

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА
«МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА ТЯЖЕЛЫХ ЯДЕР В
R-ПРОЦЕССЕ»

Выполнил студент
413 группы
Негребецкий В.В.

Научный руководитель:
научный сотрудник, кандидат ф.-м. наук
Стопани К.А.

подпись научного руководителя

Допущена к защите:
«__» _____ 2020 года
заведующий кафедрой, профессор
Ишханов Б.С.

подпись заведующего кафедрой

Москва
2020

Содержание

Введение	2
1. Общие сведения о звездном нуклеосинтезе	3
1.1. Термоядерный нуклеосинтез	4
1.2. Звездный синтез тяжелых ядер	4
1.3. Сценарии r-процесса	5
2. Расчет скоростей реакций r-процесса	7
2.1. Расчет со скоростями REACLIB	7
2.1.1. Результаты моделирования	8
2.1.2. Выбор изотопов для расчета скоростей	10
2.1.3. Расчет сечений ядерных реакций с помощью TALYS	11
2.1.4. Представление данных в формате REACLIB	11
2.2. Модели плотностей уровней	12
2.2.1. Приближение Ферми-газа	12
2.2.2. Модель константной температуры	13
2.2.3. Модель BFM	14
2.2.4. Обобщенная модель сверхтекучей жидкости	14
2.2.5. Результаты расчетов	14
2.3. Массовые модели	18
2.3.1. Модель FRDM	18
2.3.2. Метод Хартри-Фока-Боголюбова	18
2.3.3. Погрешность предсказания масс нейтроноизбыточных ядер	19
2.3.4. Результаты расчетов	19
2.4. Итоги исследования влияния моделей ядерных реакций	22
3. Численный расчет звездного горения	24
3.1. Постановка задачи	24
3.1.1. Система уравнений ядерных превращений	24
3.1.2. Особенности задачи звездного горения	25
3.2. Неявные численные методы	25
3.2.1. Неявный метод Эйлера	26
3.2.2. Влияние шага интегрирования	26
3.2.3. Численный метод системы MESA	27
3.2.4. Якобиан системы уравнений	28
3.3. Специальные явные методы	29
3.3.1. Специальная явная схема	30
3.3.2. Метод QSS	31
3.4. Итоги исследования численных схем	32
Выводы	33
Заключение	34
Список источников	35

Введение

По современным представлениям образование подавляющего числа тяжелых изотопов в природе происходит за счет звездного r -процесса. Это малоизученный механизм, требующий экстремальных внешних условий, возможных, например, на взрывных стадиях звездной эволюции или при столкновении компактных астрофизических объектов, таких как нейтронные звезды. Между тем исследование этого явления чрезвычайно важно, так как оно непосредственно влияет на распространенность изотопов во Вселенной.

Основным методом исследования r -процесса и эволюции астрофизических ядерных систем в целом является математическое моделирование. Для получения надежных результатов симуляции необходимо достоверно знать ряд входных параметров, таких как состав звездного вещества, его температуры и плотности, а также сечения ядерных реакций, протекающих в звездах. На данный момент эти величины известны в основном из теоретических моделей, астрофизических и ядерных, что вызывает существенные неопределенности входных данных.

Трудность вызывает также и сам расчет эволюции ядерных систем, целью которого является получение конечных массовых распределений изотопов за время эволюции системы. С математической точки зрения эта задача оказывается достаточно нестандартной, большинство отработанных численных методов к ней неприменимы. Проблема поиска быстрой и точной расчетной схемы для симуляции процессов естественного нуклеосинтеза, которую можно было бы внедрить в полномасштабные системы астрофизического моделирования, все еще остается актуальной.

Настоящая работа посвящена компьютерному расчету r -процесса и других механизмов звездного нуклеосинтеза. Раздел 1 дает краткий обзор астрофизического нуклеосинтеза, описывает принцип и сценарии r -процесса и обосновывает важность этого механизма. В разделе 2 рассматривается влияние, оказываемое на точность результатов моделирования факторами неопределенности входных данных о сечениях ядерных реакций на нейтроноизбыточных ядрах. В разделе 3 исследуются численные схемы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений повышенной жесткости, которые возникают при моделировании процессов звездного нуклеосинтеза, рассматривается возможность применения ряда новых методов, с помощью которых можно было бы сократить трудоемкость расчета.

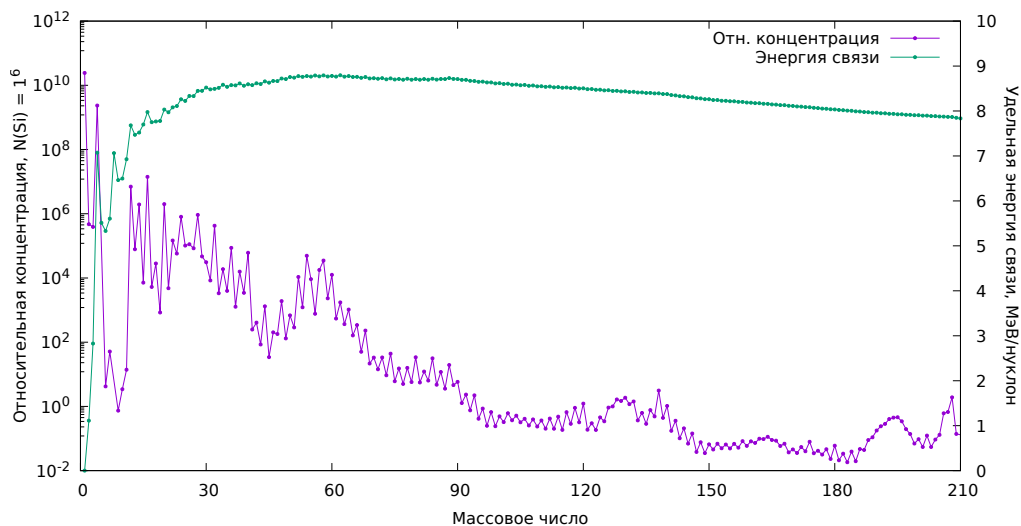


Рис. 1. Распространенность изотопов в Солнечной системе и их удельные энергии связи в зависимости от массового числа. По данным [1] и [2].

