

УСТОЙЧИВОСТЬ НЕСТАЦИОНАРНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ
ЧИСТО ВОДОРОДНОГО ГАЗА ОТНОСИТЕЛЬНО ЧИСЛА
УЧИТЫВАЕМЫХ ДИСКРЕТНЫХ УРОВНЕЙО.М. БЕЛОВА¹, К.В. БЫЧКОВ²

Поступила 7 сентября 2017

Принята к печати 14 декабря 2017

Исследовано влияние числа учитываемых уровней K атома водорода на охлаждение газа позади фронта ударной волны. Расчеты выполнены для условий в атмосферах долгопериодических переменных типа Миры Кита. Величина K варьировалась от 2 до 25. Получено, что электронная температура $T_e(t, K)$ и состояние ионизации $x(t, K)$ при увеличении K асимптотически стремятся к не зависящим от K предельным функциям $T_e(t)$ и $x(t)$. После максимума электронной температуры наступает фаза частичного равновесия, во время которой населенности высоковозбужденных дискретных уровней с главным квантовым числом равным 8-ми и более подчиняются уравнению Саха с мгновенными значениями электронной температуры и электронной плотности.

Ключевые слова: *ударная волна: долгопериодические переменные: звездные атмосферы*

1. *Введение.* Целью настоящей работы является исследование влияния числа учитываемых уровней атома водорода на решение задачи о нестационарном охлаждении за фронтом ударной волны. Расчеты проводятся для условий в атмосферах переменных звезд типа Миры Кита.

Нестационарное охлаждение газа в звездных атмосферах определяется состоянием возбуждения ионов и атомов, в первую очередь атомов водорода. Важность учета возбужденных состояний водорода отмечена в пионерских работах Горбачко [1], Brown [2], Костюк и Пикельнера [3]. В последующих компьютерных расчетах учитывалось разное число уровней, от двух до шести [4-9]. Нами [10] принята модель атома водорода, отражающая реальные условия в звездах типа Миры Кита: согласно критерию Инглиса-Теллера при электронной плотности $N_e \approx 10^{12} \text{ см}^{-3}$ число реализуемых уровней равно 25.

В рамках модельной задачи [11,12] мы показали, что скорости процессов ионизации и рекомбинации определяются высоковозбужденными состояниями. Это приводит к установлению частичного термодинамического равновесия высоковозбужденных уровней с газом свободных электронов [13], в то время как основное и низковозбужденные состояния остаются существенно неравновесными. Естественно предположить, что и в решении полной задачи о

нестационарном охлаждении также есть два предельных случая: состояния низкого возбуждения с нестационарной населенностью и высоковозбужденные квазиравновесные состояния. Перейдем к прямым расчетам.

2. *Уравнения задачи.* Введем обозначения: N_k - концентрация атомов на k -м уровне, N_p - концентрация протонов, T_e и T_a - электронная и атомно-ионная температуры, N_a - концентрация атомов,

$$N_a = \sum_{k=1}^K N_k, \quad (1)$$

где N - полная концентрация водорода:

$$N = N_a + N_p, \quad (2)$$

x - степень ионизации

$$x = N_p / N, \quad (3)$$

v_k - относительная населенность уровня

$$v_k = N_k / N, \quad (4)$$

$\frac{3}{2}k_B S$ - тепловая энергия, рассчитанная на одну тяжелую частицу - ион или атом, k_B - постоянная Больцмана; величина S в двухтемпературной частично ионизованной плазме равна

$$S = T_{ai} + xT_e. \quad (5)$$

Ниже будем ее просто называть "тепловой энергией".

Начальные условия и прохождение вязкого скачка. Скорость натекания невозмущенного газа на неподвижный фронт ударной волны, концентрация газа N_0 и его температура T_0 приняты равными, соответственно, 50 км/с, 10^{12} см $^{-3}$ и 3200 К. Состояние ионизации перед фронтом определялось по формуле Саха при заданных значениях N_0 и T_0 и нормальном космическом содержании химических элементов. Тепловая энергия $\frac{3}{2}k_B S$ и плотность позади фронта подчиняются адиабате Гюгонио, причем ее большая часть передается атомно-ионному компоненту, а увеличение температуры электронов происходит только вследствие адиабатического сжатия.

