

Расчет процессов астрофизического горения при помощи явной схемы интегрирования

Негребецкий В. В.

negrebetckii.vv16@physics.msu.ru

МГУ имени М.В. Ломоносова, Физический факультет

Введение

Астрофизическим нуклеосинтезом называют совокупность ядерных реакций в звездном веществе, ведущих к образованию новых изотопов. Изучение этого процесса представляет огромный интерес для современной науки, так как напрямую связано с исследованием образования и эволюции звезд, их характеристик, распределения ядер во Вселенной. При этом многие механизмы нуклеосинтеза до сих пор остаются малоизученными. В основном это реакции синтеза тяжелых ядер, протекающие в экстремальных условиях, которые невозможно воспроизвести на Земле.

Основным методом исследования нуклеосинтеза тяжелых ядер и в целом термоядерного горения в звездах является компьютерное моделирование. Математически задача ядерных трансмутаций представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Специфика рассматриваемых процессов обуславливает ряд особенностей системы, усложняющих ее решение: огромные размеры, различие коэффициентов на десятки порядков, неопределенность начальных условий.

В рамках данной работы различные методы численного решения жестких систем ОДУ исследуются на предмет применимости к задаче астрофизического горения. В частности, предпринимается попытка программной реализации методов QSS [1, 2] и специальной явной схемы [3, 4] на основе системы астрофизической симуляции MESA [5].

Постановка задачи

Процесс ядерных превращений может быть математически представлен в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{k \in K_i} \lambda_k g_k \prod_{l \in L_k} y_l, \quad (1)$$

где y_i – концентрация i -го изотопа, λ_k – скорость протекания k -ой реакции. Величина g_k принимает значения ± 1 в зависимости от того, нарабатывается или расходуется i -й изотоп в k -й реакции. K_i – множество всех реакций, в которых i -ый изотоп фигурирует в качестве исходного или продукта, L_k – множество исходных изотопов k -й реакции. Ясно, что если изотоп расходуется в реакции, то он входит в L_k не менее одного раза.

В более общем векторном виде задачу можно сформулировать в виде системы:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}|_{t=0} = \mathbf{y}_0, \quad (2)$$

где \mathbf{y} , \mathbf{f} – векторы значений концентраций изотопов и правых частей уравнений (1) соответственно, \mathbf{y}_0 содержит начальные концентрации.

В качестве примера рассмотрим реакцию ${}^{12}\text{C}(\alpha, \gamma){}^{16}\text{O}$, протекающую со скоростью λ . Фрагмент системы уравнений, определяемый этой реакцией, будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \dot{y}({}^4\text{He}) &= -\lambda y({}^4\text{He})y({}^{12}\text{C}) + \dots \\ \dot{y}({}^{12}\text{C}) &= -\lambda y({}^4\text{He})y({}^{12}\text{C}) + \dots \\ \dot{y}({}^{16}\text{O}) &= +\lambda y({}^4\text{He})y({}^{12}\text{C}) + \dots \end{aligned}$$

Неизвестными здесь являются все концентрации изотопов y , кроме их начальных значений. В модели реальной астрофизической ядерной системы число изотопов исчисляется сотнями, и каждому соответствует такое уравнение. Кроме того, коэффициенты скоростей реакций могут различаться на десятки порядков, что обуславливает повышенную жесткость системы. Это значит, что к ней неприменимы стандартные явные численные методы, поскольку они будут давать большую погрешность, которую невозможно устранить уменьшением шага. Величины скоростей протекания реакций являются функциями параметров системы. В большинстве случаев они известны из результатов математического моделирования. Данные о скоростях содержатся в специализированных базах данных, таких как REACLIB [6].

В качестве примера нами был выполнен расчет горения однородной среды (^{56}Fe) в нейтронном облаке с адиабатическим остыванием от 5 до 0 ГК в течение 10^8 с. Моделирование проводилось при помощи библиотеки астрофизической симуляции SkyNet [7]. Полученное распределение концентраций по массовым числам приведено на рис. 1. Отмечен повышенный выход ядер с магическими числами нуклонов.