1. Общие сведения о звездном нуклеосинтезе

Астрофизическим нуклеосинтезом называют совокупность протекающих в звездах ядерных реакций, которые приводят к образованию новых химических элементов. Естественный нуклеосинтез непосредственно определяет распределение изотопов во Вселенной, тесно связан с возникновением и эволюцией звезд и потому представляет большой интерес для современной науки. Тем не менее многие механизмы нуклеосинтеза, протекание которых возможно лишь в экстремальных астрофизических условиях, не могут быть воспроизведены на Земле, а их теоретическое описание в настоящее время возможно лишь с большой степенью неопределенности. В особенности это касается синтеза тяжелых ядер, протекающего, согласно современным представлениям, на катастрофических последних стадиях эволюции звезд. Тем самым звездный нуклеосинтез все еще является одной из главных загадок физики.

Существующее массовое распределение элементов во Вселенной является непосредственным проявлением процессов естественного нуклеосинтеза. Наши знания о распространенности изотопов на данный момент ограничиваются случаем Солнечной системы, для которой концентрации изотопов могут быть получены на основании исследования состава планет и малых небесных тел. На рис. 1 представлено массовое распределение атомных ядер, построенное на основе данных работы [1]. Зависимость обладает ожидаемыми пиками в областях особо стабильных магических ядер и имеет зубчатый характер, коррелирующий с поведением зависимости удельной энергии связи от массового числа.

Для теоретического обоснования этой зависимости и предсказания распределения ядер во всей Вселенной необходимо детально изучить все процессы естественного нуклеосинтеза, в особенности звездного, отвечающего за рождение подавляющего числа элементов и при этом до сих пор не изученного досконально.

1.1. Термоядерный нуклеосинтез

Реакции термоядерного синтеза начинаются в молодой звезде при температурах около 1 млн К, достаточных для эффективного протекания реакции слияния двух ядер дейтерия, образовавшегося на дозвездной стадии нуклеосинтеза, с рождением изотопа ^3He . Звезда при этом сжимается под действием гравитации, что приводит к дальнейшему разогреву вещества. При температуре 10 млн К запускается протон-протонный цикл, превращающий четыре протона в ядро гелия ^4He и протекающей со значительным энерговыделением. Отправной точкой pp -цикла является реакция $p + p \rightarrow ^2\text{H} + e^+ + \nu_e$, обладающей малым сечением, поэтому данная стадия звездного нуклеосинтеза является наиболее продолжительной. Большинство наблюдаемых звезд находятся именно на ней, формируя главную последовательность на диаграмме Герцшпрунга-Рассела — зависимости светимости звезды от температуры ее поверхности.

В массивных звездах второго поколения при температуре около 20 млн К становится возможен другой механизм термоядерного горения водорода, называемый CNO-циклом. В этом процессе ядра углерода, азота и кислорода выступают в роли катализаторов, их концентрации за полный цикл не меняются. На стадии горения водорода эти химические элементы еще не могли образоваться, поэтому CNO-цикл возможен только в том случае, если некоторое количество ядер-катализаторов попало в состав звездного вещества извне — например, из остатков более старой звезды.

Термоядерные реакции в центре звезды создают давление, противодействующее гравитационному сжатию. Когда весь водород выгорает, вещество звезды вновь начинает разогреваться под действием сжатия, и при температурах выше $2 \cdot 10^8$ К начинаются реакции горения гелия. Интенсивное возгорание гелиевого ядра приводит к так называемой “гелиевой вспышке”: радиус оболочки звезды быстро увеличивается, что влечет за собой потерю температуры и смещение спектра излучения в красную область. Звезда сходит с главной последовательности и превращается в красный гигант.

Чередование гравитационного сжатия и вспышек продолжается и далее, звезда на этой стадии называется переменной. Для достаточно массивных звезд этот процесс может продолжаться вплоть до образования железного ядра. Дальнейший синтез элементов в реакциях термоядерного горения оказывается неэффективным: зависимость удельной энергии связи от массового числа, представленная на рис. 1, достигает максимума на изотопах железа, что делает синтез более тяжелых ядер энергетически невыгодным. Это означает, что своим возникновением элементы тяжелее железа обязаны принципиально иным процессам.

1.2. Звездный синтез тяжелых ядер

По современным представлениям за образование тяжелых атомных ядер ответственны несколько механизмов, среди которых особо выделяются так называемые s - и r -процессы. В их основе лежит реакция нейтронного захвата,

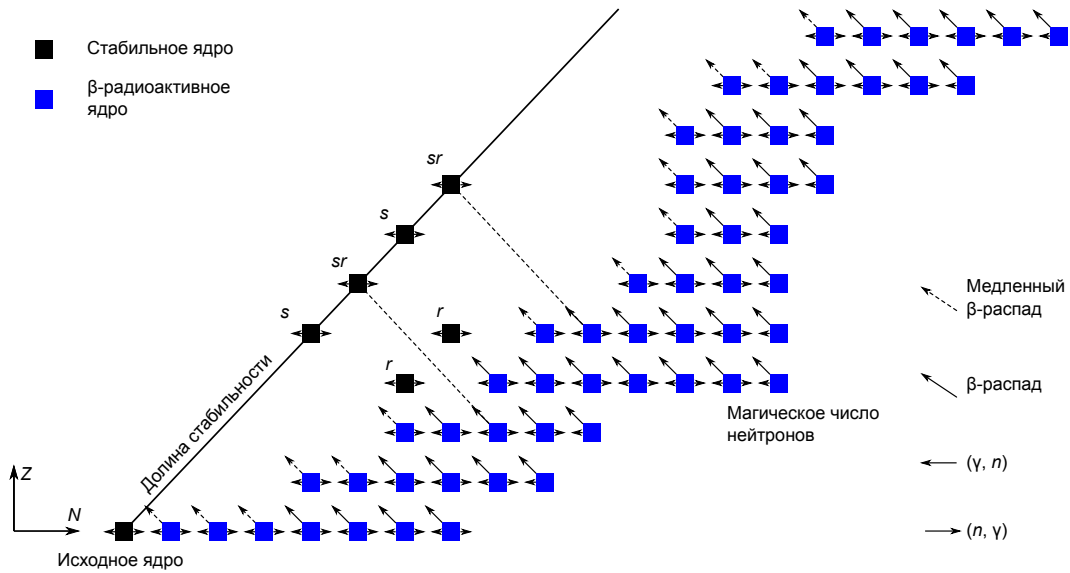


Рис. 2. Треки r -процесса на диаграмме изотопов в осях числа нейтронов N и протонов Z . Движение в положительном направлении вдоль оси N соответствует накоплению нейтронов в реакциях (n, γ) . Со смещением в область нейтроноизбыточных изотопов ядро начинает испытывать β -распады, повышающих его зарядовое число.