Через $x_m \approx 10^{-4}$ обозначим степень ионизации водорода, при которой его вклад в электронную плотность становится равным вкладу металлов, а t_m - момент времени, когда это происходит.

Пока степень ионизации водорода меньше x_m , электронная плотность обусловлена металлами (главным образом, магнием и железом). Для промежутка времени $t < t_m$ мы выполняли расчеты с учетом вклада металлов в электронную плотность способом, описанным в [10]. Решение этой задачи для момента $t = t_m$ мы принимаем как начальное условие для задачи о чисто водородном

газе:

$$x_0 = 10^{-4}, \quad S_0 = 70800 \text{ K}, \quad T_{e0} = 14000 \text{ K}. \quad (6)$$

После прохождения фронта эти величины равны:

$$x_f = 10^{-9}, \quad S_0 = 71000 \text{ K}, \quad T_{e0} = 7700 \text{ K}. \quad (7)$$

С этими начальными условиями были проведены расчеты подъема электронной температуры, достижения максимального значения T_{em} и последующего спада до величины $T_{fm} \approx 12000 \text{ K}$, ниже которой потери энергии определяются металлами.

Система уравнений нестационарного охлаждения. В уравнении для тепловой энергии S мы учитываем работу соседних слоев, свободно-свободные, связанно-связанные и связанно-свободные переходы под действием электронных ударов, а также связанно-связанные и свободно-связанные радиационные переходы:

$$\left(\frac{3}{2} + \frac{d \ln u}{d \ln S} \right) \frac{d k_B S}{dt} = -N_e (S_{ex} - S_{deact} + S_{ion} - x N_e S_t + x S_r + x B). \quad (8)$$

Дифференцирование в левой части уравнения выполняется по лагранжевой координате l - времени, протекшему с момента пересечения фронта данным элементом газа. Переменная l связана с расстоянием от фронта l соотношением $dl = u(l) dt$, где $u(l)$ - скорость оттока от фронта.

В стационарной ударной волне u является однозначной функцией S , формулы для $(d \ln u / d \ln S)$ приведены в [10].

Выпишем явные выражения для слагаемых в правой части:

- охлаждение при возбуждении атома электронным ударом:

$$S_{ex} = \sum_{u>l} q_{lu} v_l E_{lu},$$

q_{lu} - коэффициент возбуждения, E_{lu} - энергетическая щель между уровнями;

- нагрев в результате деактивации электронным ударом:

$$S_{deact} = \sum_{u>l} q_{ul} v_u E_{lu},$$

q_{ul} - коэффициент деактивации;

- охлаждение при ударной ионизации:

$$S_{ion} = \sum_k q_k v_k I_k,$$

q_k - коэффициент ионизации, I_k - работа выхода из k -го уровня;

- нагрев при тройной рекомбинации:

$$S_r = \sum_k \gamma_k I_k,$$

γ_k - коэффициент тройной рекомбинации, алгебраические выражения для

коэффициентов ударных переходов q_{ν} , q_k , взяты из статьи Johnson [14], коэффициенты тройной рекомбинации γ_k вычислены через q_k с помощью принципа детального баланса;

- охлаждение в результате фоторекомбинации:

$$S_r = \sum_k \frac{R_k}{1 + \eta_k}, \quad R_k = \int_0^{\infty} s_k \nu \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (9)$$