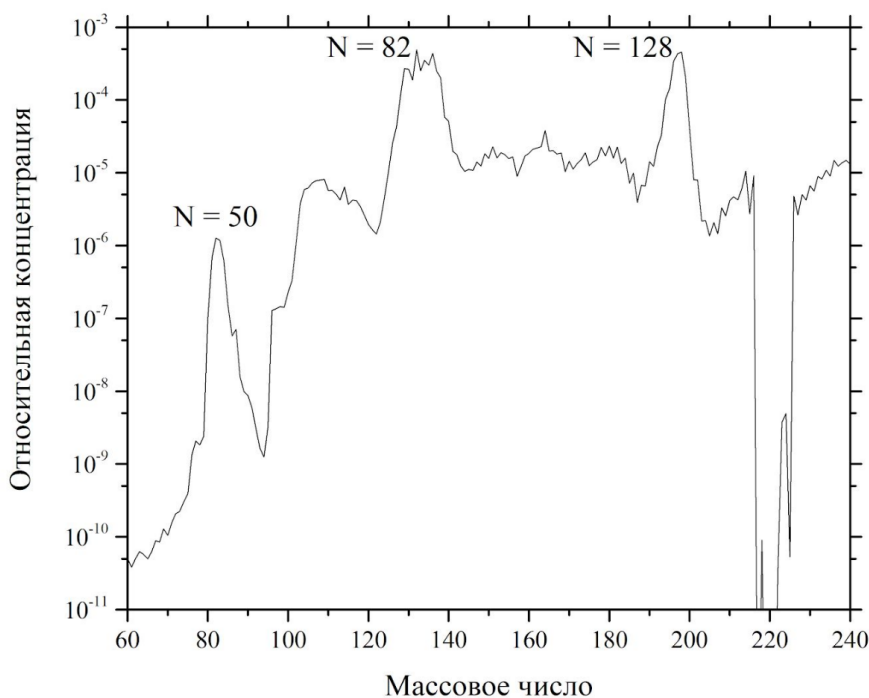


Рис. 1: Результаты моделирования горения однородной среды из ^{56}Fe при начальной температуре 5 ГК

Неявные численные методы

Как уже было упомянуто, классические явные методы, такие как метод Эйлера и схемы семейства Рунге-Кутты, не могут обеспечить приемлемую точность при решении систем ОДУ повышенной жесткости. Для решения таких задач прибегают к неявным методам, обладающим достаточной устойчивостью. Однако в неявные схемы неизвестная величина входит не единожды, поэтому для ее нахождения приходится решать алгебраическое уравнение.

Приведенный выше расчет (рис. 1) выполнен при помощи неявного метода Эйлера. Эта схема выражает значение решения в следующем узле \mathbf{y}_{n+1} следующим образом:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}), \quad (3)$$

где h — длина шага по времени. Разрешение этого уравнения относительно \mathbf{y}_{n+1} процедурой Ньютона требует вычисления якобиана, что значительно повышает трудоемкость расчета.

Очевидно, что величина временного шага h существенно влияет на результат моделирования. Для оценки этого влияния упомянутый расчет был проведен нами при различных размерах шага. Результаты для изотопов с массовыми числами 56 и 208 приведены на рис. 2. Как видно, вариации в пределах порядка могут привести к исчезновению изотопов с малыми концентрациями, представляющих интерес при изучении распространенностей ядер.