поэтому треки этих процессов, то есть траектории движения исходного ядра в осях NZ -диаграммы, лежат в области нейтроноизбыточных изотопов. При накоплении большого числа нейтронов ядро начинает претерпевать β -распады, повышающие ее зарядовое число без потери массы. Это позволяет вернуть нуклид ближе к долине стабильности и продолжать набор массы за счет захвата нейтронов. Характерный вид треков r -процесса представлен на рис. 2.

Как следует из названий, принципиальная разница между “медленным” s - и “быстрым” r -процессом заключается в том, что в последнем случае реакции (n, γ) идут значительно интенсивнее: прежде чем распасться, исходное ядро должно захватить нейтрон около 10 раз, поэтому треки r -процесса смещены значительно дальше в нейтроноизбыточную область. Благодаря этому удастся захватить ряд отстоящих от долины стабильности долгоживущих изотопов, которые не могут быть синтезированы в s -процессе. Кроме того, s -процессом невозможно объяснить существование долгоживущих ядер тяжелее висмута. Дело в том, что область зарядовых чисел $84 \div 89$ лишена стабильных изотопов, скорости s -процесса не позволили бы “перескочить” этот разрыв. Для его преодоления ядро должно стремительно набирать массу, как в случае r -процесса. Тем самым именно r -процесс может быть основным источником таких ядер, как изотопы урана ^{235}U и ^{238}U .

1.3. Сценарии r -процесса

Для протекания r -процесса необходимы чрезвычайно интенсивные потоки нейтронов, а макроскопические параметры звездного вещества должны обеспечивать достаточно высокие сечения нейтронного захвата. В литературе ([3, 4]) приводятся величины плотностей нейтронного облака порядка 10^{20} см^{-3} и выше, рассматриваются температуры более 10^9 К . В качестве исходного вещества

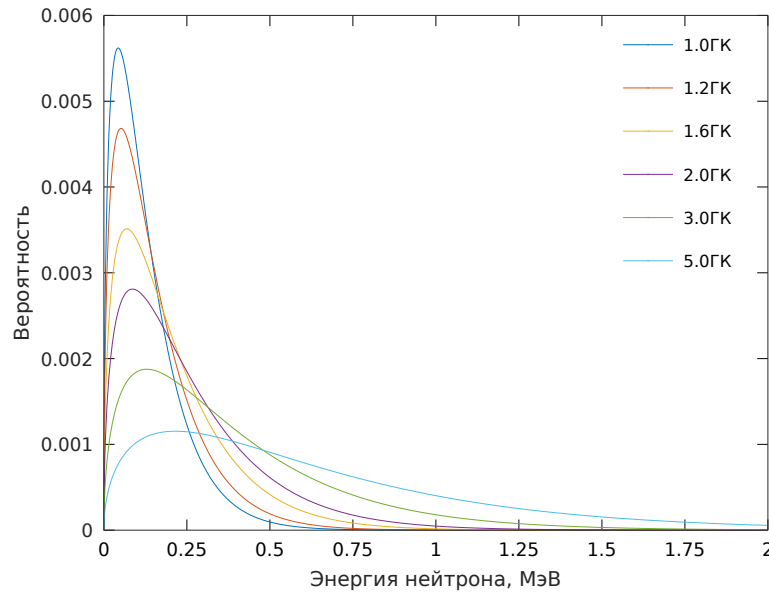


Рис. 3. Распределения кинетических энергий нейтронов при астрофизических температурах вещества.

r -процесса выступают все наработанные в звезде к тому моменту изотопы — ядра в области “железного пика”, являющиеся продуктами реакций термоядерного синтеза, и тяжелые ядра, наработанные в s -процессе.

В условиях термодинамического равновесия нейтроны в звездном веществе подчиняются статистике Максвелла-Больцмана. На рис. 3 представлены равновесные распределения кинетических энергий нейтронов для различных температур. Как видно, средние значения энергий при таких условиях не превышают 0.25 МэВ.

В качестве основного сценария, способного удовлетворить необходимым условиям r -процесса, рассматривают взрывы сверхновых. В результате гравитационного коллапса и последующего отражения вещества от сверхплотного центра звезды происходит столкновение звездных оболочек. При этом интенсивно протекают ядерные реакции, способные обеспечить достаточные плотности нейтронного потока, — например, реакции $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ при столкновении гелиевого и неоновых слоев. Наилучшими кандидатами являются массивные звезды с железными ядрами. Сложность изучения этого сценария r -процесса обусловлена недостаточными знаниями о физике предсверхновых, неточностями моделей взрывной эволюции массивных звезд и недостатком компьютерных мощностей — в частности, до сих пор во многих исследованиях астрофизические симуляции упрощают до одномерного случая.

Другим перспективным сценарием r -процесса является взаимодействие компактных астрофизических объектов: столкновение двух нейтронных звезд или нейтронной звезды с черной дырой. Выброс сверхплотной материи нейтронной звезды и ее декомпрессия могут создавать благоприятные условия для r -процесса. Получение сведений о составе вещества нейтронных звезд и достоверное моделирование их взаимодействия является ключевым шагом в исследовании этого сценария.

2. Расчет скоростей реакций r -процесса

Важной характеристикой ядерной реакции является скорость ее протекания при заданной температуре среды. Скоростью реакции называют вероятность ее протекания в единицу времени на единицу количества каждого исходного изотопа. Эта величина необходима для расчета эволюции ядерной системы, так как явно входит в уравнение эволюции концентрации изотопа.