ν и ε - тепловая скорость и энергия свободного электрона, $f(\varepsilon)$ - максвелловская функция распределения, s_k - сечение фоторекомбинации, взятое здесь в приближении Крамерса. Запись фоторекомбинационных потерь энергии в форме (9) показывает, что S_r является заведомо положительной величиной. Мы воспользовались тождеством

$$R_k = P_k - I_k r_k,$$

где P_k - потери на фоторекомбинацию, r_k - коэффициент фоторекомбинации:

$$P_k = \int_0^{\infty} s_k \nu h \nu f(\varepsilon) d\varepsilon \equiv M b_k^{1/2} I_k,$$

$$r_k = \int_0^{\infty} s_k \nu f(\varepsilon) d\varepsilon \equiv M b_k^{3/2} e^{b_k} E_1(b_k),$$

$$b_k = \frac{I_k}{k_B T_e}, \quad E_1(x) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt, \quad M = \frac{64}{3} \sqrt{\frac{\pi}{3}} \alpha^4 c a_0^2,$$

c - скорость света, α - постоянная тонкой структуры, a_0 - боровский радиус;

- охлаждение при тормозном излучении (в приближении Крамерса):

$$B = \frac{M}{2} \sqrt{R y \cdot k_B T_e}.$$

Величина η_k обозначает оптическую глубину по фотоионизации

$$\eta_k = \sigma_k^{(th)} N_k L,$$

где L - толщина слоя газа, $\sigma_k^{(th)}$ - сечение фотоионизации в пороге (в приближении Крамерса)

$$\sigma_k^{(th)} = \frac{64}{3\sqrt{3}} \alpha \pi a_0^2 k.$$

Запишем уравнение для электронной температуры:

$$\frac{dk_B T_e}{dt} = - \frac{T_e}{S} \frac{d \ln u}{d \ln S} \frac{dk_B S}{dt} + k_B (T_{ai} - T_e) N (\psi_a + \psi_i) - N (S_{ex} - S_{deact} + T_{ion} - x N_e T_i + x T_r + x B). \quad (10)$$

Скорость обмена энергии между атомно-ионной и электронной компонентами плазмы определяется функциями ψ_a и ψ_i :

$$\psi_a = (1-x)f_e, \quad f_e = \frac{m_e}{m_H} \pi a_0^2 v_0,$$

$$\psi_i = \frac{8}{3\sqrt{3}} x f_e \Lambda \cdot \left(\frac{Ry}{k_B T_e} \right)^{3/2},$$

$$\Lambda = 2 \ln \left(\frac{3}{4\sqrt{4\pi}} \right) + 3 \ln \left(\frac{Ry}{k_B T_e} \right) - \ln(N_e a_0^2),$$

m_e и m_H - массы, соответственно, электрона и атома водорода, v_0 - скорость электрона на первой боровской орбите. В правой части (10) слагаемые T_{ion} , T_i и T_r , описывающие переходы между связанными состояниями и континуумом, отличаются от аналогичных величин в правой части (8):

- потери энергии при ионизации электронным ударом:

$$T_{ion} = \sum_k q_k v_k \left(I_k + \frac{3}{2} k_B T_e \right),$$

- нагрев при тройной рекомбинации:

$$T_i = \sum_k \gamma_k \left(I_k + \frac{3}{2} k_B T_e \right),$$

- скорость изменения температуры в результате фоторекомбинации:

$$T_r = \sum_k \frac{P_k - I_k r_k - \frac{3}{2} k_B T_e}{1 + \eta_k},$$

которая может иметь любой знак - положительный и отрицательный.

Населенности дискретных уровней описываются кинетическими уравнениями

$$\begin{aligned} \frac{d v_k}{dt} = & - \left[q_k N_e + \sum_{k>i} (A_{ik}^* + q_{ki} N_e) + \sum_{k<l} q_{kl} N_e \right] v_k + \\ & + \left(\frac{r_k}{1 + \eta_k} + \gamma_k N_e \right) N_e + \left[\sum_{i>k} (A_{ik}^* + q_{ik} N_e) + \sum_{k<l} q_{lk} N_e \right] v_k. \end{aligned} \quad (11)$$

Величина A_{ij}^* обозначает вероятность спонтанного перехода с учетом рассеяний:

$$A_{ij}^* = \frac{A_{ij}}{\zeta_{ij}},$$

где ζ_{ij} - число рассеяний перед выходом кванта из среды.