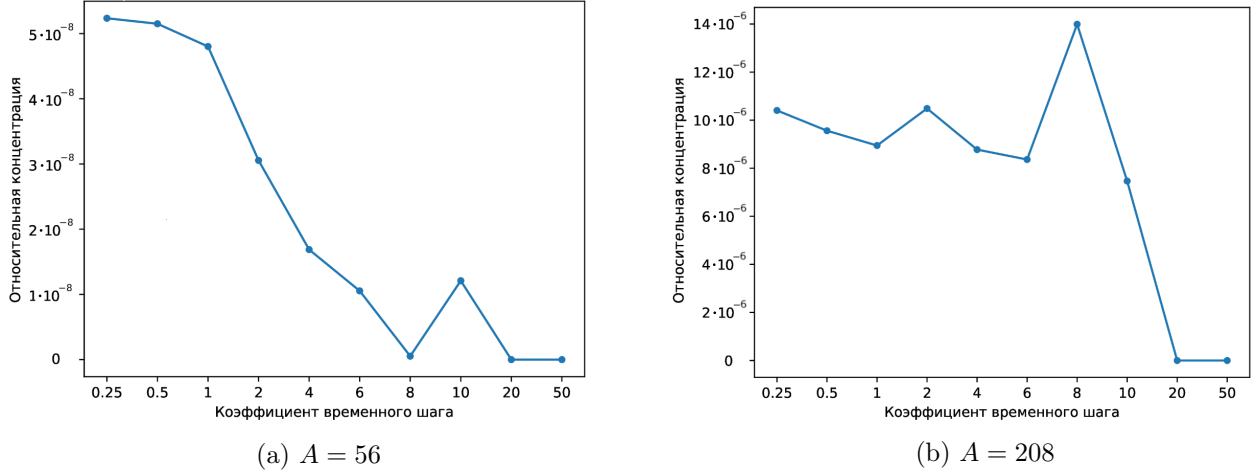


Рис. 2: Влияние размера шага на конечные концентрации изотопов для двух массовых чисел A .

Более совершенные неявные методы обладают большей точностью и возможностью задания максимального допустимого отклонения. В библиотеке астрофизического моделирования MESA в качестве штатной схемы интегрирования используется неявный метод переменного порядка точности [8, 9], являющийся развитием метода Эйлера. Это точная и эффективная схема, используемая в данной работе в качестве эталонной.

Полный шаг интегрирования H между состояниями \mathbf{y}_n и \mathbf{y}_{n+1} разбивается на несколько микрошагов $h = H/m$, разделяющих промежуточные состояния \mathbf{y}^k ($k = \overline{1, m}$). Вводится вспомогательная переменная $\Delta_k = \mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k$, изменение концентраций между шагами. Для нее выполняется алгоритм:

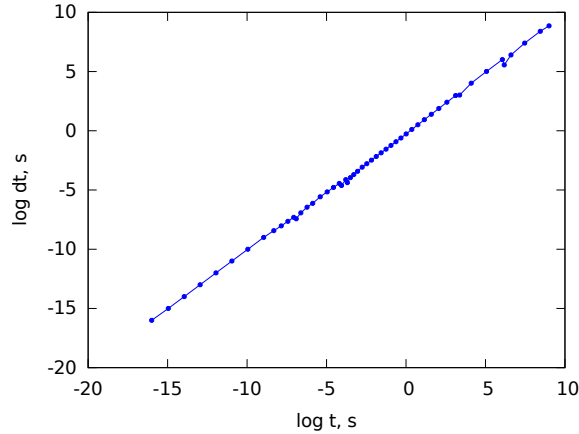


Рис. 3: Изменение размера шага во время работы штатной схемы [8] системы MESA.

$$\begin{aligned}
 \Delta^0 &= (\mathbf{I} - h\mathbf{J})^{-1}h\mathbf{f}(\mathbf{y}_n) \\
 k = \overline{1, m-1} : \quad \mathbf{y}^k &= \mathbf{y}^{k-1} + \Delta^{k-1}, \quad \Delta^k = \Delta^{k-1} + 2(\mathbf{I} - h\mathbf{J})^{-1}[h\mathbf{f}(\mathbf{y}^k) - \Delta^{k-1}] \\
 \mathbf{y}^m &= \mathbf{y}^{m-1} + \Delta^{m-1}, \quad \Delta^m = (\mathbf{I} - h\mathbf{J})^{-1}[h\mathbf{f}(\mathbf{y}^m) - \Delta^{m-1}] \\
 \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}^m + \Delta^m
 \end{aligned} \tag{4}$$