Скорость реакции вычисляется интегрированием сечений процесса по энергетическим распределениям исходных ядер при заданной температуре. Основная неопределенность состоит в получении величин сечений. Астрофизические ядерные реакции протекают через сильно возбужденные состояния ядер, их невозможно воспроизвести в лабораторных условиях, поэтому сечения приходится рассчитывать из теоретических моделей, причем верифицировать результаты не представляется возможным.

Окончательное выражение для расчета скорости протекания ядерной реакции при температуре T имеет следующий вид:

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi m}} \frac{N_A}{(kT)^{3/2} G(T)} \int_0^\infty \sum_\mu \frac{(2I^\mu + 1)}{(2I^0 + 1)} \sigma^\mu(E) E \exp\left(-\frac{E + E_x^\mu}{kT}\right) dE, \quad (1)$$

где m — приведенная масса налетающей частицы и ядра-мишени, N_A — число Авогадро, k — постоянная Больцмана, $\mu = 0, 1, \dots$ — состояние рождающегося ядра, I^μ — соответствующий этому состоянию спин, $\sigma^\mu(E)$ — сечение рождения ядра в этом состоянии, E_x^μ — энергия возбуждения. Статистическая сумма $G(T)$ рассчитывается по формуле

$$G(T) = \sum_\mu \frac{(2I^\mu + 1)}{(2I^0 + 1)} \exp\left(-\frac{E_x^\mu}{kT}\right)$$

В настоящем разделе проводится серия расчетов звездного r -процесса, отличающихся выбором моделей в расчете сечений некоторых реакций. Разница между результатами симуляций продемонстрирует, насколько велика неопределенность, вносимая в расчет r -процесса вычислением характеристик нейтроноизбыточных изотопов при помощи различных теоретических моделей.

2.1. Расчет со скоростями REACLIB

При моделировании r -процесса в данной работе в качестве сценария была выбрана так называемая каноническая модель [3], не подразумевающая конкретного астрофизического процесса. В качестве исходного распределения ядер выступает однородная среда из ^{56}Fe , так как железо является наиболее тяжелым элементом, который может быть в больших количествах наработан на стадии термоядерного нуклеосинтеза в звезде. Макроскопические параметры задаются температурой 1.2 ГК и плотностью вещества 10^8 г/см³. Концентрации изотопов измеряются по прошествии 1 секунды с начала эволюции системы. Каноническая модель не основывается на определенном астрофизическом

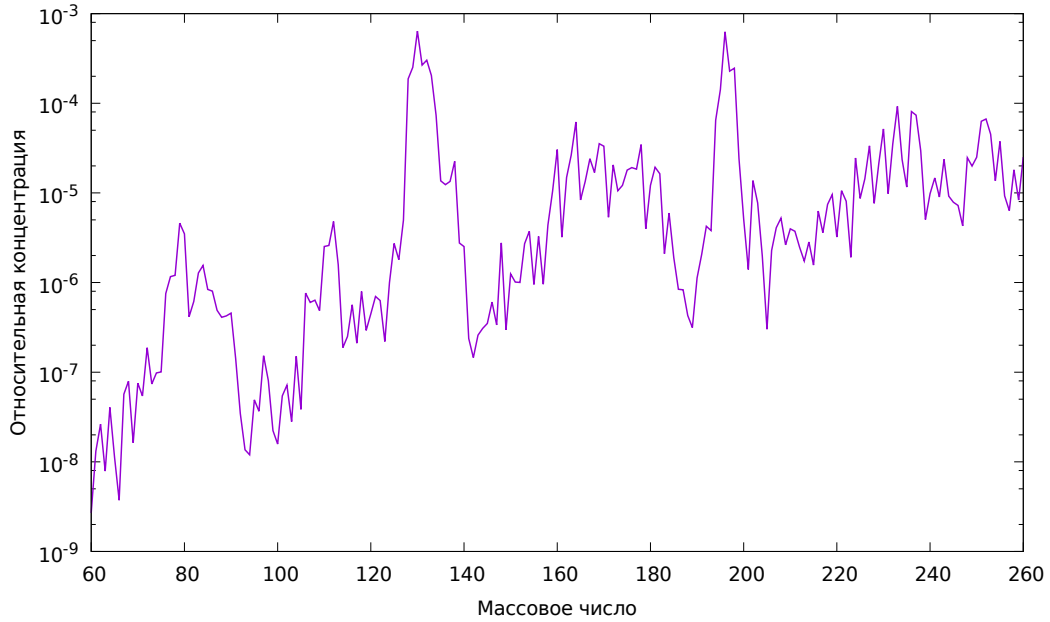


Рис. 4. Распределение концентраций изотопов, полученное при моделировании звездного r -процесса длительностью 1 секунда при температуре 1.2 ГК и плотности 10^8 г/см³ с исходным ядром ^{56}Fe .

сценарии, а отталкивается от условий эффективного протекания r -процесса, поэтому она универсальна и может использоваться в качестве базисного случая для дальнейшего исследования механизма.

В качестве вычислительной базы использовалась библиотека моделирования эволюции звездных ядерных систем SkyNet [5]. В исходный код библиотеки были внесены минимальные изменения, чтобы обеспечить возможность записи скоростей реакций на каждом шаге. В качестве стандартного источника скоростей реакций SkyNet использует базу данных REACLIB [6], составленную специально для задач астрофизического моделирования. Большинство представленных в REACLIB скоростей реакций является результатом теоретического расчета. Одной из основных моделей, использовавшихся для расчета сечений и скоростей реакций в REACLIB, является пакет NON-SMOKER [7]. В настоящей работе для сравнения результатов расчета сечений использовались данные NON-SMOKER, опубликованные на сайте модели.

2.1.1. Результаты моделирования

Полученное при моделировании массовое распределение концентраций представлено на рис. 4. Хорошо заметны пики, соответствующие магическим ядрам. Характерная “гребенка” является проявлением эффекта спаривания в ядрах.

