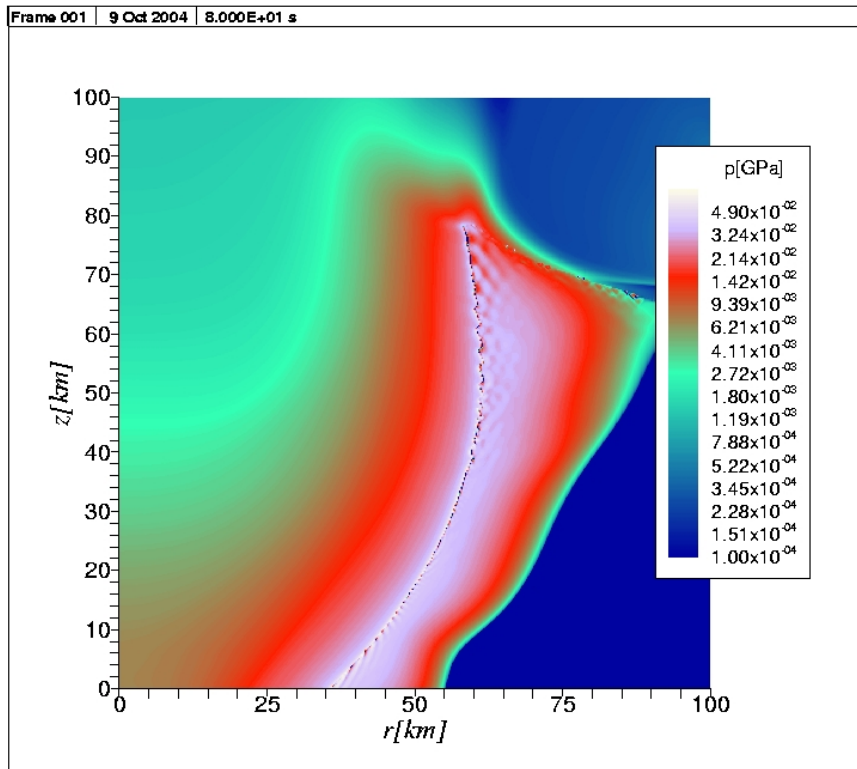


Abbildung 4.10: Druck nach 80 Sekunden, logarithmischer Maßstab, nur positiver Anteil dargestellt, siehe Text.

Erdmantels einführen, welches dann natürlich auch Reflexionen der Stoßwelle erzeugen würde, diese sind physikalisch real. Aber das beseitigt nicht das bestehende mathematische Problem, an den Rändern des Rechengebiets zum Mantelmaterial entstünde es erneut.

Einige der Strukturen entstehen durch akustische Wellen, welche vom Kraterrand und der Planetenoberfläche reflektiert werden. Dies ist auch ein Test dafür, wie gut die Methode im Unterschallbereich arbeitet. Offenbar ist der transiente Krater wesentlich tiefer als 65 km, was zwar auch daran liegen kann, daß der Einfachheit halber als Anfangszustand nur konstante Dichte und kein lithostatisches Gleichgewicht angenommen wurde. Jedoch wird betont, daß die Godunov-Methode eine sehr gute Energieerhaltung besitzt, weil keine numerische Dissipation auftritt, und ein Algorithmus mit numerischer Viskosität würde nach 120 charakteristischen Zeiten erhebliche numerische Dissipation aufweisen. Abbildung 4.7 zeigt die Dichteverteilung

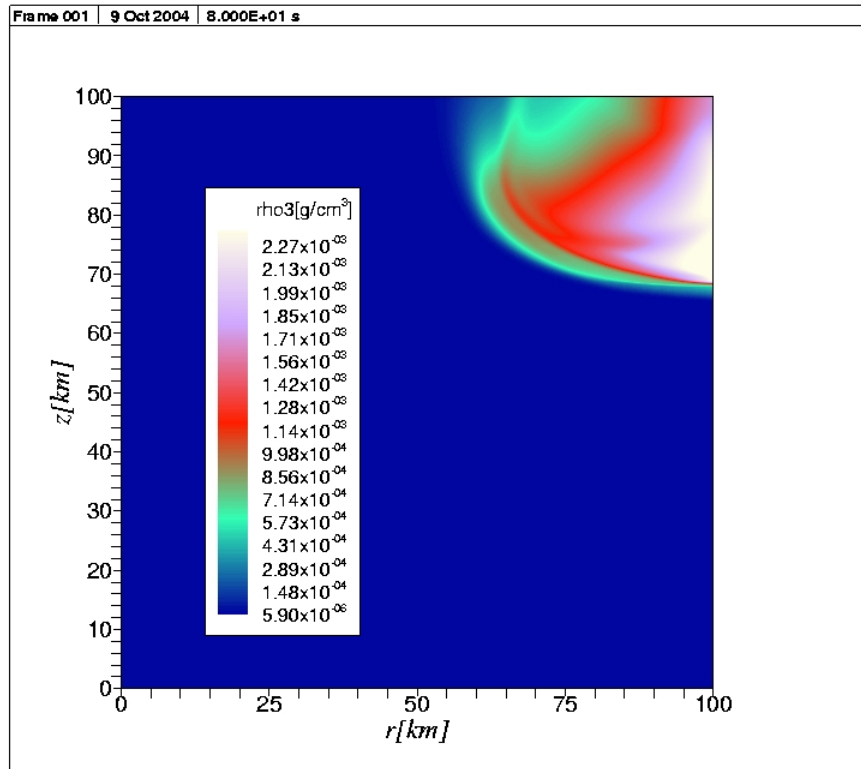


Abbildung 4.11: Dichte der Rest-Atmosphäre nach 80 Sekunden, linearer Maßstab.

des Projektilmaterials, und es ist zu erkennen, daß es nur noch maximale Dichte des etwa vierfachen atmosphärischen Wertes erreicht. Es sollte im Zustand eines teilweise kondensierten Gases sein, dies kann die Zustandsgleichung jedoch nicht beschreiben. Die Godunov-Methode ist offenbar geeignet, Kontakt-Unstetigkeiten gut aufzulösen, und das Projektilmaterial füllt bis zu Dichten unter $10^{-6} \text{ g cm}^{-3}$ nur einen Teil des transienten Kraters aus. Auch die Kontakt-Unstetigkeit zur Atmosphäre ist sehr gut approximiert. Trotz einer diffusiven Beschreibung ohne Materialgrenzen-Rekonstruktion (siehe im zweiten Teil der Darstellung numerischer Methoden) diffundiert das Projektil nicht in die dichten Teile des Bodenmaterials hinein.

Innerhalb des transienten Kraters werden jedoch beide Materialien diffusiv vermischt. Bei logarithmischem Maßstab für die Dichte des Bodenmaterials ergibt sich ein verändertes Bild, siehe Abbildung 4.8: es existiert kein scharfer Kratertrand. In einem Teil des transienten Kraters dominiert das Projektil-Material. Abbildung 4.9 zeigt den Druck, wobei im Bodenmateri-

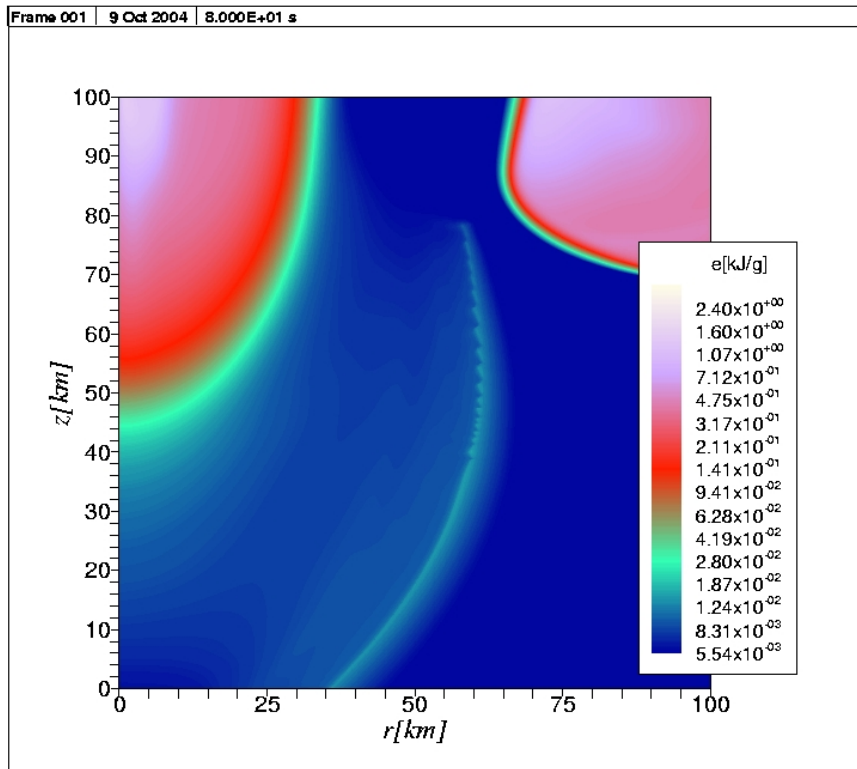


Abbildung 4.12: Totale spezifische Energie nach 80 Sekunden.

al auch negative Werte, d. h. isotrope Spannungen auftreten. Die Festigkeit des realen Materials unter Dehnung beträgt höchstens einige Zehntel GPa. An dieser Stelle müßte ein Materialmodell berücksichtigt werden, denn die Spannungen sind nicht nur isotrop. Trotzdem würde dieses Materialmodell allein nicht ausreichen, denn es betrifft nur den deviatorischen (spurfreien) Anteil des Spannungstensors (Wünnemann und Ivanov , 2003), sodaß noch ein zusätzlicher Mechanismus isotrope negative Drücke begrenzen sollte. In CTH (McGlaun, Thompson, Elrick , 1990) setzt in diesem Fall ein spezieller Algorithmus in einem Teil der Zelle Vakuum als zusätzliches Material ein, das funktioniert aber nur in einer Methode, wo auch Vakuum als Material vorkommt. Innerhalb einer Godunov-Methode ergäben sich damit zusätzliche Fälle der Vakuum-Erzeugung in einem Riemann-Problem, siehe Miller und Puckett (1996), was in dieser Arbeit nicht betrachtet wird. Abbildung 4.10 zeigt nochmals den Druck, allerdings nur positive Werte im logarithmischen Maßstab. Im Gebiet des Materials des Projektils und im gesamten Bereich

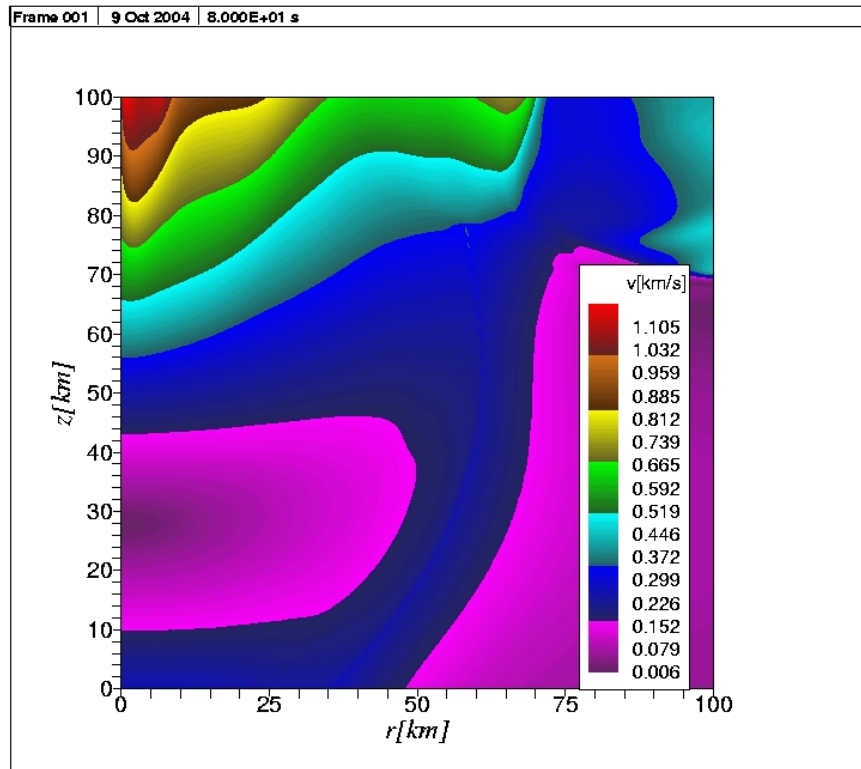


Abbildung 4.13: Betrag der Geschwindigkeit nach 80 Sekunden.

des Auswurfsmaterials über der Krateröffnung herrscht noch ein Druck von etwa einigen Zehn Atmosphären. Dies ist wahrscheinlich unrealistisch und auf Vereinfachungen in der Zustandsgleichung, hauptsächlich die Vernachlässigung von Kondensation, zurückzuführen. Schließlich ist in Abbildung 4.11 die Dichte der Atmosphäre dargestellt, und man sieht, daß kein atmosphärisches Gas ins Bodenmaterial diffundiert, es gibt außerdem eine gut abgegrenzte Kontakt-Unstetigkeit zum Auswurfsmaterial.

Allein aufgrund der Dichte kann man nicht den thermodynamischen Zustand des Materials beurteilen. Zusätzlich ist daher auch die totale spezifische innere Energie in jeder Zelle dargestellt, siehe Abbildung 4.12. Man erkennt deutlich heiße Teile im Bereich der komprimierten Atmosphäre am oberen rechten Rand, und innerhalb des Projektil-Materials, während dort, wo den transienten Krater Auswurfsmaterial aus dem Boden füllt, geringe spezifische Energien vorherrschen. Die letzte Abbildung für diese Beispiel zeigt den Betrag der Geschwindigkeit. Während oberhalb des entstehenden Kraters noch

Geschwindigkeiten über 1 km/s vorkommen, hat das Strömungsfeld innerhalb des transienten Kraters nur noch Werte um einige 100 m/s. Da hier keine Gravitation und nur ideale Hydrodynamik berücksichtigt wurden, kann man keine Aussagen über die tatsächlichen Auswurfgeschwindigkeiten machen. Jedoch sind die relativ hohen Werte der Endgeschwindigkeiten ein Zeichen für die gute Energieerhaltung der Methode.

4.3.8 Beispiel 3: Gasexpansion mit chemischem Gleichgewicht

Als Test für die die sphärisch-symmetrische Variante SOVA-S wurde das Problem der Entwicklung eines beim Einschlag erzeugten Dampfes betrachtet. Die Annahme sphärischer Symmetrie stellt eine Idealisierung dar, um eine gleichzeitige Behandlung der komplizierten hydrodynamischen Vorgänge während der Kraterbildung zu vermeiden, siehe Kapitel 3. Ein einfacheres Testbeispiel dieser Art wurde bereits in Kapitel 3, Abschnitt 3.2, gezeigt, allerdings nur mit der Zustandsgleichung für verdampftes Mg_2SiO_4 , mit einigen wenigen molekularen Tochterprodukten. Hier findet nun die Zustandsgleichung für meteoritischen Dampf mit 183 molekularen und 26 atomaren Substanzen in der Gasphase Anwendung, siehe Kapitel 3, Abschnitt 3.3. Für den Anfangszustand wurde ein planares Einschlagsproblem gelöst, siehe [Melosh \(1989\)](#). Dazu wurden die Normaldichte von Dunit $\rho_0 = 3320 \text{ kg m}^{-3}$ und $T_0 = 600\text{K}$ im Zustand vor dem Einschlag angenommen. Bei einem Einschlag mit einer Geschwindigkeit von 15km/s ergab die planare Approximation daraus den folgenden Anfangszustand

| u_{imp} | ρ | p | ϵ | T | c^2 |
|-----------|--------------------|---------|---------------------|-------|----------|
| km/s | kg m^{-3} | GPa | 10^6 J/kg | K | m/s |
| 15.0 | 53218.5 | 199.581 | 30.9725 | 18755 | 1957.913 |

wobei die Dichte allerdings nicht realistisch ist (eine Schwäche jeder Zustandsgleichung ohne "kalten Druck"), jedoch Druck, Temperatur und innere Energie plausible Werte haben, vgl. Kapitel 3. Die Masse des einschlagenden Asteroiden entspricht einem Durchmesser von 10 km und ist anfangs in einer Halbkugel konzentriert.

Als Häufigkeiten der Elemente wurden für CI-Chondriten ermittelte Werte ([McDonough und Sun , 1995](#)) angenommen. Ein weiterer Parameter ist das Verhältnis der Konzentration von O zu Fe , vgl. Kap. 3. Abschnitt 3.3; hierbei wurde ein Wert von 1.7 benutzt. Die chemische Zusammensetzung des Asteroiden entspricht nicht unbedingt dem Chicxulub-Einschlag, jedoch dem auch interessanten Fall der Zusammensetzung von Planetesimalen in der erdnahen Zone zur Zeit der Entstehung unseres Planeten (die Erde sollte

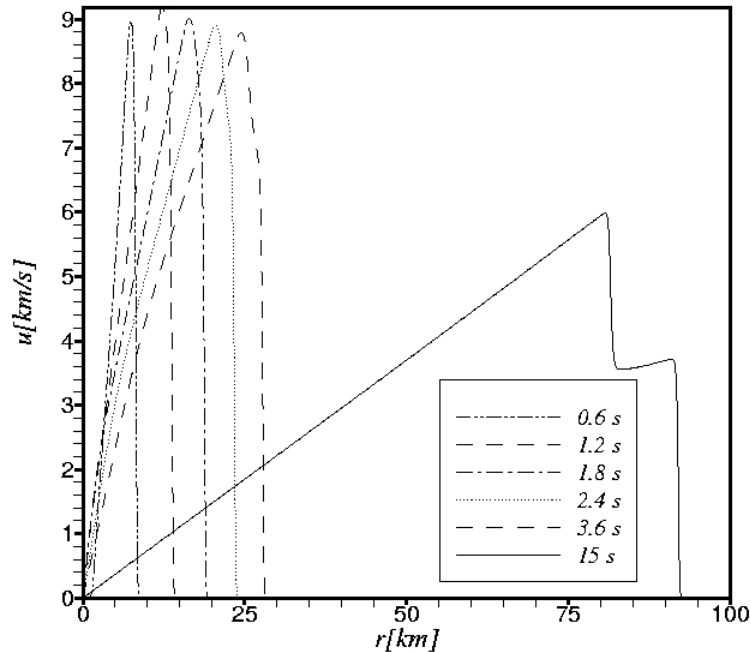


Abbildung 4.14: Verlauf der radialen Geschwindigkeit für halbkugelförmige Expansion des beim Einschlag eines CI-Chondriten mit 15km/s Geschwindigkeit erzeugten Dampfes. Parameter siehe Text.

dazu schon einen beträchtlichen Teil ihrer Masse besitzen, sonst wäre die Einschlagsgeschwindigkeit von 15km/s unrealistisch). Die Atmosphäre wurde als Gas mit einer Dichte von 1kg m^{-3} und einem Druck von 1.222×10^5 Pa angenommen. Aufgrund der Ein-Material-Beschreibung in SOVA-S muß dieses Gas mit der selben Zustandsgleichung beschrieben werden, dadurch beträgt die Temperatur außerhalb des komprimierten Asteroiden etwa 600K. Diese Temperatur ist hier nicht relevant, da die Stoßwelle in der Atmosphäre während der gesamten Zeit der Simulation eine um etwa zwei Größenordnungen höhere Temperatur besitzt. Die Atmosphäre sollte lediglich einen realistischen Gegendruck erzeugen.

Da die Zustandsgleichung in temperaturabhängiger Form vorliegt, mußte für bekannte innere Energie $\epsilon(T, \rho)$ und Dichte die Temperatur gefunden werden. Dies erfordert eine Newton-Methode, unter Benutzung der partiellen

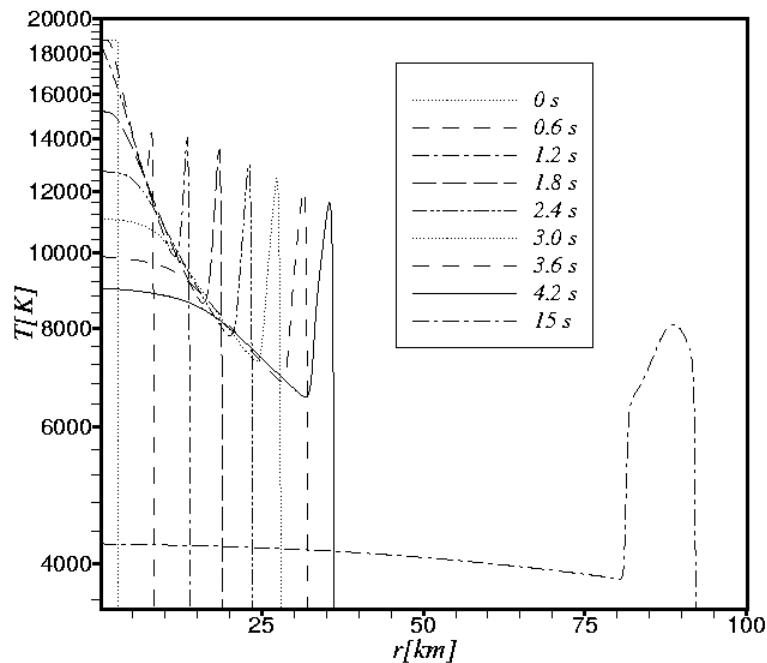


Abbildung 4.15: Temperaturverlauf zu verschiedenen Zeiten für halbku- gelförmige Expansion des beim Einschlag eines CI-Chondriten mit 15km/s Geschwindigkeit erzeugten Dampfes. Parameter siehe Text.

Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur, c_v , welche mit den in Kapitel 3 angegebenen Formeln berechnet wird. Das Problem des chemischen Gleichgewichts wird zuvor gelöst, und wenn die Inverse der Jacobi-Matrix des entsprechenden Gleichungssystems der Massenbilanzen vorliegt (siehe Kapitel 3, Abschnitt 3.3), können alle relevanten partiellen Ableitungen ermittelt werden. Der Rechenaufwand hierzu ist zwar beträchtlich, jedoch dauerten die Berechnungen bei einer Auflösung von 500 Zellen in radialer Richtung für eine simulierte Zeit von 15 Sekunden nach dem Einschlag nur etwa 3 Stunden auf einem PC mit LINUX als Betriebssystem und 3000MHz Taktfrequenz. SOVA-S benötigt im Gegensatz zu Godunov-Methoden nur einen Aufruf der Zustandsgleichung pro Zeitschritt und Zelle. Außerdem wurde lediglich dort die Zustandsgleichung benutzt, wo sich die innere Energie oder Dichte in einer Zelle ändern.

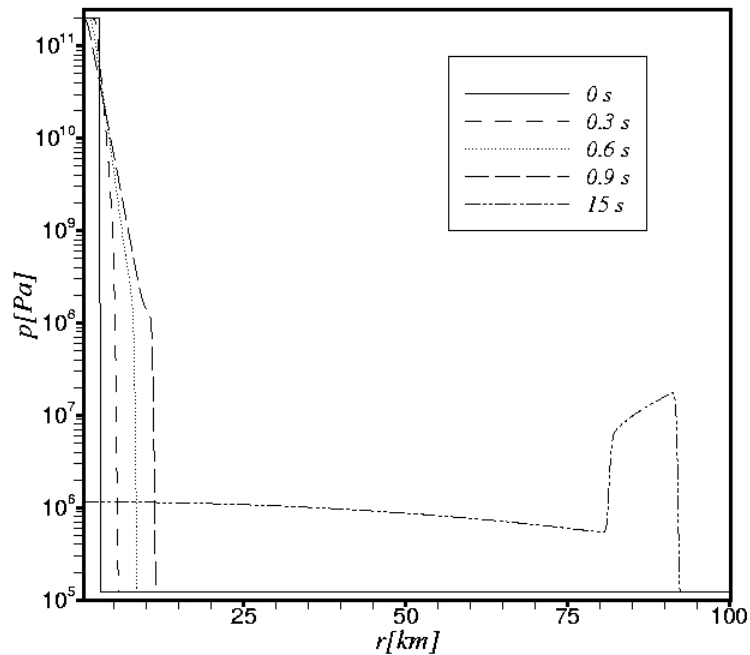


Abbildung 4.16: Druckverlauf zu verschiedenen Zeiten für halbkugelförmige Expansion des beim Einschlag eines CI-Chondriten mit 15km/s Geschwindigkeit erzeugten Dampfes. Parameter siehe Text.

Abbildung 4.14 zeigt den erhaltenen Geschwindigkeitsverlauf. Im Inneren der Struktur, welche von der in der Atmosphäre erzeugten Stoßwelle begrenzt wird, ist der Verlauf der Geschwindigkeit nahezu linear, sodaß die Approximation der semianalytischen Lösung aus Kapitel 3 auch für diese Zustandsgleichung nach einer gewissen Zeit gut erfüllt ist. Der Temperaturverlauf zu verschiedenen Zeiten ist in Abbildung 4.15 dargestellt. Nach 15 Sekunden ist innerhalb der Kontakt-Unstetigkeit zum atmosphärischen Gas eine nahezu isotherme Wolke entstanden, mit Temperaturen zwischen etwa 4000 und 4300 K. Wie Abbildung 4.16 zeigt, liegt der Druck dabei noch um etwa eine Größenordnung über dem heutigen Wert an der Erdoberfläche.

4.3.9 Beispiel 4: Expansion eines van der Waals-Gases in einer exponentiellen Atmosphäre

Das vorangegangene Beispiel ist nicht geeignet, um die Geometrie der Ausbreitung der Stoßwelle in einer Planetenatmosphäre zu verstehen. Deshalb wurde ein ähnliches Problem in Zylinderkoordinaten gelöst, allerdings mit der einfacheren van der Waals-Zustandsgleichung für Asteroidenmaterial und Atmosphäre. Die Godunov-Methode mit HLLC-Riemann-Löser konnte verwendet werden, da Berechnung der Hugoniot-Kurve und iterative Lösung des Riemann-Problems bei dieser Zustandsgleichung vergleichsweise einfach sind. Als Anfangswerte für Impaktor und Atmosphäre wurden angenommen:

| Material | ρ kg m ⁻³ | p GPa | ϵ 10 ⁶ J/kg | T K |
|------------|------------------------------|--------------------------|------------------------------------|------------|
| Asteroid | 6990.986 | 122.388 | 37.1 | 53978.2093 |
| Atmosphäre | 1.5 | 1.01325×10^{-4} | 2.214329×10^{-1} | 289.671 |

Die Anfangswerte und van der Waals Parameter a , b , und die spezifische Wärme c_v des Gases entsprechen denen im Beispiel aus Kapitel 3, Abschnitt 3.2.1, wo eine semianalytische Lösung für sphärische Symmetrie (halbkugelförmig) abgeleitet wurde. Jedoch ist hier die Anfangsverteilung aller Zustandsgrößen im verdichteten Impaktor homogen (wegen der analytischen Näherung wurde in Kapitel 3 eine Abhängigkeit $(1 - (r/R_0)^2)$ der Temperatur, R_0 ist der Anfangsradius, im verdichteten Impaktor angenommen). Die Skalenhöhe der exponentiellen Atmosphäre ist etwa 10 km.

Es wurde eine Methode zweiter Ordnung nach [LeVeque \(1997\)](#) verwendet, auf einem Gitter aus 200 x 200 Zellen. Die Stoßfront ist sehr gut an der Häufung der Konturen zu erkennen, siehe Abbildungen 4.17 bis 4.19. Zustandsgrößen wurden in den Einheiten dargestellt, in denen das Programm rechnet, d. h. GPa für Druck, g/cm^3 für die Dichte und km für die Koordinaten (Einheit der inneren Energie ist $kJ/g = km^2/s^2$), da diese Einheiten später auch verwendet werden, beim Einschlag in dichtes Bodenmaterial. Es sollte demonstriert werden, daß die Ein-Material-Methode mit diesen Einheiten auch im Gebiet mit sehr geringen Dichten am oberen Rand der Atmosphäre ausreichend genau approximiert. Wegen des exponentiellen Dichteverlaufs der Atmosphäre ist die Stoßwelle nach einiger Zeit nicht mehr halbkugelförmig, sondern nimmt eine charakteristische ovale Form an, wobei der Durchmesser am Fußpunkt geringer als in größeren Höhen ist. Der vertikale Dichtegradient bewirkt eine Beschleunigung der Ausbreitung in Richtung fallender Atmosphärendichte.

Die Berechnung dauerte nur wenige Minuten auf einem PC mit LINUX als Betriebssystem (3000 MHz). Bei Verwendung der komplizierteren Zustandsgleichung für chemisches Gleichgewicht aus dem vorigen Abschnitt würde

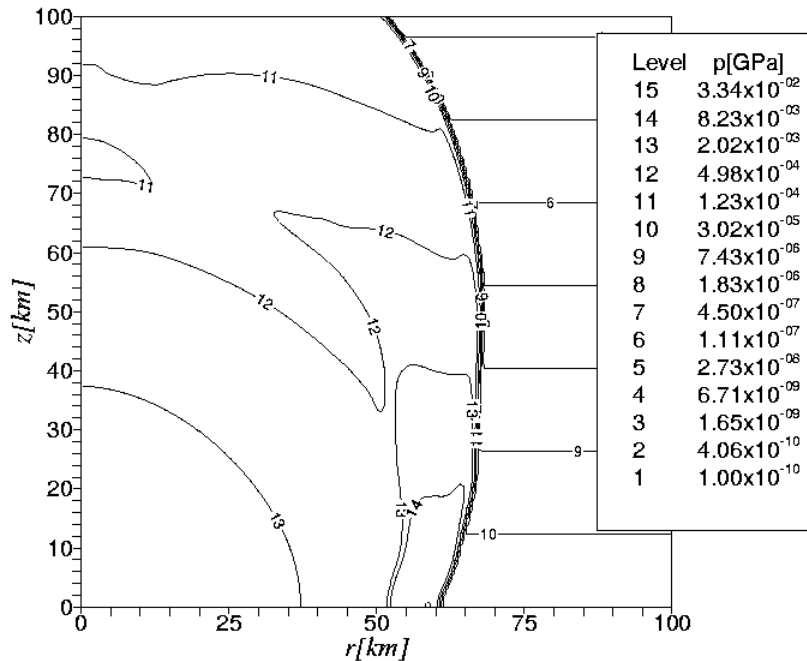


Abbildung 4.17: Druckverlauf nach $t = 6.75$ Sekunden für Expansion des beim Einschlag erzeugten Dampfes in einer exponentiellen Atmosphäre. Van der Waals-Zustandsgleichung, Parameter siehe Text.

man für die gleiche simulierte Zeit (mit dem selben PC) mehrere Monate brauchen, deshalb müßte man sie tabellieren, um sie anschließend zu interpolieren. Godunov-Methoden stellen sehr hohe Ansprüche an die Güte der Interpolation, und eine entsprechende Software-Entwicklung für tabellierte Zustandsgleichungen war im Zeitrahmen dieser Arbeit leider nicht erreichbar.

4.4 Multi-Material-Hydrodynamik

4.4.1 Volume of Fluid (VOF) Material-Rekonstruktion

In Einschlagsproblemen mit mehreren Materialien hat jedes Material eine gesonderte Volumenfraktion, Massendichte und spezifische innere Energie.

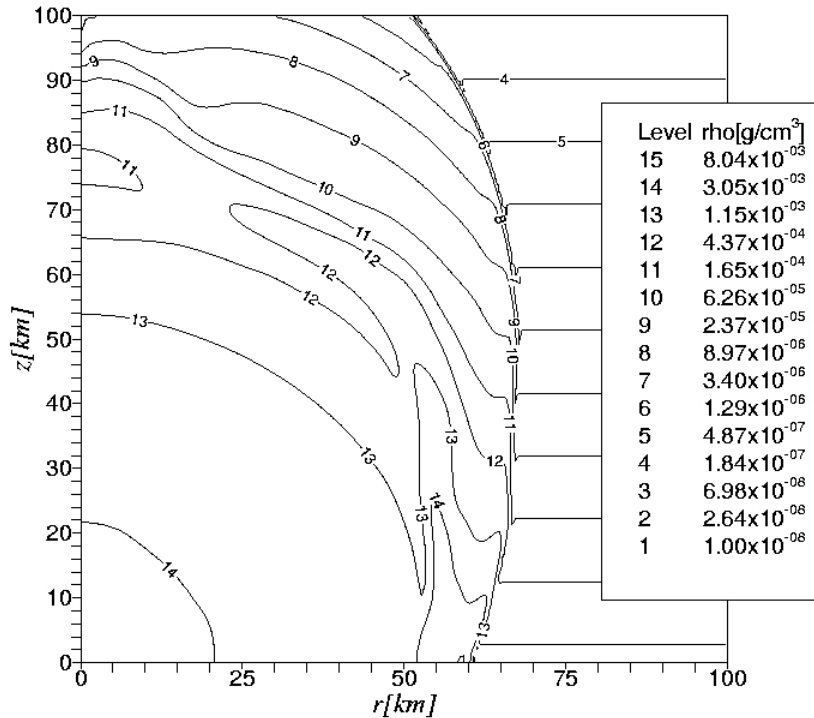


Abbildung 4.18: Dichteverlauf nach $t = 6.75$ Sekunden für Expansion des beim Einschlag erzeugten Dampfes in einer exponentiellen Atmosphäre. Van der Waals-Zustandsgleichung, Parameter siehe Text.

In der Multi-Material-Hydrodynamik ist dabei die lokale Geschwindigkeit für alle Materialsorten gleich (anders als in der Multi-Fluid-Hydrodynamik, vgl. Kap. 2). Für viele gasdynamische Probleme sind unterschiedliche Materialien lokal durchmischt, wenn die Moleküldiffusion Konzentrationen ins thermodynamische Gleichgewicht bringen kann, dann sind in jeder Zelle des Gitters im Prinzip alle gasförmigen Spezies vorhanden, wenn auch in unterschiedlicher Konzentration. Bei einer makroskopischen Beschreibung von Hochgeschwindigkeitseinschlägen sind Gase anfangs nicht durchmischt, und Diffusion beschränkt sich lediglich auf dünne Übergangszonen, welche in der idealen Hydrodynamik als Kontaktunstetigkeiten beschrieben werden. Grenzen zwischen verschiedenen Flüssigkeiten (auch feste Materialien verhalten sich bei Drücken über dem elastischen Grenzwert wie Flüssigkeiten) untereinander oder zu einem Gas sind bei der kontinuumsmechanischen Betrachtung

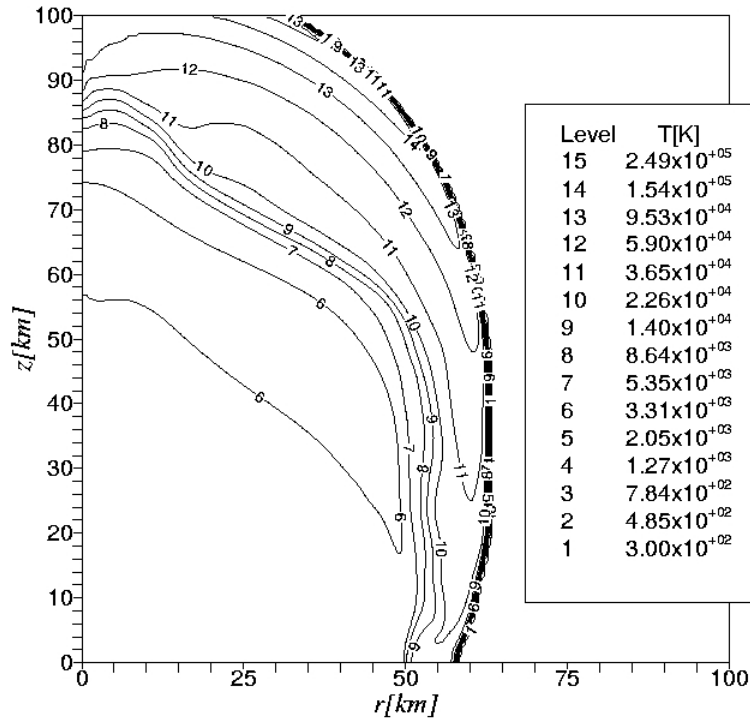


Abbildung 4.19: Temperaturverlauf nach $t = 6.75$ Sekunden für Expansion des beim Einschlag erzeugten Dampfes in einer exponentiellen Atmosphäre. Van der Waals-Zustandsgleichung, Parameter siehe Text.

ebenfalls unendlich dünne Übergangszonen.

In der Eulerschen Diskretisierung wird zwangsläufig Materialtransport durch das Gitter auftreten, sodaß eine Zelle mehrere Materialien enthalten kann, und Materialgrenzen durch die Gitterzelle verlaufen. Die Volumenfraktionen erfüllen Advektionsgleichungen, diese ließen sich zwar mit klassischen numerischen Verfahren lösen (LeVeque, 1990), aber solche numerischen Verfahren sind mehr oder weniger diffusiv, und vor allem respektieren sie nicht die Normierung der Volumenfraktionen, d.h. sie können Werte über Eins liefern. Weiterhin würden nicht nur die Gase diffundieren, sondern auch feste und flüssige Materialien würden sich über das gesamte Gitter verteilen, wie die Erfahrung zeigt. Diese Art numerisch bedingter Diffusion ist oft mit dem Auftreten unphysikalischer Werte von spezifischer Energie und Massendichte diffundierter Materialien verbunden.

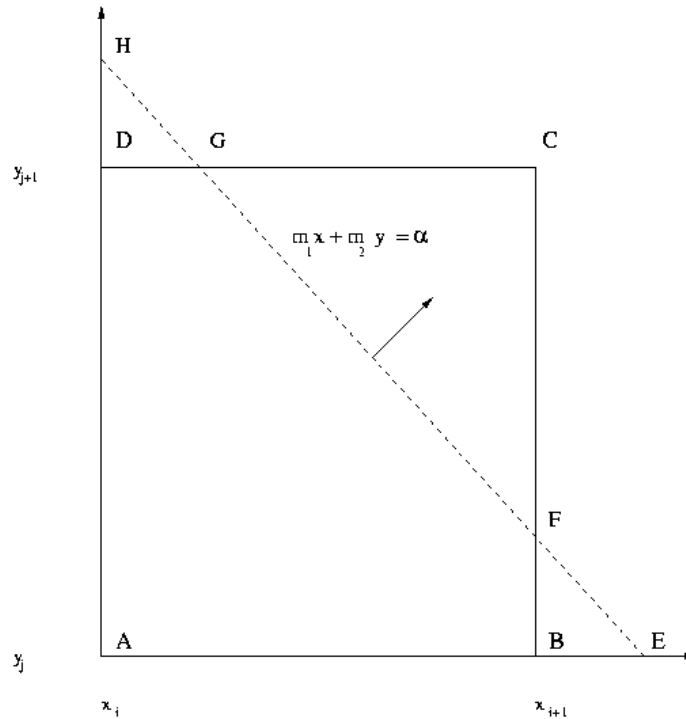


Abbildung 4.20: Annahmen für die PLIC Materialgrenzen-Rekonstruktion.

Eine andere Möglichkeit ist es, die Mediengrenzen in einer Gitterzelle zu approximieren, in der Regel mit Hilfe von Polygonen (Rider und Kothe , 1998). Solche Methoden werden bereits seit etwa 40 Jahren verwendet, und Benson (2002) gibt einen umfangreichen Überblick. Als Information kann nur der Wert der Volumenfraktion in der betrachteten Zelle und einer gewissen Umgebung benutzt werden. Es ist klar, daß die „hinter“ der so approximierten Materialgrenze liegende Volumenfraktion mit dem Mittelwert dieser Zustandsvariablen in der betrachteten Gitterzelle übereinstimmen muß. Das mathematische Problem bezeichnet man als Materialgrenzen-Rekonstruktion (material interface reconstruction). Der Zweck der Rekonstruktion ist es, damit das Advektionsproblem ohne Diffusion lösen zu können. Die approximierten Materialgrenzen bewegen sich während eines diskreten Zeitschritts mit der lokalen hydrodynamischen Geschwindigkeit. Diese Lösung des Advektionsproblems ist verlustfrei, d. h. die neuen Volumenfraktionen nach dem Advektionsschritt in jeder Zelle sind nichtnegativ und Volumen-füllend (erfüllen die Summen-Norm mit dem Wert Eins). Methoden dieser Art sind unter dem Namen Volume of Fluid (VOF) bekannt geworden (Rider und Kothe , 1998;

Gueyffier u. a. , 1999). Der Schritt der Rekonstruktion der Materialgrenzen wurde traditionell vom hydrodynamischen Problem getrennt betrachtet (Benson , 2002), und die Einbeziehung in ein konkretes numerisches Verfahren der Hydrodynamik geschah gewissermaßen nachträglich, siehe auch Miller und Puckett (1996). Die Materialgrenzen-Rekonstruktion ist ein so radikaler Eingriff in ein numerisches Verfahren der Hydrodynamik, daß man seine Grundlagen völlig neu überdenken muß. So ist z. B. die Masse als Produkt von Volumen und Dichte eines Materials eine Erhaltungsgröße, also kann man eine Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung und der Advektionsgleichung für die Volumenfraktion nicht unabhängig voneinander betrachten.