Рассеяние излучения в частотах дискретных переходов учитываем в рамках метода Соболева-Бибермана-Холстейна по известной оптической глубине τ_{ij} в центре спектральных линий. В случае теплового доплеровского профиля число рассеяний равно

$$\zeta_{ij} = 2\tau_{ij} \sqrt{\pi \ln \tau_{ij}}.$$

Последнее уравнение системы получаем из (1)-(4):

$$\sum_k v_k + x = 1. \quad (12)$$

Уравнения (6) для тепловой энергии и (10) для электронной температуры удобно решать явным методом Эйлера. Применение явных методов к системе (11), (12) может потребовать неприемлемо малого шага интегрирования, либо привести к появлению отрицательных населенностей. К этой системе мы применяем неявный метод Эйлера, а к получающейся в результате системе нелинейных алгебраических уравнений - метод Ньютона.

3. *Результаты.* В результате решения уравнений задачи с заданным числом учитываемых уровней K мы получаем функции $S^{(K)}(t)$, $T_e^{(K)}(t)$, $x(t)^{(K)}$ и $v_k^{(K)}(t)$. Тепловая энергия $S = S^{(K)}(t)$ монотонно уменьшается по мере высвечивания за фронтом, она связана с лагранжевой переменной t взаимно-однозначным соответствием: $t = t(S^{(K)})$. Следовательно, для каждой функции $f^{(K)}(t)$ можно исключить время t и получить функцию $F^{(K)}(S^{(K)})$.

3.1. *Устойчивость решения относительно числа учитываемых уровней.* Убедимся, что для каждой из вышеприведенных зависимостей $F^{(K)}(S)$ существует предельная функция $F(S)$, к которой асимптотически стремится $F^{(K)}(S)$ при увеличении K . То же самое проверим для отдельных выделенных моментов эволюции газа: максимума электронной температуры и момента, когда теряется половина тепловой энергии.

Устойчивость решения была бы заранее очевидна и не потребовала доказательств в случае фотоионизации и фоторекомбинации - процессов, скорость которых уменьшается с ростом главного квантового числа. Но доминирующие в холодных звездах ударные процессы, наоборот, становятся более быстрыми: при фиксированной температуре коэффициент ударной ионизации пропорционален $k^{2.2+2.4}$, а тройной рекомбинации - $k^{2.2+2.4}$ [11]. Следовательно, сильновозбужденные состояния могут оказывать сильное влияние на состояние ионизации, и без специальных расчетов нельзя исключить зависимость решения от числа учитываемых уровней.

Проведенные нами расчеты указывают на устойчивость решения. Результаты для электронной температуры как функции S приведены на рис.1 в виде последовательности кривых $T_e^{(K)}(S)$.

Хорошо видно, что при фиксированном значении S зависимость решения от K немонотонна: сначала температура уменьшается вплоть до $K=5$, а затем монотонно увеличивается. Различие между кривыми K и $K+1$ начинает уменьшаться, начиная с $K=10$, и в диапазоне $K > 15$ становится пренебрежимо

малым во всем диапазоне изменения температуры. Таким образом, существует некоторая предельная функция $T_e(S)$, не зависящая от числа учитываемых уровней. В практических расчетах достаточная точность достигается уже при $K \approx 15$. Зависимость от K наиболее существенна в той области за фронтом ударной волны, где велико значение упругого обмена энергией электронов с атомно-ионной компонентой.