Важным результатом расчета являются выходы каждой задействованной в r -процессе реакции. Эта величина является удобной характеристикой интенсивности реакции, показывающей ее роль в r -процессе. Суммарный выход $N(A, Z)$ реакций, нарабатывающих изотоп (A, Z) , рассчитывается по следующей фор-

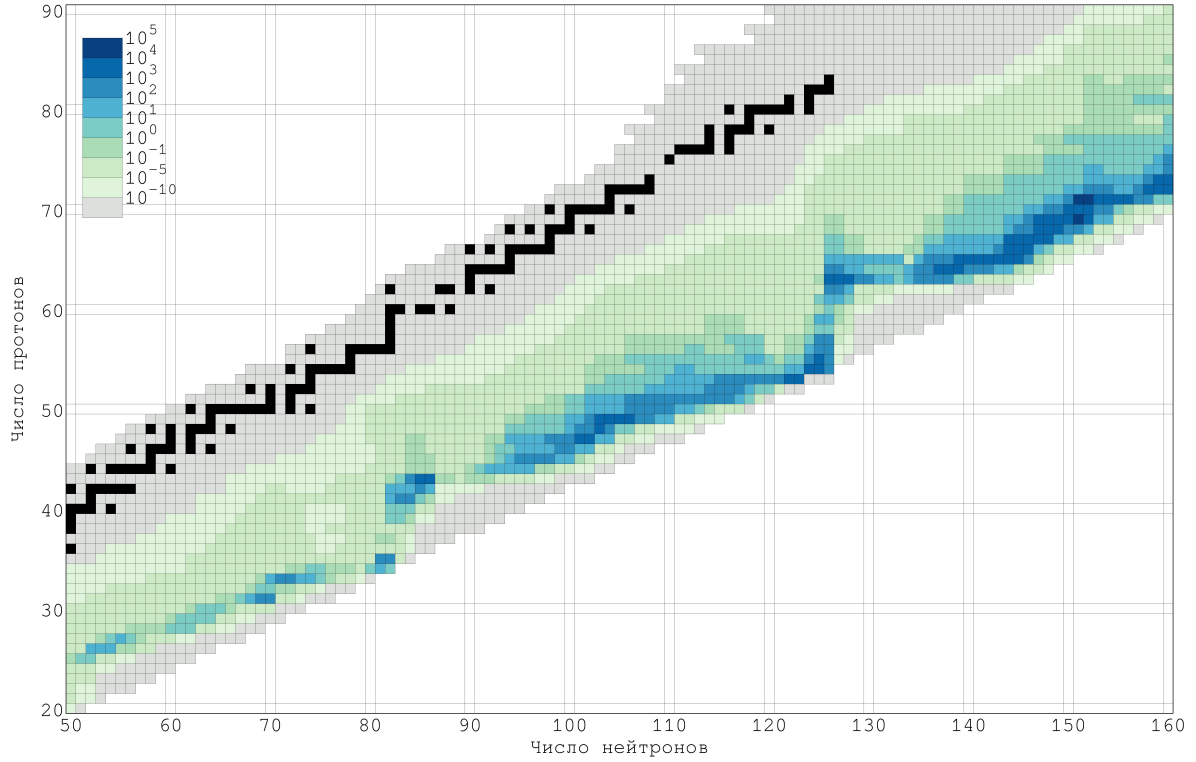


Рис. 5. Карта суммарных выходов изотопов за 1 секунду эволюции модельной системы с исходным ядром ^{56}Fe , температурой 1.2 ГК, плотностью 10^8 г/см^3 . Цветом показано число изотопов данного типа, наработанных за время симуляции, черным отмечены стабильные изотопы.

муле:

$$N(A, Z) = \sum_i \int_0^T \lambda_i(t) \cdot \prod_j y_j(t) dt, \quad (2)$$

где T — время симуляции, $\lambda_i(t)$ — скорости протекания всех реакций, конечным ядром которых является данный изотоп, $y_j(t)$ — концентрация j -го задействованного изотопа.

На рис. 5 представлена карта изотопов, наработанных за время симуляции r -процесса, с отмеченными цветом суммарными выходами реакций, в которых данный изотоп нарабатывается. На карте наблюдается характерное для r -процесса сильное смещение продуктов в нейтроноизбыточную область, прослеживаются горизонтальные треки, соответствующие процессу накопления нейтронов исходными ядрами. Вклад β -распадов проявляется в повышении зарядового числа без потери массы. Хорошо заметны “уголки” рядом с магическими числами 82 и 126 нейтронов — даже сильно нейтроноизбыточные ядра в этих областях генерируются достаточно активно, а при дальнейшем росте массы происходит резкое возвращение ближе к долине стабильности.

Результаты моделирования с оригинальными значениями скоростей из базы данных REACLIB будут использоваться в этом разделе в качестве эталонных. Сравнивая с ними результаты расчетов с модифицированными скоростями, можно судить о степени значимости внесенных в базу данных изменений.

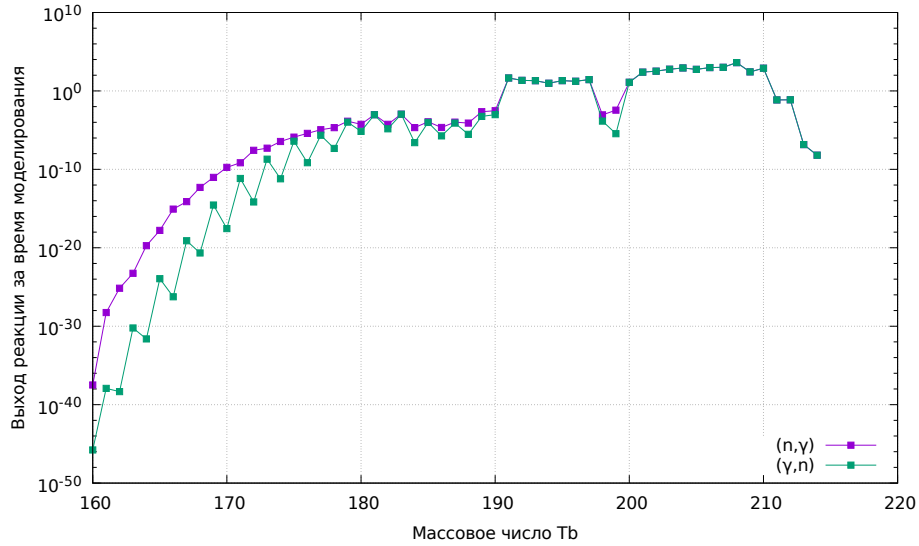


Рис. 6. Выходы реакций (n, γ) и (γ, n) на изотопах тербия за 1 секунду симуляции r -процесса.