In dieser Arbeit werden die Unterschiede zwischen Godunov-Methoden und Verfahren wie SOVA mit versetztem Gitter (staggered mesh) untersucht. Alle bisherigen Autoren haben beim Materialtransport implizit die Annahme gemacht, daß die Geschwindigkeit im gesamten Einflußgebiet der Advektionsgleichung konstant ist (Miller und Puckett , 1996), oder aber während des Lagrange-Schritts linear zwischen den Zellgrenzen variiert (Gueyffier u. a. , 1999). Hier wird ein HLLC-Riemann-Löser mit Materialgrenzen-Rekonstruktion beschrieben, mit lokaler Interpolation der Geschwindigkeit im Sinne der zugrundeliegenden Godunov-Methode. Es zeigt sich daß nicht nur advektiver Materialtransport auftritt, sondern auch Kompression und Expansion in den einzelnen Wellen des zugrundeliegenden Riemann-Problems haben Einfluß auf die diskretisierte Form der Gleichungen.

Die derzeitigen Varianten der VOF-Rekonstruktion verwenden lineare Materialgrenzen in jeder Zelle. Während die SLIC-Variante (simple linear interface construction) nur zu den Koordinatenachsen parallele Linien (oder Flächen in 3 Dimensionen) zuläßt, erlaubt die PLIC-Variante (piecewise linear interface construction) beliebige Winkel der Materialgrenzen zu den Achsen, siehe Abb. 4.20. Die SLIC-Variante kann aber sogenannte T-Topologien bei mehr als drei Materialien reproduzieren, während die PLIC-Variante eine "Zwiebelschalen"-Anordnung (onion shell) innerhalb der Zelle erzwingt, d. h. Schnittpunkte zwischen Grenzen mehrerer Materialien in einer Zelle sind unzulässig. Die primitivere SLIC-Variante hat den Vorteil, daß die entsprechenden Linien nicht unbedingt beidseitig an einer Zellgrenze enden müssen, sie können auch an einer Materialgrenze innerhalb der Zelle enden. Es wäre aber ungleich schwieriger, diese Freiheit in die PLIC-Variante einzuführen, dies ist nie versucht worden. Eine kürzlich bekannt gewordene elegante Lösung des Materialordnungsproblems verwendet Dreiecksgitter und Voronoi-Polygone, sie ist leider nicht volumentreu, d. h. die Volumenfraktion wird lediglich lokal genähert, solch ein Verfahren ist in der medizinischen Bildverarbeitung (Computer-Tomographie) brauchbar, und noch nicht in der Hydrodynamik.

Ein Problem aller derzeitigen Approximationsmethoden ist die Unste-

tigkeit der Grenzlinien (oder -Flächen) an den Zellgrenzen, d. h. die Rekonstruktion liefert keine stetig (über mehrere Zellen) zusammenhängenden Materialgrenzen. Unter einem Verfahren zweiter Ordnung wird verstanden, daß wenigstens dann, wenn die wirkliche Materialgrenze eine über mehrere Zellen verlaufende Gerade (bzw. Ebene in drei Dimensionen) ist, diese exakt approximiert wird. Seit 1997 ist ein einziges derartiges Verfahren bekannt (Pilliod und Puckett, 1997), jedoch mit dem viel höheren Aufwand einer mehrstufigen iterativen Rekonstruktion, die Publikation erschien allerdings noch nicht offiziell. Man kann sich klarmachen, daß nur die Forderung der Stetigkeit des Verlaufs der Materialgrenzen an allen geschnittenen Zellgrenzen gerade genügend Bedingungen liefert, daß kein Parameter der Gleichungen der linearen Materialgrenzen frei bleibt, also das Problem vollständig determiniert (bis auf Randbedingungen). Dieser Idealfall wird von keiner der derzeitigen Methoden erreicht, deshalb ist der Vorteil einer Rekonstruktion „zweiter Ordnung“ nur gradueller Natur. Den Verfahren ist gemeinsam, daß sie die Normale der Materialgrenze abschätzen, mit Hilfe numerisch gebildeter Gradienten der Volumenfraktion über eine Umgebung mit einer Breite von einer Zelle. So setzt man z. B. in zwei Dimensionen

$$\left(\frac{\partial f^{(m)}}{\partial x}\right)_{i+1/2, j+1/2} = \frac{(f_{i+1, j}^{(m)} - f_{i, j}^{(m)} + f_{i+1, j+1}^{(m)} - f_{i, j+1}^{(m)})}{2(x_{i+1} - x_i)}, \quad (4.152)$$

wobei $f_{i, j}^{(m)}$ eine Approximation der Volumenfraktion für Material m in der linken unteren Ecke der Zelle $(i + 1/2, j + 1/2)$ ist, d. h. folgender Mittelwert:

$$f_{i, j}^{(m)} = \frac{(f_{i-1/2, j-1/2}^{(m)} + f_{i+1/2, j-1/2}^{(m)} + f_{i-1/2, j+1/2}^{(m)} + f_{i+1/2, j+1/2}^{(m)})}{4}, \quad (4.153)$$

und durch Indexverschiebung ergeben sich die Approximationen für die übrigen Eckpunkte. Der Gradient in y -Richtung wird analog gebildet. Danach wird der inhomogene Parameter der linearen Gleichung (4.154) dadurch bestimmt, daß sich die lokale Volumenfraktion „hinter der Grenze“ ergibt. Einige Methoden, so die erwähnte „zweiter Ordnung“ verbessern anschließend die Richtung der Normalen mittels Iteration mehrfach (Rider und Kothe, 1998). Alle diese Verfahren vervielfachen den Rechenaufwand, jedoch arbeiten sie nur in einer lokalen Umgebung der Zelle. Besser wäre eine globale Rekonstruktion, welche bei Vorgabe entsprechender Randbedingungen die eindeutige global-stetige Lösung liefert, dabei würde man auch keine Iteration benötigen.

In dieser Arbeit werden keine dreidimensionalen Verfahren betrachtet, somit ist lokal in jeder Zelle eine lineare Approximation der Materialgrenzen durch

$$m_1x + m_2y = \alpha, \quad (4.154)$$

gegeben, wobei α der inhomogene Parameter und m_1 und m_2 die Komponenten des Normalenvektors sind; dieser ist nicht notwendig auf Eins normiert. Es ist klar, daß sich alle Parameter auf eine gegebene Zelle $(i + 1/2, j + 1/2)$ beziehen, die Indizes werden hier aber wegen der besseren Lesbarkeit fortgelassen. Die Gl.(4.154) gilt in einem System mit dem Ursprung in der linken unteren Ecke der betrachteten Zelle. Außerdem wird zunächst nur der Fall mit zwei Materialien betrachtet, und die Gl.(4.154) bezieht sich auf die Sorte $m = 1$. Dann ist nach Gueyffier u. a. (1999) die Volumenfraktion durch

$$f \Delta x \Delta y = \frac{1}{2m_1 m_2} \left\{ \alpha^2 - \Theta(\alpha - m_1 \Delta x)(\alpha - m_1 \Delta x)^2 - \right. \\ \left. - \Theta(\alpha - m_1 \Delta y)(\alpha - m_1 \Delta y)^2 \right\}, \quad (4.155)$$

gegeben. Die Funktion auf der rechten Seite ist das Volumen der Flüssigkeit der Sorte $m = 1$ in einer Zelle mit den Abmessungen $\Delta x \times \Delta y$. Nach Gueyffier u. a. (1999) betrachte man dazu Abb. 4.20. Der erste Term auf der rechten Seite von Gl.(4.155) ist die Fläche des Dreiecks AEH. Falls der Schnittpunkt der Materialgrenze mit der x -Achse, gegeben durch $m_1 x_s = \alpha$, größer als Δx ist, wird der Term proportional zur ersten Theta-Funktion $\Theta(\alpha - m_1 \Delta x)$ nichttrivial, und die Fläche des kleinen Dreiecks BEF subtrahiert. Ähnlich ist der Fall, wenn der Schnittpunkt mit der y -Achse größer als Δy wird, dann subtrahiert der dritte Term in Gl.(4.155) die Fläche des Dreiecks DGH. Man kann auch symbolisch schreiben

$$f \Delta x \Delta y = V(m_1, m_2, \alpha, \Delta x, \Delta y), \quad (4.156)$$

sodaß die Funktion auf der rechten Seite von 5 Parametern abhängt. Die obige Formel gilt nur, wenn beide Komponenten der Normale m_1 und m_2 positiv sind. Ansonsten, bei $m_1 < 0$ setzt man $m_1 \rightarrow -m_1$ und $\alpha \rightarrow \alpha - m_1 \Delta x$, bzw. für $m_2 < 0$ $m_2 \rightarrow -m_2$ und $\alpha \rightarrow \alpha - m_2 \Delta y$. Die Berechnung der Funktion $V(m_1, m_2, \alpha, \Delta x, \Delta y)$ stößt auf Schwierigkeiten, falls eine Komponente des Normalenvektors Null wird (entarteter Fall, hier gilt Gl.(4.155) nicht), außerdem sind die vielen Fallunterscheidungen lästig. Daher wird besser der weiter unten aufgeführte Algorithmus benutzt, dessen Prinzip von Rider und Kothe (1998) stammt. Dazu werden in mathematisch positivem Sinne alle Eckpunkte der Zelle durchlaufen, und ein Test findet statt, auf welcher Seite der Materialgrenze der jeweilige Punkt liegt. Sind zwei aufeinanderfolgende Punkte auf verschiedenen Seiten, so wird ein Zwischenpunkt, der auf der Linie $m_1 x + m_2 y = \alpha$ liegt, berechnet (das erfordert zwar eine Division, welche jedoch niemals einen numerischen Überlauf auslösen kann). Ist auf diese Weise das die Flüssigkeit enthaltende Polygon gebildet, kann das eingeschlossene

Volumen berechnet werden. Der folgende Algorithmus zur Berechnung von $V(m_1, m_2, \alpha, \Delta x, \Delta y)$ ist in FORTRAN:

c

```

real*8  function VOFPG(cmx,cmy,alf,dx,dy)
real*8  cmx,cmy,alf,dx,dy
logical flag(4)
integer n,np,k
real*8  aa(8),xp(4),yp(4),xs(8),ys(8),t
VOFPG = 0.d0
if ((dx.le.0.d0).or.(dy.le.0.d0)) return
xp(1) = dx
yp(1) = 0.d0
xp(2) = dx
yp(2) = dy
xp(3) = 0.d0
yp(3) = dy
xp(4) = 0.d0
yp(4) = 0.d0
do n=1,4
  aa(n)  = cmx*xp(n) + cmy*yp(n)
  flag(n) = aa(n) .lt. alf
enddo
k = 0
do n=1,4
  np = n + 1
  if (np.GT.4) np = np - 4
  if (flag(n)) then
    k = k + 1
    xs(k) = xp(n)
    ys(k) = yp(n)
  endif
  if ( (flag(n).or.flag(np)).and.
& (.not.(flag(n).and.flag(np))) ) then
    k = k + 1
    t=DMIN1(DMAX1((alf-aa(n))/(aa(np)-aa(n)),0.d0),1.d0)
    xs(k)=xp(n)+T*(xp(np)-xp(n))
    ys(k)=yp(n)+T*(yp(np)-yp(n))
  endif
enddo
if (k.le.2) return

```

```

VOFPG=ys(1)*(xs(k)-xs(2))+ys(k)*(xs(k-1)-xs(1))
do n=2,k-1
    VOFPG = VOFPG+ys(n)*(xs(n-1)-xs(n+1))
enddo
VOFPG=0.5d0*VOFPG
return
end

```

c

Dieser Algorithmus ist auch für den Schnitt beliebiger konvexer Polygone mit einer Geraden (und anschließende Volumenberechnung) erweiterbar. Man könnte denken, das direkte Problem, also die Bestimmung von f mit Hilfe der Linienparameter wäre irrelevant. Jedoch kann die Funktion $V(\dots)$ auch auf einem verschobenen Rechteck bzw. auf einem Gebiet mit veränderten Abmessungen Δx , Δy operieren, z. B. in der Einflußzone bei der Advektion. Man muß nur beachten, wie sich die Argumente der Funktion $V(\dots)$ dabei transformieren. Bei einer Verschiebung des Ursprungs in x -Richtung genügt es $\alpha \rightarrow \alpha - m_1 x_0$ zu setzen, wobei x_0 der neue Ursprung (relativ zum linken Rand der Zelle) ist. Weiterhin beweist man leicht das folgende Multiplikationstheorem

$$V(\phi m_1, m_2, \alpha, \Delta x, \Delta y) = \frac{1}{\phi} V(m_1, m_2, \alpha, \phi \Delta x, \Delta y), \quad (4.157)$$

es beschreibt eine Deformation in x -Richtung. Analoge Betrachtungen gelten für die y -Richtung. Das Multiplikationstheorem ist sehr nützlich für Verfahren mit einem getrennten Lagrange-Schritt. So gesehen, ist $V(\dots)$ ein Werkzeug, welches algebraische Formulierungen erlaubt, wo [Rider und Kothe \(1998\)](#) nur geometrische Konstruktionen anbieten.

Bei der inversen Aufgabe der PLIC-Rekonstruktion ist die Konstante α für gegebenes m_1 , m_2 und Volumenfraktion f zu berechnen, dies erfordert wegen Gl.(4.155) entweder die Lösung linearer oder quadratischer Gleichungen. Der entartete Fall, d. h. wenn eine der Normalenkomponenten Null ist, ergibt eine lineare Gleichung (dieser Fall steckt aber nicht in Gl.(4.155)). Wenn beide Komponenten m_1 und m_2 des Normalenvektors verschwinden, aber dennoch ein nichttriviales f vorhanden ist, bedeutet dies, daß ein isoliertes Material (flotsam, jetsam) vorliegt. In der Anfangszeit der PLIC-Methode hat man in diesem Fall Zufallszahlen für m_1 und m_2 erzeugt (B.A. Ivanov, persönliche Mitteilung), es resultiert für isolierte „Tropfen“ aber eine unphysikalische Bewegung. In CTH gibt es inzwischen bessere Methoden (Website von CTH), jedoch werden sie nicht näher spezifiziert.

Es ist wichtig, die VOF-Methode für Zylinderkoordinaten zu entwickeln, und die entsprechenden Formeln fehlen in der Literatur. Die Funktion in

Gl.(4.155) wird hierzu wie folgt verallgemeinert

$$\begin{aligned}
 f r_{i+1/2} \Delta r \Delta z = & \frac{1}{2m_1 m_2} \left[\alpha^2 \left(r_i + \frac{\alpha}{3m_1} \right) - \right. \\
 & - \Theta(\alpha - m_1 \Delta r) (\alpha - m_1 \Delta r)^2 \left(r_i + \Delta r + \frac{(\alpha - m_1 \Delta r)}{3m_1} \right) - \\
 & \left. - \Theta(\alpha - m_2 \Delta z) (\alpha - m_2 \Delta z)^2 \left(r_i + \frac{(\alpha - m_2 \Delta z)}{3m_1} \right) \right], \quad (4.158)
 \end{aligned}$$

und besitzt ein zusätzliches Argument, die radiale Koordinate r_i des linken Randes der Zelle. Die Größe auf der rechten Seite ist das durch 2π dividierte Volumen der Flüssigkeit der Sorte $m = 1$ in einem Ring mit rechteckigem Querschnitt (Abmessungen $\Delta r \times \Delta z$). Die obige Formel ist ähnlich wie Gl.(4.155) abzuleiten, d. h. als eine Differenz der Volumen in bestimmten Dreiecken, mit dem Unterschied, daß in Zylinderkoordinaten das Volumen eines Rings mit Querschnitt als rechtwinkliges Dreiecks (pro 2π) durch

$$\frac{V_{123}}{2\pi} = \Delta r \Delta z \frac{r_1 + r_2 + r_3}{6}, \quad (4.159)$$

gegeben ist, wobei r_i , $i = 1, 2, 3$ die radialen Koordinaten der Eckpunkte sind, $\Delta r = r_2 - r_1 = r_2 - r_3$ und $\Delta z = z_3 - z_1 = z_3 - z_2$ gilt. Die FORTRAN-Funktion VOFPG ist im Fall von Zylinderkoordinaten lediglich dort zu modifizieren, wo das von dem Polygonzug eingeschlossene Volumen berechnet wird:

```

if (k.le.2) return
do n=1,k
  xs(n)=xs(n)+R0
enddo
VOFPG=ys(1)*(xs(k)-xs(2))*(xs(k)+xs(1)+xs(2))
&      +ys(k)*(xs(k-1)-xs(1))*(xs(k-1)+xs(k)+xs(1))
do n=2,k-1
  VOFPG=VOFPG+ys(n)*(xs(n-1)-xs(n+1))*(xs(n-1)+xs(n)+xs(n+1))
enddo
VOFPG=VOFPG*SIXTH

```

Hierbei bezeichnet der Parameter $R0$ die radiale Koordinate am linken Rand der Zelle, r_i , und $SIXTH$ ist die Konstante $1/6$. Das Rekonstruktionsproblem bei gegebenem m_1 , m_2 und f zerfällt in verschiedene Möglichkeiten mit der Lösung von entweder einer linearen, quadratischen oder kubischen Gleichung. Die Implementation soll hier nicht im Einzelnen besprochen werden. Da die Lösung der kubischen Gleichung mit Hilfe von trigonometrischen

Funktionen ausgedrückt werden muß, und dies in gewissen Grenzfällen nicht besonders genau ist, wurden solche Grenzfälle mit Hilfe einer direkten Reihenentwicklung in den jeweiligen kleinen Parametern behandelt. Diese Reihenentwicklungen wurden mit Hilfe von Maple V erhalten. Auf diese Weise ergeben sich keine zusätzlichen Einbußen an numerischer Genauigkeit beim Übergang von kartesischen zu Zylinderkoordinaten. Auch in kartesischen Koordinaten würde in drei Dimensionen eine kubische Gleichung auftreten. Es ist nicht bekannt, wie und ob andere Programme das Genauigkeitsproblem der trigonometrischen Funktionen lösen. Jedenfalls ist auf diese Weise der Fehler bei der PLIC-Rekonstruktion im Bereich der Maschinengenauigkeit.

Es gibt auch Implementationen, die einen relativ großen Fehler der Rekonstruktion zulassen. Dabei wird die Materialidentität dynamisch zugeordnet, d.h. Masse, Impuls und Energie von Materialien unter einer bestimmten Toleranzgrenze für die Volumenfraktion werden konservativ auf die Materialien mit Volumenfraktionen oberhalb des Schwellwerts verschoben. Dies ist keine gute Lösung: die Volumenfraktion der „ausgeblendeten“ Materialien ist noch vorhanden, und es können sich in späteren Zeitschritten durch Expansion oder Assoziation Volumenfraktionen oberhalb des Schwellwertes bilden, die dann ein bestimmtes Material ohne Masse und Energie enthalten. Aus diesen und anderen Gründen sollte man höchste Genauigkeit der PLIC-Rekonstruktion anstreben. Eine gewisse endlich kleine Toleranzgrenze, bei der man ein Material als nicht vorhanden ansieht, muß es allerdings geben. Nur sollte diese nicht wesentlich über der Maschinengenauigkeit liegen.

4.4.2 Godunov-Verfahren I: Colour-Advektion

Die Godunov-Methode wurde für Systeme von hyperbolischen Erhaltungsgleichungen besprochen, jedoch sind unter den Voraussetzungen der Multi-Material-Hydrodynamik mehr Variablen als Erhaltungsgrößen vorhanden, siehe Kap. 2, Abschnitt 2. Lediglich für die effektiven Massendichten $f^{(m)}\rho^{(m)}$, die Dichte der Gesamtenergie $E = \sum_m f^{(m)}E^{(m)}$ und des Gesamtimpulses $\rho u = \sum_m f^{(m)}\rho^{(m)}u$ sind die Differentialgleichungen konservativ. Dagegen treten in den Energiegleichungen der einzelnen Materialien nichtkonservative Terme auf, gleichfalls in den Advektionsgleichungen für die Volumenfraktionen. Folglich ergibt sich das Problem, wie eine Finite-Volumen-Methode formuliert werden kann. Hierbei ist von [LeVeque \(1997\)](#), wenn auch in anderem Zusammenhang, der Begriff der Fluktuationen anstelle von Flüssen eingeführt worden, er wird weiter unten auf eine VOF-Methode verallgemeinert. Es wäre auch möglich, einen konservativen Teil der entsprechenden Gleichungen abzuspalten, und auf die restlichen Terme irgendeine andere Methode anzuwenden. Diesen Weg schlagen [Miller und Puckett \(1996\)](#) ein (die

einzigste bisher vollständig publizierte Eulersche Godunov-Methode für mehrere Materialien), allerdings ist ihr Algorithmus nicht mehr Volumen-füllend und neigt zum Überschießen (overshoot).

Weiterhin ist nicht trivial, wie ein Riemann-Problem für mehrere Materialien formuliert werden soll, [Miller und Puckett \(1996\)](#) lösen ein effektives Ein-Material-Problem. Das physikalische Modell der Wellenausbreitung ist dabei die sogenannte „mixture theory“. In diesem Abschnitt wird ein ähnlicher Weg eingeschlagen, später wird ein allgemeineres Riemann-Problem mit Wellenrefraktion an Materialgrenzen untersucht. Im Unterschied zu [Miller und Puckett \(1996\)](#) jedoch werden solche Terme, die nicht in konservativer Form sind, im Sinne der Raumzeitstruktur des HLLC-Riemann-Lösers behandelt. Weiterhin kann auch die Godunov-Methode zumindest rein logisch in einen Lagrange-Schritt und einen Eulerschen Remap-Schritt unterteilt werden. Da die Wellenfronten im Riemann-Problem an einer Zellengrenze beginnen, wird die Struktur der Lösung des Multi-Material-Problems in einer Umgebung der x - t -Ebene untersucht, siehe Abb. 4.21. Wegen der grundlegenden Annahme des HLLC-Lösers, daß die Zustandsvariablen im Gebiet zwischen zwei aufeinanderfolgenden Diskontinuitäten konstant sind, kann die Verteilung aller Variablen nach dem Lagrange-Schritt erhalten werden.

Die Remap-Operation besteht danach lediglich darin, in den einzelnen Teilvolumen vorhandene integrale Werte der Zustandsvariablen, d. h. Materialvolumen, Massen, Energien und Impulse umzuverteilen. Der Remap-Schritt ist per definitionem konservativ, und sämtliche nichtkonservativen Modifikationen beschränken sich auf den Lagrange-Schritt. Es versteht sich, daß die Formulierung des Lagrange-Schritts von den im Multi-Material-Problem geltenden Rankine-Hugoniot-Beziehungen ausgeht. Es ist hervorzuheben, daß im Unterschied zu anderen Lagrange-Remap-Verfahren hier keine Mittelung der Zustandsvariablen auf dem nach dem Lagrange-Schritt erhaltenen Gitter durchgeführt wird. Am Ende wird eine Eulersche Formulierung erreicht, d. h. die Unterteilung des Verfahrens in zwei Schritte ist nur logischer Natur, und es werden kompakte algebraische Ausdrücke für die Fluktuationen oder auch Pseudo-Flüsse im Sinne von [LeVeque \(1997\)](#) erhalten.

Wegen der eindimensionalen Natur des Riemann-Problems und der Verwendung von dimensionalem Splitting für mehrere räumliche Dimensionen (siehe Abschnitt 4.3.1) genügt eine eindimensionale Darstellung. Da im HLLC-Löser Verdünnungswellen analog zu Stoßwellen behandelt werden, muß man zuerst die Rankine-Hugoniot-Beziehungen der Multi-Material-Formulierung ableiten. Eine grundlegende Annahme ist die der Existenz von Ausbreitungsgeschwindigkeiten für ein effektives Ein-Material-Problem. Dann existieren im eindimensionalen Fall nur drei verschiedene charakteristische Geschwindigkeiten λ ([Miller und Puckett , 1996](#)). Man kann die Advektionsgleichung

für $f^{(m)}$ nicht verwenden, sie gilt nur bei glattem Verlauf. Die Kontinuitätsgleichungen für die Massendichten $\rho^{(m)}$ lauten

$$\frac{\partial(f^{(m)}\rho^{(m)})}{\partial t} + \frac{\partial(f^{(m)}\rho^{(m)}u)}{\partial x} = 0. \quad (4.160)$$

An Diskontinuitäten, die sich mit einer Geschwindigkeit λ im ruhenden System ausbreiten, gilt

$$f^{(m)}\rho^{(m)}(u - \lambda) = f_0^{(m)}\rho_0^{(m)}(u_0 - \lambda), \quad (4.161)$$

mit der Konvention, daß ein Index Null Werte im ungestörten Gebiet vor der Front (stromabwärts) bezeichnet. Summation über die Materialien ergibt

$$\rho(u - \lambda) = \rho_0(u - \lambda). \quad (4.162)$$

Der Sprung der $f^{(m)}$ ist vorläufig unbestimmt. Würden sich alle $f^{(m)}$ gleichzeitig ändern, so wäre die Kompression für alle Materialien gleich. Eine weitere Konsequenz ist, daß die sich Massenfraktion

$$M^{(m)} := \frac{f^{(m)}\rho^{(m)}}{\rho}, \quad (4.163)$$

nicht in einer Stoßfront ändern kann, lediglich an einer Kontakt-Unstetigkeit (wo $\lambda = u$ gilt). Die Euler-Gleichung

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0 \quad (4.164)$$

führt auf

$$\rho u(u - \lambda) + p = \rho_0 u_0(u_0 - \lambda) + p_0, \quad (4.165)$$

bzw. unter Benutzung der Sprungbedingung der Gesamtdichte

$$\rho_0(u_0 - \lambda)(u - u_0) + p - p_0 = 0. \quad (4.166)$$

Die Energiegleichungen lauten (vgl. Kap 1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f^{(m)}E^{(m)})}{\partial t} + \frac{\partial(f^{(m)}E^{(m)}u)}{\partial x} &= -\frac{f^{(m)}\rho^{(m)}}{\rho}u\frac{\partial p}{\partial x} - \\ &\quad -p^{(m)}\left(\frac{\partial f^{(m)}}{\partial t} + \frac{\partial(f^{(m)}u)}{\partial x}\right), \end{aligned} \quad (4.167)$$

mit $E^{(m)} = \rho^{(m)}(u^2/2 + \epsilon^{(m)})$. In Stoßwellen entsprechen den Energiegleichungen Sprungbedingungen der Art

$$\left[f^{(m)}E^{(m)}(u - \lambda)\right] = -M^{(m)}\bar{u}[p] - \overline{p^{(m)}}\left[f^{(m)}(u - \lambda)\right], \quad (4.168)$$

wobei die Invarianz der Massenfraktionen beachtet wurde, und mit den Abkürzungen

$$[q] =: q - q_0, \quad (4.169)$$

$$\bar{q} := \frac{1}{2}(q + q_0), \quad (4.170)$$

für beliebige Zustandsvariablen q . Terme wie $u\partial p/\partial x$ auf der rechten Seite der Energiegleichung werden mit der folgenden Regel behandelt

$$\int a \frac{\partial b}{\partial x} dx = \bar{a}[b], \quad (4.171)$$

welche für verallgemeinerte Funktionen a, b gilt, welche an einer gemeinsamen Stelle $x_s - \lambda t$ eine Unstetigkeit haben (dies kann man damit beweisen, daß ein Produkt von Theta-Funktionen des gleichen Arguments wieder eine Theta-Funktion ist, und die Ableitung einer Theta-Funktion eine Delta-Funktion). Auf der linken Seite der Sprungbedingung für die Energie folgt

$$[f^{(m)} E^{(m)}(u - \lambda)] = f_0^{(m)} \rho_0^{(m)}(u_0 - \lambda) \left[\frac{u^2}{2} + \epsilon \right], \quad (4.172)$$

wegen der Sprungbedingungen der Einzeldichten, und auf der rechten Seite

$$[f^{(m)}(u - \lambda)] = f_0^{(m)} \rho_0^{(m)}(u_0 - \lambda) \left(\frac{1}{\rho^{(m)}} - \frac{1}{\rho_0^{(m)}} \right). \quad (4.173)$$

Weiterhin multipliziert man die Sprungbedingung für den Impuls mit \bar{u} , und erhält damit eine Bedingung für die kinetische Energie

$$[\rho u(u - \lambda)]\bar{u} + [p]\bar{u} = \rho_0(u_0 - \lambda) \left[\frac{u^2}{2} \right] + [p]\bar{u} = 0. \quad (4.174)$$

Dies alles zusammen mit der Invarianz der Massenfraktionen führt schließlich auf die folgende Gleichung

$$\epsilon^{(m)} - \epsilon_0^{(m)} = \frac{p^{(m)} + p_0^{(m)}}{2} \left(\frac{1}{\rho_0^{(m)}} - \frac{1}{\rho^{(m)}} \right), \quad (4.175)$$

d.h. die gewöhnliche Stoßadiabate für Material m . An dieser Stelle taucht eine Schwierigkeit auf: Wenn nicht alle Materialien gleiche Drücke haben, gibt es m unbekannte Drücke $p^{(m)}$, bei gegebenen $p_0^{(m)}$, denn die Rankine-Hugoniot-Relation für den Impuls betrifft nur den Gesamtdruck. Deshalb sind einige zusätzliche Annahmen erforderlich, um ein Iterationsverfahren für die Werte p^* und u^* an der Kontaktunstetigkeit zu konstruieren.

Die einfachste Annahme ist die sogenannte Colour-Advektion und das Additionsgesetz für den Gesamtdruck ist $p = \sum_m f^{(m)} p^{(m)}$ (vgl. Kap. 2, Abschnitt 2). Dies ist ähnlich zum Additionsgesetz der Partialdrücke in Mischungen idealer Gase, wenn man $f^{(m)}$ als Konzentration ansieht (diese Interpretation ist aber unzutreffend, da sie vollständige Durchmischung annimmt). Im „linken“ Zwischenzustand des HLLC-Lösers gilt mit Hilfe der Definition Gl.(4.20) der Koeffizienten A_L aus Abschnitt 4.3.1, der Sprungbedingung für den Gesamtimpuls sowie der Massenerhaltung

$$\frac{p_L^* - p_L}{1 - \frac{\rho_L}{\rho_L^*}} = \rho_L (u_L - \lambda_L)^2 = \frac{A_L^2}{\rho_L}. \quad (4.176)$$

Nun setzt man

$$K_L^{(m)} := \frac{p_L^{(m),*} - p_L^{(m)}}{1 - \frac{\rho_L^{(m)}}{\rho_L^{(m),*}}}, \quad (4.177)$$

dies ist zunächst nur eine Definition. Wegen der Annahme der Colour-Advektion bewegen Materialgrenzen sich mit der lokalen hydrodynamischen Geschwindigkeit und die Volumenfraktionen ändern sich nicht

$$f_L^{(m)} = f_L^{(m),*}. \quad (4.178)$$

Dies vereinfacht die Sprungbedingung für $\rho^{(m)}$

$$\rho_L^{(m)} (u_L - \lambda_L) = \rho_L^{(m),*} (\lambda_C - \lambda_L), \quad (4.179)$$

und hat die gleiche Form wie die Sprungbedingung für die Gesamtdichte, daher kann die letzte Gleichung auch in der Form

$$1 - \frac{\rho_L}{\rho_L^*} = 1 - \frac{\rho_L^{(m)}}{\rho_L^{(m),*}}, \quad (4.180)$$

geschrieben werden kann. Dann resultiert folgende Relation für die unbekannten Drücke $p_L^{(m),*}$

$$p_L^{(m),*} - p_L^{(m)} = (p_L^* - p_L) \frac{\rho_L K_L^{(m)}}{A_L^2}. \quad (4.181)$$

Es braucht also nur p_L^* bekannt zu sein (am Anfang jeder Iterationsstufe sind Abschätzungen für $K^{(m)}$ und A_L vorhanden). Die $\rho_L^{(m),*}$ ergeben sich bei gegebenen $p_L^{(m),*}$ aus der Gleichung der Stoßadiabate und der Zustandsgleichung für Material m . Die Summe

$$\rho_L^* = \sum_m f_L^{(m)} \rho_L^{(m),*}, \quad (4.182)$$

ergibt einen neuen Wert für ρ_L^* , und danach kann

$$A_L = \sqrt{\frac{(p_L^* - p_L)\rho_L\rho_L^*}{(\rho_L - \rho_L^*)}}. \quad (4.183)$$

berechnet werden. Analoge Betrachtungen gelten für die „rechte“ Welle mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit λ_R . Anschließend findet man aus Gl.(4.19) einen neuen Wert für p^* (in der iterativen Form des HLLC-Lösers gilt $p_L^* = p_R^*$). Wenn $p^* < p_L$ ist, wird keine Stoßwelle, sondern eine Verdünnungswelle (rarefaction wave) auftreten, und man muß die Größe $\rho_L^{(m),*}$ nicht berechnen, sondern es gilt

$$A_L = \rho_L c_L, \quad (4.184)$$

wobei die Schallgeschwindigkeit mit Hilfe des Additionsgesetzes

$$\rho_L c_L^2 = \sum_m f_L^{(m)} \rho_L^{(m)} (c_L^{(m)})^2, \quad (4.185)$$

zu berechnen ist. Man muß dieses Additionsgesetz beweisen. Die Entwicklung des Drucks von Material m ist durch

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) p^{(m)} = (c^{(m)})^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) \rho^{(m)}, \quad (4.186)$$

gegeben, dies gilt wegen der Annahme, daß die Materialien lediglich durch adiabatische Prozesse Energie austauschen können (vgl. Kap. 2, Abschnitt 2). Daraus wird wegen der Massenerhaltung und der Colour-Advektion, d.h.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) f^{(m)} = 0, \quad (4.187)$$

die Beziehung

$$\begin{aligned} p^{(m)} \left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) f^{(m)} + f^{(m)} \left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) p^{(m)} &= \\ = \left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) f^{(m)} p^{(m)} &= -f^{(m)} \rho^{(m)} (c^{(m)})^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right). \end{aligned} \quad (4.188)$$

Nun summiert man über Materialsorten und erhält

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}\right) p = - \sum_m f^{(m)} \rho^{(m)} (c^{(m)})^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right). \quad (4.189)$$

Ein Vergleich mit der Gleichung für die Druckentwicklung in der Ein-Material-Hydrodynamik ergibt, daß man

$$\rho c^2 = \sum_m f^{(m)} \rho^{(m)} (c^{(m)})^2. \quad (4.190)$$

als Kompressibilität der Mischung ansehen kann. Die Konstruktion der Lösung des Riemann-Problems ist gerade so, daß dieses Gesetz auf die Stoßwellen-Kompressibilität erweitert wird:

$$\begin{aligned} \rho d^2 &= \frac{p^* - p}{1 - \rho/\rho^*} = \\ &= \sum_m f^{(m)} \left(\frac{p^{(m),*} - p^{(m)}}{1 - \rho^{(m)}/\rho^{(m),*}} \right) = \sum_m f^{(m)} \rho^{(m)} (d^{(m)})^2. \end{aligned} \quad (4.191)$$

wobei die Definition der Geschwindigkeit $d^{(m)}$ für die Einzelmaterialien

$$\rho^{(m)} (d^{(m)})^2 := \left(\frac{p^{(m),*} - p^{(m)}}{1 - \rho^{(m)}/\rho^{(m),*}} \right) = K^{(m)}, \quad (4.192)$$

lautet. Das gefundene Iterationsverfahren hat den Vorzug, lediglich mit den Mittelwerten der Volumenfraktionen in den Zellen bzw. Approximationen der $f^{(m)}$ im Einflußgebiet des Riemann-Problems auszukommen. Außerdem ist das Additionsgesetz für die Geschwindigkeiten der Wellenausbreitung robust und führt nicht unbedingt zu Defekten, wenn beispielsweise eines der Materialien ein anomales Quadrat der Schallgeschwindigkeit besitzt. Allerdings ist die Annahme der Colour-Advektion in Multi-Material-Zellen mit sehr unterschiedlichen Kompressibilitäten der Materialsorten eine starke Einschränkung. So wird eventuell in einer Situation, wo hauptsächlich Gas und eine sehr kleine Volumenfraktion eines anderen Materials einer kondensierten Phase vorkommen, das Material in der kondensierten Phase unphysikalisch komprimiert bzw. gedehnt. Wenn dieses Material in einer benachbarten Zelle den Hauptanteil des Volumens ausfüllt, besteht die Chance, daß der Effekt durch die Advektion wieder ausgeglichen wird. Isolierte kleine Volumen mit Material einer anderen Sorte als in ihrer Umgebung, sog. flotsam und jetsam, können unphysikalische hohe Dichten und innere Energien annehmen. Bevor entsprechende Verbesserungen untersucht werden, soll aber das Verfahren vollständig dargestellt werden.

