

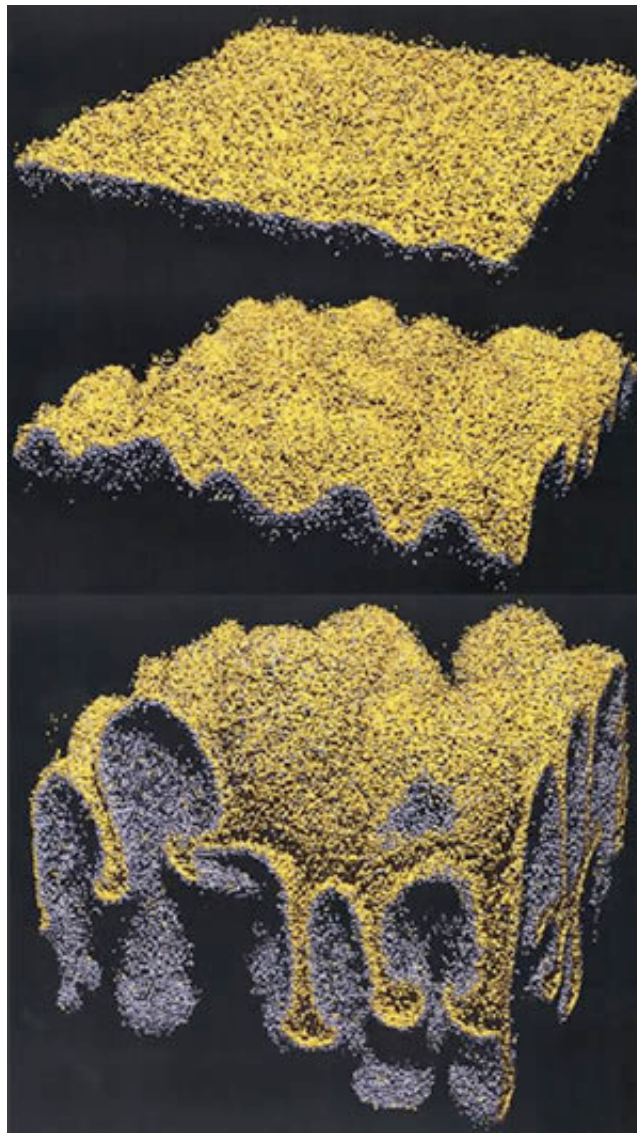
Supercomputer lässt 100 Millionen Atome tanzen

Liegt in einem Gravitationsfeld eine schwere Flüssigkeit über einer leichten, dann kann das nicht lange gut gehen. Nach kurzer Zeit bildet die schwere Flüssigkeit fingerförmige Ausstülpungen, die hinabsinken, während die leichte Flüssigkeit in Blasen nach oben steigt. Diese Rayleigh-Taylor-Instabilität hatte Lord Rayleigh schon 1883 untersucht. Sie spielt bei einer Vielzahl von Naturvorgängen eine Rolle, etwa bei Supernovaexplosionen oder bei der Entstehung von Salzdomen. Und auch bei der Inertialfusion muss man die „RT-Instabilität“ berücksichtigen, will man einen Wasserstofftropfen möglichst gleichmäßig zusammenquetschen und aufheizen.

Wäre die Berührungsfläche zwischen den unterschiedlich schweren Flüssigkeiten völlig eben und glatt, dann käme es nicht zur Bildung von Fingern und Blasen. Es sind die anfänglich vorhandenen Unregelmäßigkeiten sowie die molekularen Bewegungen, die zur RT-Instabilität führen. Anhand der hydrodynamischen Gleichungen kann man eine Stabilitätsanalyse für die beiden Flüssigkeitsschichten durchführen und herausfinden, welche Störungen sich aufschaukeln und dazu führen, dass in der Grenzfläche ein wellenförmiges Muster von Ein- und Ausstülpungen entsteht. Doch was anschließend passiert, ist so kompliziert, dass man es nur noch mit Hilfe von Supercomputern untersuchen kann.

Kai Kadau vom Los Alamos National Laboratory in New Mexico und seine Kollegen haben die bislang aufwendigsten Computersimulationen der RT-Instabilität gemacht. Sie haben die Bewegungsgleichungen von bis zu 100 Millionen Atomen gelöst, die in einem Behälter eingeschlossen und einem Schwerfeld ausgesetzt waren. Diese molekulardynamischen Berechnungen, für die die Supercomputer von Los Alamos insgesamt 600.000 CPU-Stunden benötigten, ergaben ein ausreichend detailliertes Bild des Geschehens, das sich mit experimentellen Resultaten vergleichen ließ.