2.1.2. Выбор изотопов для расчета скоростей

Для тестов нами были выбраны реакции (n, γ) на нейтроноизбыточных изотопах тербия $^{187\div 193}\text{Tb}$, скорости которых рассчитывались с использованием различных теоретических моделей и затем передавались в SkyNet.

Выбор именно этих ядер для проведения испытаний не случаен, реакции нейтронного захвата на изотопах тербия по результатам расчета с оригинальными скоростями REACLIB идут интенсивнее 80% остальных учтенных реакций r -процесса. На рис. 6 представлены выходы прямой и обратной реакций нейтронного захвата на изотопах тербия, полученные при моделировании r -процесса со стандартными скоростями. Видно, что для ядер с массовыми числами больше 200 выходы прямой и обратной реакции относительно велики и в точности совпадают друг с другом. Это означает, что для данных изотопов в условиях r -процесса соблюдается условие статистического равновесия относительно реакции (n, γ) , то есть изменение ее скорости не повлечет за собой существенное изменение концентраций. Тем самым влияние точности расчета скоростей нейтронного захвата на этих изотопах слишком мало.

С другой стороны, хоть для легких ядер тербия равновесия и не наблюдается, выходы обеих реакций почти равны нулю, соответственно изменение скорости нейтронного захвата также практически не повлияет на массовое распределение.

Все это и обуславливает выбор изотопов $^{187\div 193}\text{Tb}$. Среди них присутствуют ядра, реакция нейтронного захвата на которых близка к статистическому равновесию, и в дальнейшем мы убедимся в том, что изменение скоростей (n, γ) для этих изотопов влияет на массовое распределение в значительно меньшей степени.

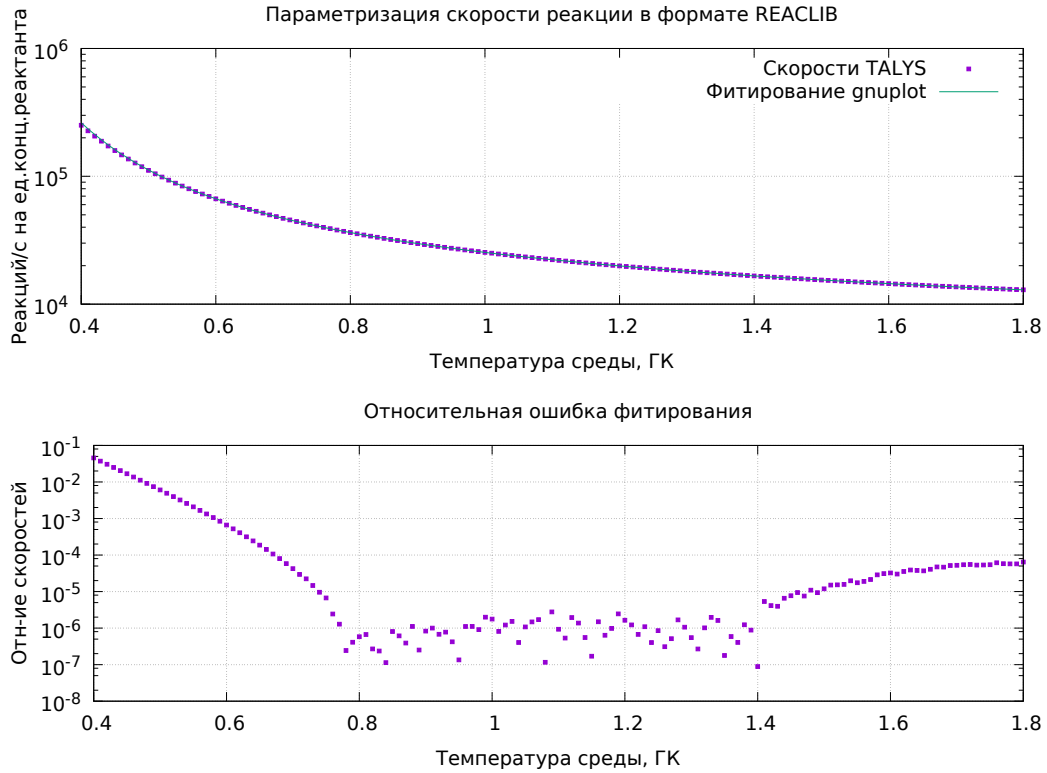


Рис. 7. Представление скорости реакции $^{188}\text{Tb}(n, \gamma)^{189}\text{Tb}$, рассчитанной при помощи программы TALYS, в формате библиотеки REACLIB.

2.1.3. Расчет сечений ядерных реакций с помощью TALYS

Для расчета сечений и скоростей протекания ядерных реакций на отобранных изотпах в данной работе используется пакет TALYS [8], который представляет собой реализацию статистического подхода моделирования ядерных реакций в области энергий до 200 МэВ, включающий в себя испарительный формализм Хаузера-Фешбаха в сочетании с экситонной моделью предравновесной стадии реакции. С помощью TALYS рассчитываются сечения реакций, а путем их свертки с распределением энергий нейтронов при заданной температуре вычисляется искомая скорость реакции λ .

2.1.4. Представление данных в формате REACLIB

В следующих подразделах (2.2, 2.3) будут продемонстрированы результаты симуляции звездного r -процесса со скоростями реакций, вычисленными отдельно при помощи TALYS и записанными поверх исходных данных библиотеки REACLIB. Преобразование вычисленных скоростей ядерных реакций к формату REACLIB, в котором данные подаются в SkyNet, является чисто техническим элементом настоящей работы, однако требует некоторого пояснения.