Für die weiteren Betrachtungen ist eine bildliche Veranschaulichung der Bewegung der Materialgrenzen unumgänglich, man betrachte dazu Abb. 4.21 für die Situation an einer Zellgrenze. Der Koordinatenursprung der x -Achse ist am linken Rand der betrachteten Zelle, und die Grenze am rechten Rand bei Δx ist der Ursprung der Wellenfronten für die Lösung des Riemann-Problems. Es wird nur die „linke“ Welle des HLLC-Lösers betrachtet, und die zweite räumliche Koordinate y ist in Abb. 4.21 nicht dargestellt. Einige Stromlinien, die im Einflußgebiet des Riemannproblems in der „linken“ Zelle beginnen, sind in Abb. 4.21. eingezeichnet. Die Trajektorie der Kontakt-Unstetigkeit, die Strecke BC, wird durch $x = \Delta x + u^*t$, $t \leq \Delta t$ beschrieben,

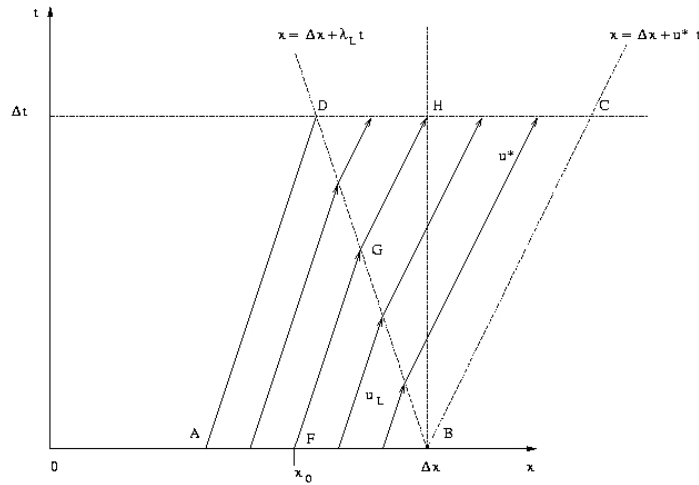


Abbildung 4.21: Trajektorien bei Wechselwirkung mit einer Stoßwelle im Riemann-Problem

hierbei ist $u^* = \lambda_C$ die Geschwindigkeit der Kontaktunstetigkeit. Das Einflußgebiet der Advektionsgleichung wird links von der Strecke AD begrenzt, einer Stromlinie mit der „ungestörten“ Geschwindigkeit u_L . Deren Anfangspunkt A liegt bei $\Delta x - (u_L - \lambda_L)\Delta t$. Alle Stromlinien zwischen AD und BC werden an der Front BD gebeugt, die nach links laufende Wellenfront ist durch $x = \Delta x + \lambda_L t$, $t \leq \Delta t$ gegeben. Im gezeichneten Fall ist $u^* > 0$, und $\lambda_L < 0$, d. h. die Situation beschreibt eine Unterschallströmung, jedoch ist das nicht entscheidend. Der Weg der Materialgrenze sei z.B. FGH, wobei sie im Punkt F mit der Koordinate x_0 beginnt und bei G auf die Front der „linken“ Welle trifft. Bei einer PLIC-Methode haben Punkte mit verschiedenen y -Koordinaten verschiedene Anfangspunkte, also

$$m_1 x_0 + m_2 y_0 = \alpha, \quad (4.193)$$

und es besteht die Möglichkeit, daß nur Teile der Materialgrenze im Einflußgebiet liegen. Falls es einen Zeitpunkt t_c gibt, wo die Wellenfront die Materialgrenze trifft, so erfüllt dieser die Gleichung

$$x_0 + u_L t_c = \Delta x + \lambda_L t_c, \quad (4.194)$$

woraus man

$$t_c = \left(\frac{\Delta x - x_0}{u_L - \lambda_L} \right), \quad (4.195)$$

erhält, desweiteren muß $0 \leq t_c \leq \Delta t$ gelten, falls ein Schnittpunkt existiert. Die x -Koordinate der Materialgrenze ist am Ende des Zeitschritts

$$x = x_0 + u_L t_c + u^*(\Delta t - t_c), \quad (4.196)$$

weil ab dem Zeitpunkt t_c die Geschwindigkeit den Wert u^* im Zwischenzustand \mathbf{U}_L^* annimmt und dieser ist im Sinne der HLLC-Approximation konstant. Wenn man in die letzte Gleichung die Lösung für t_c einsetzt

$$x - \Delta x = \left(\frac{u^* - \lambda_L}{u_L - \lambda_L} \right) (x_0 - \Delta x) + u^* \Delta t, \quad (4.197)$$

ergibt sich das Abbild der Materialgrenze nach dem Lagrange-Schritt:

$$\tilde{m}_1 x + \tilde{m}_2 y = \tilde{\alpha}, \quad (4.198)$$

mit $y = y_0$ und den transformierten Linienparametern

$$\tilde{m}_1 := m_1 \left(\frac{u_L - \lambda_L}{u^* - \lambda_L} \right), \quad \tilde{m}_2 := m_2, \quad (4.199)$$

$$\tilde{\alpha} := \alpha - m_1 \Delta x + \tilde{m}_1 (\Delta x + u^* \Delta t). \quad (4.200)$$

Um das Volumen der Flüssigkeit in der Wellenregion (zwischen D und C) nach dem Lagrange-Schritt auszurechnen, muß man beachten, daß es die Länge $(u^* - \lambda_L)\Delta t$ in x -Richtung hat und der Punkt D die x -Koordinate $x_D = \Delta x - \lambda_L \Delta t$ besitzt und $\tilde{\alpha}' = \tilde{\alpha} - \tilde{m}_1 x_D$ wegen der Verschiebung des Koordinatenursprungs der Liniengleichung gilt

$$\tilde{V}_L^{(m)} = V^{(m)}(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \tilde{\alpha} - \tilde{m}_1 (\Delta x - \lambda_L \Delta t), (u^* - \lambda_L)\Delta t, \Delta y). \quad (4.201)$$

Mit Hilfe der Gln.(4.199,4.200) sowie unter Ausnutzung des Multiplikationstheorems Gl.(4.157) entsteht daraus

$$\begin{aligned} \tilde{V}_L^{(m)} &= \left(\frac{u^* - \lambda_L}{u_L - \lambda_L} \right) V^{(m)}(m_1, m_2, \\ &\alpha + m_1((u_L - \lambda_L)\Delta t - \Delta x), (u_L - \lambda_L)\Delta t, \Delta y). \end{aligned} \quad (4.202)$$

Hierbei wurde überall, wo die Funktion $V^{(m)}(\dots)$ auftritt, ein oberer Index für die Materialsorte eingeführt, mit der Verabredung, daß die Linienparameter in der Funktion $V^{(m)}(\dots)$ die der betreffenden Materialsorte m sind. Weiterhin bezeichnet eine Tilde Werte nach dem Lagrange-Schritt. Das Volumen in der Einflußregion (das Intervall AB, vgl. Abb.4.21) vor dem Lagrange-Schritt ist

$$\begin{aligned} V_L^{(m)} &= V^{(m)}(m_1, m_2, \\ &\alpha + m_1((u_L - \lambda_L)\Delta t - \Delta x), (u_L - \lambda_L)\Delta t, \Delta y). \end{aligned} \quad (4.203)$$

Dies folgt daraus, daß die Länge der Strecke AB $(u_L - \lambda_L)\Delta t$ ist, und $\Delta x - (u_L - \lambda_L)\Delta t$ die x -Koordinate des Punktes A; weiterhin gilt zu Beginn die Form der Liniengleichung mit den „ungestörten“ Parametern m_1, m_2, α . Da die Masse der Sorte m innerhalb der begrenzenden Stromlinien AD und BC erhalten bleibt, gilt

$$\rho_L^{(m),*} \tilde{V}_L^{(m)} = \rho_L^{(m)} V_L^{(m)}. \quad (4.204)$$

Das beweist mit Hilfe der Gln.(4.202,4.203) die Verträglichkeit mit der Sprungbedingung der Dichte

$$\rho_L^{(m),*} \left(\frac{u^* - \lambda_L}{u_L - \lambda_L} \right) V_L^{(m)} = \rho_L^{(m)} V_L^{(m)}, \quad (4.205)$$

die letzte Beziehung ist Gl.(4.179) äquivalent. Material m ändert sein Volumen während des Lagrange-Schritts in der linkslaufenden Welle am rechten Rand um die Differenz

$$\Delta V_L^{(m)} := \tilde{V}_L^{(m)} - V_L^{(m)} = \left(\frac{u^* - u_L}{u_L - \lambda_L} \right) V_L^{(m)}. \quad (4.206)$$

Die gesamte Änderung des Volumens von Material m in der Zelle $(i + 1/2)$ während des Lagrange-Schritts setzt sich aus dem Beitrag der „rechten“ Welle am linken Rand x_i und dem der „linken“ Welle am rechten Rand x_{i+1} zusammen

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{i+1/2}^{(m)} &= f_{i+1/2}^{(m),(n)} \Delta x \Delta y + \Delta V_{R,i}^{(m)} + \Delta V_{L,i+1}^{(m)} = \\ &= f_{i+1/2} \Delta x \Delta y - \left(\frac{u^* - u_R}{\lambda_R - u_R} \right)_i V_{R,i}^{(m)} + \left(\frac{u^* - u_L}{u_L - \lambda_L} \right)_{i+1} V_{L,i+1}^{(m)}, \end{aligned} \quad (4.207)$$

wobei

$$\Delta V_R^{(m)} := \tilde{V}_R^{(m)} - V_R^{(m)} = \left(\frac{u^* - u_R}{u_R - \lambda_R} \right) V_R^{(m)}, \quad (4.208)$$

gilt. Es bleibt noch nachzutragen, wie das Volumen der Sorte m in einer „rechten“ Welle vor dem Lagrange-Schritt zu berechnen ist (ohne Beweis):

$$V_R^{(m)} := V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, (\lambda_R - u_R)\Delta t, \Delta y), \quad (4.209)$$

wobei die Linienparameter m_1, m_2, α die der Zelle rechts der betrachteten Zellgrenze sind. Die Länge in x -Richtung $(\lambda_R - u_R)\Delta t$ ist immer positiv. Die etwas einfachere Form des α -Arguments der Funktion $V^{(m)}$ erklärt sich daraus, daß zur Berechnung der Ursprung der Liniengleichung (4.154) in der rechten Nachbarzelle nicht verschoben zu werden braucht.

Der Remap-Schritt verteilt das Volumen der Flüssigkeit der Sorte m in den Überlappungsregionen zwischen dem Gitter nach dem Lagrange-Schritt und dem ursprünglichen Eulerschen Gitter konservativ um. Für die Zelle $(i + 1/2)$ bedeutet das Folgendes: An der Grenze x_i wird das sogenannte Transport-Volumen (oder advektierte Volumen) $V_i^{(m),adv}$ dazuaddiert, es hat das Vorzeichen der Geschwindigkeit u_i^* . Deshalb fließt bei $u_i^* > 0$ Materie am linken Rand in die Zelle. Weiterhin wird ein Transport-Volumen $V_{i+1}^{(m),adv}$ an der Grenze x_{i+1} subtrahiert, es hat das Vorzeichen der Geschwindigkeit u_{i+1}^* und fließt am rechten Rand aus der Zelle, falls $u_{i+1}^* > 0$ gilt. Die Eulersche Finite-Volumen-Formulierung lautet damit

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}^{(m),(n+1)} \Delta x \Delta y &= f_{i+1/2}^{(m),(n)} \Delta x \Delta y + \\ &+ V_i^{(m),adv} - \left(\frac{u^* - u_R}{\lambda_R - u_R} \right)_i V_{R,i}^{(m)} - \\ &- V_{i+1}^{(m),adv} + \left(\frac{u^* - u_L}{u_L - \lambda_L} \right)_{i+1} V_{L,i+1}^{(m)}. \end{aligned} \quad (4.210)$$

Um die Transportvolumina zu berechnen, sind 4 Fälle zu unterscheiden. Man betrachte die Grenze x_{i+1} , und den Fall $u^* > 0$ (der Index $i + 1$ wird fortgelassen, soweit es nicht zu Verwechslungen führt). Dann ist die Donor-Zelle L links von x_{i+1} . Im Fall einer Unterschallströmung, in der $\lambda_L < 0$ ist, befindet sich das Material im gesamten transportierten Volumen im Zwischenzustand \mathbf{U}_L^* des HLLC-Lösers. Daher muß man das Volumen mit Hilfe von \tilde{m}_1 , \tilde{m}_2 und $\tilde{\alpha}$ berechnen. Die Grenzen in x -Richtung sind Δx und $\Delta x + u^* \Delta t$. Dies ergibt

$$V^{(m),adv} = V^{(m)}(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \tilde{\alpha} - \tilde{m}_1 \Delta x, u^* \Delta t, \Delta y). \quad (4.211)$$

Mit Hilfe der Formeln für \tilde{m}_1 , und $\tilde{\alpha}$, Gln.(4.199,4.200) und des Multiplikationstheorems Gl.(4.157) folgt

$$\begin{aligned} V^{(m),adv} &= \left(\frac{u^* - \lambda_L}{u_L - \lambda_L} \right) \times \\ &\times V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(\hat{u} \Delta t - \Delta x), \hat{u} \Delta t, \Delta y), \end{aligned} \quad (4.212)$$

wobei die Abkürzung \hat{u} eine analoge Bedeutung wie Gl.(4.98) im SOVA-Algorithmus hat (die Berechnung dieser Größe ist aber hier spezifisch für eine Godunov-Methode)

$$\hat{u} := \left(\frac{u_L - \lambda_L}{u^* - \lambda_L} \right) u^*. \quad (4.213)$$

Diese Geschwindigkeit \hat{u} besitzt die folgende physikalische Interpretation: Die Stromlinie, welche bei Δt gerade die Zellgrenze Δx erreicht, ist am Beginn

des Zeitschritts bei $\Delta x - \hat{u}\Delta t$ (natürlich nur für den betrachteten Fall der Unterschallströmung). Die betreffene Stromlinie schneidet die Wellenfront, gegeben durch $x = \Delta x - \lambda_L t$, und wird dabei gebeugt. Am besten verdeutlicht man sich das anhand der Abb. 4.21. In diesem Zusammenhang sei bemerkt, daß [Miller und Puckett \(1996\)](#) in ihrer Multi-Material-Methode ein Transportvolumen mit u^* anstelle von \hat{u} in der letzten Gleichung berechnen, außerdem fehlt der Vorfaktor (auch bei [Pilliod und Puckett \(1997\)](#) liegt diese falsche Vorstellung zugrunde). Man kann die obige Prozedur auch als „characteristic traceback“ Formulierung der Transportvolumen bezeichnen, hier wurde sie zum ersten Mal für ein Godunov-Verfahren entwickelt. Der zweite Fall ist $u^* > 0$ und $\lambda_L > 0$, also Überschall mit linksseitigem Donor. Das Transportvolumen besteht aus zwei Teilen: Eine Region zwischen Δx und $\Delta x + \lambda_L \Delta t$, wo die Materie im ungestörten Zustand \mathbf{U}_L ist, und eine sich anschließende Region zwischen $\Delta x + \lambda_L \Delta t$ und $\Delta x + u^* \Delta t$, wo der Zwischenzustand \mathbf{U}_L^* vorherrscht. In der letzteren Region kennt man bereits das Volumen, es lautet $\tilde{V}^{(m)}$, und die ungestörte Region hat ein Volumen von

$$V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), \lambda_L \Delta t, \Delta y).$$

Die Summe kann man als

$$\begin{aligned} V^{(m),adv} &= V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), \lambda_L \Delta t, \Delta y) + \\ &+ V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1((u_L - \lambda_L)\Delta t - \Delta x), (u_L - \lambda_L)\Delta t, \Delta y) + \\ &\quad + \left(\frac{u^* - u_L}{u_L - \lambda_L} \right) V_L^{(m)} \end{aligned} \quad (4.214)$$

schreiben, hierbei hat man $V_L^{(m)}$ einmal addiert und einmal abgezogen. Die Summe des ersten und zweiten Terms ergeben das Volumen der Sorte m vor dem Zeitschritt in der Region zwischen $\Delta x - u_L \Delta t$ und Δx (siehe Abb. 4.22 zur Illustration), der dritte Summand ist die Differenz in der „linken“ Welle vor und nach dem Lagrange-Schritt. Daher gilt

$$\begin{aligned} V^{(m),adv} &= V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), u_L \Delta t, \Delta y) + \\ &\quad + \Delta V_L^{(m)}. \end{aligned} \quad (4.215)$$

Der Term mit $\Delta V_L^{(m)}$ hebt gerade den Beitrag des Lagrange-Schritts wieder auf, jedoch nur in der Donor-Zelle, wo $V^{(m),adv}$ subtrahiert wird. Anscheinend beachten andere Autoren diesen Beitrag nicht ([Miller und Puckett, 1996](#)). Es gibt noch zwei weitere Fälle, mit $u^* \leq 0$. Die Donor-Zelle liegt nun rechts der betrachteten Grenze, und alle Linienparameter beziehen sich auf die rechte Zelle. Die Formel bei Unterschall ($\lambda_R > 0$) lautet, ohne Beweis

$$V^{(m),adv} = - \left(\frac{\lambda_R - u^*}{\lambda_R - u_R} \right) V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, -\hat{u}\Delta t, \Delta y), \quad (4.216)$$

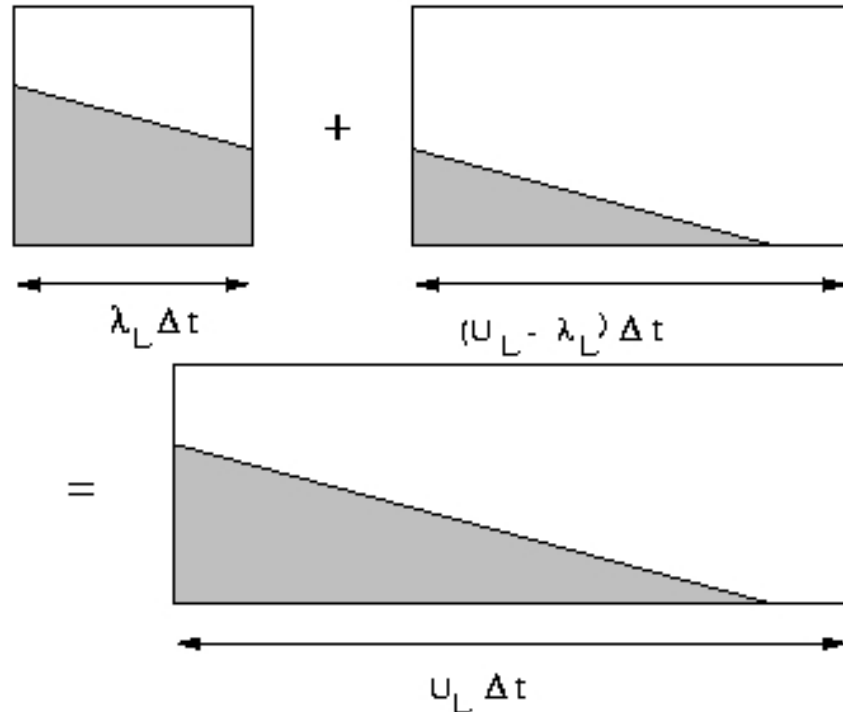


Abbildung 4.22: Addition des Volumens der Flüssigkeit bei Vereinigung zweier rechteckiger Regionen

man beachte, daß $V^{(m),adv}$ jetzt negativ ist, mit der Definition von \hat{u} als

$$\hat{u} := \left(\frac{\lambda_R - u_R}{\lambda_R - u^*} \right) u^*. \quad (4.217)$$

Der noch fehlende Fall der Überschallströmung ergibt

$$V^{(m),adv} = -V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, -u_L \Delta t, \Delta y) - \Delta V_R^{(m)}, \quad (4.218)$$

ebenfalls ohne Beweis. Da die Formeln so unanschaulich sind, ist eine Erläuterung angebracht. In jedem Falle ist nur ein Einflußgebiet vor dem Lagrange-Schritt zu betrachten. Für Unterschallströmungen rechnet man mit Hilfe der Geschwindigkeit \hat{u} das Volumen der Sorte m im Einflußgebiet der Advektion aus. Anschließend beachtet man, daß sämtliches Material in diesem Gebiet eine Deformation erfährt, mit dem Faktor $(u^* - \lambda_S)/(u_S - \lambda_S)$, wobei $S = L$ bzw. $S = R$ gelten. Für Überschall muß man das Einflußgebiet mit Hilfe der

ungestörten Geschwindigkeit u_S , $S = L$ bzw. $S = R$ berechnen, und den Beitrag der Änderung in der Wellenregion $\Delta V_S^{(m)}$ dazuaddieren bzw. subtrahieren. Dies funktioniert, weil für Überschall alles Material in der Wellenregion aus der Donorzelle transportiert wird.

Die Diskretisierung der Advektionsgleichung kann etwas rationeller formuliert werden

$$f_{i+1/2}^{(m),(n+1)} = f_{i+1/2}^{(m),(n)} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{A}_i^{(m),(+)} + \mathcal{A}_{i+1}^{(m),(-)} \right), \quad (4.219)$$

wobei die sogenannten Fluktuationen oder Pseudo-Flüsse (in Anlehnung an [LeVeque \(1997\)](#)) wie folgt definiert werden

$$\mathcal{A}_i^{(m),(+)} \Delta y \Delta t := -V_i^{(m),adv} + f_{i+1/2}^{(m)} u_{i+1/2} \Delta t \Delta y - \Delta V_{R,i}^{(m)}, \quad (4.220)$$

$$\mathcal{A}_i^{(m),(-)} \Delta y \Delta t := V_i^{(m),adv} - f_{i-1/2}^{(m)} u_{i-1/2} \Delta t \Delta y - \Delta V_{L,i}^{(m)}. \quad (4.221)$$

Die zweiten Terme auf den rechten Seiten in den Definitionen der $\mathcal{A}_i^{(m),(\pm)}$ heben sich in Gl.(4.219) gegenseitig auf. Sie sind eingeführt, damit für triviale Situation an einer Grenze x_i beide Fluktuationen $\mathcal{A}_i^{(m),(\pm)}$ identisch Null werden. Dies ist leicht zu beweisen. Eine triviale Situation liegt vor, falls an beiden Seiten das Material m nicht existiert, oder aber mit Volumenfraktion $f_S^{(m)} = 1$, $S = L, R$. Die Abwesenheit von Material m ist völlig trivial, da dann sowohl Transportvolumen als auch die Differenzen $\Delta V_{S,i}^{(m)}$, $S = L, R$ identisch verschwinden. Wenn nur Material m auftritt, sind die Differenzen $\Delta V_{L,R}^{(m)} = \pm(u^* - u_{L,R}) \Delta t \Delta y$ und die Transportvolumen $u^* \Delta t \Delta y$, wie man leicht einsieht. Daraus ergibt sich die Behauptung.

Damit hat das Verfahren für die Advektionsgleichung die Eigenschaft, daß unnötiger Rechenaufwand vermieden wird, und nur an Multi-Material-Kanten die sogenannten Fluktuationen $\mathcal{A}_i^{(m),(\pm)}$ zu berechnen sind. Alle Ausdrücke werden mit Hilfe der Geschwindigkeiten ($\lambda_L, \lambda_C = u^*, \lambda_R$) der Wellenfronten berechnet, und benötigen ansonsten nur Werte “rechts“ und “links“ zu Beginn des Zeitschritts. Der Lagrange-Schritt diente nur als Vehikel zur Herleitung. Die Gl.(4.219) ist die Eulersche Formulierung einer Godunov-Methode für die Advektionsgleichung. Dieses Schema ist nach bestem Wissen des Autors bisher noch nicht in der Literatur aufgetaucht. Es ließe sich auch auf Probleme jenseits der reinen Hydrodynamik mit mehr als drei charakteristischen Geschwindigkeiten verallgemeinern.

Die Bilanzgleichungen für den Gesamtimpuls und die Massen der Materialien sind in konservativer Form, daher stellt ihre Diskretisierung kein Problem dar. Die bisherigen Überlegungen sind ausreichend, um die Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung, Gl.(4.160), zu beschreiben. Während

des Lagrange-Schritts gibt es keine Veränderung der Massen der Materialien zwischen den Trajektorien $x_i + u_i^* t$ und $x_{i+1} + u_{i+1}^* t$ des mitbewegten Lagrange'schen Gitters. Die transportierte Masse der Sorte m ist in Unterschall-Fällen durch Multiplikation der Transportvolumen mit den jeweiligen Werten $\rho_S^{(m),*}$, $S = R, L$ zu berechnen

$$M^{(m),adv} = \rho_S^{(m)} \left(\frac{u_S - \lambda_S}{u^* - \lambda_S} \right) V_S^{(m),adv}, \quad (4.222)$$

wobei $S = L$ für $u^* > 0$ und $\lambda_L < 0$ bzw. $S = R$ für $u^* < 0$ und $\lambda_R > 0$ gilt. Die expliziten Formeln vereinfachen sich noch

$$M^{(m),adv} = \left\{ \begin{array}{l} \rho_L^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(\hat{u} - \Delta x), \hat{u}\Delta t, \Delta y), \\ \quad (u^* > 0), (\lambda_L < 0) \\ -\rho_R^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, -\hat{u}\Delta t, \Delta y), \\ \quad (u^* < 0), (\lambda_R > 0) \end{array} \right\}, \quad (4.223)$$

und enthalten nur die Donor-Werte der Dichten (die Linienparameter gehören auch zur jeweiligen Donor-Zelle). Die Überschall-Fälle sind analog, die einzige Änderung besteht darin, daß $\hat{u} \rightarrow u_S$ substituiert werden muß

$$M^{(m),adv} = \left\{ \begin{array}{l} \rho_L^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L - \Delta x), u_L\Delta t, \Delta y), \\ \quad (u^* > 0), (\lambda_L \geq 0) \\ -\rho_R^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, -u_R\Delta t, \Delta y), \\ \quad (u^* < 0), (\lambda_R \leq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.224)$$

Der Fall $u^* = 0$ ist trivial und es gibt keinen Massenstrom. Im Gegensatz zur Volumenadvektion tritt kein zusätzlicher Term proportional zu $\Delta V_S^{(m)}$ auf, da in den "Wellenregionen" die Masse erhalten bleibt. Die Eulersche Formulierung der diskretisierten Kontinuitätsgleichung Gl.(4.160) lautet damit

$$f_{i+1/2}^{(m),(n+1)} \rho_{i+1/2}^{(m),(n+1)} \Delta x \Delta y = f_{i+1/2}^{(m),(n)} \rho_{i+1/2}^{(m),(n)} \Delta x \Delta y + M_i^{(m),adv} - M_{i+1}^{(m),adv}. \quad (4.225)$$

Da alle Materialien eine gemeinsame hydrodynamische Geschwindigkeit besitzen, ist die Diskretisierung Impuls-Bilanz sehr einfach. Dazu definiert man die Flußfunktion der Gesamtmasse als

$$\Phi_i := \sum_m M_i^{(m),adv}. \quad (4.226)$$

Danach lautet die Diskretisierung der Impuls-Bilanz in Eulerscher Form

$$\rho_{i+1/2}^{(n+1)} u_{i+1/2}^{(n+1)} \Delta x \Delta y = \rho_{i+1/2}^{(n)} u_{i+1/2}^{(n)} \Delta x \Delta y + (\Phi_i u_i + p_i \Delta t \Delta y) - (\Phi_{i+1} u_{i+1} + p_{i+1} \Delta t \Delta y), \quad (4.227)$$

wobei die u_i und p_i wie in einer Godunov-Methode für nur ein Material gebildet werden (siehe auch [Miller und Puckett \(1996\)](#)):

$$u_i := \left\{ \begin{array}{l} u_i^*, (u_i^* = 0) \\ u_{i-1/2}, (u_i^* > 0), (\lambda_L > 0) \\ u_{i+1/2}, (u_i^* < 0), (\lambda_R < 0) \\ u_i^*, (u_i^* > 0), (\lambda_L \leq 0) \\ u_i^*, (u_i^* < 0), (\lambda_R \geq 0) \end{array} \right\}, \quad (4.228)$$

$$p_i := \left\{ \begin{array}{l} p_i^*, (u_i^* = 0) \\ p_{i-1/2}, (u_i^* > 0), (\lambda_L > 0) \\ p_{i+1/2}, (u_i^* < 0), (\lambda_R < 0) \\ p_i^*, (u_i^* > 0), (\lambda_L \leq 0) \\ p_i^*, (u_i^* < 0), (\lambda_R \geq 0) \end{array} \right\}. \quad (4.229)$$

Die Werte u_i^* und p_i^* an der Kontakt-Unstetigkeit ergeben sich mit Hilfe des schon beschriebenen Iterationsverfahrens nach Godunov.

Es fehlen noch die Energie-Gleichungen. Man betrachte wieder die Abbildung 4.21. Wie schon erwähnt, bleibt die Masse des Materials m innerhalb des Gebiets zwischen der Trajektorie AD, d. h. $x = \Delta x - (u_L - \lambda_L)\Delta t + u_L t$ und der Kontakt-Unstetigkeit BC, d. h. $x = \Delta x + u^* t$ erhalten. Die Energie im Einflußgebiet ist anfangs

$$E_L^{(m)} V_L^{(m)} = \rho_L^{(m)} V_L^{(m)} \left(\frac{u_L^2}{2} + \epsilon_L^{(m)} \right), \quad (4.230)$$

und am Ende des Lagrange-Schritts befindet sich das Gebiet zwischen D und C im Zwischenzustand U_L^* , also ist die Energie

$$\tilde{E}_L^{(m),*} \tilde{V}_L^{(m)} := \rho_L^{(m),*} \tilde{V}_L^{(m)} \left(\frac{(u^*)^2}{2} + \epsilon_L^{(m),*} \right). \quad (4.231)$$

Unter Benutzung der Massenerhaltung wird daraus die Differenz

$$\Delta E_L^{(m)} = \rho_L^{(m)} V_L^{(m)} \left[\frac{(u^* + u_L)(u^* - u_L)}{2} + \epsilon_L^{(m),*} - \epsilon_L^{(m)} \right], \quad (4.232)$$

wobei die Größe $\Delta E_L^{(m)}$ die Differenz des Produkts aus Energiedichte und Volumen darstellt. Weiterhin kann man die Stoßadiabate für die Differenz der inneren Energien benutzen, und findet

$$\begin{aligned} \Delta E_L^{(m)} = \rho_L^{(m)} V_L^{(m)} & \left[\frac{(u^* + u_L)(u^* - u_L)}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{p^{(m),*} + p_L^{(m)}}{2} \left(\frac{1}{\rho_L^{(m)}} - \frac{1}{\rho_L^{(m),*}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.233)$$

Außerdem gilt die Sprungbedingung für die Dichte, Gl.(4.179), und das ergibt nach einer Umordnung von Termen

$$\Delta E_L^{(m)} = \left(\frac{u^* - u_L}{u_L - \lambda_L} \right) V_L^{(m)} \left[\rho_L^{(m)} \frac{(u_L - \lambda_L)(u^* + u_L)}{2} - \frac{p^{(m),*} + p_L^{(m)}}{2} \right]. \quad (4.234)$$

Der Vorfaktor des Ausdrucks in den eckigen Klammern ist gerade die Volumendifferenz $\Delta V_L^{(m)}$. In der Welle rechts der Kontaktunstetigkeit gilt eine analoge Beziehung (man substituiert $L \rightarrow R$)

$$\Delta E_R^{(m)} = \left(\frac{u^* - u_R}{u_R - \lambda_R} \right) V_R^{(m)} \left[\rho_R^{(m)} \frac{(u_R - \lambda_R)(u^* + u_R)}{2} - \frac{p^{(m),*} + p_R^{(m)}}{2} \right], \quad (4.235)$$

und auch dieser Ausdruck ist proportional zur Volumendifferenz $\Delta V_R^{(m)}$. Lediglich die Terme in den eckigen Klammern müssen im Algorithmus neu berechnet werden, denn die Volumendifferenzen $\Delta V_S^{(m)}$, $S = L, R$ werden schon bei der Lösung der Gleichung (4.219) bereitgestellt. Damit ist die diskrete Form der Energiebilanz des Materials m , bezogen auf die Zelle $(i+1/2)$ während des Lagrange-Schritts

$$\tilde{E}_{i+1/2}^{(m)} \tilde{V}_{i+1/2}^{(m)} = E_{i+1/2}^{(m),(n)} f_{i+1/2}^{(m),(n)} \Delta x \Delta y + \Delta E_{L,i}^{(m)} + \Delta E_{R,i+1}^{(m)}. \quad (4.236)$$

Der Eulersche Remap-Schritt wird, wie erwartet, eine transportierte (oder advektierte) Energie ergeben, sodaß danach die diskretisierte Energie-Gleichung für das Material m

$$E_{i+1/2}^{(m),(n+1)} f_{i+1/2}^{(m),(n+1)} \Delta x \Delta y = E_{i+1/2}^{(m),(n)} f_{i+1/2}^{(m),(n)} \Delta x \Delta y + \Delta E_{L,i}^{(m)} + E_i^{(m),adv} + \Delta E_{R,i+1}^{(m)} - E_{i+1}^{(m),adv}, \quad (4.237)$$

lautet. Die advektierte Energie $E_i^{(m),adv}$ wird im Fall einer Unterschallströmung durch Multiplikation des Transportvolumens mit dem Wert der Energiedichte im Zwischenzustand gebildet:

$$E_i^{(m),adv} = \left\{ \begin{array}{l} E_{L,i}^{(m),*} V_i^{(m),adv}, (u_i^* > 0), (\lambda_{L,i} < 0) \\ E_{R,i}^{(m),*} V_i^{(m),adv}, (u_i^* < 0), (\lambda_{R,i} > 0) \end{array} \right\}. \quad (4.238)$$

Es sollte noch erklärt werden, wie $E_S^{(m),*}$, $S = L, R$ berechnet werden. Dies ist sehr einfach, denn diese treten nur als Produkt mit $V^{(m),adv}$ auf, und die Transportvolumen für Unterschall haben jeweils den Vorfaktor

$$\left(\frac{u^* - \lambda_S}{u_S - \lambda_S} \right), \quad S = L, R$$

welcher hier die Dichte $\rho_S^{(m),*}$ multipliziert. Dabei entsteht wegen Gl.(4.179) die ungestörte Dichte $\rho_S^{(m)}$. Also muß man nur die Differenzen der Energie pro Masse kennen, diese sind jedoch in den Gln.(4.234,4.235) für $\Delta E_S^{(m)}$ in den Ausdrücken in den eckigen Klammern enthalten. Durch diese Wiederverwertung einmal berechneter Ausdrücke bei der Implementation im Programm wird die Effizienz gesteigert und die Konsistenz gewahrt.

Die Überschall-Fälle sind etwas komplizierter. Der Einfachheit halber sei $0 \leq \lambda_L < u^*$. Das Überlappungsgebiet des Gitters nach dem Lagrange-Schritt mit dem ursprünglichen Eulerschen Gitter besteht aus einer Region zwischen Δx und $\Delta x + \lambda_L \Delta t$, wo das Material der Sorte m im ungestörten Zustand \mathbf{U}_L ist, mit der Energiedichte $E_L^{(m)}$ und dem Volumen (diese Formel enthält den Effekt der Bewegung der Materialgrenze unter dem Einfluß der Geschwindigkeit u_L)

$$V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), \lambda_L \Delta t, \Delta y),$$

sowie einer zweiten Region zwischen $\Delta x + \lambda_L \Delta t$ und $\Delta x + u^* \Delta t$, mit der Energiedichte $E_L^{(m),*}$ im Zwischenzustand und dem Volumen $\tilde{V}_L^{(m)}$. Die Summe ergibt

$$E^{(m),adv} = E_L^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), \lambda_L \Delta t, \Delta y) + E_L^{(m),*} \tilde{V}_L^{(m)}. \quad (4.239)$$

Mit Hilfe der Differenz während des Lagrange-Schritts, $\Delta E_L^{(m)}$ wird daraus

$$E^{(m),adv} = E_L^{(m)} \left[V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), \lambda_L \Delta t, \Delta y) + V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L - \lambda_L) \Delta t - \Delta x), (u_L - \lambda_L) \Delta t, \Delta y) \right] + \Delta E_L^{(m)} \quad (4.240)$$

Die Summe der Volumen in den eckigen Klammern läßt sich zusammenfassen, und es resultiert (vergleiche die analoge Betrachtung bei der Berechnung der Transportvolumen, siehe auch Abb. 4.22)

$$E^{(m),adv} = E_L^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), u_L \Delta t, \Delta y) + \Delta E_L^{(m)}. \quad (4.241)$$

Der zweite Summand hebt den Beitrag des Lagrange-Schritts in der Donor-Zelle auf, aber nicht in der rechten Zelle, wohin die Materie fließt. [Miller und Puckett \(1996\)](#) stellen keine so weitgehenden Betrachtungen an und

beschränken sich für die Energien der Einzelmaterialien auf eine reine Donor-Zellen-Methode. Für die negative Richtung $u^* < \lambda_R \leq 0$ ergibt sich (ohne Beweis)

$$E^{(m),adv} = -E_R^{(m)} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, -u_R \Delta t, \Delta y) + \quad (4.242)$$

$$-\Delta E_R^{(m)},$$

wobei die Linienparameter m_1 , m_2 , und α aus der rechten Donor-Zelle verwendet werden müssen. Am Ende dieses Abschnitts sei bemerkt, daß dies wahrscheinlich die erste logisch konsistente Behandlung der Energiegleichungen für mehrere Materialien in einer Volume-of-Fluid Methode ist. Weiterhin sind sämtliche Ausdrücke in geschlossener algebraischer Form angegeben.

4.4.3 Godunov-Verfahren II: Wellenrefraktion

Ein gewisser „Schönheitsfehler“ der Methode im letzten Abschnitt ist die Annahme der Colour-Advektion und die daraus resultierende gleichartige Kompression von Materialien in einer Stoßwelle, ungeachtet der individuellen Kompressibilität. In diesem Abschnitt wird das Problem behoben.

Miller und Puckett (1996) betrachten die komplizierte Advektionsgleichung der „mixture theory“ für die Volumenfraktionen. Diese gilt nur in statistischem Sinne, wenn Materialien überall mikroskopisch vermischt sind. Außerdem erzwingt solch eine Formulierung ein Additionsgesetz für reziproke Quadrate der Schallgeschwindigkeiten, vgl. Gl.(2.18), Kap. 2, Abschnitt 2. Das Analogon aus der Elektrotechnik dazu ist eine Parallelschaltung von Widerständen. Wenn nur ein Material Null als quadratische Schallgeschwindigkeit hat (und dies kann wegen numerischer Fehler und thermodynamischer Inkonsistenzen der Zustandsgleichung leicht vorkommen), so wird die Gesamt-Schallgeschwindigkeit Null (ein Kurzschluß im Bild mit den Widerständen). Dagegen ist das Additionsgesetz aus dem vorigen Abschnitt robuster.

Eine weitere Möglichkeit ist es, lokales Druckgleichgewicht zwischen den Materialien zu verlangen (siehe Kapitel 2, Abschnitt 2). Es gibt jedoch kein Verfahren, das automatisch nach dem Zeitschritt wieder Druckgleichgewicht produziert. Also muß eine weitgehend künstliche Relaxation stattfinden, nicht in physikalischer Zeit, sondern instantan (Lallemand und Saurel , 2000). Dabei sollte eine adiabatische Relaxation in jeder Multi-Material-Zelle stattfinden (Miller und Puckett , 1996; Lallemand und Saurel , 2000), wobei die Adiabate nur näherungsweise bekannt ist, aber man möchte auch nicht in jeder Multi-Material-Zelle eine gewöhnliche Differentialgleichung lösen. Dadurch besteht die Gefahr, unphysikalische Zustände zu erzeugen. In Fällen, wo große Ungleichheit der Massenfraktionen zwischen einzelnen Materialien

vorhanden ist, wird die Materie mit der geringeren Masse beim adiabatischem Ausgleich enorm aufgeheizt (bzw. abgekühlt). In praktischen Berechnungen kommen Massenfraktionen bis zur Größenordnung des Maschinenfehlers zustande. Solche Methoden funktionieren nicht ohne „engineering cutoffs“, „fallback assumptions“ usw. Außerdem breitet sich auch Information aus, und es entstehen unphysikalische Wellen. Um das Druckgleichgewicht herzustellen, finden kostspielige Aufrufe der Zustandsgleichungen statt (Benson , 1992; Lallemand und Saurel , 2000), was mehr Zeit als für den eigentlichen Hydrodynamik-Algorithmus in Multi-Material-Zellen verbraucht.

Programme wie CTH (McGlaun, Thompson, Elrick , 1990) oder SAGE (Gisler u. a. , 2003) behandeln die Materie deshalb lokal als isotherm (G. Gisler, pers. Mitteilung), und so gibt es nur eine Evolutionsgleichung für die Gesamtenergie. Die Annahme gleicher Temperaturen ist nicht günstiger, sie erfordert ebenfalls aufwendige iterative Berechnungen mit den Zustandsgleichungen aller Materialien in einer Zelle (Benson , 1992), ist aber dann leichter zu implementieren, falls die Zustandsgleichung ohnehin nur in der temperaturabhängigen Form $p = p(\rho, T)$, $\epsilon = \epsilon(\rho, T)$ existiert. Auch physikalisch erscheint es eher fragwürdig, Temperatúrausgleich in Multi-Material-Zellen mit bis einigen hundert Metern Ausdehnung anzunehmen. Ein weiteres Problem mit Druckgleichgewichten ist die Tatsache, daß diese nur mit einer endlichen numerischen Genauigkeit verwirklicht werden. Verletzungen des Gleichgewichts müssen dann doch irgendwie aufgefangen werden, sonst resultieren Fehler in den Energiegleichungen oder sogar in der Konservativität. Besser wäre, gleich von Anfang an eine Methode ohne Druckgleichgewicht und ohne die Einschränkung der Colour-Advektion zu betrachten.