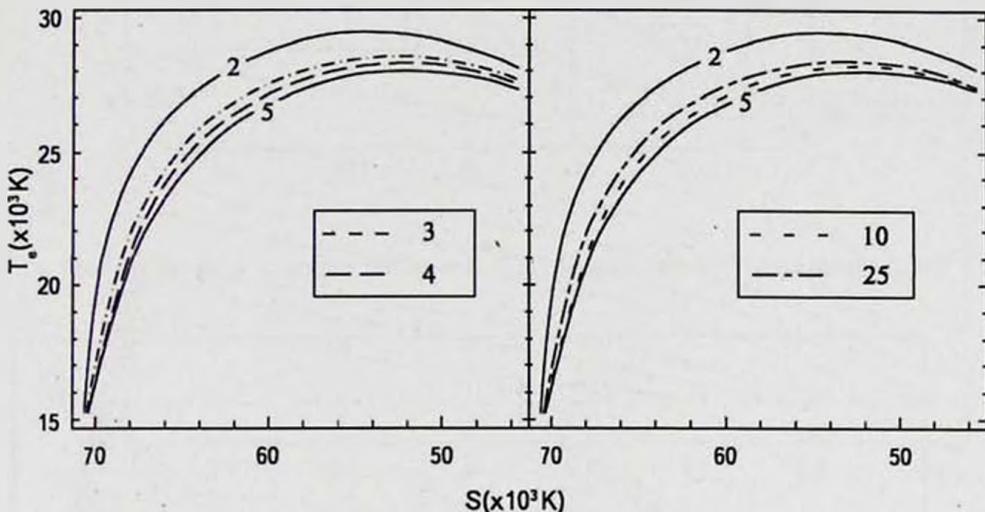


Рис.1. Набор кривых $T_e^{(K)}(S)$ для $K = 2 + 5$ (слева) и $K = 2, 5, 10, 25$ (справа); при $K \geq 5$ температура T_e при фиксированном S уменьшается с ростом K , а при $K > 5$ она монотонно растет.

На поздних стадиях охлаждения, для $S < 45000$ K, где роль обмена энергией уменьшается, зависимость функций $T_e^{(K)}(S^{(K)})$ от K очень слаба уже для $K \geq 2$.

Наличие предела у максимума электронной температуры $T_{em}(K)$ демонстрирует сплошная кривая на рис.2. Здесь немонотонность наблюдается в большем диапазоне K , вплоть до $K=9$, но затем $T_{em}(K)$ стремится к своему пределу монотонно. Аналогично ведет себя x_m (штриховая линия) - степень ионизации водорода в точке максимума T_e .

Предельная кривая также существует у последовательности функций $x^{(K)}(S^{(K)})$ на рис.3. На левом графике видно монотонное уменьшение $x^{(K)}$ при фиксированном S в диапазоне $K \geq 5$. Графики правого рисунка показывают, что при $K > 5$ ионизация растет с увеличением K , также стремясь к пределу: различие между $x^{(10)}$ и $x^{(25)}$ можно считать пренебрежимо малым.

3.2. Частично равновесные состояния. Поскольку скорости ударных

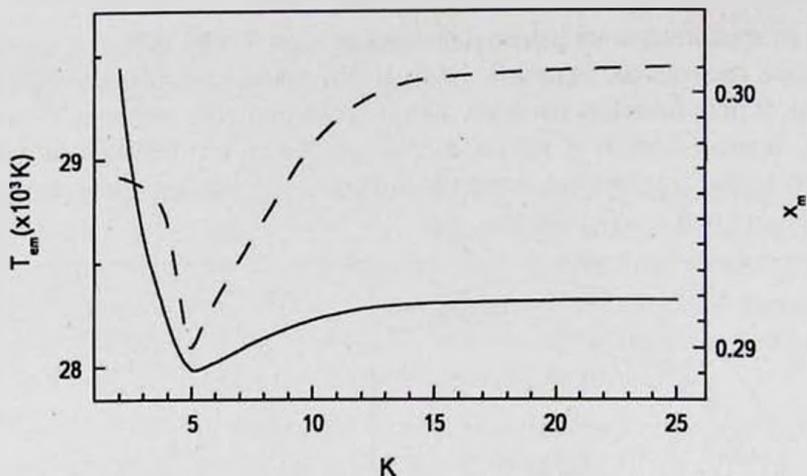


Рис.2. Пределы последовательностей $T_{inf}^{(K)}$ (сплошная линия) и $x_{inf}^{(K)}$ (штриховая).