Для оценки точности эта последовательность действий выполняется на каждом шагу как минимум два раза с разными значениями m , то есть с разной точностью. Ошибка опреде-

ляется как разность результатов двух прогонок. Значение ошибки используется в методе адаптивного шага: если ошибка превышает желаемую, шаг уменьшается, а при удовлетворительной ошибке увеличивается. Пример поведения шага при моделировании процесса горения звездного вещества описанной схемой MESA приведен на рис. 3. В целях контроля точности в алгоритме также варьируются значения m .

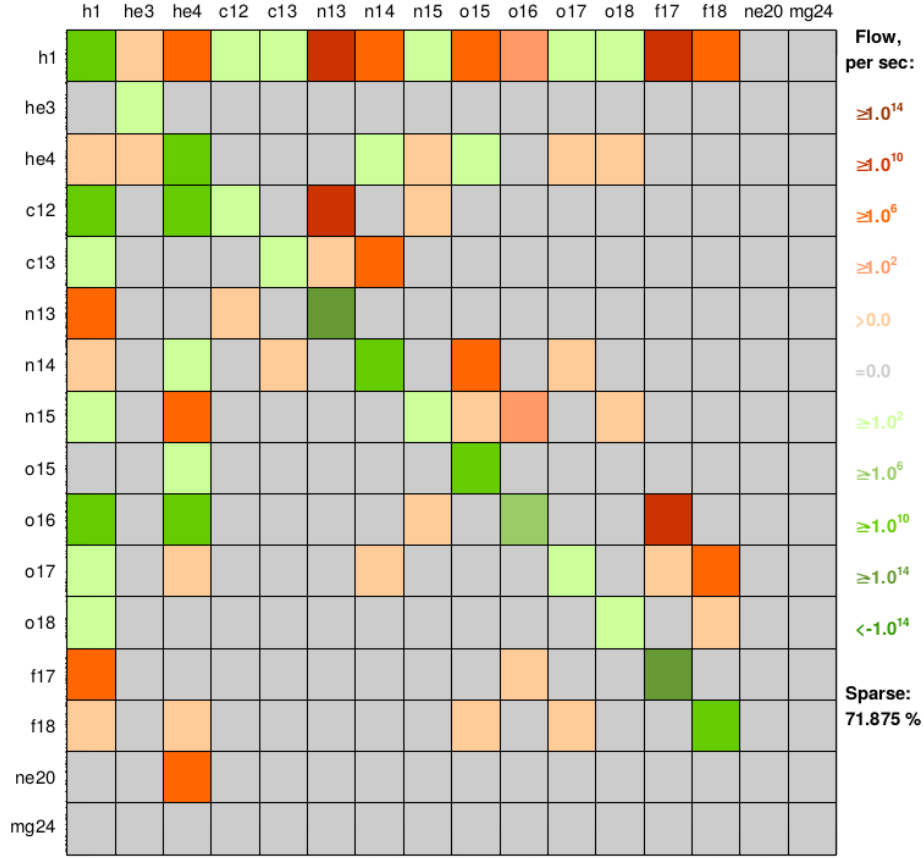


Рис. 4: Пример якобиана модельной системы из 16 изотопов. Цветом показаны порядки ненулевых элементов.