Der Dichteunterschied der beiden Flüssigkeiten ließ sich mit der Atwood-Zahl $A=(\rho_1-\rho_2)/(\rho_1+\rho_2)$ charakterisieren, die bei den Simulationen Werte zwischen 0,3 und 0,97 hatte. Entsprechend den beiden Flüssigkeiten gab es zwei Sorten von Atomen, schwere und leichte, wobei sich Atome derselben Sorte anzogen. Nur wenn sie einander zu nahe kamen, stießen sie sich ab. Galt dies auch für unterschiedliche Atome, dann ließen sich die Flüssigkeiten mischen. Stießen sich unterschiedliche Atome hingegen stets ab, dann verhielten sich die beiden Flüssigkeiten wie Öl und Wasser. Auf Wunsch konnten die Forscher also die RT-Instabilität sowohl für mischende als auch für nichtmischende Flüssigkeiten untersuchen. Sie ließen die leichten Atome in der unteren Hälfte des Behälter starten und die schweren in der oberen Hälfte. Dann nahm die Simulation ihren Lauf und die Bewegungen der Atome in der Grenzfläche setzten die RT-Instabilität in Gang.



Graphik: Zeitliche Entwicklung der Grenzfläche. Oben: Die schwerere Flüssigkeit (gelb) befindet sich über der leichteren (grau) und wird instabil. Mitte: die Instabilitäten entwickeln sich schnell. Unten: Finger und Blasen entstehen. Es sind nur die Atome an der Grenzfläche der beiden Flüssigkeiten zu sehen.

Trotz der riesigen Zahl von Atomen und der enormen Rechenzeit konnten die Simulationen die RT-Instabilität nur für einen wenige Nanometer großen Bereich und auch nur für einige Nanosekunden verfolgen. Die Forscher sprechen deshalb in diesem Zusammenhang von Nanohydrodynamik. Damit in dieser kurzen Zeit und auf dieser kleinen Skala überhaupt etwas passierte, mussten die Atome der 10^{10} -fachen Erdbeschleunigung ausgesetzt werden. Trotz dieser unnatürlichen Bedingungen ergaben die Simulationen erstaunlich realistische Resultate, sowohl für kurze als auch für längere Zeiten.

Für eine kurze Zeit stimmten die Simulationsergebnisse gut mit den Resultaten der vereinfachenden Stabilitätsanalyse überein. Für längere Zeiten zeigte es sich, dass die absinkenden Finger und die aufsteigenden Blasen quadratisch mit der Zeit vorankamen – also eine konstante Beschleunigung erfuhren – und nicht linear, wie man es von Bewegungen in viskosen Medien her kennt. Außerdem hing das Wachstum der Finger nichtlinear vom Dichteunterschied Δ der Flüssigkeiten ab, das Anwachsen der Blasen hingegen linear. Genau dies hatten auch schon frühere Experimente gezeigt.

Für noch längere Zeiten entwickelten die aufsteigenden Blasen und die absinkenden Finger an ihren Spitzen

pilzförmige Strukturen, die schließlich verwirbelten, was zur turbulenten Durchmischung der Flüssigkeiten führte. Damit eröffnen die Simulationen auch die Möglichkeit, die noch immer rätselhafte Turbulenz auf kleinstmöglicher Skala – nämlich der der einzelnen Atome – zu untersuchen und besser zu verstehen.

Rainer Scharf

Weitere Infos:

- Originalveröffentlichung:
Kai Kadau et al.: Nanohydrodynamics simulations: An atomistic view of the Rayleigh-Taylor instability. Proc. Natl. Acad. Sci. USA (2004)
<http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0401228101>
<http://www.pnas.org/cgi/content/full/0401228101/DC1>
- Kai Kadaus Homepage:
<http://hal6000.thp.uni-duisburg.de/~kai/>
- Molekulardynamik-Simulationen in Los Alamos:
<http://bifrost.lanl.gov/MD/MD.html>

Weitere Literatur:

- E. George et al.: A comparison of experimental, theoretical, and numerical simulation Rayleigh-Taylor mixing rates. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **99**, 2587 (2002)
<http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.032568799>
- P. Entel et al.: Molecular Dynamics Simulations in Biology, Chemistry and Physics. Heraeus Summer School (2002) Proceedings, edited by W. Hergert (Springer, Berlin), LNP, in print (2003)
<http://www.thp.uni-duisburg.de/~kai/bio.pdf>