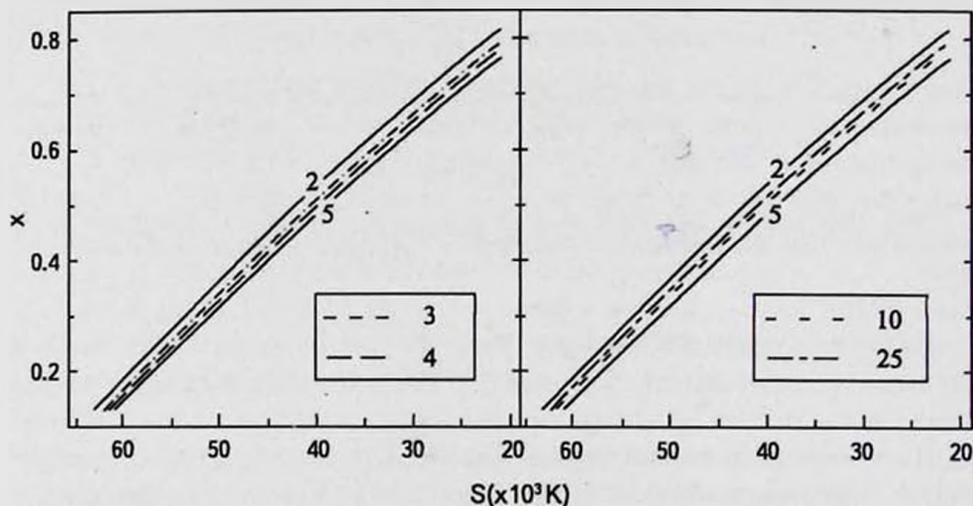


Рис.3. Последовательность функций $x^{(K)}(S)$ для набора K из рис.1.

процессов ионизации и тройной рекомбинации быстро растут с увеличением главного квантового числа, следует ожидать, что, начиная с некоторого уровня, состояния становятся "квазиравновесными", а именно, устанавливается частичное ионизационное равновесие, при котором населенность определяется формулой Саха при текущих значениях $T_e(t)$ и $N_e(t)$. Удобным инструментом для описания эволюции населенностей в данном случае являются множители Мензела b_k .

На рис.4 приведены результаты расчетов для 25-уровневой системы. По вертикальной оси отложены десятичные логарифмы b_k , по горизонтальной - степень охлаждения $\Delta S/S_f$, где $\Delta S = S_f - S(t)$. На этом рисунке квазиравновесным состояниям соответствует нижняя горизонтальная прямая $\log b_k = 0$.