Dazu ist es notwendig, nochmals die Voraussetzungen der Lösung für den Gesamtdruck p^* und die Geschwindigkeit u^* an der Kontakt-Unstetigkeit im Riemann-Problem zu überdenken. Man betrachte erneut die Massenerhaltung für Material m an der „linken“ Wellenfront, jedoch ohne die Vereinfachung der Colour-Advektion

$$\begin{aligned} f_L^{(m)} \rho_L^{(m)} (u_L - \lambda_L) &= f_L^{(m),*} \rho_L^{(m),*} (u^* - \lambda_L) = \\ &= M_L^{(m)} \rho_L (u_L - \lambda_L) = M_L^{(m)} A_L, \end{aligned} \quad (4.243)$$

wobei in der zweiten Zeile die Definition der Massenfraktion $M^{(m)}$, Gl.(4.163) und des Koeffizienten A_L , der p - u -Relation in der „linken“ Welle, Gl.(4.20), benutzt wurden. Teilt man einmal durch $\rho_L^{(m)}$, ein anderes Mal durch $\rho_L^{(m),*}$ und subtrahiert beide Ausdrücke voneinander, so entsteht

$$M_L^{(m)} A_L \left(\frac{1}{\rho_L^{(m)}} - \frac{1}{\rho_L^{(m),*}} \right) = f_L^{(m)} (u_L - \lambda_L) - f_L^{(m),*} (u^* - \lambda_L). \quad (4.244)$$

Anschließend wird über alle Materialsorten summiert, die Definition der Massenfraktion $M_L^{(m)}$ benutzt, und mit ρ_L multipliziert:

$$A_L \sum_m f_L^{(m)} \left(1 - \frac{\rho_L^{(m)}}{\rho_L^{(m),*}} \right) = \rho_L (u_L - u^*). \quad (4.245)$$

Diese Gleichung wird nochmals mit A_L multipliziert, und wegen der Sprungbedingung für den Gesamtimpuls,

$$A_L (u_L - u^*) = p^* - p_L, \quad (4.246)$$

ergibt sich

$$A_L^2 \sum_m f_L^{(m)} \left(1 - \frac{\rho_L^{(m)}}{\rho_L^{(m),*}} \right) = \rho_L (p^* - p_L), \quad (4.247)$$

was auch als

$$A_L = \left[\frac{(p^* - p_L) \rho_L}{\sum_m f_L^{(m)} \left(1 - \frac{\rho_L^{(m)}}{\rho_L^{(m),*}} \right)} \right]^{1/2}, \quad (4.248)$$

geschrieben werden kann. Der Unterschied zum vorigen Abschnitt ist, daß weder spezielle Annahmen über die $f_L^{(m),*}$ nötig waren (abgesehen von der Normierung $\sum_m f_L^{(m),*} = 1$), noch über das Kompositionsgesetz der Drücke. Daher gilt diese Formel, ganz gleich, ob die Drücke der Einzelmaterialien in der Zelle gleich sind, oder irgendein Kompositionsgesetz benutzt wird. Allerdings werden noch Annahmen gebraucht, um die Dichten $\rho_L^{(m),*}$ zu berechnen. In einer Stoßwelle, die sich mit der echten, materialabhängigen Ausbreitungsgeschwindigkeit $\lambda_L^{(m)}$ für Material m bewegt, wäre

$$\rho_L^{(m),*} = \rho_L^{(m)} \left(\frac{u_L - \lambda_L^{(m)}}{u^* - \lambda_L^{(m)}} \right). \quad (4.249)$$

In die obere Gleichung für A_L eingesetzt, ergibt dies

$$\frac{1}{u_L - \lambda_L} = \sum_m \frac{f_L^{(m)}}{u_L - \lambda_L^{(m)}}, \quad (4.250)$$

wobei auch wieder die p - u -Relation Gl.(4.246) benutzt wurde. Die letzte Relation, Gl.(4.250), ist ein inverses Additionsgesetz von Wellengeschwindigkeiten, was nicht robust in numerischen Methoden für sehr unterschiedliche Materialien sein wird. Es sei daran erinnert, daß z. B. für akustische Wellen

$u_L - \lambda_L^{(m)} = c_L^{(m)}$ gilt, und es kommen sehr kleine Schallgeschwindigkeiten vor.

Bisher galt die Annahme, daß sämtliche Volumenfraktionen $f_{L,R}^{(m)}$, welche zur Definition des Riemann-Problems benutzt werden, die mittleren in den angrenzenden Zellen sind. Dies entspricht einer Methode erster Ordnung im Sinne von Godunov. Diese Annahme muß man fallenlassen, um hier weiterzukommen. Die folgende Definition führt anstelle der $f_{L,R}^{(m)}$ neue abstrakte Gewichte

$$f_L^{(m)} =: \frac{(u_L - \lambda_L^{(m)})W_L^{(m)}}{\sum_l (u_L - \lambda_L^{(l)})W_L^{(l)}}, \quad (4.251)$$

mit der Normierung $\sum_l W_L^{(l)} = 1$ ein, wobei $f_{L,R}^{(m)} \neq f_{i\pm 1/2}^{(m)}$ sind, d. h. es werden nicht die Mittelwerte in den angrenzenden Zellen verwendet. Danach nimmt Gl.(4.250) die Form

$$u_L - \lambda_L = \sum_m (u_L - \lambda_L^{(m)})W_L^{(m)}, \quad (4.252)$$

an. Somit ist die effektive Ausbreitungsgeschwindigkeit λ_L der „linken“ Welle in der Materialmischung eine lineare Summe der Ausbreitungsgeschwindigkeiten in den Einzelmaterialien, gewichtet mit $W_L^{(m)}$. Dies ist ein robusteres Additionsgesetz in einem numerischen Algorithmus. Es ist auch notwendig, eine Relation für $p^{(m),*}$ abzuleiten, der Ausgangspunkt ist die Definition von $K_L^{(m)}$, Gl.(4.177), und man erhält unter Benutzung der Sprungbedingung für den Gesamtimpuls, sowie der Annahme Gl.(4.249)

$$\frac{(p^{(m),*} - p_L^{(m)})}{(p^* - p_L)} = \left(\frac{K_L^{(m)} \rho_L}{A_L^2} \right) \left(\frac{u_L - \lambda_L}{u_L - \lambda_L^{(m)}} \right), \quad (4.253)$$

und wenn die Definition von A_L , Gl.(4.20) benutzt wird, ergibt sich

$$p^{(m),*} - p_L^{(m)} = (p^* - p_L) \left(\frac{K_L^{(m)}}{(u_L - \lambda_L^{(m)})A_L} \right). \quad (4.254)$$

Im Spezialfall des Druckgleichgewichts $p_L^{(m)} = p_L$, $p_L^{(m),*} = p^*$ (genauer, es genügt lediglich Gleichheit der Druckdifferenzen) hat man

$$\frac{K_L^{(m)}}{(u_L - \lambda_L^{(m)})A_L} = 1. \quad (4.255)$$

Dies definiert die Ausbreitungsgeschwindigkeit für Material m bei Druckgleichgewicht, $\lambda_L^{(m)}$ für gegebene $K_L^{(m)}$ und A_L . Andererseits ist auch der Spezialfall der Colour-Advektion in Gl.(4.254) enthalten, wenn man $\lambda_L^{(m)} = \lambda_L$ für alle m verlangt, dann reduziert sich Gl.(4.254) auf Gl.(4.181).

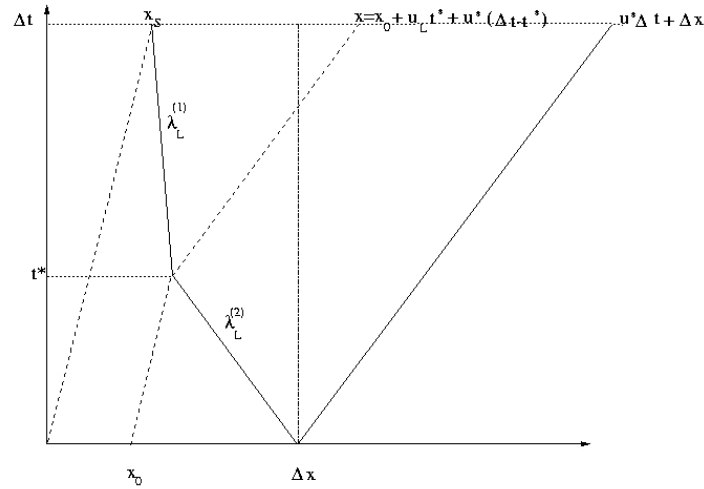


Abbildung 4.23: Wellenpropagation mit unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten, dargestellt für zwei Materialien. Schnitt bei konstantem y , zweite Raumkoordinate y zeigt in die Zeichenebene. Materialgrenze liegt anfangs bei x_0 .

Während des Iterationsverfahrens müssen die Gewichte $W_{L,R}^{(m)}$ in jeder Iterationsstufe berechnet werden. Dazu betrachtet man Abb. 4.23, und nur eine Situation mit 2 Materialien. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei die Ordnung der zwei betrachteten Materialien derart, daß Material 2 näher an der Zellgrenze liegt. Dann gibt es einen Zeitpunkt wo die Materialgrenze die Wellenfront erreicht. Dies ist ähnlich zur Situation im vorangegangenen Abschnitt, mit dem einzigen Unterschied, daß die Ausbreitungsgeschwindigkeit jetzt $\lambda_L^{(2)}$ ist. Ohne hier alle entsprechenden Rechnungen zu wiederholen, wird das Volumen von Material 2 in der „linken“ Welle vor dem Lagrange-Schritt erhalten

$$V_L^{(2)} = V^{(2)}(m_1, m_2, \alpha + m_1((u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t - \Delta x), (u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t, \Delta y), \quad (4.256)$$

wobei die Linienparameter m_1 , m_2 und α die von Material 2 sind. Dem entspricht eine mittlere Laufzeit durch Material 2 von

$$\tau_L^{(2)} = \frac{V_L^{(2)}}{(u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta y}, \quad (4.257)$$

und nun definiert man den Gewichtungsfaktor als

$$W_L^{(2)} := \frac{\tau_L^{(2)}}{\Delta t} = \frac{V_L^{(2)}}{(u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t \Delta y}, \quad (4.258)$$

Diese Definition macht Sinn, denn wenn beispielsweise nur Material 2 in der Einflußregion vorhanden ist, wird $V_L^{(2)} = (u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t\Delta y$ und dadurch $W_L^{(2)} = 1$, und ansonsten ist immer $W_L^{(2)} \leq 1$. Die transformierten Linienparameter am Ende des Lagrange-Schritts ergeben sich als

$$\tilde{m}_1 := \left(\frac{u_L - \lambda_L^{(2)}}{u^* - \lambda_L^{(2)}} \right) m_1, \quad \tilde{m}_2 := m_2, \quad (4.259)$$

$$\tilde{\alpha} := \alpha - m_1\Delta x + \tilde{m}_1(\Delta x + u^*\Delta t), \quad (4.260)$$

sodaß das Volumen von Material 2 nach dem Lagrange-Schritt

$$\begin{aligned} \tilde{V}_L^{(2)} &= \left(\frac{u^* - \lambda_L^{(2)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) V^{(2)}(m_1, m_2, \\ &\alpha + m_1((u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t - \Delta x), (u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t, \Delta y), \end{aligned} \quad (4.261)$$

lautet. Hierbei wurde wieder das Multiplikationstheorem Gl.(4.157) verwendet. Bemerkenswerterweise tritt der korrekte Deformationsfaktor auf, und es gilt die Massenerhaltung unter Verwendung der richtigen Dichte im Zwischenzustand, $\rho_L^{(2),*}$ nach Gl(4.249). Material 1 hat wegen der Normierung den Gewichtungsfaktor $W_L^{(1)} := 1 - W_L^{(2)}$. Somit ist sein Volumen in der Einflußregion vor dem Lagrange-Schritt

$$\begin{aligned} V_L^{(1)} &= W_L^{(1)}(u_L - \lambda_L^{(1)})\Delta t\Delta y = \\ &= \left(\frac{u_L - \lambda_L^{(1)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) (1 - W_L^{(2)})(u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t\Delta y = \\ &= \left(\frac{u_L - \lambda_L^{(1)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) [(u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t\Delta y - V_L^{(2)}]. \end{aligned} \quad (4.262)$$

Der Ausdruck in den eckigen Klammern ist das Volumen des Komplements des Materials 2 bezüglich einer fiktiven Einflußregion $(\Delta x - (u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t; \Delta x) \times (0, \Delta y)$, also des Materials 1 in dieser Region (fiktiv, weil die wirkliche Einflußregion die Ausdehnung $(u_L - \lambda_L)\Delta t = \sum_m W_L^{(m)}(u_L - \lambda_L^{(m)})\Delta t$ in x -Richtung hat). Man kann dann auch schreiben

$$\begin{aligned} V_L^{(1)} &= \left(\frac{u_L - \lambda_L^{(1)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) V^{(1)}(m_1, m_2, \alpha + \\ &+ m_1((u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t - \Delta x), \Delta y), \end{aligned} \quad (4.263)$$

wobei die Linienparameter die von Material 1 sind. Eine geometrische Herleitung der obigen Beziehung wäre sehr kompliziert, denn die Wellenfront

ist nach Δt wegen der beiden unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten im zweiten durchlaufenden Material (der Sorte 1) nicht mehr parallel zur y -Achse, falls Material 2 in y -Richtung unterschiedliche Dicke besitzt. Aufgrund von Gl.(4.249) und der Massenerhaltung hat nach dem Lagrange-Schritt Material 1 das Volumen

$$\begin{aligned} \tilde{V}_L^{(1)} = & \left(\frac{u^* - \lambda_L^{(1)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) V^{(1)}(m_1, m_2, \alpha + \\ & + m_1((u_L - \lambda_L^{(2)})\Delta t - \Delta x), \Delta y). \end{aligned} \quad (4.264)$$

Es handelt sich trotzdem noch um ein effektives Ein-Material-Problem, wobei die mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit der „linken“ Wellenfront $\lambda_L = \sum_m W_L^{(m)} \lambda_L^{(m)}$ beträgt, denn es wird nicht an jeder Materialgrenze ein gesondertes Riemann-Problem gelöst. Jedoch ist eine Refraktion (Beugung) der Wellenfronten Bestandteil der Methode, siehe Abb. 4.23., daher der Titel dieses Abschnitts. Die Änderung des Volumens während des Lagrange-Schritts ist nun allgemein in der Form

$$\Delta V_L^{(m)} = (u^* - u_L) W_L^{(m)} \Delta t \Delta y, \quad (4.265)$$

darstellbar. Damit sind die Auswirkungen auf die Advektionsgleichungen für die Volumenfraktionen während des Lagrange-Schritts geklärt. Die Energiegleichungen enthalten einen Beitrag

$$\Delta E_L^{(m)} = \Delta V_L^{(m)} \left[\rho_L^{(m)} (u_L - \lambda_L^{(m)}) \frac{u^* + u_L}{2} - \frac{p^{(m),*} + p_L^{(m)}}{2} \right], \quad (4.266)$$

dessen Herleitung analog wie im vorigen Abschnitt erfolgt, und wegen der separaten Massenerhaltung für jedes Material gibt es keine Beiträge des Lagrange-Schritts in den diskreten Massenbilanzen.

Damit die Effekte in der Impulsbilanz verstanden werden, bleibt noch nachzutragen, wie die Addition von Drücken erfolgen soll. Dazu multipliziert man Gl.(4.254) mit $W_L^{(m)}$, summiert über Materialien, und kann auf beiden Seiten die Differenz $p^* - p_L$ kürzen

$$1 = \sum_m \frac{W_L^{(m)} K_L^{(m)}}{(u_L - \lambda_L^{(m)}) A_L}, \quad (4.267)$$

unter der Annahme $p_L := \sum_m W_L^{(m)} p_L^{(m)}$ (analog für p^*). Daher ist A_L nun durch die lineare Summe

$$A_L = \sum_m \frac{W_L^{(m)} K_L^{(m)}}{(u_L - \lambda_L^{(m)})}, \quad (4.268)$$

gegeben. Dem Additionsgesetz für die Drücke liegt die Vorstellung zugrunde, daß in Material m eine Druckdifferenz $p^{(m),*} - p_L^{(m)}$ an den Grenzflächen des Teilvolumens $V_L^{(m)}$ nur während des Bruchteils $W_L^{(m)}\Delta t$ des Zeitschritts einwirken kann. Beispielsweise hat das erste von der „linken“ Welle durchlaufene Material (Sorte 2) nach $W_L^{(2)}\Delta t$ an beiden Grenzflächen den selben Druck $p_L^{(2),*}$ erreicht. Die Besonderheit des Iterationsverfahrens im HLLC-Löser mit dieser Methode ist die Tatsache, daß in jedem Iterationsschritt auch

$$p_S = \sum_m W_S^{(m)} p_S^{(m)}, \quad S = L, R \quad (4.269)$$

neu zu berechnen ist. Die diskrete Impulsbilanz enthält lediglich den Gesamtdruck und Gesamtimpuls, sodaß die entsprechende Gleichung aus dem vorigen Abschnitt übernommen werden kann.

Einige Änderungen ergeben sich noch dadurch, daß die Transportmassen bzw. -Volumen etwas komplizierter werden. Es wird wieder angenommen, daß $u^* > 0$ ist, und Material 2 näher an der Zellgrenze x_i liegt, genauer gesagt, Material 2 liegt rechts der Materialgrenze. Es sei $\lambda_L^{(2)} > 0$, dann wird das gesamte Volumen $\tilde{V}_L^{(2)}$ von Material 2, welches sich nach dem Lagrange-Schritt im Zwischenzustand \mathbf{U}_L^* befindet, advektiert. Außerdem gibt es einen ungestörten Anteil, und dieser wird wie im vorigen Abschnitt berechnet, sodaß Gl.(4.215) gilt

$$V^{(2),adv} = V^{(2)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L\Delta t - \Delta x), u_L\Delta t, \Delta y) + \Delta V_L^{(2)}. \quad (4.270)$$

Das gesamte Transportvolumen hat die Größe $u^*\Delta t\Delta y$. Also kann man die Differenz bilden, um das Transportvolumen des Materials 1 zu erhalten. Dabei wird Gl.(4.265) und die Normierung der $W_L^{(m)}$ verwendet, dies ergibt

$$\begin{aligned} V^{(1),adv} &= u^*\Delta t\Delta y - \\ &- V^{(2)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L\Delta t - \Delta x), u_L\Delta t, \Delta y) - \\ &- (1 - W_L^{(1)})(u^* - u_L)\Delta t\Delta y. \end{aligned} \quad (4.271)$$

Die letzte Gleichung ist äquivalent zu

$$\begin{aligned} V^{(1),adv} &= u_L\Delta t\Delta y - \\ &- V^{(2)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L\Delta t - \Delta x), u_L\Delta t, \Delta y) + \\ &+ W_L^{(1)}(u^* - u_L)\Delta t\Delta y. \end{aligned} \quad (4.272)$$

Die Summe der ersten beiden Terme auf der rechten Seite ergibt das Volumen des ersten Materials in der Region $(\Delta x - u_L\Delta t, \Delta x) \times (0, \Delta y)$ vor dem

Lagrange-Schritt, und der dritte Term ist die Volumenänderung von Material 1 in der Region der „linken“ Welle. Damit gilt Gl.(4.215) nun auch für Material 1

$$V^{(1),adv} = V^{(1)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(u_L \Delta t - \Delta x), u_L \Delta t, \Delta y) + \Delta V_L^{(1)}, \quad (4.273)$$

der einzige Unterschied zum vorigen Abschnitt ist die Berechnung der $\Delta V_L^{(m)}$ mit Hilfe der Wellenausbreitungsgeschwindigkeit $\lambda_L^{(m)}$ desjenigen Materials, welches „zuerst“ transportiert wird. Das Programm muß also eine Ordnung der Materialien in Transportrichtung unterscheiden (transport order). Ganz analog wird die „rechten“ Welle behandelt. Sei $u^* < 0$ und $\lambda_R^{(2)} < 0$, d. h. Überschall für das erste Material in Richtung des Transports, dann gilt wieder Gl.(4.218) für beide Materialien. Der Fall mit linkseitigem Donor $u^* > 0$ und $\lambda_L^{(2)} < 0$ erlaubt es, das Transportvolumen des zuerst transportierten Materials ($m = 2$) mit Hilfe der Linienparameter nach dem Lagrange-Schritt, \tilde{m}_1 , \tilde{m}_2 und $\tilde{\alpha}$ der Donor-Zelle zu berechnen

$$V^{(2),adv} = V^{(2)}(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \tilde{\alpha} + \tilde{m}_1(u^* \Delta t - \Delta x), u^* \Delta t, \Delta y). \quad (4.274)$$

Wieder ergibt sich unter Ausnutzung des Multiplikationstheorems Gl.(4.157)

$$V^{(2),adv} = \left(\frac{u^* - \lambda_L^{(2)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) \times \\ \times V^{(2)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(\hat{u} \Delta t - \Delta x), \hat{u} \Delta t, \Delta y), \quad (4.275)$$

mit dem Unterschied zum vorangegangenen Abschnitt 4.4.2, daß \hat{u} jetzt mit Hilfe von $\lambda_L^{(2)}$ definiert ist

$$\hat{u} := \left(\frac{u_L - \lambda_L^{(2)}}{u^* - \lambda_L^{(2)}} \right) u^*. \quad (4.276)$$

Die Transportvolumen beider Materialien ergänzen sich zum gesamten Transportvolumen $u^* \Delta t \Delta y$, daher ist $V^{(1),adv}$ die folgende Differenz

$$V^{(1),adv} = u^* \Delta t \Delta y - V^{(2),adv} = \left(\frac{u^* - \lambda_L^{(2)}}{u_L - \lambda_L^{(2)}} \right) \times \\ \times V^{(1)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(\hat{u} \Delta t - \Delta x), \hat{u} \Delta t, \Delta y), \quad (4.277)$$

wobei diesmal die Linienparameter von Material 1 auftreten (welche zwar die selbe Materialgrenze, jedoch mit umgekehrter Normalenrichtung wie in Material 2, beschreiben). Man beachte, daß der Vorfaktor wieder $\lambda_L^{(2)}$ enthält.

Der noch fehlende Fall ist $u^* < 0$ und $\lambda_R^{(2)} > 0$, das Ergebnis lautet (ohne Beweis)

$$V^{(m),adv} = - \left(\frac{u^* - \lambda_R^{(2)}}{u_R - \lambda_R^{(2)}} \right) V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, -\hat{u}\Delta t, \Delta y), \quad (4.278)$$

wobei die Linienparameter der rechten Zelle angehören und

$$\hat{u} := \left(\frac{u_R - \lambda_R^{(2)}}{u^* - \lambda_R^{(2)}} \right) u^*, \quad (4.279)$$

bedeutet.

Die Transport-Massen und -Energien werden wie im Abschnitt 4.4.2 berechnet. Es ergeben sich einige Modifikationen, wegen des Auftretens der Ausbreitungsgeschwindigkeit des ersten Materials in Transportrichtung, jedoch wird hier darauf verzichtet, diese Terme im Einzelnen anzugeben.

Es wurde deutlich, daß eine Godunov-Methode sehr kompliziert ist, da geometrische Terme wie $W_{L,R}^{(m)}$ mehrmals berechnet werden müssen. Außerdem werden in Verbindung mit der Lösung der Gleichung der Stoßadiabate im Riemann-Löser sehr viele Aufrufe der Routine für die Zustandsgleichung erzeugt. Weiterhin können nur Zustandsgleichungen benutzt werden, die hinreichend glatt approximieren, mit überall konvexer Hugoniot-Kurve.

4.4.4 Multi-Material-Erweiterungen in SOVA-Z

Primitivere Methoden wie SOVA sind schnell und vielseitig, wegen der Einschränkungen, die Godunov-Methoden der Zustandsgleichung auferlegen. Der Preis für solche Vereinfachungen ist das Auftreten einer numerischen Viskosität, welche in die Energiebilanz eingeht, und gewisse Oszillationen an Stoßfronten. Man kann aber dafür in der gleichen Zeit Probleme in viel höherer räumlicher Auflösung rechnen (ca. Faktor 4 in jeder Richtung, bei zwei Dimensionen).

Die entsprechenden Multi-Material-Erweiterungen werden gleich für Zylinderkoordinaten formuliert, da nur diese in den Anwendungsbeispielen auftreten. Die hier erhaltenen Formeln für Zylindergeometrie sind nicht in der Literatur zu finden. Die radiale und die z -Richtung werden getrennt betrachtet, zuerst die r -Richtung. Bei der Behandlung der Volume-of-Fluid-Methode wurde Gl.(4.158) für das Volumen der Flüssigkeit in Zylinderkoordinaten gefunden, in der Funktion $V(\dots)$ tritt ein sechstes Argument auf, die radiale Koordinate des linken Randes der rechteckigen Region in der r - z -Ebene. Man

kann eine Schwerpunktskoordinate $\hat{r}^{(m)}$ bezüglich des Volumens von Material m durch folgende Gleichung definieren

$$\begin{aligned} V^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, \Delta r, \Delta z, r_i) = \\ =: \hat{r}^{(m)} A^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, \Delta r, \Delta z) = f^{(m)} r_{i+1/2} \Delta r \Delta z, \end{aligned} \quad (4.280)$$

hierbei bedeutet die Funktion $A(\dots)$ den Ausdruck auf der rechten Seite von Gl.(4.155), d. h. die Volumenfunktion in kartesischen Koordinaten. Die Funktion $A(\dots)$ ist die „Oberfläche der Flüssigkeit“ in der r - z -Ebene. Die letzte Gleichung ist als eine Definition der Größe $\hat{r}^{(m)}$ zu verstehen. Für die Betrachtung des Lagrange-Schritts müssen wie vorher die Transformationsformeln für die Linienparameter und für $\hat{r}^{(m)}$ gefunden werden. Nach (Gueyffier u. a. , 1999) ist während des Lagrange-Schritts das Geschwindigkeitsfeld eine lineare Funktion der radialen Koordinate

$$u^*(r) = u_i^* + \frac{r - r_i}{\Delta r} (u_{i+1}^* - u_i^*), \quad (4.281)$$

wobei r die radiale Koordinate im mitbewegten System ist, und u_i^* bzw. u_{i+1}^* bedeuten die zeitlichen Mittelwerte an den Zellengrenzen (vgl. Abschnitt 4.3.3). Daraus ergeben sich Transformationsformeln für die Linienparameter nach dem Lagrange-Schritt (Gueyffier u. a. , 1999) in Zelle $(i + 1/2)$

$$\tilde{m}_1 = m_1 \left(\frac{\Delta r}{\Delta r + (u_{i+1}^* - u_i^*) \Delta t} \right), \quad \tilde{m}_2 = m_2, \quad (4.282)$$

$$\tilde{\alpha} = \alpha + \tilde{m}_1 u_i^* \Delta t. \quad (4.283)$$

Mit Hilfe der Interpolation des Geschwindigkeitsfeldes, Gl.(4.281), lautet die Gleichung der Position des Volumen-Schwerpunkts $\hat{r}^{(m)}$ nach dem Lagrange-Schritt

$$\hat{r}^{(m)}(\Delta t) = \hat{r}^{(m)} + u_i^* \Delta t + \frac{\hat{r}^{(m)} - r_i}{\Delta r} (u_{i+1}^* - u_i^*) \Delta t. \quad (4.284)$$

Eine etwas andere Form der letzten Gleichung ist

$$\hat{r}^{(m)}(\Delta t) = \hat{r}^{(m)} \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*) \Delta t}{\Delta r} \right) - \frac{(r_i u_{i+1}^* - r_{i+1} u_i^*) \Delta t}{\Delta r}. \quad (4.285)$$

Aufgrund des Multiplikationstheorems Gl.(4.157) und der expliziten Form der Linienparameter nach dem Lagrange-Schritt ändert sich der Oberflächenterm der Sorte m nur um einen multiplikativen Faktor

$$\begin{aligned} A^{(m)}(\tilde{m}_1, m_2, \tilde{\alpha} - \tilde{m}_1 u_i^* \Delta t, \Delta \tilde{r}, \Delta z) = \\ = \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*) \Delta t}{\Delta r} \right) A^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, \Delta r, \Delta z). \end{aligned} \quad (4.286)$$

Nach etwas längerer Rechnung ist das Volumen nach dem Lagrange-Schritt

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{i+1/2}^{(m)} = & \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*)\Delta t}{\Delta r}\right) \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* + u_i^*)\Delta t}{2r_{i+1/2}}\right) V_{i+1/2}^{(m)} - \\ & - \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*)\Delta t}{\Delta r}\right) \frac{(r_i u_{i+1}^* - r_{i+1} u_i^*)\Delta t}{\Delta r} \times \\ & \times \left[A_{i+1/2}^{(m)} - \frac{1}{r_{i+1/2}} V_{i+1/2}^{(m)} \right], \quad (4.287) \end{aligned}$$

wobei jetzt noch ein Index $(i + 1/2)$ zur Kennzeichnung der Zelle eingeführt wurde. Der Vorfaktor des ersten Terms beschreibt eine homogene Deformation

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*)\Delta t}{\Delta r}\right) \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* + u_i^*)\Delta t}{2r_{i+1/2}}\right) = \\ & = \frac{(r_{i+1} + u_{i+1}^* \Delta t)^2 - (r_i + u_i^* \Delta t)^2}{(r_{i+1}^2 - r_i^2)} = \frac{(r_{i+1}^{n+1/2} u_{i+1}^* - r_i^{n+1/2} u_i^*)}{r_{i+1/2} \Delta r} \Delta t \quad (4.288) \end{aligned}$$

und nur der Term in den eckigen Klammern enthält den Effekt der inhomogenen räumlichen Verteilung von Material, wobei $r_i^{n+1/2}$ die Abkürzung

$$r_i^{n+1/2} := r_i + \frac{1}{2} u_i^* \Delta t, \quad (4.289)$$

ist. Um die Eulersche Finite-Volumen-Form der Advektionsgleichung zu konstruieren, muß man wieder Transportvolumen einführen, wonach gilt

$$\begin{aligned} V_{i+1/2}^{(m),n+1} = & V_{i+1/2}^{(m),n} + \\ & + \frac{(r_{i+1}^{n+1/2} u_{i+1}^* - r_i^{n+1/2} u_i^*)}{r_{i+1/2} \Delta r} \Delta t V_{i+1/2}^{(m),n} - \\ & - \left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*)\Delta t}{\Delta r}\right) \frac{(r_i u_{i+1}^* - r_{i+1} u_i^*)\Delta t}{\Delta r} \times \\ & \times \left[A_{i+1/2}^{(m),n} - \frac{1}{r_{i+1/2}} V_{i+1/2}^{(m),n} \right] + V_i^{(m),adv} - V_{i+1}^{(m),adv}, \quad (4.290) \end{aligned}$$

und $V_i^{(m),adv}$ das Transportvolumen bezeichnet, welches am linken Rand einfließt bzw. $V_{i+1}^{(m),adv}$ dasjenige, welches am rechten Rand herausfließt, und Indizes n bzw. $n + 1$ bezeichnen aufeinanderfolgende Zeiten. Die folgenden Definitionen der Fluktuationen oder Pseudo-Flüsse (siehe die beiden vorangegangenen Abschnitte) haben den Zweck, Gl.(4.290) wieder in kompakter

Schreibweise formulieren zu können

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i^{(+),(m)} &:= -\frac{V_i^{(m),adv}}{r_{i+1/2}\Delta z\Delta t} + \frac{r_i^{n+1/2}u_i^*}{r_{i+1/2}}f_{i+1/2}^{(m)} - \\ &-\frac{r_{i+1}u_i^*}{r_{i+1/2}}\left[\frac{A_{i+1/2}^{(m)}}{\Delta r\Delta z} - f_{i+1/2}^{(m)}\right]\left(1 + \frac{(u_{i+1}^* - u_i^*)\Delta t}{\Delta r}\right), \end{aligned} \quad (4.291)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i^{(-),(m)} &:= \frac{V_i^{(m),adv}}{r_{i-1/2}\Delta z\Delta t} - \frac{r_i^{n+1/2}u_i^*}{r_{i-1/2}}f_{i-1/2}^{(m)} + \\ &+\frac{r_{i-1}u_i^*}{r_{i-1/2}}\left[\frac{A_{i-1/2}^{(m)}}{\Delta r\Delta z} - f_{i-1/2}^{(m)}\right]\left(1 + \frac{(u_i^* - u_{i-1}^*)\Delta t}{\Delta r}\right), \end{aligned} \quad (4.292)$$

sodaß sich auch hier Gl.(4.219) ergibt:

$$f_{i+1/2}^{(m),n+1} = f_{i+1/2}^{(m),n} - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left[\mathcal{A}_i^{(+),(m)} + \mathcal{A}_{i+1}^{(-),(m)} \right]. \quad (4.293)$$

Die Konstruktion der $\mathcal{A}_i^{(\pm),(m)}$ ist wieder derart, daß sie für triviale Kanten i verschwinden (wo entweder $f_{i\pm 1/2}^{(m)} = 1$ oder $f_{i\pm 1/2}^{(m)} = 0$ gilt). Damit ist ein sehr rationeller Algorithmus möglich; diese Formulierung wurde hier zum ersten Mal entwickelt. In referierten Zeitschriften ist auch nichts darüber zu finden, wie man z. B. in CTH (McGlaun, Thompson, Elrick, 1990) die Advektionsgleichung in Zylinderkoordinaten löst. Es fehlen noch explizite Formeln für den Beitrag des Remap-Schritts, die Transportvolumen. Anders als in Godunov-Methoden, wo man Überschall und Unterschall unterscheiden mußte, gibt es hier nur zwei Fälle in Abhängigkeit des Vorzeichens von u_i^* . Für positive u_i^* gilt

$$V_i^{(m),adv} = V_{i-1/2}^{(m)}(\tilde{m}_1, m_2, \alpha - m_1\Delta r + \tilde{m}_1u_i^*\Delta t, u_i^*\Delta t, \Delta z, r_i), \quad (4.294)$$

und der Index $(i - 1/2)$ der Funktion auf der rechten Seite bedeutet, alle Linienparameter sind die in der Donor-Zelle $(i - 1/2)$. Der Linienparameter $\tilde{\alpha}$ gilt für einen Koordinatenursprung bei r_{i-1} , jedoch die linke r -Koordinate der Überlappungsregion ist r_i (die rechte ist $r_i + u_i^*\Delta t$). Bei Verschiebung in r -Richtung ändert sich $\tilde{\alpha}$

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} &\rightarrow \tilde{\alpha} - \tilde{m}_1(r_i - r_{i-1}) = \\ &= \alpha + \tilde{m}_1\Delta r \left[1 + \frac{(u_i^* - u_{i-1}^*)\Delta t}{\Delta r} \right] + \tilde{m}_1u_i^*\Delta t = \\ &= \alpha - m_1\Delta r + \tilde{m}_1u_i^*\Delta t, \end{aligned} \quad (4.295)$$

dies liefert die Erklärung für das dritte Argument in der Funktion $V_{i-1/2}^{(m)}$. Der Parameter \tilde{m}_1 ist nach Gl.(4.282), jedoch mit um Eins kleineren Indizes i , zu berechnen. Der umgekehrte Fall $u_i^* < 0$ ergibt (ohne Beweis)

$$V_i^{(m),adv} = -V_{i+1/2}^{(m)}(\tilde{m}_1, m_2, \alpha, |u_i^*|\Delta t, \Delta z, r_i + u_i^*\Delta t), \quad (4.296)$$

wobei jetzt Gl.(4.282) benutzt wird, für die Linienparameter der Donor-Zelle ($i + 1/2$). Die Transportmassen werden nicht mit Hilfe der Transportvolumen gebildet, weil dies erfordern würde, die lokale Dichte im Teilvolumen der Advektionsregion nach dem Lagrange-Schritt zu berechnen. Alternativ wird die Geschwindigkeit \hat{u}_i der Stromlinie betrachtet, welche zum Ende des Zeitschritts die Koordinate r_i erreicht, diese ist in Gl.(4.98) gegeben. Wenn man mit Hilfe dieser Geschwindigkeit von r_i aus um Δt in der Zeit zurückgeht, ergibt sich die Einflußregion für den Materialtransport (wie in Godunov-Methoden, dort war lediglich die explizite Form von \hat{u}_i etwas anders). Am Anfang des Zeitschritts nimmt man konstante Dichte in der Einflußregion an. Dann ergibt sich bei $u_i^* > 0$ (u_i^* hat das Vorzeichen von \hat{u}_i)

$$M_i^{(m),adv} = \rho_{i-1/2}^{(m)} V_{i-1/2}^{(m)}(m_1, m_2, \alpha + m_1(\hat{u}_i\Delta t - \Delta r), \hat{u}_i\Delta t, \Delta z, r_i - \hat{u}_i\Delta t), \quad (4.297)$$

hingegen bei $u_i^* < 0$ ist

$$M_i^{(m),adv} = -\rho_{i+1/2}^{(m)} V_{i+1/2}^{(m)}(m_1, m_2, \alpha, |\hat{u}_i|\Delta t, \Delta z, r_i). \quad (4.298)$$

In beiden Fällen gehören die Dichten und Linienparameter zur Donor-Zelle, d. h. zu $(i - 1/2)$ für positive, und zu $(i + 1/2)$ für negative Werte von u_i^* . Die Konstruktion der Transportmassen erfüllt ein wichtiges Kriterium: es kann höchstens soviel Masse des Materials m aus einer Zelle herausfließen, wie anfangs vorhanden war. In Ein-Material-Methoden ist diese Bedingung automatisch erfüllt, falls der Zeitschritt mit Hilfe einer CFL-Bedingung begrenzt ist (z. B. $\hat{u}\Delta t < \Delta x$). Hingegen bedeutet diese Bedingung in Multi-Material-Methoden keinen grundsätzlichen Schutz vor dem Auftreten negativer Massen. Nur die geometrische Konstruktion der Transportmassen, wie hier beschrieben, sichert die Stabilität. Die Flußfunktion für die Masse des Materials m wird nun (in Übereinstimmung mit dem Ein-Material-Fall) wie folgt gebildet (Masse in der Zelle pro Länge in z -Richtung)

$$\Phi_i^{(m)} = \frac{M_i^{(m),adv}}{\Delta z}, \quad (4.299)$$

und die konservative Eulersche Form der Massenbilanz von Sorte m lautet

$$(f^{(m)}\rho^{(m)})_{i+1/2}^{n+1} = (f^{(m)}\rho^{(m)})_{i+1/2}^n - \frac{1}{r_{i+1/2}\Delta r} (\Phi_{i+1}^{(m)} - \Phi_i^{(m)}). \quad (4.300)$$

Es gibt im SOVA-Algorithmus noch andere Verwendungen für die Größe $\Phi_i^{(m)}$ im Remap-Schritt der Impuls-Bilanz. Jedoch tritt dort nur die über alle Materialien summierte Massen-Flußfunktion auf, sodaß keine Änderungen notwendig sind.

Es schließt sich eine Betrachtung der diskretisierten Energie-Gleichungen an. Bei der Einführung von SOVA-Z im Abschnitt 4.3.4, wurde klar, daß die Konservativität des Verfahrens während des Lagrange-Schritts erfordert, Terme wie $r_i^{(n+1/2)}$ in nullter Ordnung in Δt zu approximieren. Die bisherige Behandlung von Materialgrenzen entspricht außerdem der Colour-Advektion, da das Geschwindigkeitsfeld während des Lagrange-Schritts linear interpoliert wurde, um die Volumen der Materialien zu berechnen. Daher gilt

$$p_{i+1/2}^{(n+1/2)} = \sum_m f_{i+1/2}^{(m)} p_{i+1/2}^{(m),(n+1/2)}, \quad (4.301)$$

wobei die Verallgemeinerung von Gl.(4.86)

$$p_{i+1/2}^{(m),n+1/2} = (p+q)_{i+1/2}^{(m),n} - \rho_{i+1/2}^{(m),n} (c_{i+1/2}^{(m),n})^2 \left(\frac{r_{i+1} \tilde{u}_{i+1} - r_i \tilde{u}_i}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} \right) \frac{\Delta t}{2}, \quad (4.302)$$

lautet (die quadratische numerische Viskosität $q_{i+1/2}^{(m)}$ ist für alle Materialien gleich). Daher ändert sich nichts an der Form der Koeffizienten des tridiagonalen Gleichungssystems, Gl.(4.53) zur Bestimmung der radialen Geschwindigkeiten nach dem Lagrange-Schritt, \tilde{u}_i . Die Änderung der inneren Energie der einzelnen Materialien im Lagrange-Schritt muß gegenüber Gl.(4.91) etwas verallgemeinert werden

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}^{(m)} \rho_{i+1/2}^{(m)} \tilde{\epsilon}_{i+1/2}^{(m)} &= f_{i+1/2}^{(m)} \rho_{i+1/2}^{(m)} \epsilon_{i+1/2}^{(m)} - \\ &- f_{i+1/2}^{(m)} p_{i+1/2}^{(m),n+1/2} \left(\frac{r_{i+1} u_{i+1}^* - r_i u_i^*}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} \right) \Delta t, \end{aligned} \quad (4.303)$$

hierbei wurde die Massenerhaltung für einzelne Materialien benutzt. Die Summation über Materialien ergibt Gl.(4.91), und dadurch ist die Gesamtenergie während des Lagrange-Schritts erhalten, im selben Sinne wie in Abschnitt 4.3.4 erläutert wurde, d. h. es ergibt sich wieder Gl.(4.96). Die inneren Energien der einzelnen Materialien werden während des Remap-Schritts umverteilt, und die Eulersche Form der diskreten Energie-Gleichungen lautet

$$\begin{aligned} (f^{(m)} \rho^{(m)} \epsilon^{(m)})_{i+1/2}^{n+1} &= (f^{(m)} \rho^{(m)} \epsilon^{(m)})_{i+1/2}^n - \\ &- f_{i+1/2}^{(m)} p_{i+1/2}^{(m),n+1/2} \left(\frac{r_{i+1} u_{i+1}^* - r_i u_i^*}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} \right) \Delta t - \\ &- \frac{1}{r_{i+1/2} (r_{i+1} - r_i)} \left(\epsilon_{i+1}^{(m),*} \Phi_{i+1}^{(m)} - \epsilon_i^{(m),*} \Phi_i^{(m)} \right), \end{aligned} \quad (4.304)$$

wobei der Remap-Fluß aus dem mit einer Donor-Approximation $\tilde{\epsilon}_i^{(m),*}$ multiplizierten Massenfluß $\Phi_i^{(m)}$ dieses Materials besteht, d. h.

$$\epsilon_i^{(m),*} := \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\epsilon}_{i-1/2}^{(m)}, \quad (u_i^* > 0) \\ \tilde{\epsilon}_{i+1/2}^{(m)}, \quad (u_i^* \leq 0) \end{array} \right\}. \quad (4.305)$$

Diese Art der Donor-Approximation garantiert, daß nicht mehr an innerer Energie des Materials m aus einer Zelle herausfließen kann, als nach dem Lagrange-Schritt vorhanden war. Das ist sehr wichtig, denn u. U. ist das von Material m eingenommene Teilvolumen nur wenig größer als der Maschinenfehler. Eine andere Approximation etwa höherer Ordnung würde dieses Kriterium verletzen (wenn nur ein Material vorhanden ist, spielen solche Betrachtungen natürlich keine Rolle, soweit der Zeitschritt Δt durch eine CFL-Bedingung begrenzt ist).