Скорости ядерных реакций являются функциями температуры, и в REACLIB они представлены коэффициентами $a_{0 \div 6}$ параметризации следующего вида ([6]):

$$\lambda = \exp \left[a_0 + \sum_{i=1}^5 a_i T_9^{\frac{2i-5}{3}} + a_6 \ln T_9 \right], \quad (3)$$

где λ — скорость реакции, а T_9 — температура среды, выраженная в ГК.

Программа TALYS возвращает скорости реакции в виде таблицы в астрофизическом диапазоне температур от 10^5 до 10^{10} К. Для этих перевода в формат REACLIB их необходимо фитировать выражением (3). При выполнении настоящей работы был выбран наиболее простой вариант действий: так как используемая нами модель r -процесса использует приближение константной температуры среды, было достаточно аппроксимировать данные в узком диапазоне вблизи выбранной температуры 1.2 ГК. Тем самым, не погружаясь в проблему точной численной аппроксимации, удалось добиться представления данных TALYS в формате REACLIB с относительными ошибками порядка $10^{-4}\%$ в интересующей нас области температур. Пример аппроксимации для одной из рассмотренных ниже реакций вместе с зависимостью ошибки от температуры приведен на рис. 7. Фитирование производилось при помощи программы Gnuplot.

2.2. Модели плотностей уровней

Вычисление сечений ядерных реакций требует учета возбужденных состояний начального и конечного ядер. При энергиях возбуждения выше нескольких МэВ количество дискретных уровней на единицу энергии настолько велико, что они практически сливаются. Для расчета сечений целесообразно рассматривать не отдельные состояния, а величину плотности ядерных уровней $\rho(E_x, J, \Pi)$ с энергией возбуждения E_x , моментом J и четностью Π . Учет момента и четности необходим для проверки законов сохранения.

Величины плотностей уровней определяют исходя из различных теоретических моделей, среди которых выделяются “эффективные”, неявно учитывающие сложные микроскопические и коллективные эффекты в ядре на основе более простых представлений. Большинство из них основываются на простом и удобном приближении Ферми-газа. В программе для расчета сечений ядерных реакций TALYS представлены три подобные модели.

2.2.1. Приближение Ферми-газа

В модели Ферми-газа ядро является системой невзаимодействующих фермионов двух типов (протоны и нейтроны) в области с постоянным потенциалом. Основываясь на этом представлении, можно получить следующее выражение для плотности ядерных уровней [9]:

$$\rho_F(E_x) = \frac{\sqrt{\pi}}{12a^{1/4}E_x^{5/4}} e^{2\sqrt{aE_x}}, \quad (4)$$

где E_x — энергия возбуждения, a — параметр, связанный с гиромангнитными отношениями нуклонов, на практике выступающий в роли калибровочного параметра.

Чтобы распределение плотностей включало момент и четность, требуется умножить $\rho_F(E_x)$ на их распределения — нормальное по J и равномерное по Π . Кроме того, для учета эффекта спаривания в правых частях выражения (4) от

переменной энергии возбуждения E_x переходят к величине $U = E_x - \Delta$, где Δ — параметр, фактически соответствующий энергии спаривания нуклонов в ядре. Таким образом вносится поправка на необходимость разрыва пары для перевода ядра в следующее возбужденное состояние. Тогда формула распределения плотности ядерных уровней принимает вид

$$\rho_F(E_x, J, \Pi) = \frac{\sqrt{\pi}}{12a^{1/4}U^{5/4}} e^{2\sqrt{a}U} \cdot \frac{2J+1}{2\sigma^2\sqrt{2\pi}\sigma^2} \exp\left[-\frac{J(J+1)}{2\sigma^2}\right] \frac{1}{2}, \quad (5)$$

где σ^2 — величина, характеризующая ширину распределения моментов ядерных состояний.

Переменные a , σ^2 и Δ играют роль калибровочных параметров, выбор которых зависит от модели и часто основывается на нестрогих полуэмпирических представлениях. Параметр a при этом является определяющим, а Δ обычно сводится к энергии спаривания нуклонов. В программе TALYS a рассчитывается на основе данных из библиотеки ядерных параметров RIPL [10].

Рассмотрим модификации модели Ферми-газа для плотности ядерных уровней, представленные в TALYS и применявшиеся в данной работе.

2.2.2. Модель константной температуры

В модели Ферми-газа частицы считаются невзаимодействующими друг с другом. Это приближение хорошо описывает сильно возбужденное ядро, в котором энергиями парных взаимодействий нуклонов можно пренебречь, однако на низких уровнях модель не работает. Модель константной температуры (СТМ), предложенная в [11], представляет собой естественное решение этой проблемы: вводится величина E_M минимальной энергии возбуждения, при которой применима модель Ферми-газа. Для более низких энергий используется подтвержденное для низколежащих уровней выражение

$$\rho_T(E_x) = \frac{1}{T} \exp\left[\frac{E_x - E_0}{T}\right], \quad (6)$$

где T и E_0 — параметры, T носит название ядерной температуры. Тем самым выражение для плотности уровней в модели константной температуры имеет следующий вид:

$$\rho_{СТМ}(E_x, J, \Pi) = \begin{cases} \rho_F(E_x, J, \Pi), & \text{если } E_x \geq E_M \\ \frac{1}{2}R(E_x, J)\rho_T(E_x), & \text{если } E_x \leq E_M, \end{cases} \quad (7)$$

где $R(E_x, J)$ — гауссово распределение момента.

Параметры E_0 , E_M и T связаны между собой и рассчитываются по полуэмпирическим формулам с учетом условия сшивки функции плотности уровней. Поправка сил спаривания Δ для ядра с массовым числом A в модели констант-

ной температуры приближается выражением

$$\Delta_{STM} = \chi \frac{12}{\sqrt{A}}, \quad \chi = \begin{cases} 0 & \text{для нечетно-нечетных} \\ 1 & \text{для четно-нечетных} \\ 2 & \text{для четно-четных} \end{cases}$$

2.2.3. Модель BFM

В модели BFM [12] (Back-shifted Fermi-gas model) общий вид зависимости (5), а учет парных взаимодействий нуклонов осуществляется за счет параметра Δ . Он рассчитывается следующим образом:

$$\Delta_{BFM} = \chi \frac{12}{\sqrt{A}} + \delta, \quad \chi = \begin{cases} -1 & \text{для нечетно-нечетных} \\ 0 & \text{для нечетно-четных} \\ 1 & \text{для четно-четных,} \end{cases}$$

где δ является калибровочной поправкой, наравне с a и σ^2 .