Остановимся отдельно на структуре якобиана J . Возвращаясь к использованному выше примеру реакции $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$, выпишем обусловленные ею элементы якобиана $J_{ik} = \frac{\partial f_i}{\partial y_k}$:

$$\begin{aligned}
 J(^4\text{He}, ^4\text{He}) &= -\lambda y(^{12}\text{C}) + \dots, & J(^{12}\text{C}, ^{12}\text{C}) &= -\lambda y(^4\text{He}) + \dots, \\
 J(^4\text{He}, ^{12}\text{C}) &= -\lambda y(^4\text{He}) + \dots, & J(^{16}\text{O}, ^4\text{He}) &= +\lambda y(^{12}\text{C}) + \dots, \\
 J(^{12}\text{He}, ^4\text{He}) &= -\lambda y(^{12}\text{C}) + \dots, & J(^{16}\text{O}, ^{12}\text{C}) &= +\lambda y(^4\text{He}) + \dots
 \end{aligned} \tag{5}$$

Если i -ый изотоп не участвует ни в одной реакции, задействующей k -ый, то соответствующий элемент якобиана J_{ik} будет равен нулю. Полный якобиан будет в общем случае несимметричным, потому что скорости прямых и обратных реакций могут значительно различаться, а также сильно разреженным, так как для многих пар изотопов реакции либо отсутствуют, либо дают малый вклад. Пример реального модельного якобиана приведен на рис. 4. В соответствующем реальной астрофизической системе якобиане число элементов достигает сотен тысяч.

Специальные явные методы

Повышенная трудоемкость является существенным недостатком неявных схем, особенно если речь идет о таких больших системах уравнений, как в случае задачи звездного горения.

Даже для современных вычислительных мощностей эффективная реализация такого алгоритма представляет определенную сложность. В связи с этим одним из актуальных направлений исследования в данной области является поиск явных схем, применимых к специфическим жестким задачам. Такая альтернатива неявным методам существенно облегчила бы расчет ядерных трансмутаций. Явные методы для решения сверхжестких задач химической кинетики представлены в работах [1] и [4], а в исследовании [2] указывается на возможность применения некоторых таких схем к задачам звездного горения.

При построении этих методов используется специфика самой задачи. Общая особенность уравнений химических и ядерных (1) превращений заключается в том, что все процессы, которым соответствуют элементы суммы в правой части, делятся на нарабатывающие и расходующие – первые имеют положительные значения, вторые отрицательные. Тогда для i -й компоненты системы можно записать:

$$\frac{dy_i}{dt} = f_i(t) = q_i(t) - p_i(t)y_i(t) \quad (6)$$

Специальная явная схема

Метод, описанный в работе [3, 4], применяет возможность разделения положительных $q_i(t)$ и отрицательных $p_i(t)y_i(t)$ вкладов следующим образом:

$$y_{i,n+1} = \frac{y_{i,n} + hq_i(\tilde{\mathbf{y}})[1 + \frac{1}{2}hq_j(\tilde{\mathbf{y}})]}{1 + hp_i(\tilde{\mathbf{y}}) + \frac{1}{2}h^2p_j^2(\tilde{\mathbf{y}})}, \quad \tilde{\mathbf{y}} = \frac{1}{2}(\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n) \quad (7)$$

Представленная система уравнений выражает искомое значение $y_{i,n+1}$ неявно. Решая ее двумя итерациями, можно достигнуть второго порядка точности, получив таким образом явную схему. В дополнение к этому авторы рекомендуют пользоваться методом геометрически-адаптивного выбора шага. Идея заключается в переходе от аргумента времени к величине длины дуги решения l : $dl^2 = \sum_{j=0}^N du_j$, где N – число компонент системы, $u_j = y_j / \sum y_j$, $u_0 = t/T$, где T – полное время эволюции системы. Такая параметризация позволяет неявно измельчать шаг в областях повышенной крутизны дуги решения.

В рамках настоящей работы специальная явная схема была реализована на языке Fortran и встроена в систему MESA. Испытания с простейшей схемой из двух изотопов дали удовлетворительные результаты, сошедшиеся с результатами штатного интегратора MESA и проверенные аналитически. Однако на более сложной сети из 31 изотопа явный метод давал концентрации (рис. 5а), на порядки отличающиеся от результатов эталонной схемы (рис.