4.4.5 Materialordnung

Eine Voraussetzung der PLIC-Materialgrenzen-Rekonstruktion ist, daß sich Materialgrenzen innerhalb einer Zelle nicht schneiden, d.h. die sogenannte Zwiebschalen-Anordnung. Die Überlegungen in diesem Abschnitt sind nicht von der Art der hydrodynamischen Methode abhängig. Bei M Materialien gibt es $M - 1$ Materialgrenzen. Man berechnet aber M Materialgrenzen, welche zunächst so konstruiert werden, als ob es nur das betreffende Material und die Summe der jeweils anderen Materialien gäbe. Jedoch schneiden sich danach möglicherweise einzelne Materialgrenzen innerhalb der betrachteten Zelle.

Hier soll nur ein Algorithmus für 3 Materialien beschrieben werden. Eine Lösung des Problems ist bisher nicht in der Literatur aufgetaucht. Bei drei Materialien können sich Materialgrenzen 1 und 2, 2 und 3 oder auch 3 und 1 schneiden. Jeder dieser Möglichkeiten entspricht ein Flag oder ein Bit, somit gibt es $2^3 = 8$ Fälle insgesamt. Die folgende Tabelle verdeutlicht dies.

| Fall | 3-1 Schnitt | 2-3 Schnitt | 1-2 Schnitt | Klassifikation |
|------|-------------|-------------|-------------|----------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 | kein Paar |
| 1 | 0 | 0 | 1 | ein Paar |
| 2 | 0 | 1 | 0 | ein Paar |
| 3 | 0 | 1 | 1 | zwei Paare |
| 4 | 1 | 0 | 0 | ein Paar |
| 5 | 1 | 0 | 1 | zwei Paare |
| 6 | 1 | 1 | 0 | zwei Paare |
| 7 | 1 | 1 | 1 | drei Paare |

Wenn sich zwei Materialgrenzen schneiden, wird die Situation abgekürzt als

„ein Paar“ beschrieben, usw. Sind zwei Paare vorhanden, z. B. Fall 3: 1 – 2, 2 – 3, so genügt es offenbar, Materialgrenze 2 einfach fortzulassen, denn bei 3 Materialien sind nur zwei Grenzen notwendig. Somit sind alle 3 Fälle mit 2 Paaren trivial (die Fälle 3,5,6).

Bei nur einem Paar (Fälle 1,2,4) gibt es 2 Kandidaten für die Materialgrenze, welche fortgelassen werden kann. Dann muß ein geometrischer Test entscheiden, ob die beiden anderen Materialgrenzen (die nicht fortgelassen werden) derart sind, daß keines der betreffenden Materialien von dem anderen eingeschlossen wird. Dazu testet man alle vier Eckpunkte der Zelle darauf, ob einer existiert, welcher auf der selben Seite von beiden übrigbleibenden Materialgrenzen liegt, dann ist eines der betreffenden Materialien innerhalb der Materialgrenze des anderen (wenigstens teilweise). Tritt dieser Fall ein, so wird der andere Kandidat als fortzulassene Materialgrenze gewählt.

Bei drei Paaren (Fall 7) muß man die Materialgrenzen so drehen, daß sie sich nicht mehr schneiden. Vor einer Drehung werden die Materialien nach kleiner werdender Volumenfraktion geordnet. Es reicht aus, eine Drehung der Normalen in der richtigen Richtung um einen geschätzten Winkel auszuführen. Zuerst versucht man, die Normale des Materials mit dem kleinsten Volumen derart zu drehen, daß seine Grenze nicht mehr die des Materials mit dem größten Volumen schneidet. Jedoch wird dies nur dann durchgeführt, falls der Winkel zwischen den Normalen beider Materialien größer als 90 Grad ist, ansonsten dreht man die Normale des „mittleren“ Materials. Danach wird der Linienparameter α neu bestimmt, und der Algorithmus verzweigt erneut zu der Stelle, wo die 8 Fälle klassifiziert werden. Es ist nicht sehr wahrscheinlich, daß erneut der Fall der „drei Paare“ auftritt, aber manchmal treten mehrere Durchläufe des Algorithmus auf, bis eine zulässige Materialgrenzen-Anordnung gefunden wurde.

Der Fall 0 erlaubt es, irgendeine Materialgrenze fortzulassen. Die anderen zwei müssen jedoch dem Kriterium genügen, daß die beiden jeweils anderen Materialien keine teilweise Überlappung besitzen. Wenn Materialien unterschiedlichen Phasen (fest, flüssig, gasförmig) entsprechen, kann eine Prioritätsliste vorgegeben werden, für welches Material unbedingt die berechnete Grenze beibehalten werden soll. Z. B. ist es unbedenklich, die Materialgrenze eines Gases fortzulassen, wenn die anderen beiden Materialien zu kondensierten Phasen gehören.

Leider ist nicht klar, wie dieser Algorithmus auf wesentlich mehr Materialien erweitert werden kann, denn die Komplexität steigt sprunghaft an: bei M Materialien gibt es $2^{M(M-1)/2}$ mögliche Fälle, bei 10 Materialien also 35184372088832.

Kapitel 5

Ergebnisse numerischer Simulationen

5.1 Energiepartitionen bei Einschlägen

Einschläge mit Hypergeschwindigkeiten waren von entscheidender Bedeutung für die Entstehung der Planeten, sobald diese etwa $1/4$ ihrer heutigen Masse erreichten (Fluchtgeschwindigkeit an der Oberfläche $1/2$ ihres heutigen Wertes). In der Gegenwart des Sonnensystems sind die Relativgeschwindigkeiten der kleinen Körper aufgrund der Entwicklung unter dem Einfluß der Störungen durch die großen Planeten „aufgeheizt“ (Safronov , 1969), daher findet man heute wesentlich höhere Geschwindigkeiten als in der Anfangsphase des Planetensystems, wo diese nur in der Größenordnung der Fluchtgeschwindigkeit des jeweils größten Körpers in seiner Akkretionszone lagen. Es entsteht die Frage, wie sich Energie und Masse beim Einschlag eines Asteroiden oder Planetesimals verteilen. Ein gewisser Teil der Masse und Energie des einschlagenden Körpers kann entweichen, und auch Material der Planeten wird in Form von Auswurfmaterial auf der Oberfläche verteilt, oder die gravitative Einflußsphäre verlassen, siehe z. B. O’Keefe und Ahrens (1975). Dabei wird es Einschlagsgeschwindigkeiten geben, bei denen Erosion dominiert und kein Massenwachstum des Planeten mehr stattfinden kann. Einige extrasolare Planeten befinden sich sehr nahe an ihrem Stern. Es ist einleuchtend, daß irgendwo eine Grenze existiert, bei der Massenakkretion auf diese Weise (durch Einschläge fester Körper) nicht mehr funktioniert, innerhalb solcher Bahnen können sich terrestrische Planeten nicht bilden (ob Jupiter-ähnliche, ist eine andere Frage).

Für die heutigen Planeten, insbesondere die Erde, ist interessant, welche Teile der Energie sich auf die Atmosphäre übertragen können, wieviel

entweicht, und in welche Tiefe die einschlagenden Körper vordringen. Untersuchungen in der Literatur stammen aus der Anfangszeit der Multi-Material-Hydrodynamik (Hagemann und Walsh , 1970), wobei O’Keefe und Ahrens (1975) das Programm dieser Autoren verwendeten. Spätere Veröffentlichungen, z. B. Pierazzo u. a. (1998); Pierazzo und Melosh (1999) stellten keine Energie-Partitionen und nur spärliches Datenmaterial zu den Verteilungen der Zustandsgrößen dar, wobei dies angesichts der moderneren Methoden wie CSQIII (Thompson , 1988) und CTH (McGlaun, Thompson, Elrick , 1990) interessant gewesen wäre.

In diesem Abschnitt wird am Beispiel des Einschlags eines Asteroiden von 10 km Durchmesser dargestellt, wie sich die Energie verteilt. Dazu wurde mit dem SOVA-Algorithmus (vgl. Kap. 4) für eine Anfangsgeschwindigkeit von 20 km/s und unter Bedingungen der Erdgravitation $g = 9.81m/s^2$ gerechnet. Sowohl der Asteroid als auch die Erde wurden mit Hilfe der Tillotson-Zustandsgleichung für Granit mit Parametern nach Melosh (1989) beschrieben, die Atmosphäre als ideales Gas mit Adiabatenexponent $\gamma = 1.4$. Der Druck an der Erdoberfläche beträgt anfangs eine Atmosphäre ($=1.01325 \times 10^5$ Pa). Es wurde ein litostatisches Gleichgewicht erzeugt, und der Druckgradient der Atmosphäre kompensiert ebenfalls die Gravitation. Dazu ist es nicht ausreichend, beispielsweise nur die Gleichungen des hydrostatischen Gleichgewichts in der vertikalen Richtung numerisch zu integrieren. Stattdessen wurde folgende Differenzgleichung gelöst

$$\frac{p_{j+1/2} - p_{j-1/2}}{(\rho\Delta z)_j} = -g, \quad (5.1)$$

wobei g die Gravitationsbeschleunigung an der Planetenoberfläche bedeutet,

$$(\rho\Delta z)_j := \rho_{j+1/2}(z_{j+1/2} - z_j) + \rho_{j-1/2}(z_j - z_{j-1/2}), \quad (5.2)$$

ist die kanten-zentrierte Masse in SOVA. Diese Differenzgleichung entspricht exakt der diskreten Form der Impuls-Bilanz, wenn die vertikale Geschwindigkeit Null bleibt und keine Zeitabhängigkeit der Drücke vorhanden ist. Die innere Energie wird als konstant vorausgesetzt, auch weil mit der Tillotson-Gleichung keine temperaturabhängige Form der Zustandsgleichung vorliegt. Es wurde nicht angestrebt, eine thermodynamisch realistische Lithosphäre aufzubauen, lediglich hydrostatisches Gleichgewicht stand im Vordergrund. Dabei läßt sich die Form der Zustandsgleichung im Gebiet kalter und komprimierter Zustände (siehe Kap. 4) ausnutzen, um einen exakten Ausdruck für die Druckdifferenzen zu finden. Nach einigen algebraischen Rechnungen ergibt sich

$$\left\{ \left[a + b - b \left(\frac{\frac{\epsilon}{E_0}}{\frac{\epsilon}{E_0} + \eta^2} \right)_j \left(1 - \frac{2(\bar{\eta}_j)^2}{\frac{\epsilon}{E_0} + \eta^2_j} \right) \right] \epsilon + \frac{A}{\rho_0} + 2 \frac{B}{\rho_0} \bar{\mu}_j \right\} \Delta \rho_j =$$

$$= -g \left[\rho_{j+1/2}(z_{j+1/2} - z_j) + \rho_{j-1/2}(z_j - z_{j-1/2}) \right], \quad (5.3)$$

hier ist $\Delta\rho_j := \rho_{j+1/2} - \rho_{j-1/2}$, die Hilfsgrößen $\eta := \rho/\rho_0$ und $\mu := \eta - 1$ entsprechen den in Kap. 4 eingeführten, die innere Energie ϵ ist eine Konstante. Die Mittelung \bar{f} für beliebige Funktionen f von Zustandsgrößen in den angrenzenden Zellen wird durch

$$\bar{f}_j := \frac{1}{2}(f_{j-1/2} + f_{j+1/2}) \quad (5.4)$$

definiert. Die Differenzgleichung ist nichtlinear, da gemittelte Größen auf der linken Seite von Werten in beiden Zellen abhängen. Der Faktor bei $\Delta\rho_j$ ist ein Mittelwert der isothermen Schallgeschwindigkeit. An der Grenze zur Atmosphäre lautet die Bedingung

$$p_j^* := \frac{p_{j-1/2}\rho_{j+1/2}(z_{j+1/2} - z_j) + p_{j+1/2}\rho_{j-1/2}(z_j - z_{j-1/2})}{\rho_{j+1/2}(z_{j+1/2} - z_j) + \rho_{j-1/2}(z_j - z_{j-1/2})}, \quad (5.5)$$

hierbei ist p_j^* der Druck an der Oberfläche des Planeten. Das Gleichgewicht wird mit Hilfe einer Iteration, ausgehend von einer konstanten Dichteverteilung erreicht. In jedem Schritt wird $\Delta\rho_j$ bei gegebener Dichteverteilung aus Gl.(5.3) berechnet und danach, vom oberen Rand beginnend (wo die Dichte gegeben ist), eine neue Dichteverteilung erhalten. Die Prozedur zur Erzeugung der hydrostatischen Anfangsverteilung ist sehr robust und konvergiert in wenigen Schritten. Außerdem entspricht sie der Diskretisierung im Hydrodynamik-Algorithmus und ist daher viel besser als irgendeine andere Approximation. Die Lösung in der darüberliegenden Atmosphäre ist wegen der Zustandsgleichung des idealen Gases vereinfacht, man erhält dort

$$\rho_{j+1/2} = \rho_{j-1/2} \frac{(\gamma - 1)\epsilon_{atm} - g(z_j - z_{j-1/2})}{(\gamma - 1)\epsilon_{atm} + g(z_{j+1/2} - z_j)}. \quad (5.6)$$

Die Genauigkeit der Anfangsverteilung ist entscheidend, weil sonst unphysikalische Schwingungen auftreten würden, die das gesamte Ergebnis infrage stellen.

Der Asteroid wird zwar mit der selben Zustandsgleichung wie die Lithosphäre beschrieben, jedoch ist sein Material von ihr durch den Volume-of-Fluid-Algorithmus getrennt. Insgesamt sind drei Materialsorten vorhanden (dies ist eine augenblickliche Grenze des Verfahrens, siehe Bemerkung zur Materialordnung im vorigen Kapitel). Jedes Material hat eine eigene Volumenfraktion, Dichte, und innere Energie. Die Geschwindigkeiten der Materialien innerhalb des Kontrollvolumens einer Kante des Gitters sind gleich. Nun betrachte man die Situation in Abb. 5.1 für die Materialgrenzen, nach 10

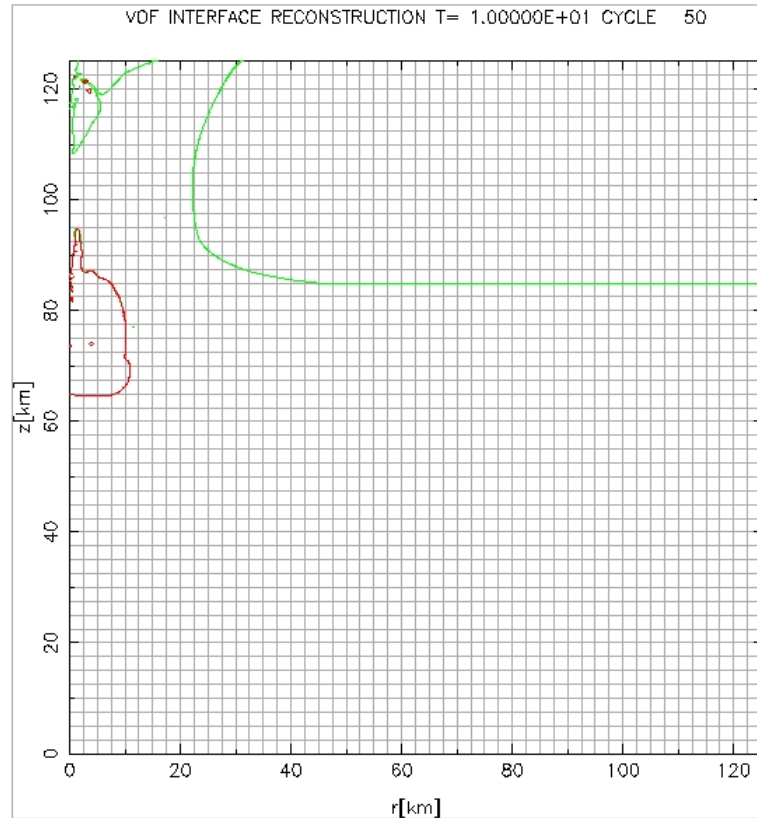


Abbildung 5.1: Materialgrenzen nach 10 Sekunden simulierter Zeit. Rot: Asteroidenmaterial. Grün: Planetenmaterial. Planetenoberfläche bei $z = 85$ km. Zeichenalgorithmus verwendet gleiche Subroutinen wie VOF-Rekonstruktion.

Sekunden, dies ist bereits eine recht lange Zeit, d.h. 20 charakteristische Eindringzeitskalen. Das Material des Asteroiden wird zum großen Teil in einer etwa birnenförmigen Region eingeschlossen (rot). Es ist vom teilweise verdampften oder flüssigen Auswurfmaterial des Planeten umgeben, welches wiederum von der Kontakt-Unstetigkeit zur Atmosphäre (grün) begrenzt wird. Das dargestellte Gitter dient nur als Orientierung, die Auflösung betrug 500×500 Zellen (das dargestellte Gitternetz ist um den Faktor 8 größer als das wirkliche und dient nur zur Orientierung). In den Gebieten der unterschiedlichen Materialsorten sind auch kleinere Einschlüsse von Materialien der anderen Sorten vorhanden. Jedoch existiert noch keine großräumige Instabilität der Materialgrenzen, wie sie bei der Erosion in einer Atmosphäre

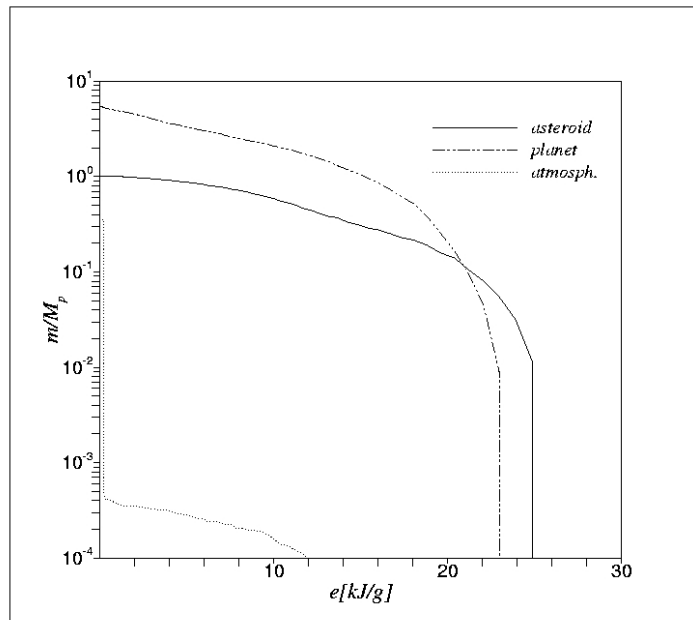


Abbildung 5.2: Verhältnis der Massen mit spezifischer Energie ϵ zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 0.8$ Sekunden.

entstehen kann. Es ist zu erkennen, daß nahezu alles Material des „Projektils“ so eingeschlossen ist, sodaß es vorläufig nicht nach oben entweichen kann. Bei Hochgeschwindigkeitseinschlägen in Wasser ist ebenfalls beobachtet worden, wie sich die Höhlung zuerst von oben verschließt (Lee, Longoria und Wilson, 1996). Die Ursache ist hier jedoch eine andere. Der anfangs sehr dichte Dampf des Bodenmaterials breitet sich vom Ort seiner Erzeugung isotrop aus und füllt damit den wenig dichten oberen Teil der Höhlung, kurz nachdem das „Projektil“ völlig abgebremst wurde. Ein kleiner Teil des ebenfalls dichten Dampfes des Asteroiden bohrt sich als Jet in der Nähe der Symmetrieachse durch.

Um statistische Aussagen machen zu können, werden in jedem Zeitschritt die Werte interessierender Zustandsgrößen in gewissen Intervallen, im weiteren als „Bins“ oder Fächer bezeichnet, gesammelt. Dabei wird die Materialmenge über die Masse gemessen. Jedes Material besitzt seine eigene Anordnung von Bins. Um ein Beispiel zu geben: Wenn die Innere Energie eines Materials in einer Zelle oberhalb der unteren Energie-Grenze eines Bins verbleibt, wird die Masse des entsprechenden Materials in der Zelle zu der in diesem Bin (für die Materialsorte) addiert. Im untersten Bin (Null) werden alle Massen des entsprechenden Materials angesammelt, wo die Energie un-

terhalb des Minimalwertes liegt. Somit entsteht eine kumulative Verteilung, oder auch ein Spektrum der Verteilung physikalischer Größen, gewichtet mit der Masse. Die Gesamtmasse eines Materials ist die Summe der des untersten (nullten) und des ersten Bins. Wegen der Zylindergeometrie ist die Masse der Zellen in radialer Richtung unterschiedlich, das wird natürlich berücksichtigt. Es zeigte sich weiterhin, daß eine logarithmische Einteilung der Funktionswerte der Bins (z. B. Geschwindigkeiten oder Energien) besser als eine lineare funktionierte. Schließlich werden die Verteilungen mit Hilfe der Masse des „Projektils“ (des Asteroiden) normiert. Auf diese Weise können solche Fragen beantwortet werden, wie beispielsweise: Wieviel Masse des Planetenmaterials wird bis auf eine bestimmte Geschwindigkeit beschleunigt? Wieviel Masse der Atmosphäre wird auf einen bestimmten Wert der inneren Energie „aufgeheizt“? Die Auflösungsgrenze bei diesem Vorgehen ist mit dem Verhältnis der kleinsten in irgendeiner Zelle gegebenen Masse (für jedes Material typisch) zur Gesamtmasse des Asteroiden gegeben. Dieses Verhältnis hängt von der Gitterauflösung ab, man sollte also das „Projektil“ durch ausreichend viele Zellen modellieren. Dadurch sind Messungen sehr viel schärfer als z. B. solche mit einigen wenigen Tracer-Teilchen erzielte Ergebnisse. Ein weiterer Vorteil dieser statistischen Auswertung ist ein gutes Verständnis der Zeitabhängigkeit. In der Literatur dominieren allerdings Verfahren mit Tracer-Teilchen, siehe z. B. [Pierazzo, Vickery und Melosh \(1997\)](#). Man kann auch leicht mehrere Informationen im Kriterium für die Zugehörigkeit zu einem Bin kombinieren, z. B. Auswurfsgeschwindigkeit über einem Schwellwert und Druck unterhalb einer Grenze (z. B. für Schmelzen).

Die Abbildung 5.2 zeigt das „Spektrum“ der inneren Energie ϵ , bei $t = 0.8$ Sekunden, die charakteristische Eindringzeit beträgt für den Asteroiden mit 10 km Durchmesser nur 0.5 Sekunden. Die Stoßwelle hat also bereits den hinteren Rand des Asteroiden erreicht und ihn vollständig aufgeheizt. Wie man sieht, ist die nahezu die Hälfte seiner Masse über einem Wert, wie er zum Verdampfen von Mineralien ausreicht ~ 15 kJ/g. Weiterhin ist interessant, daß die Menge von Bodenmaterial im selben Energiebereich um etwa einen Faktor zwei bis drei höher liegt, und dies, obwohl beide Materialien gleiche thermodynamische Parameter besitzen. Dies liegt auch an der Geometrie der Energiefreisetzung. Damit ist ersichtlich, daß die sogenannte planare Einschlagsapproximation ([Melosh, 1989](#)) allenfalls für eine Schätzung des Anfangsdrucks gilt, nicht jedoch nach dem Eindringen des Asteroiden. Die Atmosphäre nimmt nur wenig thermische Energie auf, da sie eine so geringe Masse besitzt. Dies ist also ein vergleichsweise unbedeutender Verlust. Der etwas höhere Massenanteil der Atmosphäre am linken Rand des Diagramms bedeutet, daß nahezu alle Masse der Atmosphäre im Rechengebiet noch den Anfangswert besitzt (etwa 0.2 kJ/g).

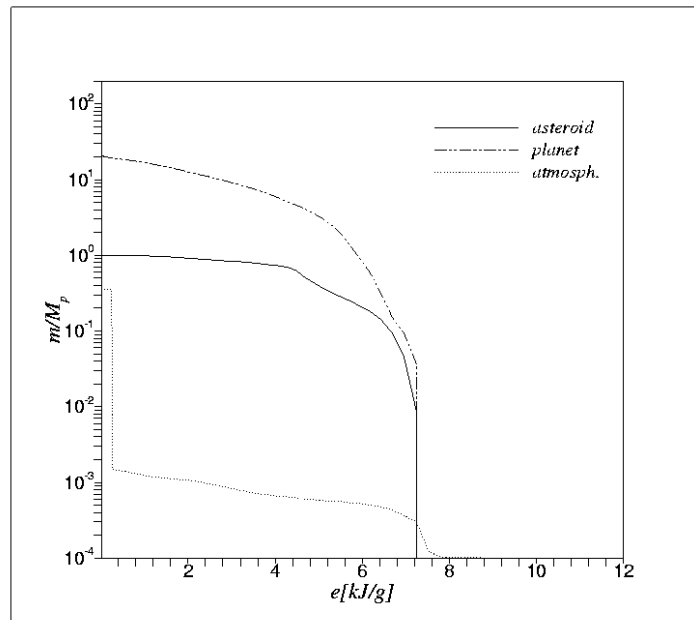


Abbildung 5.3: Verhältnis der Massen mit spezifischer Energie ϵ zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 1.6$ Sekunden.

Nach genau der doppelten Zeit hat sich die Energie über eine viel größere Masse im Material des Planeten verteilt, siehe Abb. 5.3. Insgesamt sind die Grenzwerte, wo die Verteilung stark abfällt, wesentlich geringer geworden. Das Projektil hat aber noch eine relativ „scharfe“ Energieverteilung; ein exponentieller Abfall würde bei der gewählten Darstellung linear erscheinen.

Der Energie-Schwellwert, wo die Verteilung abrupt abfällt, stimmen in Asteroid und Bodenmaterial nahezu überein, wogegen es Teile der Atmosphäre gibt, die bis auf eine etwas höhere innere Energie kommen. Nach 10 charakteristischen Eindringzeiten, d. h. 5 Sekunden, entsteht ein anderes Bild, siehe Abb. 5.4. Die Energieverteilung des Asteroiden ist flacher geworden, typische innere Energien liegen aber noch für mehr als 50 Prozent über 2 kJ/g. Dagegen ist die typische innere Energie des von der Stoßwelle erfaßten Bodenmaterials auf einen recht kleinen Wert abgefallen, allerdings hat die Welle bereits mehr als das Hundertfache an Masse erfaßt.

Weiterhin ist das Spektrum der Geschwindigkeit, welche die Materialien zu den verschiedenen Zeitpunkten besitzen, erhalten worden. Die Zeitpunkte sind wieder die gleichen wie vorher, d. h. 0.8 Sekunden für Abb. 5.5, 1.6 Sekunden für Abb. 5.6, und 5.0 Sekunden für Abb. 5.7. Nach 0.8 Sekunden ist

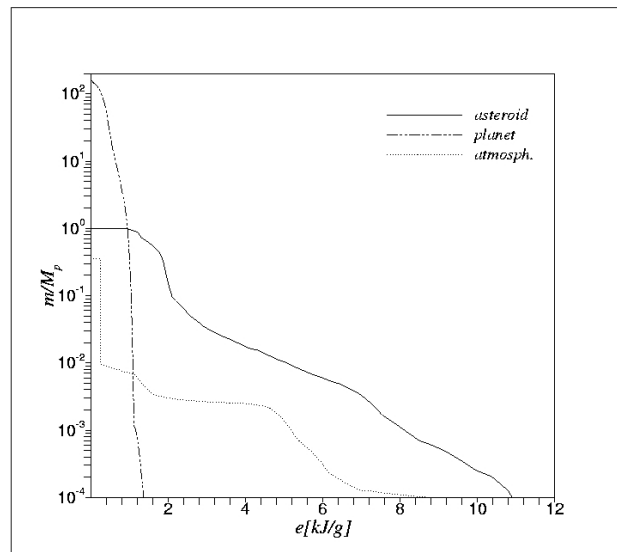


Abbildung 5.4: Verhältnis der Massen mit spezifischer Energie ϵ zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 5$ Sekunden.

die typische Geschwindigkeit in dem von der Stoßwelle erfaßten Bereich etwa die halbe Einschlagsgeschwindigkeit, 10 km/s. Es gibt im „Projektile“ aber noch geringfügig schnellere Anteile, während im Bodenmaterial die Stoßwelle die Geschwindigkeit etwa exakt auf diesem Wert bringt.

Aus der Verteilung bei 0.8 Sekunden war ersichtlich, daß etwa eine Projektile-Masse an Material insgesamt Werte über der Fluchtgeschwindigkeit des Planeten besaß, davon ist der größte Teil Material des Planeten, dies ist bei 1.6 Sekunden nicht mehr der Fall. Welcher Anteil tatsächlich entweichen kann, ist zu dem Zeitpunkt noch unklar, da sich die Geschwindigkeiten weiter verändern. Bei 5.0 Sekunden simulierter Zeit (10 charakteristischen Zeiten) besteht nicht mehr der Eindruck, daß Auswurfsmaterial mit diesen hohen Geschwindigkeiten vorhanden ist, und es ist noch kein Material des Planeten an den Rändern des Rechengebiets ausgetreten, wie am Bild der Materialgrenzen (siehe Abb. 5.1, bei 10 Sekunden) zu erkennen ist. Ein kleiner Massenanteil an Atmosphären gas mit etwas höheren Geschwindigkeiten ist vorhanden, ansonsten haben Asteroiden- und Planetenmaterial sehr scharf begrenzte Verteilungen der Geschwindigkeit. Bei einigen Versuchen zeigte sich, daß eine Auflösungsabhängigkeit vorliegt, darum sind die aktuellen Werte mit einer Gitterauflösung von 500 x 500 Zellen erzeugt worden. Dies entspricht bei der Gesamtgröße von 125 x 125 km einer Anzahl von 20 Zellen pro Projektile radius. Dieser Wert wurde von [Pierazzo, Vickery und Melosh \(1997\)](#)

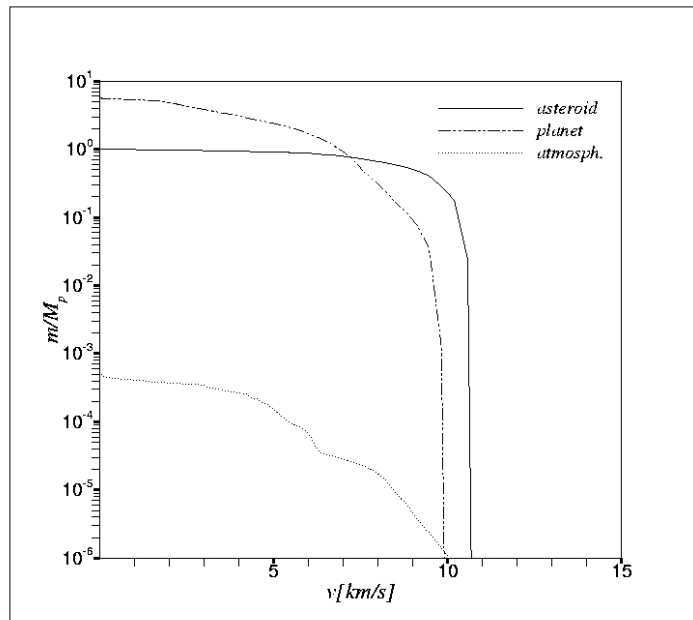


Abbildung 5.5: Verhältnis der Massen mit Betrag der Geschwindigkeit v zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 0.8$ Sekunden.

ermittelt, um zuverlässige Aussagen zum Anteil des geschmolzenen Materials zu bekommen.

Es ist auch von Interesse, das Strömungsfeld selbst zu betrachten, da es mehr Information enthält. Die Dichte nach 10 Sekunden simulierter Zeit zeigt Abbildung 5.8. Dabei wurde bewußt auf eine Darstellung mit nur 25 Farben bzw. Konturen eingeschränkt, um die Datenmenge der Bilder zu reduzieren. Die grafische Darstellung hat leider den Mangel, daß auch in Zellen, durch welche Materialgrenzen verlaufen, solange irgendein noch so kleiner Anteil des Planetenmaterials vorhanden ist, ein Wert angezeigt wird. Ein Vergleich mit Abb. 5.1 mag genügen, um sich zu vergewissern, daß beispielsweise im Inneren der birnenförmigen Struktur in der Nähe der Achse Material des Asteroiden eingeschlossen ist, daher wird dort der Minimalwert der Dichte (Null) angezeigt, ebenso im Bereich der Atmosphäre. Es ist sichtbar, daß die ausströmende Materie des Planeten in größeren Höhen eine geringe Dichte besitzt. Weiterhin ist die Schichtung in der Lithosphäre an einigen (insgesamt nur 3) Konturen zu erkennen. In der nächsten Abbildung (5.9) ist der Druck nach 10 Sekunden abgebildet. Die Konturen sind allerdings so, daß keine Stoßwelle im Bereich der Atmosphäre zu sehen ist. Dazu müßte man

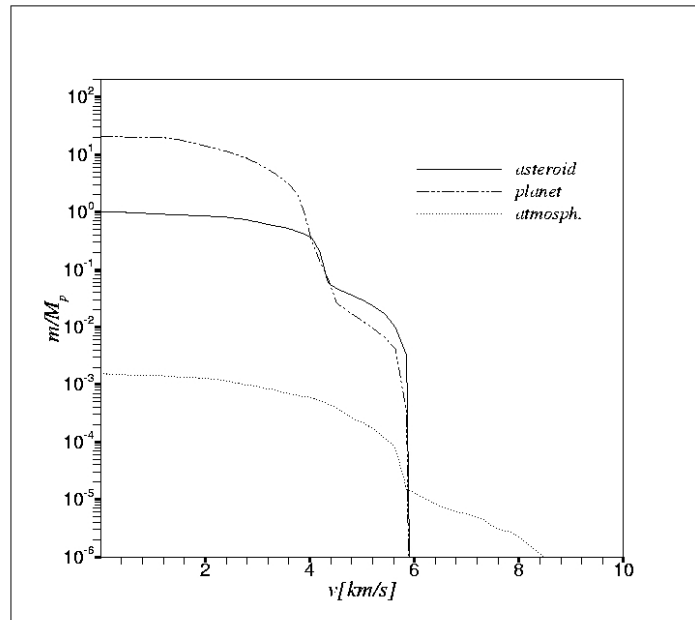


Abbildung 5.6: Verhältnis der Massen mit Betrag der Geschwindigkeit v zur Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 1.6$ Sekunden.

logarithmische Konturen darstellen. Stattdessen ist aber die Schichtung der Lithosphäre deutlich zu sehen. Weiterhin ist der Kraterrand dadurch sichtbar, daß irreguläre Strukturen auftreten, weil auch negative Drücke (Spannungen) vorkommen. Die Dichte dort ist geringfügig unter der Normaldichte von 2.68 g/cm^3 .

Das Geschwindigkeitsfeld ist in Abbildung 5.10 zu erkennen. Man sieht, daß Material geringer Dichte mit hohen Geschwindigkeiten am oberen Rand das Gebiet verläßt. Es wurden nur Vektoren an jedem achten Gitterpunkt gezeichnet. Nach etwa 50 Sekunden kommt das Wachstum des transienten Kraters zum Stillstand, nun würde die Kollapsbewegung einsetzen, was mindestens eine Freifall-Zeit dauert. Um dies weiter zu untersuchen, müßt jedoch ein Materialmodell, d. h. eine geeignete Rheologie vorhanden sein. Es ist aber sichtbar (Abb. 5.11), daß im Inneren des Kraters sowohl noch Material des Planeten, als auch des Asteroiden (nicht sichtbar) vorhanden sind, d. h. die Höhlung ist nicht leer, wie beispielsweise Collins (2002) in seiner Untersuchung des Krater-Kollapses vereinfachend annahm, um ein Einmaterial-Verfahren benutzen zu können. Die Dichten betragen dort stellenweise noch ein Zehntel der des festen Materials. Im Inneren, wo das Planetenmaterial

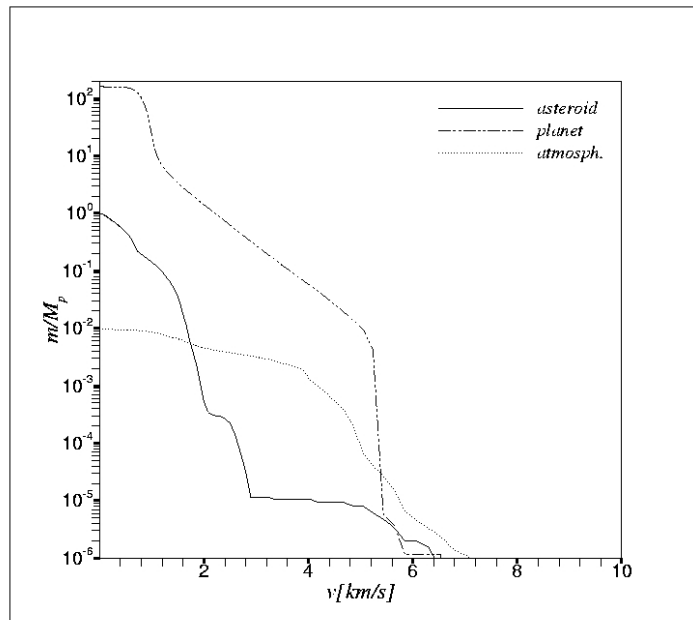


Abbildung 5.7: Verhältnis der Massen mit Betrag der Geschwindigkeit v zur der Gesamtmasse des Projektils M_p . Dargestellt ist der Zeitpunkt $t = 5.0$ Sekunden.

gänzlich fehlt, ist immer noch ein Teil der Masse des Asterioden vorhanden, dort existieren noch hohe thermische Energien, wie Abb. 5.12 verdeutlicht. Dagegen ist im gesamten Bereich der Auswurfsströmung des Planetenmaterials nur noch relativ kalte Materie. Außerdem hebt sich in der Darstellung der inneren Energie noch der Kraterrand schwach ab, wo sich wahrscheinlich geschmolzenes Material des Planeten befindet. Deutlich ist weiterhin die Stoßwellenstruktur in der Atmosphäre mit einem keilförmigen Ausläufer in Bodennähe zu sehen.