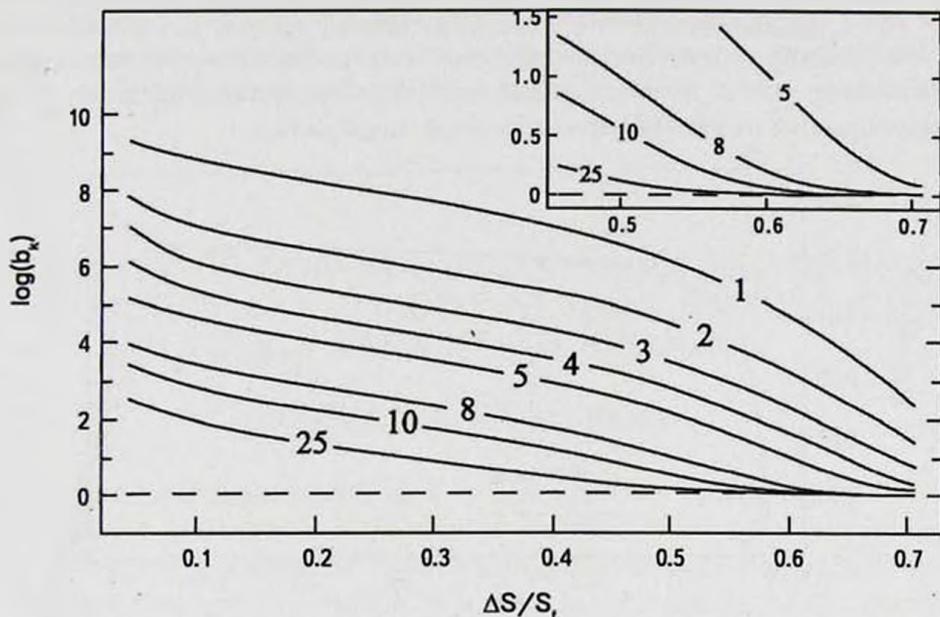


Рис.4. Логарифм множителя Мензела в зависимости от степени охлаждения; номера кривых соответствуют значению главного квантового числа.

Хорошо видно, что при $k \geq 8$ величина b_k стремится к единице ($b_k < 1.01$), когда потеряна примерно половина тепловой энергии. Основное состояние и возбужденные уровни с $k < 6$ остаются существенно неравновесными на протяжении всего интервала $S > 20000 \text{ K} \approx 2T_{fn}$.

На ранних стадиях эволюции газа за фронтом, пока $S > S_f/2$, множители Мензела являются функциями времени, т.е., ни одно состояние не находится в квазиравновесном режиме. Это объясняется обменом энергией между атомно-ионной компонентой газа и электронами. Большая скорость нагрева электронов путем упругих ударов обеспечивает быстрое изменение электронной температуры. Скорости неупругих процессов значительно ниже, чем упругих соударений, поэтому ионизация и возбуждение "отстают" от температуры. В результате дискретные состояния не могут "подстроиться" под текущие значения N_e и T_e . Такое положение дел имеет место до максимума электронной температуры и некоторое время после максимума. Скорость обмена энергией при этом

монотонно уменьшается, главным образом, за счет разности $(T_a - T_e)$, и в конце концов высоковозбужденные уровни приходят в состояние равновесия со свободными электронами. Доля высветившейся энергии определяется изменением полной энергии за вычетом работы, обозначим эту величину W . На рис.5 степень высвечивания $\Delta W/W_f$, где $\Delta W = W_f - W(t)$, представлена в зависимости от величины охлаждения $\Delta S/S_f$. Ее сопоставление с рис.4 показывает, что к моменту, когда наступает квазистационарный режим, высвечивается около 6% первоначальной энергии газа.

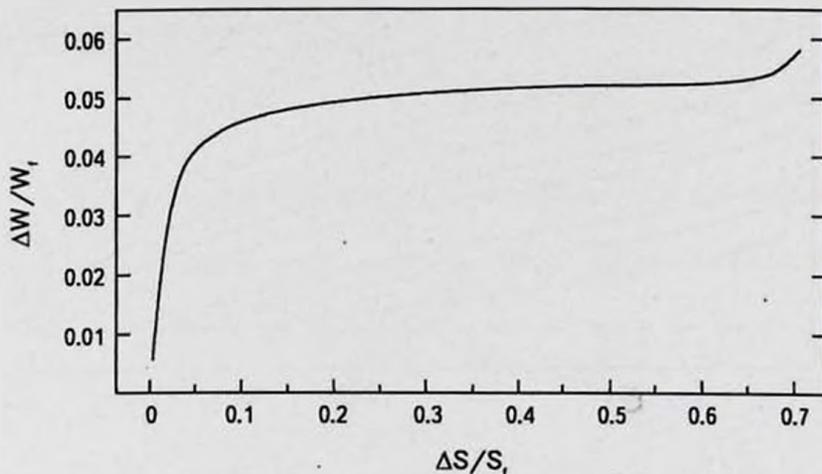


Рис.5. Зависимость степени высвечивания $\Delta W/W_f$ от потерь тепловой энергии $\Delta S/S_f$.