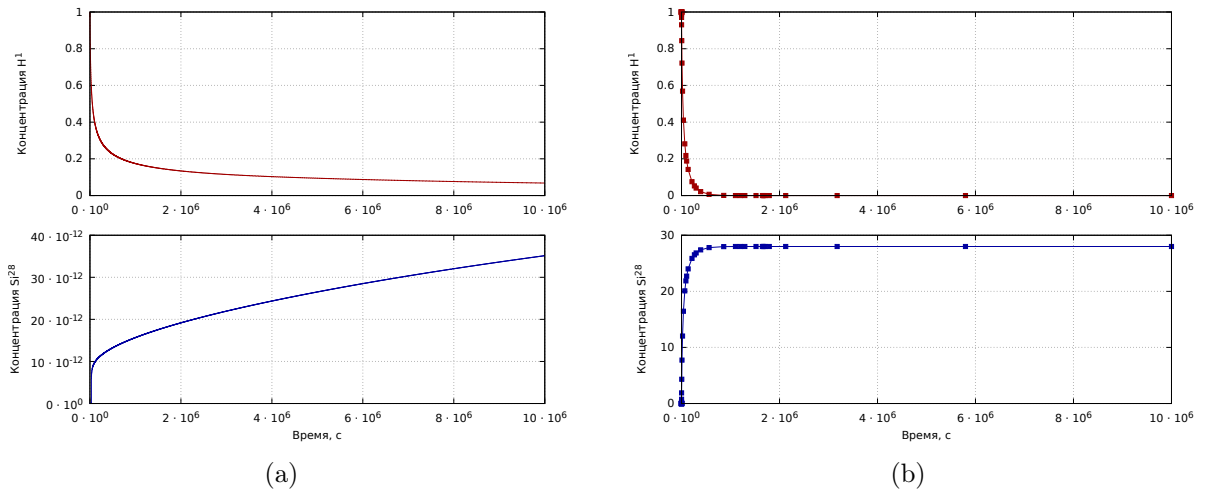


Рис. 5: Сравнение результатов расчета системы из 31 изотопа специальной схемой (а) и неявным методом MESA (б) для изотопов ^1H и ^{28}Si .

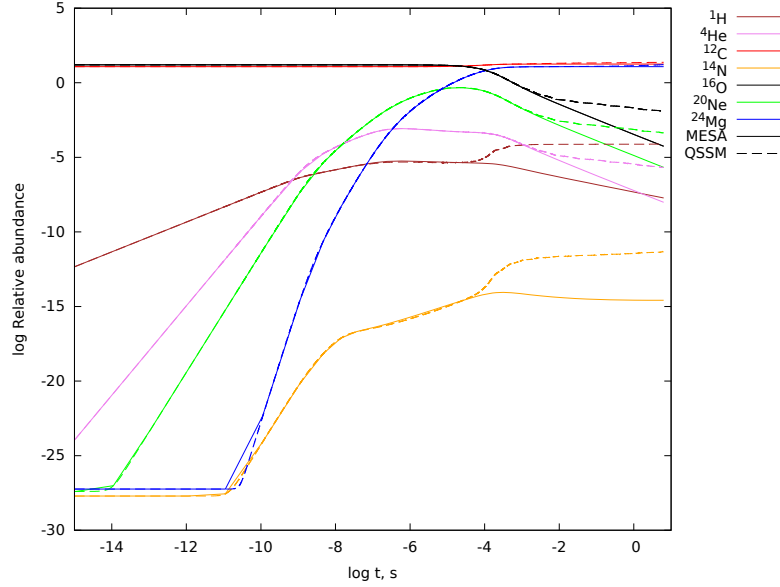


Рис. 6: Сравнение результатов моделирования «горячего» CNO-цикла, полученных при помощи штатного интегратора библиотеки MESA и исследуемого метода QSS.

5b). Причина расхождений заключается в неконсервативности явной схемы – между шагами возникает дисбаланс концентраций, неприципиальный для расчета химических реакций на коротких временах, но существенно сказывающийся на моделировании процессов нуклеосинтеза на астрофизическом масштабе времени. Из-за этой особенности метод, по всей видимости, неприменим к поставленной задаче.