Einige Strukturen am rechten Rand sind leider nicht physikalischer Natur und entstehen wegen einer teilweisen Reflexion der Stoßwelle (wenige Prozent der Energie) am Rand. Die Farbdarstellung im Bereich um die Normaldichte von Granit ist bewußt so, daß sehr geringe Dichtekontraste sichtbar werden sollen, und der Effekt ist so deutlich zu erkennen. Zwar wurden sogenannte nichtreflektierende Randbedingungen im Programm verwendet (Baum u. a. , 1994; Okong'o und Bellan , 2002), diese linearisieren jedoch nur lokal die Wellenausbreitung und versuchen dadurch, einlaufende akustische Wellen zu unterdrücken. Dies ist schwierig, da es sich bei SOVA um ein Verfahren höherer Ordnung handelt, wo das tridiagonale Gleichungssystem (4.53) für

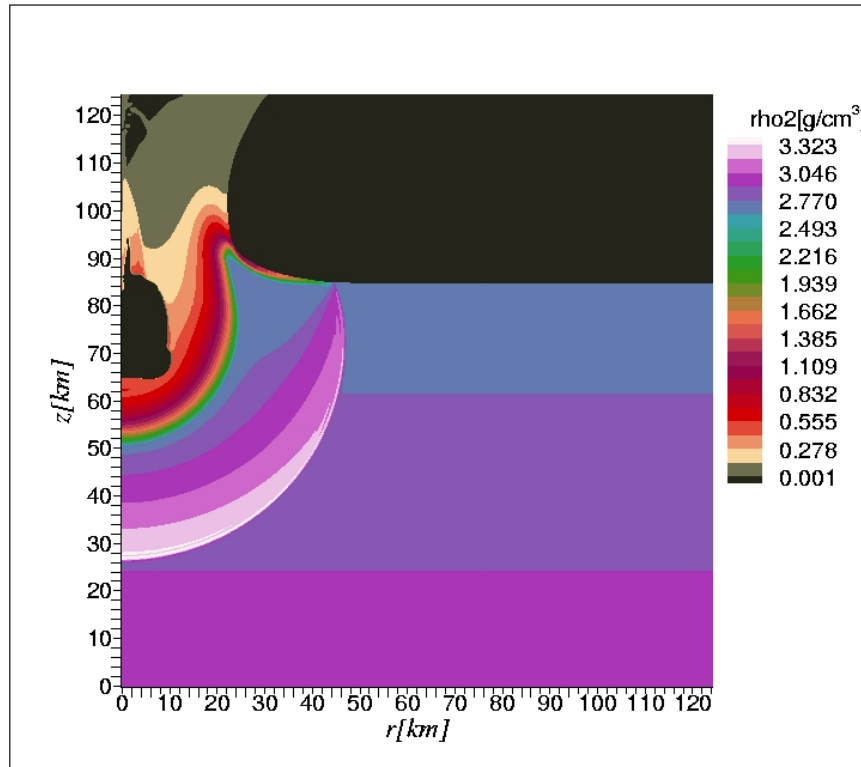


Abbildung 5.8: Konturen der Dichte des Planetenmaterials nach 10.0 Sekunden

die Geschwindigkeit invertiert wird. So koppeln Randwerte sehr empfindlich auf die Lösung zurück. Daher funktionieren diese Randbedingungen nur für in der Kompression lineare Zustandsgleichungen, wie die des idealen Gases. Dort, wo die Materie derartige Eigenschaften hat, sind darum die Randbedingungen nicht störend in Erscheinung getreten. Die einzige Lösung des Problems wäre ein sehr großes Rechengebiet.

Ebenfalls von Interesse ist, daß nach zehn Sekunden folgende globale Energieaufteilung vorhanden war:

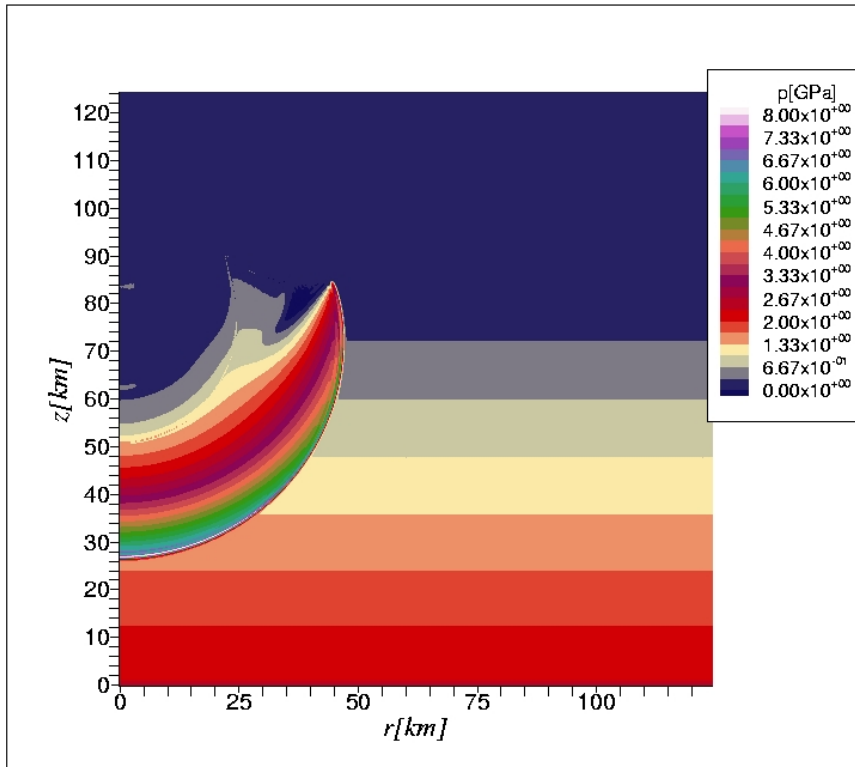


Abbildung 5.9: Konturen des Drucks nach 10.0 Sekunden.

| Energieart und Material | Anteil |
|--------------------------------|----------------|
| E_{kin}/E_{tot} , Projektil | 0.00150926978 |
| E_{int}/E_{tot} , Projektil | 0.0126270006 |
| E_{kin}/E_{tot} , Planet | 0.543807406 |
| E_{int}/E_{tot} , Planet | 0.440915932 |
| E_{kin}/E_{tot} , Atmosphäre | 0.000211043436 |
| E_{int}/E_{tot} , Atmosphäre | 0.000929347446 |

Es wurde also bereits etwa 98 Prozent der Einschlagsenergie an die Lithosphäre abgegeben, alle anderen Anteile sind verschwindend klein. Dabei ist die Aufteilung in kinetische und innere Energie des Bodenmaterials etwa 54:44, während im Material der Atmosphäre der Anteil thermischer Energie deutlich über dem der kinetischen liegt. Damit ist klar, daß bei der Akkretion, selbst mit vergleichsweise hohen Geschwindigkeiten ein großer Teil der Energie des Einschlags als thermische Energie in der Lithosphäre des Pla-

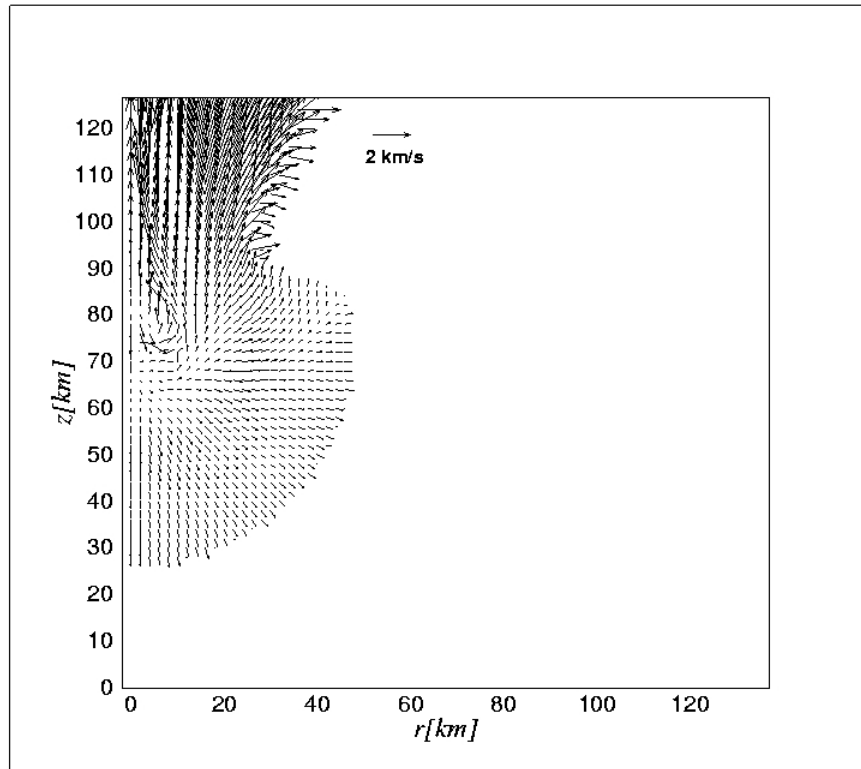


Abbildung 5.10: Geschwindigkeitsfeld nach 10.0 Sekunden.

neten verbleibt. Die Atmosphäre spielt nahezu überhaupt keine Rolle in der Energiebilanz.

Es wurden auch zum Vergleich Berechnungen mit der Godunov-Methode durchgeführt, diese kann aber keine Zylindergeometrie berücksichtigen. Das liegt daran, daß die Godunov-Methode mit VOF-Advektion nicht auf krummlinige Koordinaten verallgemeinert werden konnte (dreidimensionale Rechnungen wären im Prinzip möglich, jedoch ungleich langwieriger). Auch ist die notwendige Iteration zur Lösung des Riemann-Problems bedeutend zeitintensiver, selbst wenn eine Methode mit beschleunigter Konvergenz angewendet wird. Es sind pro Zelle und Zeitschritt einige hundert Auswertungen der Zustandsgleichung (und ihrer Ableitungen) erforderlich. Mit der selben Auflösung, allerdings in einem geringfügig kleineren Gebiet von 100×100 km wurden Vergleichsrechnungen durchgeführt. Ergebnisse sind wegen der andersartigen Geometrie nur am Rande von Bedeutung. Außerdem kann die Gravitation nicht so einfach einbezogen werden. Für Ein-Material-Probleme

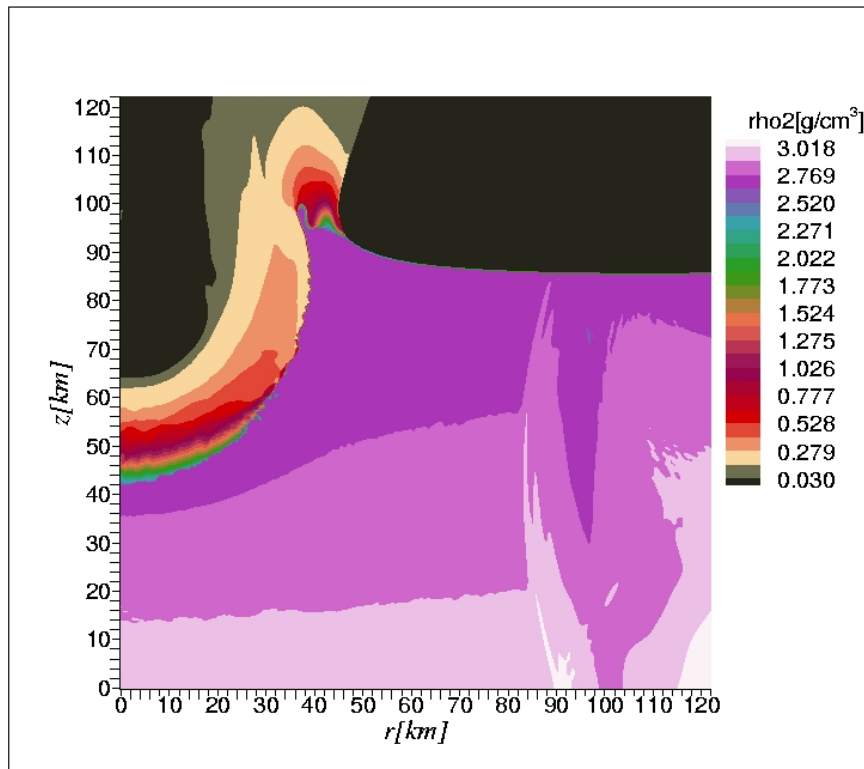


Abbildung 5.11: Dichte des Planetenmaterials nach 50 Sekunden.

wäre sie lediglich ein Quellterm in den hydrodynamischen Gleichungen, aber die Verallgemeinerung für VOF-Advektion ist nicht trivial. Anders als in SOVA, werden in Godunov-Methoden Energie-Gleichungen für die totale (kinetische plus innere) Energie jedes Materials gelöst. Die innere Energie ergibt sich als die oft sehr kleine Differenz zwischen totaler und kinetischer Energie des Materials, was leicht zu Überhitzung oder Unterkühlung führen kann, sobald die Nichtlinearitäten der Zustandsgleichung im Riemann-Löser weniger gut approximiert wurden. Daher traten auch Bereiche mit unphysikalisch hoher innerer Energie (hauptsächlich in weniger dichten Gebieten und in der oberen Atmosphäre) auf. Der einzige praktische Vorteil der Godunov-Methode ist eine robuste Realisierung von Ausström-Randbedingungen ohne Reflexion. Nach bereits 20 Sekunden simulierter Zeit war der Krater tiefer als 65 km, und verließ damit das etwas kleinere Rechengebiet von nur 100 x 100 km, bei einer Anfangshöhe der Planetenoberfläche von 65 km. Es wurde bis zu einer Endzeit von 30 Sekunden simuliert, dabei bewegte sich die Mate-

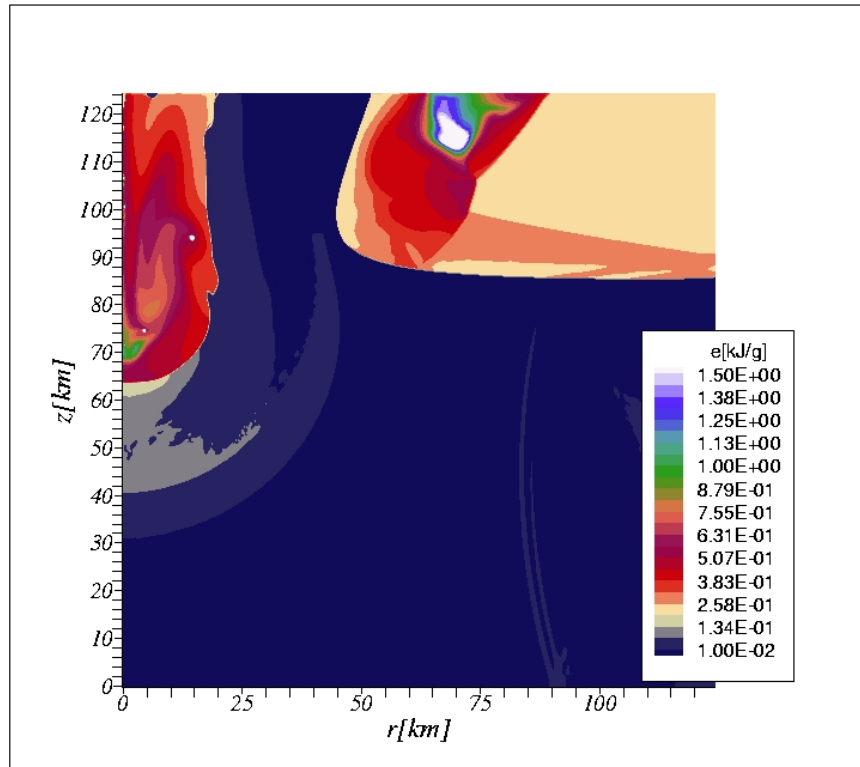


Abbildung 5.12: Spezifische innere Energie nach 50 Sekunden.

rie des Asteroiden nach oben und entwich aus dem Rechengebiet. Trotzdem wird in den folgenden Abbildungen die Situation nach 20 Sekunden simulierter Zeit dargestellt. Daß sich die Energie anders verteilt, ist nicht besonders relevant, da eine andere Geometrie zugrundelag. Die Höhlung schloß sich anfangs aber genauso wie in der Simulation mit SOVA, und das „Projektile“ blieb eine zeitlang „gefangen“, bis es seinen Weg nach oben begann.

5.2 Wechselwirkung mit einem Ozean

Auf der Erde ist es wahrscheinlicher, daß Einschläge in den Ozean erfolgen. Hier gibt es verschiedene Fälle, die man grob danach einteilen kann, ob der Durchmesser des Asteroiden oder Kometen groß oder klein gegenüber der Wassertiefe war. Die erste Möglichkeit war im Fall des Chicxulub-Kraters realisiert. Um den entgegengesetzten Fall zu untersuchen, wurde der Einschlag eines 1 km großen basaltischen Asteroiden in einen 8.5 km tiefen Ozean

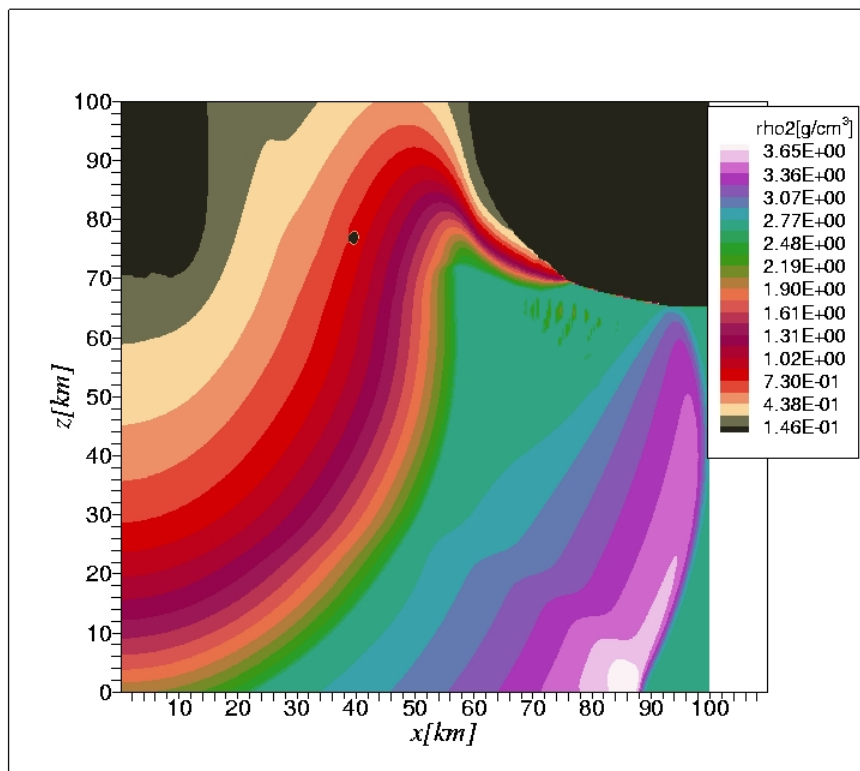


Abbildung 5.13: Dichte des Planetenmaterials nach 20 Sekunden, mit Godunov-Methode. Keine Zylinderkoordinaten ! Planetenoberfläche bei 65 km.

mit SOVA simuliert, die Geschwindigkeit betrug 20 km/s. Wieder wurde ein hydrostatisches Gleichgewicht aufgebaut, um den Anfangszustand zu realisieren. Die Zustandsgleichung für Asteroid und Wasser ist die Tillotson-Gleichung mit Parametern nach Melosh (1989), die der Atmosphäre wurde wieder als ideales Gas mit $\gamma = 1.4$ approximiert. Es ist klar, daß ein kleinerer Impaktor keinen Krater mehr am Ozeanboden erzeugt, weil er vorher seine Energie an das Wasser abgegeben hat, und sich nur noch mit geringer Geschwindigkeit dem Meeresboden nähert. Die Dichte des Wassers ist mit etwa 1 g cm^{-3} geringer als die typischer basaltischer Asteroiden (2.7), daher ist der Effekt der unterschiedlichen Dichten deutlich. Hier erkennt man eine Rayleigh-Taylor-Instabilität der Materialgrenze des expandierenden Impaktors zum Wasser, siehe Abb. 5.15. Das Bild zeigt die Situation nach 0.5 Sekunden, also 10 charakteristischen Zeiten.

Es bildet sich am oberen Rand der Eintrittsstelle ein Abschluß und der

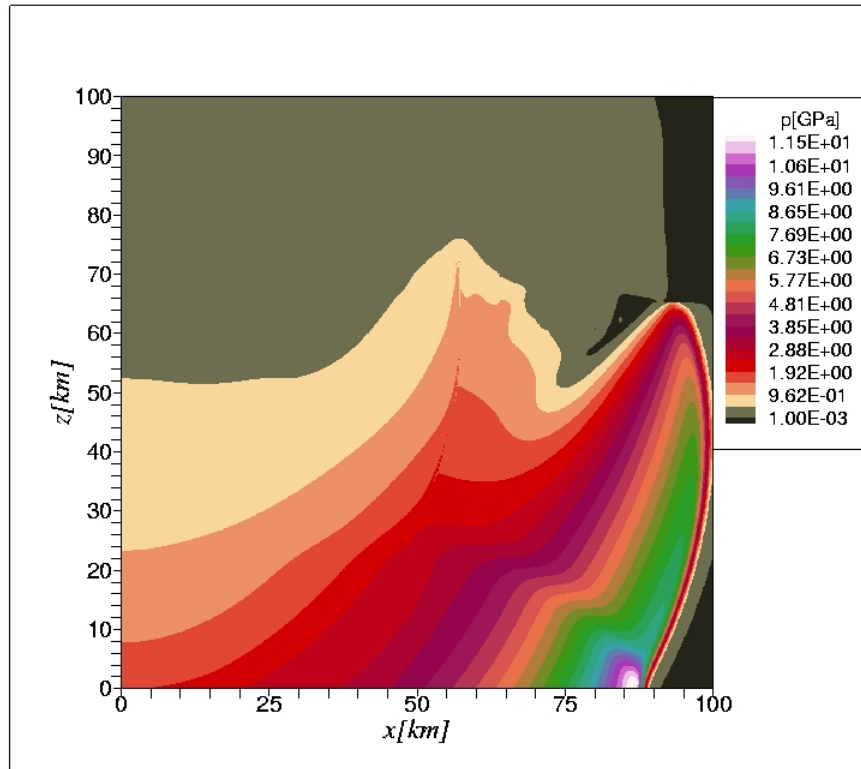


Abbildung 5.14: Druck-Konturen 20 Sekunden, mit Godunov-Methode. Kei- n Zylinderkoordinaten ! Planetenoberfläche bei 65 km.

Raum über dem „Projektile“ wird durch Wasserdampf aufgefüllt. Entlang der Symmentrieachse sind auch noch Reste des Atmosphäregases eingeschlossen. Nach einer Sekunde (20 charakteristischen Zeiten) findet man folgende globale Energieaufteilung:

| Energieart und Material | Anteil |
|--------------------------------|----------------|
| E_{kin}/E_{tot} , Projektil | 0.0075403449 |
| E_{int}/E_{tot} , Projektil | 0.0113628427 |
| E_{kin}/E_{tot} , Ozean | 0.459281582 |
| E_{int}/E_{tot} , Ozean | 0.517990964 |
| E_{kin}/E_{tot} , Atmosphäre | 0.000576949201 |
| E_{int}/E_{tot} , Atmosphäre | 0.00324731771 |

Hier ist die spezifische innere Energie, welche dem Ozean übertragen wur-

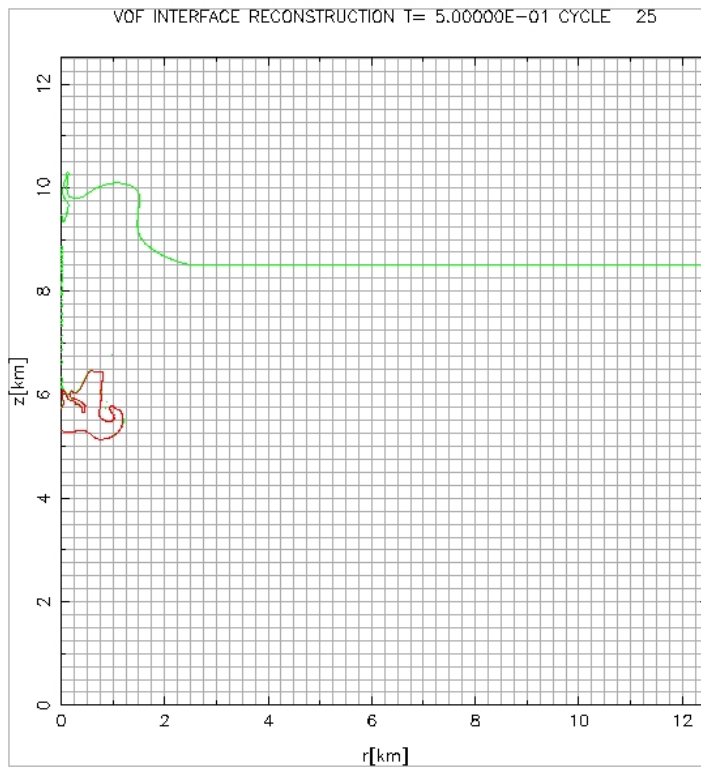


Abbildung 5.15: Materialgrenzen nach 0.5 Sekunden, Einschlag in einen Ozean, Basalt (rot), Wasser (grün), Oberfläche bei 8.5 km.

de geringfügig größer als die kinetische Energie. Abbildung 5.16 stellt die Geschwindigkeitsverteilung nach einer Sekunde dar. Die hohen Geschwindigkeiten des Asteroidenmaterials sind mehr durch eine turbulente Bewegung als durch eine systematische Translation oder Expansion gekennzeichnet. Trotzdem bewegte sich der Asteroid nach 1 Sekunde noch langsam abwärts. Die Verteilung der Geschwindigkeiten zeigt, daß sich nach einer Sekunde eine große Masse von Wasser (Faktor Hundert der Asteroidenmasse) mit Geschwindigkeiten größer als 800 m/s bewegte. Der Hochgeschwindigkeitsanteil mit wesentlich kleinerer Masse stellt die verschiedenen Stoßwellenregionen, sowie das Auswurfsmaterial (hauptsächlich Wasser) dar.

Eine weitere Abbildung, 5.17 zeigt die Dichte am Ende der Simulation, bei $t = 1.9$ Sekunden, also nach 38 charakteristischen Zeiten. Die Stoßwelle hat bereits den Grund des Ozeans erreicht, und das „Projektile“ ist stark deformiert, es hebt als schwarzer Bereich, in dem Wasserdampf fehlt, ab. Ebenso ist die Grenze zur Atmosphäre sichtbar.

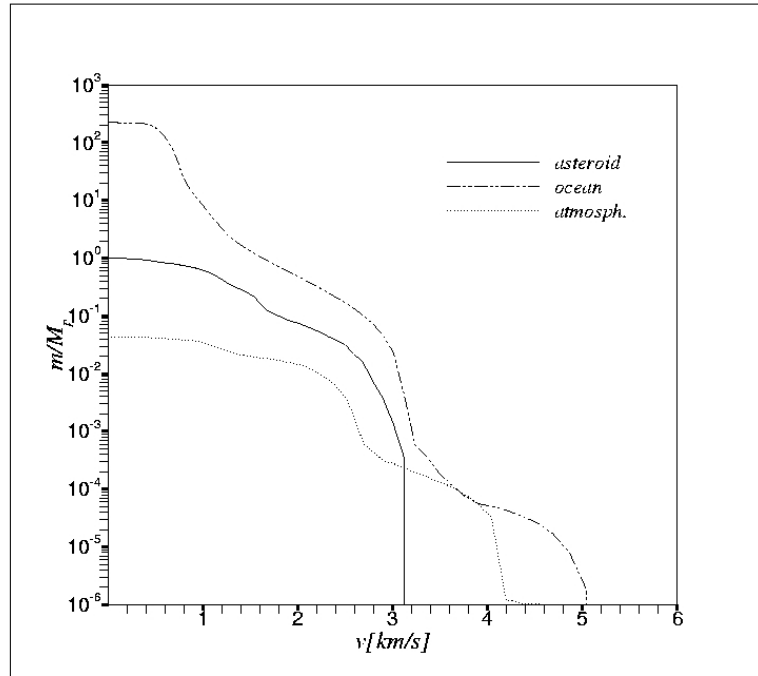


Abbildung 5.16: Geschwindigkeitsverteilung nach einer Sekunde, normiert mit Masse des Projektils M_p , für Einschlag eines Asteroiden mit 1 km Durchmesser in Wasser.

Die zeitlich begrenzte Modellierung des Einschlags gibt noch keine Anhaltspunkte für die Entwicklung eines Tsunamis. Dazu müßten weitaus längere Rechenzeiten erreicht werden (Gisler u. a. , 2003), so etwa 150 Sekunden, bis ein vertikaler Jet etwa 20 km in die Atmosphäre aufsteigt, und bei seinem Kollaps den eigentlichen Tsunami produziert. Vorher ergibt der Kollaps der Randwelle noch einen kleineren Vorläufer-Tsunami von anfangs 1 km Höhe, siehe Gisler u. a. (2003). Die Berechnung von Gisler u. a. (2003) mit ASCII White, dem derzeit größten Supercomputer entsprach 1.3×10^6 CPU-Stunden, d. h. ein einzelner Prozessor (vom PC-Typ) würde dafür 148 Jahre rechnen, allerdings simulierten Gisler u. a. (2003) in 3 D. Die hier verwendete räumliche Auflösung ist dabei mindestens äquivalent. Bei einer derart langen Simulation, d. h. 3000 charakteristischen Zeiten gegenüber den hier „nur“ ~ 40 treten noch eine Reihe von erschwerenden Problemen auf. So sind die Randbedingungen nicht ohne Einfluß, denn man kann keine reine Ausström-Randbedingung formulieren: es fließt eine große Wassermenge von außen in das Rechengebiet hinein. Die Stoßwelle erreicht bereits eine

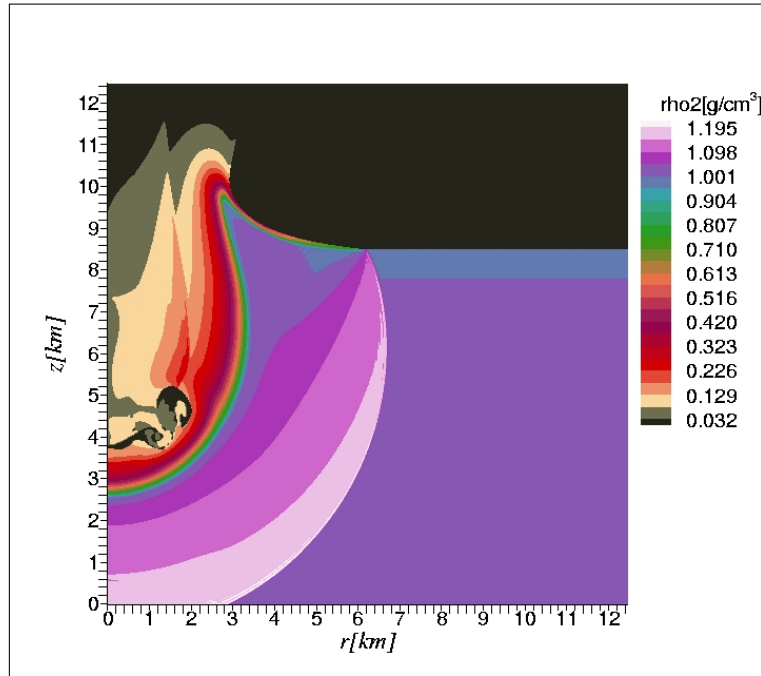


Abbildung 5.17: Dichte des Wassers nach 1.9 Sekunden, für Einschlag eines Asteroiden von 1 km Durchmesser mit 20 km/s Geschwindigkeit.

Entfernung von $150 \times 1.5 = 300$ km, derart ausgedehnt war das Gitter von [Gisler u. a. \(2003\)](#) nicht, sondern ~ 40 km. Weiterhin findet Kondensation von Wasserdampf statt, und die Zustandsgleichung sollte dies berücksichtigen. Vor allem jedoch sind Rayleigh-Taylor-Instabilitäten die Ursache für das frühzeitige Ende der Simulation mit SOVA. Volume-of-Fluid Methoden sind nur sinnvoll, solange noch nicht ein Material vollkommen in kleine „jet-sam“ oder „flotsam“ genannte Teile aufgelöst ist, wie hier der Impaktor. Die Diffusion der Materialien ist so stark, daß eine andere Advektionsmethode benutzt werden sollte, zumindest für den Impaktor. Über den von [Gisler u. a. \(2003\)](#) verwendeten Algorithmus ist leider nichts bekannt.

5.3 Der Chicxulub-Krater

Für den Chicxulub-Krater passende Berechnungen wurden schon im Abschnitt 5.1 dargestellt. Leider ist die Multi-Material-Methode SOVA nicht so vielseitig wie CTH ([McGlaun, Thompson, Elrick, 1990](#)), wo mehr als

10 Materialien gleichzeitig simuliert werden können. Dadurch ist es nicht möglich, das Bodenmaterial mit verschiedenen Schichten aus Sedimenten, Wasser, Erdkruste und Mantelmaterial, wie in den Simulationen von [Pierazzo u. a. \(1998\)](#), darzustellen. Dafür ist die Materialgrenzen-Rekonstruktion stabiler, denn z. B. der Materialgrenzen-Plot von [Pierazzo u. a. \(1998\)](#) zeigt nach bereits 3 Sekunden recht chaotische Verhältnisse, was wohl daran liegt, daß nur die wesentlich einfachere SLIC-Methode, im Gegensatz zur hier verwendeten VOF-PLIC-Methode zum Einsatz kam. Auch unterscheiden sich diese Programme (CTH und CSQIII) dadurch, daß sie nur eine einzige Energie-Gleichung für ein gemittelt Material lösen, wobei die Materialien gleiche Temperaturen haben. Dies setzt natürlich temperaturabhängige Zustandsgleichungen voraus. Jedoch ist die Annahme gleicher Temperaturen für alle Materialien in einer Zelle physikalisch nicht so realistisch, wie die hier betrachtete rein adiabatische Wechselwirkung. Dies liegt daran, daß Temperaturangleichung nur durch Wärmeleitung oder Strahlung erfolgen kann, jedoch die typischen inneren Energien der Materialien durch die Stoßwelle erzeugt werden, welche sich in viel kürzeren Zeiträumen ausbreitet. Die typischen Zellendimensionen sind beim Chicxulub-Problem 250 Meter, und Wärmetransport durch Leitung über solch eine Distanz bei plausiblen Modellen dauert wesentlich länger als die gesamte Dauer der Simulation. Weiterhin sei erwähnt, daß die einzigen späteren Simulationen mit CTH in 3D ([Pierazzo und Melosh, 1999](#)) nur etwa 5 Sekunden Zeit umfaßten. Lediglich die frühesten mit CSQIII waren länger, aber auch nur etwa 33 Sekunden ([Pierazzo u. a., 1998](#)). Daher sind die in dieser Arbeit gewonnenen Daten relevant, auch angesichts der Schwierigkeit des hydrodynamischen Problems. Andere Autoren, wie [O’Keefe und Ahrens \(1975, 1976\)](#), haben mit skalierten Problemen gearbeitet, in denen die Froude-Zahl, welche den Einfluß der Gravitation parametrisiert, einer künstlich um mehrere Größenordnungen erhöhten Gravitationsbeschleunigung entsprach, um so z. B. die Rückprall-Bewegung (rebound) auf dem Mond mit Hilfe von nur 20 charakteristischen Zeiten unter Benutzung des Programms HELP von [Hagemann und Walsh \(1970\)](#) zu studieren zu können. Lediglich [Gisler u. a. \(2003\)](#) haben in einer Simulation eines Ozean-Einschlags über wesentlich längere Zeiten mit Multi-Material-Hydrodynamik simuliert. Die Krater-Kollaps-Modelle, wie z. B. [Wünnemann und Ivanov \(2003\)](#) mit Hilfe von SALE, siehe auch [Collins \(2002\)](#) rechneten zwar über einen längeren Zeitraum, machten aber unrealistische Anfangsannahmen, wie einen vollkommen leeren transienten Krater, um so die Behandlung von Materialien mit sehr unterschiedlichen Dichten und anderen Eigenschaften zu vermeiden.

Eine Konsequenz der Simulation ist, daß der Einschlag eines basaltischen Asteroiden mit einer Dichte von $\sim 2.7 \text{ gcm}^{-3}$ einen transienten Krater von

ungefähr 80 km Durchmesser bildet, siehe Abb. 5.11, nach einer Zeit von ~ 50 Sekunden. Es sei dazu bemerkt, daß [Pierazzo u. a. \(1998\)](#) immer ein dichteres Material, Dunit, für den Asteroiden annahmen, was aber mehr für den Erdmantel typisch ist (darin bestand das technische Problem, denn der Mantel sollte nicht mit einem weiteren Material modelliert werden). Die hier verwendete Dichte ist typisch für Basalt, und damit realistischer. Der Durchmesser des Rechengebiets war dabei 250 km, um Störungen durch Randbedingungen zu unterdrücken, trotz dieser Reflexionen ist der Durchmesser des transienten Kraters für diese Parameter (20 km/s Einschlagsgeschwindigkeit bei vertikaler Richtung) davon unabhängig, denn die reflektierte Welle ist bei 50 Sekunden noch nicht so weit einwärts gelaufen. Die Größe des transienten Kraters bei der Verwendung eines „konventionellen“ Verfahrens mit künstlicher Viskosität ist jedoch viel kleiner als die im Rechenbeispiel 2 aus Kapitel 4, siehe Abschnitt 4.3.7. Dort war ebenfalls in Zylinderkoordinaten simuliert worden, jedoch mit einer „diffusen“ Methode für die Material-Advektion. Die Einschlagsgeschwindigkeit betrug sogar weniger, nur 15 km/s. Trotzdem hat der transiente Krater einen Durchmesser von nahezu 120 Kilometern (allerdings wurde dort kein litostatisches Gleichgewichts mit Gravitation als Anfangszustand berücksichtigt). Obwohl die Einschlagsenergie bei 20 km/s um einen Faktor 1.77 höher lag, ergab die Methode mit künstlicher Viskosität (SOVA) also einen um 1/3 kleineren transienten Krater. Der Grund hierfür ist wohl die numerische Dissipation der Stoßwellen-Energie aufgrund numerischer Viskosität in SOVA. Da auch Verfahren wie HELP ([Hagemann und Walsh, 1970](#)), CSQIII ([Thompson, 1988](#)) und CTH ([McGlaun, Thompson, Elrick, 1990](#)) künstliche Viskosität enthalten, liegt bei allen vorangegangenen Simulationen die selbe Unsicherheit vor. Weiterhin sind Verfahren mit versetztem Gitter für die Geschwindigkeit (außer den genannten Verfahren zählt auch SALE, [Hirt, Amsden, Cook \(1997\)](#) dazu), wie es in SOVA vorkommt, nicht in der Lage, gleichzeitig Impuls und Gesamt-Energie bei der Impuls-Advektion richtig zu erhalten ([Benson, 1992](#); [Shuvalov, 1999](#)). Diese Probleme lassen nur den Schluß zu, daß für solche Parameter wie die Kratergröße am Ende nur Godunov-Methoden verlässliche Werte liefern können. Die hier entwickelte Methode mit VOF-PLIC-Advektion besitzt leider noch nicht die Vielseitigkeit von SOVA (d. h. keine Zylinderkoordinaten), aber man kann mit den Testergebnissen der „diffusen“ Methode aus Kapitel 4 vergleichen. Über die neueste, von [Gisler u. a. \(2003\)](#) verwendete Methode SAGE ist leider nichts bekannt, nur daß es auch eine Godunov-Methode ist, es wurde nicht im Los Alamos National Laboratory, sondern von der Firma SAIC entwickelt, siehe [Gisler u. a. \(2003\)](#). Der Algorithmus ist bedauerlicherweise kein Gegenstand wissenschaftlicher Diskussionen (und bleibt es wohl noch einige Zeit).

Weiterhin ist aus der Geschwindigkeitsverteilung verständlich, daß man in weiter entfernten Regionen im Auswurfsmaterial nur noch einen recht geringen Teil des Asteroiden gefunden hat, denn der Hochgeschwindigkeitsanteil (siehe Abb. 5.7) des Asteroidenmaterials hat gegenüber dem des Bodenmaterials eine um etwa 2.5 Größenordnungen geringere Masse. Man vergleiche dazu beispielsweise den Anteil des jeweiligen Materials mit Geschwindigkeiten zwischen 2.5 bis 6 km/s in Abbildung 5.7. Daher ist die Iridium-Anomalie um etwa diesen Faktor geringer als für typisches Meteoritenmaterial. Der Grund liegt in der Geometrie der Expansion der beim Einschlag früh verdampfenden Materie, die das „Projektile“ für längere Zeit „einsperrt“. Diese Phänomene kann sich bei schrägen Einschlägen ändern, und ist wegen der Zylindergeometrie beim vertikalen Einschlag stärker ausgeprägt. Bei schrägen Einschlägen würde die Zusammensetzung des Auswurfsmaterials, und in Konsequenz die Iridium-Anomalie richtungsabhängig.