4. Заключение. Сформулируем основные результаты.

1. При увеличении числа учитываемых дискретных состояний атома водорода K последовательности $T_e^{(k)}(S^{(k)})$, $x^{(k)}(S^{(k)})$ равномерно сходятся каждая к своей предельной функции.

2. В практических расчетах отличие от предельных кривых становится пренебрежимо малым при $K \geq 15$ К, что значительно меньше максимального значения главного квантового числа, допустимого по критерию Инглиса-Теллера (для звезд-гигантов около 25).

3. Вскоре после максимума электронной температуры наступает фаза частичного равновесия, во время которой населенности высоковозбужденных дискретных уровней v_k при $k \geq 8$ подчиняются уравнению Саха с мгновенными значениями $T_e(t)$ и $N_e(t)$. На более ранних стадиях выходу на квазистационарный режим всех дискретных состояний препятствует обмен энергией электронов с атомно-ионной компонентой путем упругих соударений.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 15-03-03302 и гранта научной школы НШ 9670.2016.2.

¹ Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия, e-mail: whitecanvas05122010@mail.ru

² Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Астрономический институт им. П.К.Штернберга, Москва, Россия, e-mail: bychkov@sai.msu.ru

STABILITY OF NON STATIONARY COOLING OF PURE HYDROGEN GAS AGAINST NUMBER OF DISCRETE LEVELS TAKEN INTO ACCOUNT

O.M.BELOVA¹, K.V.BYCHKOV²

We investigate the influence of K on non-stationary cooling of the shocked pure hydrogen gas, where K is the number of discrete levels taken into account. Calculations are performed for conditions in atmospheres of long periodic stars of the Mira Ceti type. The value of K is taken in the range $2 \leq K \leq 25$. Electron temperature $T_e(t, K)$ and ionization state $x(t, K)$ tend to K -independent functions $T_e(t)$ and $x(t)$ when K is increasing. A phase of partial equilibrium is reached after a moment of the T_e maximum. At this phase occupation of high excited levels with the principal quantum number $k \geq 8$ obeys Saha equation with current values T_e and electron density.

Key words: *shock waves: long-period variables: stellar atmospheres: radiative cooling*

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Г.Горбачкий, Астрон. ж., 38, 256, 1961.
2. J.C.Brown, Solar Phys., 29, 421, 1973.
3. Н.Д.Костюк, С.Б.Пикельнер, Астрон. ж., 51, 1002, 1974.
4. М.М.Кацова, А.Г.Косовичев, М.М.Лившиц, Астрофизика, 17, 285, 1981, (Astrophysics, 17, 156, 1981).
5. M.W.Fox, P.R.Wood, Astrophys. J., 297, 455, 1985.
6. Yu.A.Fadeev, D.Gillet, Astron. Astrophys., 354, 349, 2000.

7. *Yu.A.Fadeev, D.Gillet*, *Astron. Astrophys.*, **420**, 423, 2004.
8. *D.Gillet, A.V.Fokin*, *Astron. Astrophys.*, **565**, 423, 2014.
9. *J.C.Allred, A.F.Kowalski, M.Carlsson*, *Astrophys. J.*, **809**, 104, 2015.
10. *О.М.Белова, К.В.Бычков, Е.С.Морченко и др.*, *Астрон. ж.*, **91**, 745, 2014. (*Astronomy reports*, **58**, 650, 2014).
11. *О.М.Белова, К.В.Бычков*, *Астрофизика*, **60**, 127, 2017, (*Astrophysics*, **60**, 111, 2017).
12. *О.М.Белова, К.В.Бычков*, *Астрофизика*, **60**, 219, 2017, (*Astrophysics*, **60**, 200, 2017).
13. *О.М.Белова, К.В.Бычков*, *Астрофизика*, **60**, 387, 2017, (*Astrophysics*, **60**, 357, 2017).
14. *L.C.Johnson*, *Astron. J.*, **174**, 227, 1972.