Метод QSS

Другой явный метод, предложенный в работе [1], был исследован в работе [2] на предмет применимости к задаче термоядерного горения. При построении схемы пользуются тем, что в приближении постоянного или линейного вида функций $q_i(t)$ и $p_i(t)$ можно получить аналитические решения уравнения (6). Анализ этих решений позволил построить две величины:

$$y_p = y_0 + \frac{\Delta t(q_0 - p_0 y_0)}{1 + \alpha(\Delta t p_0)\Delta t p_0}, \quad y_c = y_0 + \frac{\Delta t(\tilde{q} - \bar{p} y_0)}{1 + \alpha(\Delta t \bar{p})\Delta t \bar{p}} \quad (8)$$

Эти величины носят название предиктора и корректора. В представленных выше выражениях $\bar{p} = \frac{1}{2}(p_0 + p_p)$, $\tilde{p} = \alpha(\Delta t \bar{p})q_p + (1 - \alpha(\Delta t \bar{p}))q_0$, а функция $\alpha(r)$ имеет следующий вид:

$$\alpha(r) = \frac{1 - (1 - e^{-r})/r}{1 - e^{-r}} \quad (9)$$

Предиктор вычисляется в качестве оценочного значения, корректор уточняет оценку. Разница предиктора и корректора позволяет оценить ошибку за шаг.

Аналогично специальной явной схеме, в ходе данной работы метод QSS был реализован на базе MESA. Проведено сравнение результатов, полученных методом QSS и схемой MESA, описанной в предыдущем разделе. Расчеты проводились на стандартной ядерной системе, использующейся в MESA для моделирования процесса «горячего» CNO-цикла (взрывная форма обычного CNO-цикла, протекающая в экстремальных условиях, например, при взрыве сверхновой). Результаты расчетов представлены на рис. 6. Начиная с $\sim 10^{-4}$ с наблюдаются расхождения между решениями QSS и MESA, вероятно, объясняющиеся похожей проблемой дисбаланса концентраций схемы QSS. Однако следует отметить, что на данный момент мы не успели внедрить механизм подстройки шага в алгоритм QSS. Алгоритм еще может быть значительно оптимизирован.

Преимуществом метода QSS является большая простота в сравнении с интегратором MESA и специальной явной схемой. В настоящее время продолжается работа по его программной реализации.

Заключение

В рамках представленной работы исследован ряд методов решения жестких систем ОДУ в задачах нуклеосинтеза, в частности неявный метод, использующийся в системе MESA [5]; проведено моделирование горения однородной среды в потоках нейтронов при помощи библиотеки SkyNet [7]; на базе MESA реализована специальная явная схема [3, 4] и метод QSS [1, 2], исследована возможность их применения к задачам нуклеосинтеза.

Неявный метод MESA на данный момент остается самым точным и оптимизированным. Специальная явная схема оказалась неподходящей для решения задачи из-за неконсервативности. Метод QSS расходится с эталонным интегратором MESA, а программная реализация требует оптимизации, однако сам метод прост и демонстрирует лучшие результаты, чем специальная явная схема, поэтому его исследование целесообразно продолжать.

Список литературы

- [1] Mott, D. *dissertation* (1999)
- [2] Guidry, M. W., Harris, J. A. *Comput. Sci. Disc.* 6 (2013), 015002
- [3] Белов, А. А. *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша* 71 (2015), 12
- [4] Булатов, П. Е., Белов, А. А., Калиткин, Н. Н. *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша* 173 (2018), 32
- [5] Paxton, B. et al *ApJ* 192 (2011), 3
- [6] Cyburt, R. H. et al *ApJ* 189 (2010), 240
- [7] Lippuner, J., Roberts, L. F.. *arXiv:1706.06198* (2017)
- [8] Bader, G., Deuhard, P. *Numer. Math.* 41 (1983), 373
- [9] Timmes, F. X. *ApJ* 124 (1999), 241