5.4 Ein künstlicher Einschlag auf einem Kometen

Am 4. Juli des Jahres 2005 wird die Satellitenmission Deep Impact der NASA ein Projektil aus etwa 370 kg (ursprünglich 450 kg geplant) Kupfer mit einer Geschwindigkeit von 10 km/s auf den Kometen 9P/Tempel-1 schießen. Der Vorgang wird aus sicherer Distanz (einige hundert Kilometer) mit Hilfe von optischen Instrumenten (Kamera und Spektrometer) aufgenommen. Diese Raumfahrtmission hat das Ziel, den dabei entstandenen Krater abzubilden, und das Auswurfsmaterial spektroskopisch zu charakterisieren (A'Hearn, 1999). Die charakteristische Zeitskala des Eindringens ist so kurz, daß (auch aufgrund der Entfernung) keine Aufnahmen möglich sind, also sind zunächst theoretische Abschätzungen notwendig, um das Experiment zu interpretieren.

Nur die Godunov-Methode ist dazu in der Lage, ein Material wie Vakuum zu behandeln. Bei SOVA würde, sobald im Kontrollvolumen einer Kante keine Masse mehr vorhanden ist, der Algorithmus in Schwierigkeiten kommen. In Godunov-Methoden sind alle Zustandsvariablen zellenzentriert. Die Geschwindigkeit an der Zellgrenze ergibt sich aus einem Riemann-Problem. Dabei kann durchaus an einer Seite der Grenze Vakuum sein, dann ist die Lösung eine Verdünnungswelle mit dem Druck $p^* = 0$ der Kontakt-Unstetigkeit. Mit einer geeigneten Logik lassen sich unnötige Berechnungen in Zellen, die kein Material enthalten, vermeiden. Die Volume-of-Fluid-Methode wird wieder zur Advektion des Materials benutzt. Der vorliegende Algorithmus verwen-

det bisher nur ein Material+Vakuum, also kann der Impaktor auch nur aus dem selben Material wie der Komet bestehen. Hier wird Eis gewählt, beschrieben über eine Variante der Tillotson-Gleichung, die so erweitert wurde, daß dem „kalten“ Druck $p_c(\rho) := A(\rho/\rho_0 - 1) + B(\rho/\rho_0 - 1)^2$ der Tillotson-Formulierung eine „kalte“ Energie ϵ_c zugeordnet ist, welche sich aus

$$d\epsilon_c(\rho) = \frac{P_c(\rho)}{\rho^2} d\rho, \quad (5.7)$$

ergibt. Die Tillotson-Gleichung wird so verallgemeinert, daß der Druck der kondensierten Phase

$$P = a + \frac{b}{\frac{\epsilon - \epsilon_c(\rho)}{\epsilon_0} (\rho/\rho_0)^{-2} + 1} \rho(\epsilon - \epsilon_c(\rho)) + p_c(\rho), \quad (5.8)$$

ist. Leider besitzt die „heiße“ Phase der Tillotson-Gleichung für Eis mit den in der Literatur (Melosh, 1989; Benz und Asphaugh, 1999) veröffentlichten Parametern einen sogenannten van-der-Waals-loop, d. h. negatives Quadrat der Schallgeschwindigkeit, und dies beim ungefähr 0.7-fachen der Normaldichte. Diese physikalische Unzulänglichkeit ist im gesamten Energiebereich, sogar über der Schwelle für vollständige Verdampfung ϵ_{cv} vorhanden. Deshalb wurde davon abgesehen, in der Zwischenregion $\epsilon_{iv} \leq \epsilon \leq \epsilon_{cv}$ die „kalte“ und „heiße“ Phase mit einander in der üblichen Weise zu kombinieren, und es wird nur mit dem Druck nach der obigen Formel gerechnet. So ist die Zustandsgleichung nur eine Art von Mie-Grüneisen-Approximation (der Grüneisen-Parameter ist Energie-abhängig!). Weiterhin wird bei Dichten unterhalb $\sim 0.8\rho_0$ der „kalte“ Druck Null gesetzt und ϵ_c auf dem Wert belassen, der bei dieser Dichte auftritt. Dies simuliert das Zerreißen der Materie. Aufgrund der noch vorhandenen inneren Energie ist die Schallgeschwindigkeit so niemals unphysikalisch und nähert sich dem Wert für eine Gasphase.

Das Projektil wurde als eine Kugel mit einem Radius von 0.4584 Metern simuliert, dies entspricht der Masse des ursprünglich mit 450 kg geplanten Impaktors. Das Gitter hatte 200 x 200 Zellen und erfaßt ein Gebiet von 20 Metern Kantenlänge. Die Normaldichte von Eis ist als 0.917 gcm^{-3} angenommen, und es wurden folgende von Benz und Asphaugh empfohlene Tillotson-Parameter verwendet: $a = 0.3$, $b = 0.1$, $A = B = 9.47 \text{ GPa}$, $\epsilon_0 = 10 \text{ kJ/g}$. Die weiteren Parameter $\epsilon_{cv} = 3.04 \text{ kJ/g}$ und $\epsilon_{iv} = 0.773 \text{ kJ/g}$ sind nicht direkt relevant, da keine Interpolation mit der Formel für den Druck in der „heißen“ Phase durchgeführt wird, sie dienen aber als Interpretationshilfe, ob das Material vollständig verdampft, flüssig oder kalt ist. Kupfer hätte die viel höhere Dichte von 8.9 gcm^{-3} und der charakteristische Radius wäre weitaus kleiner, daher müssen die simulierten Zeiten auf die charakteristische Zeit für solch einen Impaktor bezogen werden, der hätte nur ~ 0.229 Meter

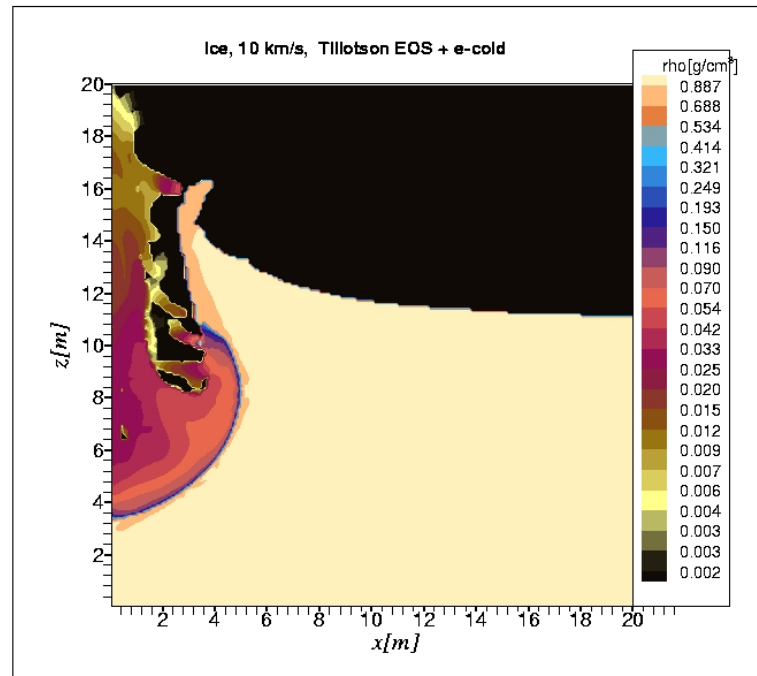


Abbildung 5.18: Dichte des Kometenmaterials nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit.

Radius, die zugehörige charakteristische Zeit ist 45.88 Mikrosekunden. Nach einigen Millisekunden beginnt am Boden des sich formenden Kraters ein Teil der Materie auszutreten, die typische Energie liegt dabei über ϵ_{iv} . Die nach 9.7 Millisekunden berechneten Verteilungen von Dichte, Druck und innerer Energie zeigen die folgenden Abbildungen 5.18-5.20. Dabei handelt es sich für den realen Impaktor schon um etwa 211 charakteristische Zeiten (etwa halb soviel für den Impaktor aus Eis, da dieser etwa halb so groß ist)! Dies ist also schon eine späte Phase der Kraterentstehung, und man könnte glauben, der transiente Krater wäre vollständig ausgebildet. Der entstehende Krater hat sich offensichtlich mit Material geringer Dichte angefüllt. Die zugehörige innere Energie zeigt hohe Werte, über ϵ_{iv} , vgl. Abb. 5.20. Der Druck ist nur im Bereich positiver Werte abgebildet, um den Variationsbereich zu zeigen. Es sind nur noch sehr kleine Werte vorhanden, außer im Bereich des ausgetretenen Materials innerhalb des Kraters und entlang der Achse. Es gibt ganze Regionen, wo der Druck negative Werte hat (nicht gezeigt). Eine physikalische Interpretation des beobachteten Vorgangs wäre, daß man relativ

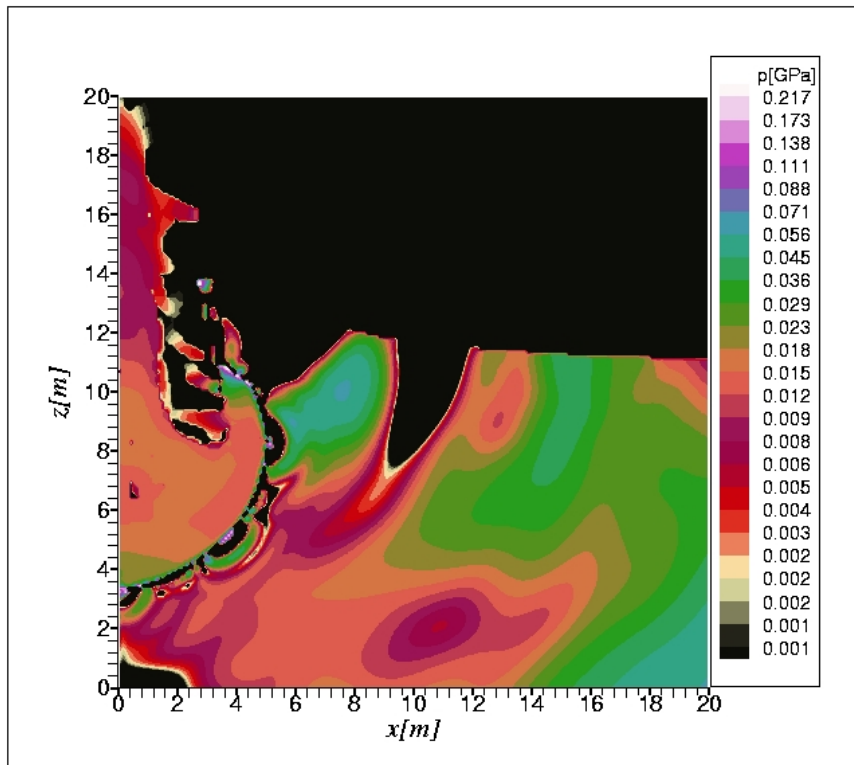


Abbildung 5.19: Druck nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis, 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit. Dargestellt ist nur der Bereich positiver Werte.

spät einsetzende Entwicklung von Gas sieht. Es ist aber auch möglich, daß es sich um Spallationsprodukte handelt. Die Frage muß noch mit alternativen Methoden untersucht werden. Auf jeden Fall ist es interessant, daß hier eine relativ späte Entwicklung stattfindet, welche nach mehr als 100 charakteristischen Zeiten noch nicht aufhört, sondern der Bereich mit etwas geringerer Dichte (blau gefärbt) um den transienten Krater beginnt sich auszuweiten. Die Materie begann zuerst im unteren Teil des Kraters auszutreten, und dies setzt sich langsam nach oben fort. Leider sind diese Vorgänge trotzdem für die Instrumente an Bord des Satelliten zu schnell und viel zu weit entfernt.

Folgerscheinungen, wie erhöhte Aktivität des Kometen durch Vergrößerung der aktiven Oberfläche, den Auswurf von Eis- und Staubkörnern, die Temperaturerhöhung durch den Einschlag, sowie die Helligkeitszunahme wegen der höheren Staubaktivität sollten durch die Instrumente an Bord und

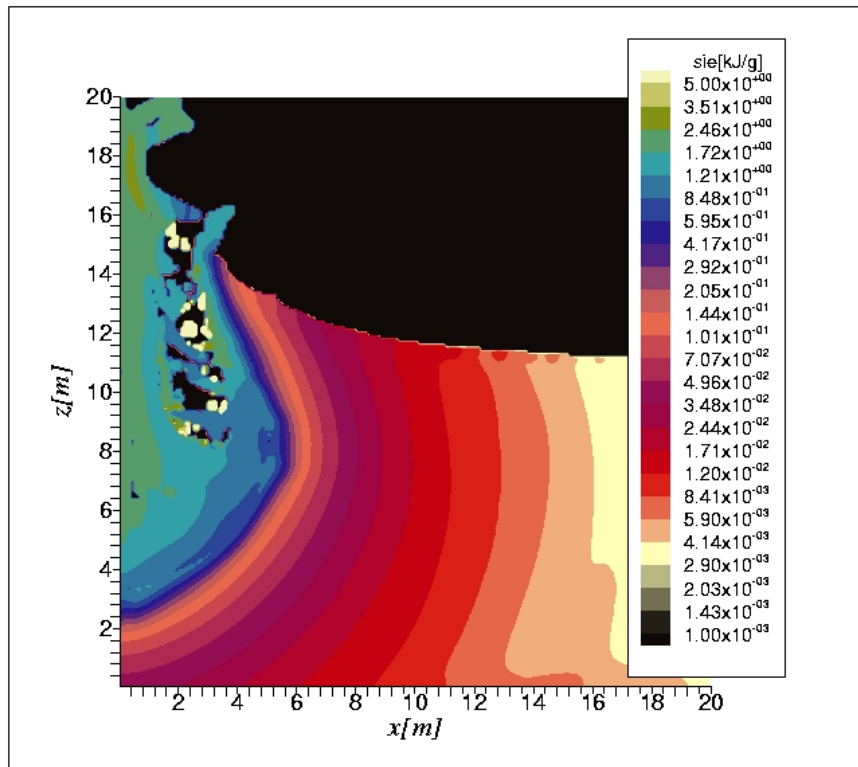


Abbildung 5.20: Innere Energie nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis, 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit. Dargestellt ist nur der Bereich positiver Werte.

auch von Teleskopen auf der Erde gut zu beobachten sein.

Die letzte Abbildung 5.21, stellt die Geschwindigkeiten dar, überall sind die Werte sehr groß gegenüber der gravitativen Fluchtgeschwindigkeit, letztere ist um mehrere Größenordnungen kleiner, als die untere Grenze der hier gezeigten Werte. Die Ejekta nahe der Achse sind recht schnell, bis zu 3 km/s. Weiter unterhalb und in Nähe des Kraterrandes werden die Geschwindigkeiten kleiner. Es sieht so aus, als wenn eine Gasexpansion stattfindet, wobei Druckkräfte den Geschwindigkeitszuwachs nach außen hervorrufen. Eine Interpretation der Dimensionen des endgültigen Kraters ist mit Hilfe dieser Simulation noch nicht möglich, jedoch wird der transiente Krater nach den hier simulierten 211 charakteristischen Eindringzeiten (bezogen auf einen Impaktor aus Kupfer, s.o.) erreicht sein.

Geeignete experimentelle Vergleichsdaten wurden von [Burchell u. a.](#)

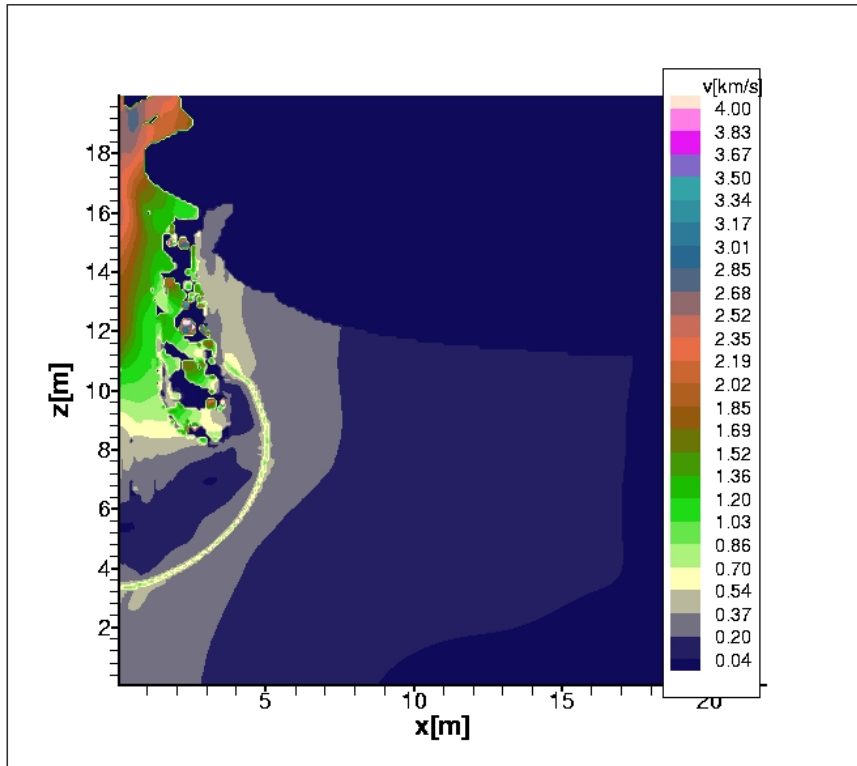


Abbildung 5.21: Betrag der Geschwindigkeit nach 9.7 Millisekunden, für Einschlag eines Impaktors aus Eis, 0.458 m Radius, mit 10 km/s Geschwindigkeit.

(2002) bei etwa 7 km/s mit $D = 1$ mm Kupfer-Projektilen in porösem Eis (50%) gewonnen. Es ergab sich eine charakteristische Morphologie mit einer zentralen „Grube“, umgeben von einer etwa 3-mal größeren Zone geringer Tiefe. Die Autoren vermieden bewusst, diese Zone als Krater zu bezeichnen und wählten den Begriff Spallationszone. Falls die Experimente Extrapolationen zulassen, ergeben damit 1-mm-Projektile etwa 65mm Durchmesser der Spallationszone bei ~ 10 km/s, soweit die Daten grafisch aus Abb. 3 von Burchell u. a. (2002) extrapoliert werden können. Bezogen auf einen Kupfer-Impaktor von 0.229 m Radius resultiert dann ein äquivalenter Durchmesser der Spallationszone von 29.8 m für Deep Impact. In der Simulation reicht das Gebiet hoher Auswurfgeschwindigkeiten bis zu einem Durchmesser von etwa ~ 34 m, danach erkennt man einen Abfall auf Werte unter ~ 40 m/s, siehe Abb. 5.21. Die Tiefe der Spallationszone im Experiment mit 7

km/s von Burchell u. a. (2002) ist wesentlich geringer als die Kratertiefe, letztere wird nur innerhalb der zentralen „Grube“ erreicht, wie aus Abb. 2 (Burchell u. a. , 2002) hervorgeht. Die Oberfläche liegt in der numerischen Simulation bei $z = 11$ m, sodaß am Ende die Tiefe hier also etwa 8 m beträgt, und der transiente Kraterdurchmesser ist ~ 9.5 m. Die Experimente von Burchell u. a. (2002) erreichten Tiefen von ~ 20 mm, wobei mit höherer Geschwindigkeit (> 5 km/s) keine weitere Tiefenzunahme beobachtet wurde. Auf die Simulation bezogen, entspricht dies 9.16 m, ein recht geringfügiger Unterschied angesichts der Unsicherheiten im Experiment, sowie der Tatsache, daß es sich um poröses Eis handelte. Die Berechnung kann Spallation nicht sichtbar machen, dazu wäre angesichts typischer Geschwindigkeiten im Bereich einiger 100 m/s eine wesentlich längere Rechenzeit von mindestens $\sim (10m/100m/s) = 100$ ms nötig, außerdem enthält die Godunov-Methode noch kein Materialmodell. Eine Interpretation der experimentellen Morphologie ergibt sich, wenn man die zentrale „Grube“ mit dem transienten Krater identifiziert. Wesentlich länger als die simulierten ~ 10 ms findet in oberflächennahen Schichten Spallation statt, solange $u^2 > S/\rho$ für die Geschwindigkeitsamplitude gilt, wobei S die Spannungsfestigkeit bezeichnet. Wenn die Festigkeit des Kometenmaterials $\sim 10^5 Pa$ beträgt, (dies ist schon etwa eine Größenordnung unter der von Wassereis, siehe Tauber und Kührt (1987)) so ergibt sich $u > \sim 10$ m/s. Dieser Wert liegt immer noch etwa eine Größenordnung über der wahrscheinlichen gravitativen Fluchtgeschwindigkeit des Kometen, sodaß kaum gravitationsbedingte Begrenzung der Auswurfsbewegung zu erwarten ist, es sei denn, die makroskopische Spannungsfestigkeit wäre etwa 2 Größenordnungen unter der von Wassereis. Das Skalierungsgesetz für den Übergang von Festigkeits-dominiertem zu Gravitations-dominierten Verhalten lautet (Melosh (1989), Gl. 7.7.14)

$$D_{tr} = \frac{C_{tr}S}{g\rho_p^{2/3}\rho_t^{1/3}}, \quad (5.9)$$

hierbei D_{tr} der charakteristische Durchmesser, C_{tr} eine dimensionslose Konstante, und für Basalt beträgt das Produkt $C_{tr}S$ etwa 0.9 MPa, wobei $S \sim 10^8$ Pa ist (Melosh, 1989). Es sei erwähnt, daß diese Formel für den Mond $D_{tr} \sim 220$ m ergibt. Weiterhin ist g die Gravitationsbeschleunigung an der Oberfläche und ρ_p bzw. ρ_t bezeichnen die Massendichte von Impaktor und „Target“. Das Produkt $C_{tr}S$ ist materialabhängig und unbekannt für Kometenmaterial. Die Gravitation an der Oberfläche ist

$$g = \frac{GM}{R^2} = 6.989 \times 10^{-4} m s^{-2} \left[\frac{\rho_t}{g \text{ cm}^{-3}} \right] \left[\frac{R}{2.5 \text{ km}} \right], \quad (5.10)$$

wobei $G = 6.6742 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ die Newtonsche Gravitationskonstante, M die Masse und R den Radius des Kometen bedeuten. Bei einem

angenommenen Radius von 2.5 km, der Dichte von Wassereis und einem Impaktor aus reinem Kupfer ist das Produkt im Nenner der Gl.(5.9) $3 \text{ Pa} / \text{m}$. Falls die Konstante C_{tr} sich für Eis nicht wesentlich ändert, und $S \sim 10^5 \text{ Pa}$ beträgt, so resultiert $D_{tr} \sim 300 \text{ m}$. Andererseits läge bei einer Festigkeit von nur $\sim 10^4 \text{ Pa}$ der Übergangsdurchmesser D_{tr} bei 30 m. Modelle zu thermischen Spannungen, wie das von Tauber und Kührt (1987) können vielleicht jene Untergrenze der Spannungsfestigkeit liefern, auf die es hier ankommt. Ob gravitations-dominiertes Verhalten vorliegt oder nicht - die Größe des transienten Kraters ist davon nicht betroffen. Eine Simulation mit kompressibler Hydrodynamik, konsistenter Zustandsgleichung und im gravitations-dominierten Regime erfordert eine extrem hohe Anzahl von Zeitschritten, da die CFL-Bedingung nicht verletzt werden darf. Das gerechnete Beispiel hatte die Gitterauflösung $\Delta x = 0.1 \text{ m}$, und die Untergrenze der Ausbreitungsgeschwindigkeit ist die Schallgeschwindigkeit von intaktem Eis (3.2 km/s), für die Zustandsgleichungs-Parameter von Benz und Asphaugh (1999). Bei einer CFL-Zahl von 0.5 verlangt so 1 Sekunde simulierter Zeit etwa 640000 Schritte, unabhängig von der konkreten numerischen Methode. Verfahren mit künstlicher Viskosität würden sehr große Schwierigkeiten bereiten, da dann die Energie hauptsächlich numerisch dissipiert wird. Dies war auch der Anlaß, in dieser Simulation eine Godunov-Methode zu verwenden.

Kapitel 6

Schlußbemerkungen

6.1 Zusammenfassung

Einschlagskrater sind die vorherrschende Oberflächenformation auf dem Erdmond; die terrestrischen Planeten, Monde der Planeten Jupiter und Saturn, und die Asteroiden sind ebenfalls von Kratern bedeckt. Die dichten Atmosphären von Erde und Venus verhindern, daß kleinere Meteoriten mit Geschwindigkeiten von der Größenordnung der gravitativen Fluchtgeschwindigkeit auf die Oberfläche treffen, aber auch Erde und Venus besitzen größere Krater mit bis zu einigen hundert Kilometern Durchmesser. Astronomische Beobachtungen führten zur Entdeckung von Asteroiden, welche die Bahnen der Planeten kreuzen, ihre Einschlagshäufigkeit wurde durch die Arbeiten von [Öpik \(1951\)](#) berechenbar. Neuere Entwicklungen in der Himmelsmechanik, wie z. B. die Entdeckung von Chaos im Asteroidengürtel ([Wisdom , 1983](#)), halfen den Ursprung von Planeten-Kreuzern unter den Asteroiden zu verstehen. Gegenwärtige Beobachtungen erdnaheer Objekte (NEOs) ergeben, daß Körper von 1 km Durchmesser ungefähr alle 10^6 Jahre die Erdoberfläche treffen. In größeren Zeiträumen erreichen auch bedeutend massivere „Projektilen“ die Erde; so der etwa 10 km große Impaktor, welcher den Chicxulub-Krater vor der Küste von Yucatan gebildet hat ([Alvarez u. a. , 1980](#)). Für etwa 3.9 Milliarden Jahren haben Erde und Mond ein viel häufigeres Bombardement (late heavy bombardement) erfahren ([Hartmann u. a. , 2000](#)), dabei entstanden Einschlagbecken von einigen hundert Kilometern Durchmesser. Durch isotonenchemische Untersuchungen an von den Astronauten mitgebrachten Bodenproben kennt man das Alter dieser Formationen. Daher ist es möglich, Kraterhäufigkeiten zur Altersanalyse der Mondoberfläche zu verwenden, man konnte so die Kraterstatistik „eichen“. Falls die Zeitabhängigkeit des Meteoritenflusses bekannt, und die Krater nicht zu klein sind, um

durch Erosion ausgelöscht zu werden, ist die Kraterdichte ein direktes Maß für das Alter der betreffenden Oberflächenregion. Man versucht gegenwärtig, diese Methoden auf andere planetare Oberflächen zu übertragen, wo Fernerkundungsdaten durch Raumfahrtmissionen gesammelt wurden. Eventuell können Krater auch über die Beschaffenheit der Kruste eines Planeten Auskunft geben. Zumindest sind relative Alter unterschiedlicher Gebiete anhand der Kraterhäufigkeit meßbar, und die Zeitdauer der Entstehung von Oberflächenformen ist teilweise dadurch bestimmbar. Dies gelingt nur insoweit, wie physikalische Vorgänge bei Einschlägen verstanden werden. Numerische Simulation und theoretische Modelle sind die einzigen Möglichkeiten, sie zu verstehen, wo weder Experimente durchführbar, noch geologische Daten vorhanden sind. Wenn geologische Daten der unmittelbaren Umgebung des Kraters vorhanden sind, kann anhand mineralogischer Indikatoren der Maximalwert des Drucks ortsabhängig erhalten werden, dies gelingt jedoch auch bei irdischen Kratern selten. Die beobachtete Morphologie von Kratern in Abhängigkeit vom Material an der Oberfläche, der Gravitation und anderen physikalischen Parametern ist noch nicht gut verstanden. Hinweise auf die Größe und physikalische Beschaffenheit der einschlagenden Körper sind selbst bei gut untersuchten irdischen Kratern nur indirekter Art. Einschläge von erdnahen Objekten (NEOs) sind auch heute noch eine Gefahr für die Biosphäre, die Häufigkeit für $D = 1$ km NEOs wird gegenwärtig auf etwa einen Ereignis pro 10^6 Jahre geschätzt. Betrachtung technologischer Methoden ihrer Abwehr wurden hier nicht angestellt, hierzu stellt die Dissertation von [Kahle \(2005\)](#) Möglichkeiten dar.

Kapitel 2 dieser Arbeit stellt die Grundlagen der physikalischen Vorgänge bei der Kraterentstehung dar. Schwerpunkte bilden die Besonderheiten von Stoßwellen in kondensierter Materie, die Zustandsgleichungen bei hohem Druck, die Gleichungen der Multi-Material-Hydrodynamik, sowie Skalierung und Ähnlichkeit.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Verdampfung bei großen terrestrischen Einschlägen und deren Folgeerscheinungen. Die Hinterlassenschaft von Einschlägen sind nicht nur Krater, sondern auch Kondensate, glasartige Schmelztropfen, die Tektite und andere mineralogische Indikatoren extremer Materialumwandlungen. Sie bedecken große Teile der Mondoberfläche, wurden auf der Erde nachgewiesen und ermöglichen weit entfernt vom Einschlagsort einen Nachweis noch vor der Entdeckung des zugehörigen Kraters, wie im Fall des Chicxulub. Der Chicxulub-Einschlag soll das Massensterben der Arten an der Kreide-Tertiär-Grenze verursacht haben, aber der physikalische Mechanismus hierzu ist noch umstritten ([Pope , 2002](#)). Keines der gegenwärtigen Modelle, in denen Staub und Aerosole eine Rolle spielen, ([Toon u. a. , 1997](#); [Kring und Durda , 2001](#)) leitet deren Eigenschaften aus physikalischen

Prozessen während des Einschlags ab. Daher wird hier die Kondensation kinetisch behandelt, um auch die Kondensat-Größenverteilung zu erhalten. Ergebnis ist, daß die Größenverteilung mehrere Maxima besitzt. Die Ursache dafür liegt darin, daß sich Kondensation während einer schnellen, nahezu adiabatischen Expansion mehrmals wiederholen kann, d. h. der Dampf mehrfach nacheinander übersättigt wird, wobei jeweils eine neue Generation kleinerer Kondensattröpfchen heranwächst. Der thermodynamische Weg bis zur Kondensation wird für verschiedene Zustandsgleichungen untersucht. Schrittweise, beginnend mit einem van der Waals Gas für die Verdampfungsprodukte von Mg_2SiO_4 , bis hin zu einem aus 183 molekularen und 26 atomaren Teilchensorten im chemischen Gleichgewicht zusammengesetzten Gas werden hydrodynamische Berechnungen zur Expansion der Gaswolke durchgeführt; für die komplizierteste Zustandsgleichung erst später im Kapitel 4. Chemische Gleichgewichte aus vielen Gasen besitzen eine stark veränderliche Wärmekapazität mit Schwankungen bis zum zehnfachen des entsprechenden Wertes von einatomigen Gasen, und kühlen sich nicht so schnell ab, wie ein- oder zweiatomige ideale Gase. Diese Besonderheit ignorierten bisherige Simulationen von Einschlägen völlig, sie kann jedoch eine Rolle bei Entstehung von globalen Waldbränden während des Chicxulub-Einschlags gespielt haben. Weiterhin untersucht Kapitel 3 die chemische Zusammensetzung von Hochtemperatur-Kondensaten, die im Gleichgewicht entstehen, wobei aufgrund der hohen Temperaturen nur flüssige (und keine festen) Lösungen angenommen wurden. In diesen frühzeitig gebildeten Kondensaten sind die siderophilen Platin-Gruppen-Elemente konzentriert, welche zur Entdeckung der Kreide-Tertiär-Schicht aufgrund ihres im Vergleich zur Erdkruste anomal hohen Iridium-Gehalts führten. Solche Kondensate enthalten hauptsächlich reine Metalle, weniger Metalloxide und -Sulphide, und entstehen bei Temperaturen zwischen 3500 und 4000 K; der Druck während der Kondensation beträgt deutlich mehr als eine Atmosphäre. Bei einer ursprünglichen Komposition des verdampfenden Meteoriten entsprechend der eines CI-Chondriten ist der Sauerstoffanteil der entscheidende Parameter, geringe Konzentration fördert Kondensation von Fe-Ni-dominierten Schmelzen, wogegen höhere Werte das Gleichgewicht in Richtung von Ca-Al-Mg und ihren Verbindungen verschieben. Dies ist jedoch nicht die engültige Komposition, beispielsweise der Kreide-Tertiär-Spherulen, sondern die metallischen Tröpfchen werden vermutlich in andere später kondensierende Substanzen eingeschlossen, bis zu dieser Situation wurde nicht gerechnet, zum Teil auch, weil kein geeignetes Lösungsmodell vorlag.

Kapitel 4 leitet numerische Verfahren ab, die später, im Kapitel 5, zur direkten Simulation der Kraterentstehung verwendet werden. Multi-Material-Hydrodynamik ist ein aktives Forschungsgebiet der numerischen Mathema-

tik, und Kapitel 4 der vorliegenden Arbeit stellt eigene Entwicklungen dazu dar. Hydrodynamik mit einer freien Oberfläche, bzw. einer Mediengrenze zur Planetenatmosphäre ist kein Standardfall numerischer Verfahren; hierbei ist die Oberfläche dynamisch, und nicht durch irgendeine einfache Randbedingung zu beschreiben. Teile der Oberfläche können sich ablösen und wieder verbinden, wie beim klassischen Beispiel sich brechender Wasserwellen. Es bestand Bedarf, wenigstens die wesentlichen mathematischen Schritte zur Entwicklung solcher numerischer Methoden zu beschreiben, da kein existierendes Verfahren einfach übernommen werden kann. Die Auswahl der numerischen Verfahren mußte berücksichtigen, daß der Variationsbereich der Zustandsgrößen enorm groß ist. So reichen die Geschwindigkeiten während der Kraterentstehung von mehrfachem Überschall in bezug auf die Schallgeschwindigkeit von Geomaterialien bis hin zu sehr geringen Werten während der Auswurfbewegung. Es treten für Geomaterialien extreme Dichten und Drücke auf, und die Materie befindet sich teilweise in verschiedenen Aggregatzuständen, wobei auch die Kompressibilität an Materialgrenzen um drei bis vier Größenordnungen variiert. In dieser Arbeit werden zwei verschiedene Eulersche Verfahren mit Volume-of-Fluid Rekonstruktion von Materialgrenzen untersucht, beide lösen die selben physikalischen Gleichungen. Jedes Material hat eine unabhängige spezifische innere Energie, sodaß insgesamt soviel Energie-Bilanzgleichungen wie Materialien auftreten, im Unterschied, beispielsweise zu CTH (McGlaun, Thompson, Elrick, 1990) oder SAGE (Gisler u. a., 2003). Das erste hier entwickelte Verfahren ist ein Godunov-Schema, es ist zeitlich explizit, konservativ und alle Zustandsvariablen sind zellenzentriert. Das zweite Verfahren ist zeitlich implizit, mit künstlicher Viskosität, und ähnelt ansonsten CTH (McGlaun, Thompson, Elrick, 1990), auch in der Verwendung unterschiedlicher Gitter für skalare Zustandsgrößen und Geschwindigkeiten. Bessere Stabilität gegenüber einer expliziten Methode wird durch die Lösung einer tridiagonalen Matrixgleichung erreicht, dies ist ein Vorteil gegenüber CTH. Der SOVA-Algorithmus (Shuvalov, 1999), wurde dabei wesentlich verbessert, so wird eine PLIC (piecewise linear interface construction) Advektionsmethode für Zylinderkoordinaten eingeführt, während das ursprüngliche Verfahren die primitive SLIC-Advektionsmethode geringerer Genauigkeit hatte. Ab drei Materialien mußte dazu ein Algorithmus zur Materialgrenzen-Ordnung entwickelt werden, dies ist ein eigenständiger Beitrag der Arbeit, wie die VOF-PLIC Advektion in Zylinderkoordinaten, letztere ist geometrisch exakt (die Originalmethode in SOVA ist nicht publiziert). Die Materialgrenzen-Ordnung ist genauso in der Godunov-Methode realisiert. Weiter wurden Erweiterungen für SOVA in sphärischen Koordinaten dargestellt; dies wird in Kapitel 3 verwendet. Ebenso sind Teile der Godunov-Methode eigenständige Entwick-

lungen, wie die Behandlung der Energie-Gleichungen, der Riemann-Löser, und die Advektionsmethode, da mit der Publikation von [Miller und Puckett \(1996\)](#) bisher insgesamt nur ein vergleichbares Verfahren für sehr spezielle Mie-Grüneisen-Zustandsgleichungen veröffentlicht wurde. Kapitel 4 enthält auch numerische Testprobleme. Geometrische Advektionsfehler, d. h. Volumenfraktionen unter Null und über Eins nach dem Advektionsschritt, sind nicht vorhanden, auch wegen einer speziellen Methode zur Lösung der kubischen Gleichung im Problem der Rekonstruktion in Zylinderkoordinaten. Dadurch ist die Stabilität hoch, und die Programme sind in der Lage, mit sehr hohen Gitterauflösungen zu arbeiten. Unvermeidliche Fehler im Materialvolumen nach der VOF-Rekonstruktion liegen nur eine Größenordnung über der Maschinengenauigkeit. Die Implementation erfolgte in double precision, während die Originalmethode ([Shuvalov , 1999](#); [Shuvalov, Artem'eva und Kosarev , 1999](#)) lediglich real-Genauigkeit hat. Stoßwellen werden von beiden Verfahren gut approximiert, wobei allerdings die Godunov-Methode weitaus bessere Ergebnisse zeigte. Für Einschlags-Probleme laufen beide Verfahren bisher etwa ~ 100 charakteristische Zeiten, bevor durch Materialgrenzen-Instabilität und den dann teilweise gemischt hyperbolisch-elliptischen Charakter des Problems Schwierigkeiten auftreten.

Im Kapitel 5 der Arbeit werden Modellprobleme gelöst, so der Einschlag eines Asteroiden im tiefen Ozean, die Entstehung des Chicxulub-Kraters und der Einschlag im Kometen Tempel-1 während der Mission Deep Impact. Im Fall von terrestrischen Einschlägen offenbarte sich eine Art „confinement“ des expandierenden „Projektils“ durch verdampfendes Bodenmaterial. Das verhindert zunächst eine freie Expansion des dichten Gases des bei diesen Geschwindigkeiten verdampften Asteroiden, und relativiert dadurch bestimmte Annahmen zur Dynamik von Verdampfungsprodukten im Kapitel 3. Außerdem gab der Impaktor fast seine gesamte ursprüngliche Energie ab, bevor er eine Aufwärtsbewegung begann. Dies sieht man in der „diffusen“ Variante ohne Materialgrenzen-Rekonstruktion nicht, einem der Rechenbeispiele in Kapitel 4, siehe Abschnitt 4.3.7. Weiterhin wurde zu bestimmten Zeitschritten für jede Materialsorte die Geschwindigkeitsverteilung, kumulativ in der Masse, ausgegeben, sowie analoge Verteilungen für die spezifische innere Energie. Das erlaubt beispielsweise Betrachtungen, wieviel Masse einer bestimmten Materialsorte ausreichend spezifische Energie für Phasenübergänge hat. Der Vorteil der Godunov-Methode liegt im Fehlen numerischer Viskosität, dies zeigt sich an im Vergleich zu SOVA geringen Energie-Verlusten. Daher sind die Dimensionen der transienten Krater mit SOVA wahrscheinlich noch zu klein; der Energieverlust aufgrund numerischer Viskosität ist erheblich. Leider gelang es nicht, die Godunov-Methode für Zylinderkoordinaten weiterzuentwickeln. Außerdem zeigte sich, daß sie gegenüber SOVA weniger

robust und viel aufwendiger ist, wegen der iterativen Lösung des Riemann-Problems. Bei dem Einschlag in den Ozean hatte bereits nach einer Sekunde eine Wassermasse von etwa dem hundertfachen der des Asteroiden eine Geschwindigkeit von mehr als 800 m/s. Da der Ozean-Einschlag eines Asteroiden mit 1 km Durchmesser nur für 40 charakteristische Zeiten, d.h. 2 Sekunden, simuliert wurde, konnten keine Kollapsbewegungen des Wassers sichtbar gemacht werden. Letzteres erfordert erheblich längere Rechenzeiten, während derer u. a. die Randbedingungen des Gebiets ein Problem darstellen. Man müßte auch das Gebiet stark vergrößern, da rein durchlässige Randbedingungen ohne Reflexion mit SOVA nicht erreichbar waren. Die Simulationen können nicht wesentlich über den Zeitpunkt hinausgeführt werden, wo sich das „Projektile“ durch Rayleigh-Taylor-Instabilitäten vollkommen aufzulösen beginnt. Die Volume-of-Fluid Methode kann nur dann Materialien trennen, wenn die Strukturen der Materialgrenzen nicht wesentlich kleiner als die Gitterauflösung werden, dies ist ein Hindernis, längere Zeiten zu erreichen. Die Simulation des Einschlags eines Raumflugkörpers in einen Kometen mit 10 km/s ist zwar bis zu einer simulierten Zeit von ~ 211 charakteristischen Zeiten (10 ms) vorangekommen, jedoch liegt dies noch um mehrere Größenordnungen unter der Entstehungszeit eines eventuell gravitationsdominierten Kraters. Wird mit Laborexperimenten von [Burchell u. a. \(2002\)](#) verglichen, ist deutlich, daß die Simulation wahrscheinlich nur den tieferen Teil des im Labor erzeugten Kraters beschreibt, von [Burchell u. a. \(2002\)](#) als zentrale Grube bezeichnet. Die zu wesentlich späteren Zeiten einsetzende Spallation kann noch nicht gesehen werden.

6.2 Ausblick

Einige Verbesserungen der Verfahren sind notwendig, um Kraterentstehung tatsächlich bis zum Ende simulieren zu können. Das robustere Verfahren ist derzeit SOVA. Es muß versucht werden, Behandlung von deviatorischen Spannungen und ein elastisch-plastisches Materialmodell in SOVA zu integrieren. Ebenso können zu den in der Simulation erhaltenen Daten noch Temperaturen berechnet werden. Entsprechende thermodynamisch konsistente Erweiterungen der verwendeten Zustandsgleichungen sind möglich. Alternative Zustandsgleichungen sind ebenfalls zu betrachten, die Materialdatensammlung dementsprechend zu erweitern. Dabei haben auch experimentelle Daten von Geomaterialien Bedeutung. Die Godunov-Methode in der Variante mit Vakuum als zweitem Material sollte erweitert werden, d. h. für mehr Materialien und Zylinderkoordinaten. Eine Verbindung von Riemann-Löser und Gravitation muß erreicht werden. Z. B. könnte eine Transformation

der Godunov-Methode in ein beschleunigtes Bezugssystem und anschließende Rücktransformation der numerischen Flußfunktion versucht werden, um Gravitationskräfte zu berücksichtigen; Gravitations-Quellterme außerhalb des Riemann-Lösers führen zu Schwingungen im hydrostatischen Gleichgewicht. Überlegungen zu Modellen poröser Materialien sind ebenso von Bedeutung in zukünftigen Anwendungen für kleine Körper.

6.3 Anmerkung zur Literaturliste

Einige spezielle Literatur, die hier aufgelistet ist (unveröffentlichte Sandia Reports, Manuale von HELP, CSQIII) wurde **nicht** vom Autor dieser Dissertation gelesen, sie ist nicht frei zugänglich. Es wäre aber auch nicht üblich, die entsprechenden Zitate zu unterschlagen, wo Programme oder Reports richtungweisende Bedeutung hatten, und weil sonst die Entwicklung lückenhaft dargestellt wäre. Es ist zu hoffen, daß zumindest einige der entsprechenden Quellen in der Zukunft allgemein zugänglich sein werden, oder daß, wer diese Arbeit liest, die entsprechenden Quellen erhalten kann. Weiterhin kann der Autor keine Garantie übernehmen, daß bei einigen Artikeln aufgelistete Web-Adressen frei zugänglich bleiben. Ebenso sind Zusätze wie „to be published“, „submitted“, in einigen Fällen nicht mehr aktuell, wenn diese Arbeit gelesen wird, bzw. kann sich der Titel verändert haben.

6.4 Danksagung

Prof. Uwe Motschmann hat diese Arbeit mit seiner hilfreichen Kritik unterstützt, und seine praktische Erfahrung mit numerischer Hydrodynamik, Thermodynamik und Stoßwellen mit mir geteilt. Ekkehard Kührt hat mir in schwierigen Phasen dieser Arbeit geholfen, mich auf den praktisch möglichen Teil zu konzentrieren, und eine Vielzahl von Versionen der einzelnen Kapitel korrigiert. Ihm und Jörg Knollenberg danke ich auch für Diskussionen zu Einschlägen auf Kometen. Prof. Gerhard Neukum weckte mein Interesse an Meteoriten- und Asteroiden-Einschlägen, ohne ihn wäre diese Arbeit nie begonnen worden. Boris A. Ivanov danke ich für unzählige interessante Diskussionen während seiner Forschungsaufenthalte am DLR. Er gab mir u. a. den FORTRAN-Code der ANEOS Zustandsgleichung, wichtige Materialdaten, und seine Version des SALE „hydrocodes“. H. J. Melosh machte durch seine Initiative im Rahmen der IMPACT Workshops der European Science Foundation (ESF) die Ein-Material-Variante von SALE allgemein zugänglich, ihm sei nachträglich dafür gedankt. Valeri Schuvalov, seine Kollegen Valeri

Svetsov und Natalia Artem'eva haben mir die Idee ihres SOVA-Algorithmus erläutert, und Valera (Shuvalov) beantwortete geduldig viele E-mails. Mein ehemaliger Kollege Stephan Lenzner lieferte durch seine oft kontroverse Sicht der Dinge manchen Denkanstoß und half mir auch damit, daß er viele numerische Testprobleme mit alternativen Methoden löste.

Literaturverzeichnis

- ABRAHAM, F. F., HOMOMGENEOUS NUCLEATION THEORY. *Advances in theoretical chemistry, Supplement 1, Academic Press, New York* (1974), 1-263.
- A'HEARN, M. F.: DEEP IMPACT *Bull. Am. Astron. Soc.* **31** (1999), 1114.
- ALTWEGG, K., EHRENFREUND, P., GEISS, J., HUEBNER, W. F., AND LEVASSEUR-REGOURD, A.-C., COMETARY MATERIALS: PROGRESS TOWARD UNDERSTANDING THE COMPOSITION IN THE OUTER SOLAR NEBULA. *Sp. Sci. Rev.*, **90 Issue 1/2** (1999), 373-389.
- ALVAREZ, L. W., ALVAREZ, W., ASARO, F., AND MICHEL, H. V., EXTRATERRESTRIAL CAUSE FOR THE CRETACEOUS-TERTIARY EXTINCTION, *Science* **208** (1980), 1095-1108.
- ANDERSON, C. E., AN OVERVIEW OF THE THEORY OF HYDROCODES *Intl. J. of Impact Engng.* **5** (1987), 33-59.
- ASH, R. A., KNOTT, S. F., AND TURNER, G., EVIDENCE FOR THE TIMING OF THE EARLY BOMBARDMENT OF MARS, *Meteoritics* **30, no. 5** (1995), 483.
- BAUM, M., POINSOT, T., AND THEVENIN, D.: ACCURATE BOUNDARY CONDITIONS FOR MULTICOMPONENT REACTIVE FLOWS *J. Comp. Phys.* **116** (1994), 247-261.
- BECKER, R. , DÖRING *Ann. d. Phys.* **24** (1935), 719.
- BEN MOUSSA, B., AND VILA, J. P., CONVERGENCE OF SPH METHOD FOR SCALAR CONSERVATION LAWS *SIAM J. Numer. Anal.* **37, No. 3** (2000), 863-887.
- BENSON, D. J., COMPUTATIONAL METHODS IN LANGRANGEAN AND EULERIAN HYDROCODES *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* **99** (1992), 235-394.

- BENSON, D. J., VOLUME OF FLUID INTERFACE RECONSTRUCTION METHODS FOR MULTI-MATERIAL PROBLEMS *Appl. Mech. Rev.* **55**, No 2 (2002), 151-165.
- BENZ, W., AND ASPHAUGH, E., IMPACT SIMULATIONS WITH FRACTURE *Icarus* **107** (1994), 98.
- BENZ, W., AND ASPHAUGH, E.: CATASTROPHIC DISRUPTIONS REVISITED *Icarus* **142** (1999), 5-20.
- BOTTKE, W. F., NOLAN, M. C., GREENBERG, R., AND KOLVOORD, R. A., VELOCITY DISTRIBUTION AMONG COLLIDING ASTEROIDS. *Icarus* **107** (1994), 255-268.
- BROUWER, D. , AND CLEMENCE, G. M., METHODS OF CELESTIAL MECHANICS. *Academic Press, New York*, (1961).
- BENSON, D. J., AND OKAZAWA, S., CONTACT IN A MULTI-MATERIAL EULERIAN FINITE ELEMENT FORMULATION *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* (2004), to be published.
- BURCHELL, M. J., JOHNSON, E., AND GREY, I. D. S.: HYPERVELOCITY IMPACTS ON POROUS ICE *Asteroids, Comets, Meteors, (Proceedings of the ACM)* , **ESA SP-500** (2002), 859-861.
- BUSHMAN, A. V., INTENSE DYNAMIC LOADING OF CONDENSED MATTER *Taylor & Francis, London*(1993).
- CAMERON, A. G. W., HIGHER-RESOLUTION SIMULATIONS OF THE GIANT IMPACT *Origin of the Earth and Moon (R. Canup, K. Righter, Eds.) Univ. of Arizona Press*, (2000), 133-144.
- CELLINO, A. ZAPPALA, AND FARINELLA, P., THE SIZE DISTRIBUTION OF MAIN-BELT ASTEROIDS FROM IRAS DATA. *Mon. Not. R. astr. Soc.* **253** (1991), 561-574.
- CHIGAY T., YAMAMOTO, T., AND KOZASA, T., FORMATION CONDITIONS OF PRESOLAR TiC CORE-GRAPHITE MANTLE SPHERULES IN THE MURCHISON METEORITE. *Astrophys. J.* **510** (1999), 999-1010.
- COLELLA, P., MULTIDIMENSIONAL UPWIND METHODS FOR HYPERBOLIC CONSERVATION LAWS *J. Comput. Phys.* **87** (1990), 171-200.

- COLLINS, G., NUMERICAL MODELLING OF LARGE IMPACT CRATER COLLAPSE, *Doctoral thesis, Dept. Earth Sc. Engng., Imperial College, London submitted Jan. (2002)*.
- CRAWFORD, D. A., BOSLOUGH, M. B., TRUCANO, T. G. AND ROBINSON, A. C., THE IMPACT OF COMET SHOEMAKER-LEVY 9 ON JUPITER *Shock Waves* **4** (1994), 47-50.
- DAVIS, D. R., CHAPMAN, C. R., WEIDENSCHILLING, S. J., AND GREENBERG, R., COLLISIONAL HISTORY OF ASTEROIDS: EVIDENCE FROM VESTA AND THE HIRAYAMA FAMILIES. *Icarus* **62** (1985), 30-53.
- DEGUCHI, S., GRAIN FORMATION IN COOL STELLAR ENVELOPES. *Astrophys. J.* **236** (1980), 567-576.
- DELALE, C. F. , A COMPARISON OF NUCLEATION THEORIES IN TRANSONIC NOZZLE FLOWS WITH HOMOGENEOUS CONDENSATION. *Institut für Strömungsmechanik Göttingen, Forschungsbericht* **94-37** (1993)
- DE NIEM, D., MULTIPLE STAGES OF CONDENSATION IN IMPACT-PRODUCED VAPOR CLOUDS *Geol. Soc. Amer. Special Papers* **356** (2002), 631-644.
- DE NIEM, D., AND WERNER, S., THE STATIONARY SIZE DISTRIBUTION OF MAIN-BELT ASTEROIDS: COMPARING RECENT OBSERVATION WITH THEORY, *Asteroids, Comets, Meteors, (Proceedings of the ACM)* , **ESA SP-500** (2002), 839-842.
- DILLMANN, A. , MEIER, G. E. A., A REFINED DROPLET APPROACH TO THE PROBLEM OF HOMOGENEOUS NUCLEATION FROM THE VAPOR PHASE. *Journal of Chemical Physics* **94** (1991), 3872.
- DOHNANYI, J.S., COLLISIONAL MODEL OF ASTEROIDS AND THEIR DEBRIS. *J. Geophys. Res.* **74**, No. 10 (1969) 2531-2554.
- DUNCAN, M., QUINN, T., AND TREMAINE, S., THE ORIGIN OF SHORT-PERIOD COMETS, *Astrophys. J.* **328**, (1988), L69-L73.
- ELIEZER, S., HIGH-PRESSURE EQUATIONS OF STATE: THEORY AND APPLICATIONS. PROCEEDINGS OF THE INTERNATIONAL SCHOOL OF PHYSICS ENRICO FERMI, VARENNA ON LAKE COMO, 1989. *North-Holland Publishing Co., Amsterdam*(1991).

- EMEL'YANENKO, V. V., AND BAILEY, M. E., CAPTURE OF HALLEY-TYPE COMETS FROM THE NEAR-PARABOLIC FLUX, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **298**, (1998), 212-222.
- ENGELHARDT, W. VON, LUFT, E., ARNDT, J., SCHOCK, H., AND WEISKIRCHNER, W., ORIGIN OF MOLDAVITES. *Geochim. Cosmochim. Acta*, **51** (1987), 1425-1443.
- EVERHART, E., CLOSE ENCOUNTERS OF COMETS AND PLANETS. *Astron. J.* **74** No 5, (1969), 735-750.
- FABER, J. A., AND RASIO, F. A., POST-NEWTONIAN SPH CALCULATIONS OF BINARY NEUTRON STAR COALESCENCE. III. IRROTATIONAL SYSTEMS AND GRAVITATIONAL WAVE SPECTRA. *Phys. Rev. D (particles and fields)* **65**, issue 8 (2002), 084042-084066.
- FARINELLA, P., VOKROUHLICKY, D. AND HARTMANN, W. K., METEORITE DELIVERY VIA YARKOVSKY ORBITAL DRIFT, *Icarus* **132**, issue 2 (1998), 378-387.
- FERNANDEZ, J. A., DYNAMICAL ASPECTS OF THE ORIGIN OF COMETS, *Astron. J.* **82** No 9, (1982), 1318-1332.
- FRENKEL, YA. I., KINETIC THEORY OF LIQUIDS. *Oxford University Press, Oxford* (1946).
- GINGOLD, R. A., AND MONAGHAN, J. J., SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS: THEORY AND APPLICATION TO NON-SPHERICAL STARS *Mon. Not. R. astr. Soc.* **181** (1977), 375.
- GISLER, G. , WEAVER, R., MADER, CH., AND GITTINGS, M., TWO- AND THREE-DIMENSIONAL SIMULATIONS OF ASTEROID OCEAN IMPACTS *Science of Tsunami Hazards* **21** No 2 (2003) 119-134.
- GHIORSO M. S. , CARMICHAEL I. S. E., RIVERS M. L., AND SACK R. O. THE GIBBS FREE ENERGY OF MIXING OF NATURAL SILICATE LIQUIDS; AN EXPANDED REGULAR SOLUTION APPROXIMATION FOR THE CALCULATION OF MAGMATIC INTENSIVE VARIABLES. *Contributions to Mineralogy and Petrology* **84** (1983), 107-145.
- GHIORSO, M. S., AND SACK, R. O., CHEMICAL MASS TRANSFER IN MAGMATIC PROCESSES IV. A REVISED AND INTERNALLY CONSISTENT THERMODYNAMIC MODEL FOR THE INTERPOLATION AND EXTRAPOLATION OF LIQUID-SOLID EQUILIBRIA IN MAGMATIC SYSTEMS AT ELEVATED

- TEMPERATURES AND PRESSURES. *Contrib. Mineral. Petrol.*, **119** (1995), 187-212.
- GLADMAN, B., DYNAMICS OF SYSTEMS OF TWO CLOSE PLANETS, *Icarus* **106**, issue 1 (1993), 247-263.
- GODUNOV, S. K., A FINITE DIFFERENCE METHOD FOR THE NUMERICAL COMPUTATION OF DISCONTINUOUS SOLUTIONS OF THE EQUATIONS OF FLUID DYNAMICS *Mat. Sb.* **47** (1959), 357.
- GREENBERG, R. AND NOLAN, M. C., DELIVERY OF ASTEROIDS AND METEORITES TO THE INNER SOLAR SYSTEM. *Asteroids II* (R. P. Binzel, T. Gehrels, and M. S. Matthews, Eds.) Univ. of Arizona Press, (1989), 778-804.
- GROSSMAN, L., CONDENSATION IN THE PRIMITIVE SOLAR NEBULA. *Geochim. Cosmochim. Acta* **36** (1972), 597-619.
- GUEYFFIER, D., LI, J., SCARDOVELLI R., AND ZALESKI, S., VOLUME-OF-FLUID INTERFACE TRACKING WITH SMOOTHED SURFACE STRESS METHODS FOR THREE-DIMENSIONAL FLOW *J. Comp. Phys.* **152** (1999), 423-456.
- GUGGENHEIM, E. A., THERMODYNAMICS. AN ADVANCED TREATMENT FOR CHEMISTS AND PHYSICISTS. *North-Holland Publishing Co., Amsterdam*(1957).
- HAGEMANN, L. J., WALSH, J. M. HELP, A MULTIMATERIAL EULERIAN PROGRAM FOR COMPRESSIBLE FLUID AND ELASTIC-PLASTIC FLOWS IN TWO SPACE DIMENSIONS AND TIME *Systems, Science, and Software Report, 3SR-350, vol.1* (1970)
- HALLQUIST, J. O, LS-DYNA THEORETICAL MANUAL *Lawrence Livermore software technology corporation* (1998)
- HARTMANN, W. K., RYDER, G., DONES, L., AND GRINSPON, D., THE TIME-DEPENDENT INTENSE BOMBARDMENT OF THE PRIMORDIAL EARTH/MOON SYSTEM *Origin of the Earth and Moon* (R. Canup, K. Righter, Eds.) Univ. of Arizona Press, (2000), 493-512.
- HEISLER, J., AND TREMAINE, S., THE INFLUENCE OF THE GALACTIC TIDAL FIELD ON THE OORT COMET CLOUD, *Icarus*, **65** , iss. 1 (1986), 13-26.

- HILDEBRAND, A. R., PENFIELD, G. T., KRING, D. A., PILKINGTON, M., JACOBSEN, S., AND BOYNTON, W. V., THE CHICXULUB CRATER: A POSSIBLE CRETACEOUS-TERTIARY BOUNDARY IMPACT CRATER ON THE YUCATAN PENINSULA, MEXICO, *Geology* **19** (1991), 867-871.
- HIRSCH, C., NUMERICAL COMPUTATION OF INTERNAL AND EXTERNAL FLOWS *John Wiley & Sons* (1988)
- HIRT, C. W., AMSDEN, A. A., COOK, J. L., AN ARBITRARY LAGRANGIAN-EULERIAN COMPUTING METHOD FOR ALL FLOW SPEEDS *J. Comp. Phys.* **135** (1997), 203-216.
- HOUSEN, K. R., AND HOLSAPPLE, K. A., ON THE FRAGMENTATION OF ASTEROIDS AND PLANETARY SATELLITES, *Icarus* **84** (1990), 225-253.
- HOWELL, B. P., AND BALL, G. J., A FREE-LAGRANGE AUGMENTED GODUNOV METHOD FOR THE SIMULATION OF ELASTIC-PLASTIC SOLIDS *J. Comp. Phys.* **175** (2002), 128-167.
- IVANOV, B. A., DE NIEM, D., AND NEUKUM, G., IMPLEMENTATION OF DYNAMIC STRENGTH MODELS INTO 2D HYDROCODES: APPLICATIONS FOR ATMOSPHERIC BREAKUP AND IMPACT CRATERING *Intl. J. Impact Engng.* **20** (1997), 411-430.
- JEWITT, D., LUU, J., AND MARSDEN, B. G., 1992 QB1 *IAU Circ. (edited by B. G. Marsden)*, **5611**, **1** (1992).
- JOHNSON, W. E., ANDERSON, C. E., HISTORY AND APPLICATION OF HYDROCODES IN HYPERVELOCITY IMPACT *Intl. J. of Impact Engng.* **5** (1987), 423-439.
- KAHLE, R., MODELLRECHNUNGEN ZUR BAHNBEEINFLUSSUNG ERDNAHER ASTEROIDEN UND KOMETEN, *Doctoral thesis, Dept. Aerospace Engng., Technical University Berlin* submitted Jan. (2005).
- KOKUBO, E., AND IDA, S., OLIGARCHIC GROWTH OF PROTOPLANETS, *Icarus* **178** (1998), 171-178.
- KOKUBO, E., CANUP, R. M., AND IDA, S., LUNAR ACCRETION FROM AN IMPACT-GENERATED DISK *Origin of the Earth and Moon (R. Canup, K. Righter, Eds.) Univ. of Arizona Press*, (2000), 145-162.
- KORYZANSKY, D. G., ZAHNLE, K. J., AND MAC LOW M.-M., HIGH-RESOLUTION SIMULATIONS OF THE IMPACT OF ASTEROIDS INTO THE VENUSIAN ATMOSPHERE II: 3D MODELS *Icarus* **157** (2002), 1-23.

- KRING, D. A., AND DURDA, D. D., TRAJECTORIES AND DISTRIBUTION OF MATERIAL EJECTED FROM THE CHICXULUB IMPACT CRATER: IMPLICATIONS FOR POSTIMPACT WILDFIRES, *J. Geophys. Res.* **107**, No. E8 (2001), 6-1-6-22.
- KYTE, F. T., AND BOHOR, B. F., NICKEL-RICH MAGNESIOWÜSTITE IN CRETACEOUS/TERTIARY BOUNDARY SPHERULES CRYSTALLIZED FROM ULTRAMAFIC, REFRACTORY SILICATE LIQUIDS, *Geochimica et Cosmochimica Acta* **59** (1995), 4967-4974.
- LALLEMAND, M.-H., AND SAUREL, R., PRESSURE RELAXATION PROCEDURES FOR MULTIPHASE COMPRESSIBLE FLOWS *INRIA, Rapport de recherche* N 4038 (2000)1-31.
- LANDAU, L. D. , UND LIFSHITZ, E. M., LEHRBUCH DER THEORETISCHEN PHYSIK BAND V: THERMODYNAMIK. *Akademie Verlag, Berlin* (1983).
- LEE, M., LONGORIA, R. G., AND WILSON, D. E., CAVITY DYNAMICS IN HIGH-SPEED WATER ENTRY, *Phys. Fluids* **9** (3) (1996), 540-550.
- LEE, M. H., ON THE VALIDITY OF THE COAGULATION EQUATION AND THE NATURE OF RUNAWAY GROWTH, *Icarus* **143**, issue 1 (2000), 74-86.
- LEVEQUE R. J., NUMERICAL METHODS FOR CONSERVATION LAWS *Birkhäuser* (1990)
- LEVEQUE R. J., NONLINEAR CONSERVATION LAWS AND FINITE VOLUME METHODS FOR ASTROPHYSICAL FLUID FLOW *Saas-Fee Course on Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow* **187** (1997)
- LEVISON, H. F., AND DUNCAN, M. J., THE GRAVITATIONAL SCULPTING OF THE KUIPER BELT. *Astron. J.* **406**, (1993), L35-38.
- LEVISON, H. F., AND DUNCAN, M. J., FROM THE KUIPER BELT TO THE JUPITER-FAMILY COMETS: THE SPATIAL DISTRIBUTION OF ECLIP TIC COMETS. *Icarus* **127**, issue 1 (1997), 13-32.
- LITTLEFIELD, D., AND ODEN, J. T., IMPLEMENTATION OF ADAPTIVE MESH REFINEMENT INTO AN EULERIAN HYDROCODE. *Texas Institute for Computational and Applied Mathematics, The University of Texas at Austin*,
[http : //www.wes.hpc.mil/faq/tech_reports/tr_00-04.pdf](http://www.wes.hpc.mil/faq/tech_reports/tr_00-04.pdf) (2004), 1-88.
- LOTHE, J. , POUND, G. M., ON THE STATISTICAL MECHANICS OF NUCLEATION THEORY. *Journal of Chemical Physics* **45** (1966), 630.

- LUO, G. Q., AN EQUATION OF STATE FROM COOL DENSE FLUIDS TO HOT GASES FOR MIXED ELEMENTS, *Astrophys. J.* **491** (1997), 366-374.
- MAC LOW M.-M. AND ZAHNLE, K. J., EXPLOSION OF COMET SHOEMAKER-LEVY 9 ON ENTRY INTO THE JOVIAN ATMOSPHERE *Astrophys. J.* **434 part 2** (1994), L33-L36.
- MARGOLIN, L. G., SHASHKOV, M., REMAPPING, RECOVERY AND REPAIR ON A STAGGERED GRID *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* (to be published) **xxx** (2004), xxx.
- MCCLURG, R. B., FLAGAN, R. C., CRITICAL COMPARISON OF DROPLET MODELS IN HOMOGENEOUS NUCLEATION THEORY. *Journal of Colloid and Interface Science* **201** (1998), 194-199.
- MCDONOUGH, W. F., AND SUN, S.-s., THE COMPOSITION OF THE EARTH *Chemical Geology* **120** (1995), 223-253.
- MCGLAUN, J.M., THOMPSON S.L., AND ELRICK, M.G., CTH: A THREE-DIMENSIONAL SHOCK WAVE PHYSICS CODE *Intl. J. Impact Engng.* **10** (1990), 351-360.
- MCGRAW, R., LAAKSONEN, R., INTERFACIAL CURVATURE FREE ENERGY, THE KELVIN RELATION, AND VAPOR-LIQUID NUCLEATION RATE. *J. of Chem. Phys.* **106 No. 12** (1996), 5284-5287.
- MELNIKOFF, R., AND PLOHR, B. J., *Rev. Mod. Phys.* **61(1)** (1989), 75.
- MELOSH, H. J., IMPACT CRATERING: A GEOLOGIC PROCESS *Oxford University Press, New York* (1989)
- MELOSH, H. J., AND PIERAZZO, E., IMPACT VAPOR PLUME EXPANSION WITH REALISTIC GEOMETRY AND EQUATION OF STATE. [abs]: *Lunar and Planet Sc.* **28** (1997), 935.
- MELOSH, H. J., A NEW MODEL MOON *Nature* **412** (2003), 694-695.
- MICHEL, P., BENZ, W., TANGA, P., AND RICHARDSON, D. C., COLLISIONS AND GRAVITATIONAL REACCUMULATION: FORMING ASTEROID FAMILIES AND SATELLITES *Nature* **294** (2001), 1696-1699.
- MILLER, G. H., AND PUCKETT, E. G., A HIGH-ORDER GODUNOV METHOD FOR MULTIPLE CONDENSED PHASES *J. Comput. Phys.* **128** (1996), 134-164.

- MONAGHAN, J. J., AND GINGOLD, R. A., SHOCK SIMULATION BY THE PARTICLE METHOD SPH *J. Comput. Phys.* **52** (1983), 374.
- MONTANARI, A., HAY, R. L., ALVAREZ, W., ASARO, F., MICHEL, H. V., AND ALVAREZ, L. W., SPHEROIDS AT THE CRETACEOUS/TERTIARY BOUNDARY ARE ALTERED DROPLETS OF BASALTIC COMPOSITION, *Geology* **11** (1983), 668-671.
- NEMTCHINOV, I. V., SHUVALOV, V. V., KOSAREV, I. B., ARTEM'eva, N. A., TRUBETSKAYA, I. A., SVETSOV, V. V., IVANOV, B. A., LOSEVA, T. V., NEUKUM, G., HAHN, G. AND DE NIEM, D., ASSESMENT OF COMET SHOEMAKER-LEVY 9 FRAGMENT SIZES BY USING LIGHT CURVES MEASURED BY GALILEO SPACECRAFT INSTRUMENTS *Planet. Space Sci.* **45 No 3** (1997), 311-326.
- NESLUSAN, L., THE OORT CLOUD AS A REMNANT OF THE PROTOSTELLAR NEBULA, *Astron. Astrophys.*, **361** (2000), 369-378.
- NEWTON, H., *Mem. Nat. Acad. Sci. (Washington)* **6**, (1893), 7.
- NIST CHEMISTRY WEBBOOK, NIST STANDARD REFERENCE DATABASE, **No 69** (2003) <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- NOLAN, M. C., ASPHAUGH, E., MELOSH, H. J., AND GREENBERG, R., IMPACT CRATERS ON ASTEROIDS: DOES GRAVITY OR STRENGTH CONTROL THEIR SIZE? *Icarus* **124** (1996), 359-371.
- O'KEEFE, J. D, AND AHRENS, T. J., THE INTERACTION OF THE CRETACEOUS/TERTIARY EXTINCTION BOLIDE WITH THE ATMOSPHERE, OCEAN AND SOLID EARTH. *Geol. Soc. Amer. Special Papers* **190** (1982), 103-120.
- O'KEEFE, J. D., AHRENS, T. J., SHOCK EFFECTS FROM A LARGE IMPACT ON THE MOON *Lunar Planet. Sci. Conf.*, **6th** (1976), 2831-2844.
- O'KEEFE, J. D., AHRENS, T. J., IMPACT EJECTA ON THE MOON *Lunar Planet. Sci. Conf.*, **7th** (1976), 3007-3025.
- O'KEEFE, J. D., AHRENS, T. J., PLANETARY CRATERING MECHANICS *J. Geophys. Res.*, **98, No E9**, (1993), 17011-17028.
- O'KEEFE, J. D., STEWART, S. T., LAINHART, M. E., AHRENS, T. J., DAMAGE AND ROCK-VOLATILE MIXTURE EFFECTS ON IMPACT CRATER FORMATION *Intl. J. Impact Engng.* **26** (2001), 543-553.

- OKONG'O, N., AND BELLAN, J.: CONSISTENT BOUNDARY CONDITIONS FOR MULTICOMPONENT REAL GAS MIXTURES BASED ON CHARACTERISTIC WAVES *J. Comp. Phys.* **176** (2002), 330-344.
- OORT, J. H., *Bull. Astron. Inst. Neth.* **11**, (1950), 91.
- ÖPIK, E. J. 1951., COLLISIONAL PROBABILITIES WITH THE PLANETS AND THE DISTRIBUTION OF INTERPLANETARY MATTER. *Proc. R. Ir. Acad.* **54** (1951) 165-199.
- ÖPIK, E. J., INTERPLANETARY ENCOUNTERS *Elsevier, New York*, (1976).
- ORAN, E. S., AND BORIS, J. P., NUMERICAL SIMULATION OF REACTIVE FLOW *Elsevier Sciences Publishing Co. Inc.* (1987)
- PIERAZZO, E., VICKERY, A. M., AND MELOSH, H. J., A REEVALUATION OF IMPACT MELT PRODUCTION, *Icarus* **127** (1997), 408-423.
- PIERAZZO, E., KRING, D. A., AND MELOSH, H. J., HYDROCODE SIMULATION OF THE CHICXULUB IMPACT EVENT AND THE PRODUCTION OF CLIMATICALLY ACTIVE GASES, *J. Geophys. Res.* **103** (1998), 28607-28626.
- PIERAZZO, E., AND MELOSH, H. J., HYDROCODE MODELING OF CHICXULUB AS AN OBLIQUE IMPACT EVENT, *Earth and Planet. Sci. Lett.* **165** (1999), 163-176.
- PILLIOD, J. E. JR. AND PUCKETT, E. G., SECOND-ORDER ACCURATE VOLUME-OF-FLUID ALGORITHMS FOR TRACKING MATERIAL INTERFACES *Technical Report, Lawrence Berkeley National Laboratory* **LBNL-40744** (1997), submitted to *J. Comp. Phys.*
- POPE, K. O., IMPACT DUST NOT THE CAUSE FOR THE CRETACEOUS-TERTIARY MASS EXTINCTION, *Geology* **30** No. 2 (2002), 99-102.
- PRAUSNITZ, J. M., MOLECULAR THERMODYNAMICS OF FLUID-PHASE EQUILIBRIA. *Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey*(1969).
- PREPARATA, F. P., AND SHAMOS, M. I., COMPUTATIONAL GEOMETRY, AN INTRODUCTION (TEXT AND MONOGRAPHS IN COMPUTER SCIENCE), *Springer Verlag* (1985)

- RADZIEVSKII, V. V. 1967, THE GRAVITATIONAL CAPTURE OF COSMIC DUST BY THE SUN AND PLANETS AND THE EVOLUTION OF THE CIRCUMTERRESTRIAL DUST CLOUD. *Astron. Sh. (Soviet Astron.)* **44**, N. 1 (1967), 166-177.
- RAIZER, YU. P., ON CONDENSATION OF A CLOUD OF VAPOROUS MATTER EXPANDING INTO VACUUM, *Soviet Physics JETP* **37** No. 12 (1959), 1741-1750.
- RIDER, W. J. AND KOTHE, D. B., RECONSTRUCTING VOLUME TRACKING *J. Comput. Phys.* **141** (1998)112-152.
- ROE, P. L., APPROXIMATE RIEMANN SOLVERS, PARAMETER VECTORS, AND DIFFERENCE SCHEMES *J. Comput. Phys.* **43** (1981), 357-372.
- RODDY, D. J., PEPIN, R. O., AND MERRILL, R. B., EDS., IMPACT AND EXPLOSION CRATERING: PLANETARY AND TERRESTRIAL IMPLICATIONS *New York, Pergamon Press* (1977), 1301 p.
- SAFRONOV, V. S., EVOLUTION OF THE PROTOPLANETARY CLOUD AND FORMATION OF THE EARTH AND THE PLANETS. *Translated from Russian (1972) by the Israel program of scientific translation, Jerusalem*
- SALPETER, E. E., AND FLAGAN, R. C., NUCLEATION AND GROWTH OF DUST GRAINS. *Astrophys. J.* **193** (1974), 579-584.
- SCHMELZER, J. W. P., KINETICS OF NUCLEATION AT INCREASING SUPERSATURATION. *Journal of Colloid and Interface Science* **215** (1999), 345-355.
- SENGER, B., SCHAAF, P., CORT, D. S., BOWLES, R., VOEGEL, J.-C., AND REISS, H., A MOLECULAR THEORY OF THE HOMOGENEOUS NUCLEATION RATE. I. FORMULATION AND FUNDAMENTIAL ISSUES. *Journal of Chemical Physics* **110**, N. 13 (1999), 6421-6431.
- SESAME '83, REPORT ON THE LOS ALAMOS EQUATION-OF-STATE LIBRARY *Los Alamos National Laboratory Report LALP-83-4, Los Alamos, N. M.* (1983).
- SHARP, C. M., AND HÜBNER, W. F., MOLECULAR EQUILIBRIUM WITH CONDENSATION. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **72** (1990), 417-431.
- SHUVALOV, V.V., MULTI-DIMENSIONAL HYDRODYNAMIC CODE SOVA FOR INTERFACIAL FLOWS: APPLICATION TO THE THERMAL LAYER EFFECT *Shock Waves* **9** (1999), 381-390.

- SHUVALOV, V. V., ARTEM'eva, N. A., AND KOSAREV, I. B., 3D HYDRODYNAMIC CODE SOVA FOR MULTI-MATERIAL FLOWS, APPLICATION TO SHOEMAKER-LEVY 9 IMPACT PROBLEM *Intl. J. Impact Engng.* **23** (1999), 847-858.
- SMIT, J., AND KYTE, F. T., SIDEROPHILE-RICH MAGNETIC SPHEROIDS FROM THE CRETACEOUS-TERTIARY BOUNDARY IN UMBRIA, ITALY, *Nature* **310** (1984), 403-405.
- STERN, S. A, AND COLWELL, J. E., ACCRETION IN THE EDGEWORTH KUIPER BELT: FORMING 100-1000 KM RADIUS BODIES AT 30 AU AND BEYOND *Astron. J.*, **114**, No **2** (1997), 841-884.
- STONE, J.M, AND NORMAN, M. L., ZEUS-2D: RADIATION MAGNETO-HYDRODYNAMICS CODE FOR ASTROPHYSICAL FLOW IN TWO SPACE DIMENSIONS. I. THE HYDRODYNAMIC ALGORITHMS AND TESTS *Astrophys. J. Suppl. Series* **80** (1992), 753-790.
- STRANG, G., ON THE CONSTRUCTION AND COMPARISON OF DIFFERENCE SCHEMES *SIAM J. Num. Anal.* **5** (1968), 506-517.
- SWEEGLE, J. W., HICKS, D. L., AND ATTAWAY, S. W., SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS STABILITY ANALYSIS *J. Comput. Phys.* **115** (1994), ?.
- TAUBER, F. AND KÜHRT, E.: THERMAL STRESSES IN COMETARY NUCLEI *Icarus* **69** (1987), 83-90.
- TAKATA, T., O'KEEFE, J. D., AHRENS, T. J. AND ORTON, G. S., COMET SHOEMAKER-LEVY 9: IMPACT ON JUPITER AND PLUME EVOLUION *Icarus* **109** (1994), 3-19.
- THOMPSON, S. L., AND LAUSON H. S., IMPROVEMENTS IN THE CHART D RADIATION-HYDRODYNAMIC CODE III: REVISED ANALYTIC EQUATIONS OF STATE. *Sandia National Laboratory Report SC-RR-71 0714* (1972).
- THOMPSON, S. L., CSQIII: AN EULERIAN FINITE DIFFERENCE PROGRAM FOR TWO-DIMENSIONAL MATERIAL RESPONSE: USERS MANUAL, SAND87-2763, *Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico*, (1988)
- TOON, O. B., ZAHNLE, K., MORRISON, D., TURCO, R. P., AND COVEY, C., ENVIRONMENTAL PERTURBATIONS CAUSED BY THE IMPACTS OF ASTEROIDS AND COMETS, *Rev. Geophys.* **35** (1997), 41-78.

- TORO, E. F., SPRUCE, M., AND SPEARES, W., RESTORATION OF THE CONTACT SURFACE IN THE HLL-RIEMANN SOLVER *Shock Waves* **4** (1994), 25-34.
- VOLMER, M. , 1939, KINETIK DER PHASENBILDUNG. *Th. Steinkopf Verl., Dresden, Leipzig* (1939).
- WARNEKE, G., ANALYTISCHE METHODEN IN DER THEORIE DER ERHALTUNGSGLEICHUNGEN *Teubner-Texte zur Mathematik* **138** (1999)
- WETHERILL, G. W., COLLISIONS IN THE ASTEROID BELT. *J. Geophys. Res.* Vol. **72**, No. **8** (1967) 2429-2444.
- WIEGERT, P., AND TREMAINE, S., THE EVOLUTION OF LONG-PERIOD COMETS, *Icarus* **137**, (1999), 84-121.
- WISDOM, J., CHAOTIC BEHAVIOUR AND THE ORIGIN OF THE 3/1 KIRKWOOD GAP. *Icarus* **56** (1983), 51-74.
- WÜNNEMANN, K., AND IVANOV, B. A., NUMERICAL MODELLING OF THE IMPACT CRATER DEPTH-DIAMETER DEPENDENCE IN AN ACOUSTICALLY FLUIDIZED TARGET *Planet. Space Sci.* **51**, Issue **13** (2003), 831-845.
- ZASLAVSKII G. M., STOCHASTIC BEHAVIOUR OF DYNAMICAL SYSTEMS. *Harwood, New York* (1985).
- YANENKO, N. N. , THE METHOD OF FRACTIONAL STEPS *Springer, Berlin* (1971)
- ZAHNLE, K., SCHENK, P., SOBIESZCZYK, S., DONES, L. AND LEVISON, H., DIFFERENTIAL CRATERING OF SYNCHRONOUSLY ROTATING SATELLITES BY ECLIPTIC COMETS *Icarus* **153** (2001), 111-129.
- ZEL'DOVICH, YA. B., THEORY OF THE FORMATION OF A NEW PHASE. *Zhurnal Eksperimental'noi i Theoreticeskoi Fiziki* N. **12** (1942), 525-538.
- ZEL'DOVICH, YA. B., AND RAIZER, YU. P., PHYSICS OF SHOCK WAVES AND HIGH-TEMPERATURE HYDRODYNAMIC PHENOMENA, *Academic Press, New York*, (1967)