2.2.4. Обобщенная модель сверхтекучей жидкости

Как и СТМ, обобщенная модель сверхтекучей жидкости (GSM) разделяет случаи низких и высоких энергий возбуждения. Учет парных корреляций происходит по аналогии с микроскопической теорией сверхпроводимости Бардина-Купера-Шриффера, основывающейся на понятии куперовской пары — двух связанных электронов с противоположными спинами и скоростями. При помощи теории БКШ были выработаны поправки к параметрам формулы (5), что позволило создать цельную теоретическую модель плотностей ядерных уровней. Подробное феноменологическое описание GSM представлено в [13].

2.2.5. Результаты расчетов

При помощи программы TALYS сечения и скорости протекания реакции нейтронного захвата на ядрах $^{187-193}\text{Tb}$ были рассчитаны с использованием моделей СТМ, BFM и GSM. Результаты расчета сечений представлены на рис. 8 вместе с сечениями, полученными при помощи программы NON-SMOKER, использовавшейся при построении библиотеки астрофизических скоростей реакций REACLIB. Обращает на себя внимание существенное расхождение сечений TALYS и NON-SMOKER, растущее с набором массы.

Кроме того, видно качественное расхождение: сечения TALYS показывают рост вблизи 10 МэВ, в то время как сечения NON-SMOKER убывают. Это обусловлено особенностями программы NON-SMOKER, разработанной специально для расчета сечений астрофизических реакций, идущих через механизм составного ядра. Действительно, при температуре среды 1.2 ГК средняя кинетическая энергия нейтронов составляет порядка 100 кэВ, в чем можно убедиться по рис. 3, — при таких энергиях не имеет смысла учитывать прямой механизм

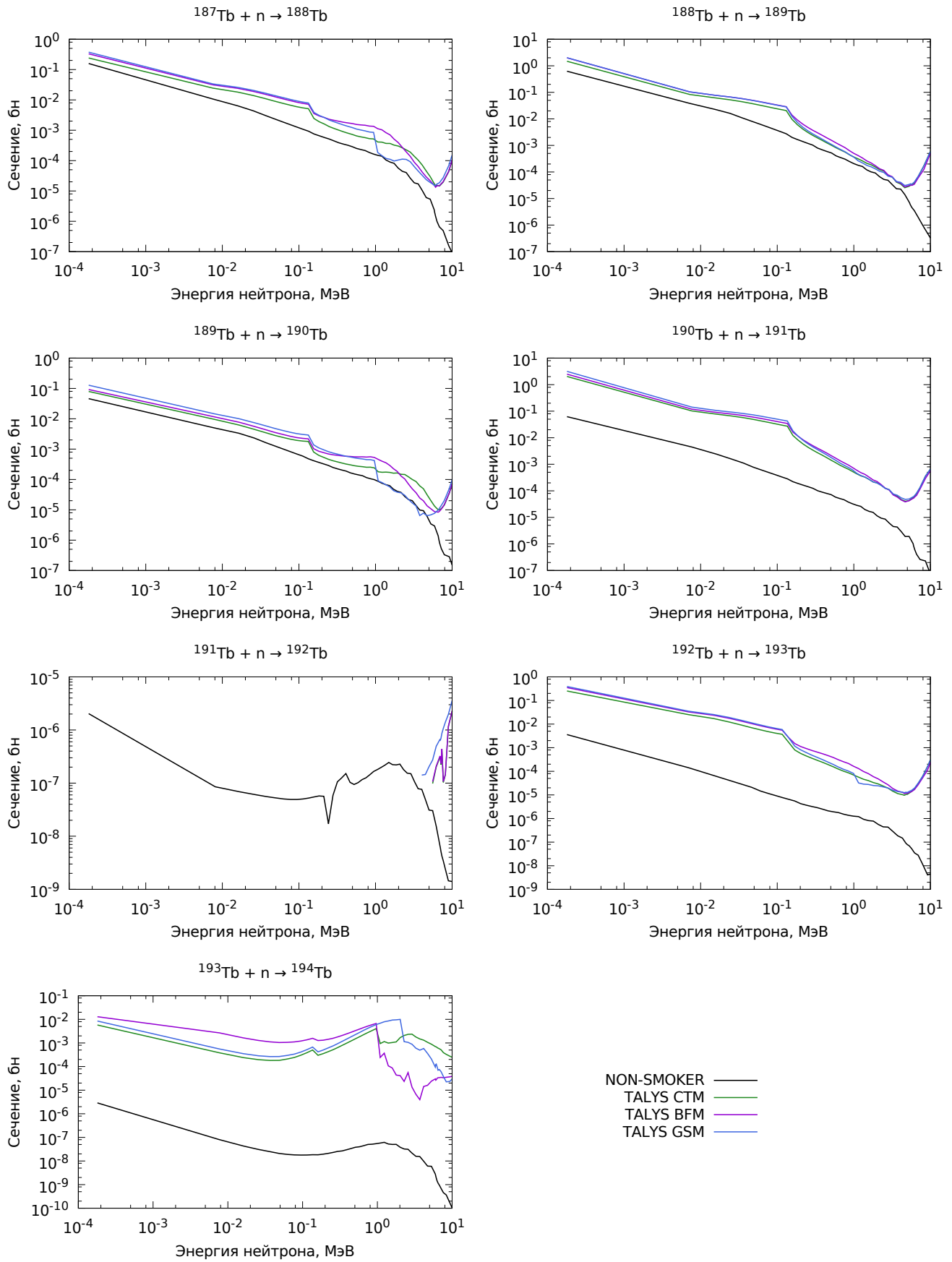


Рис. 8. Сечения реакций (n, γ) на изотопах тербия $^{187\div 193}\text{Tb}$, рассчитанные при помощи NON-SMOKER и TALYS с тремя вариациями модели Ферми-газа.

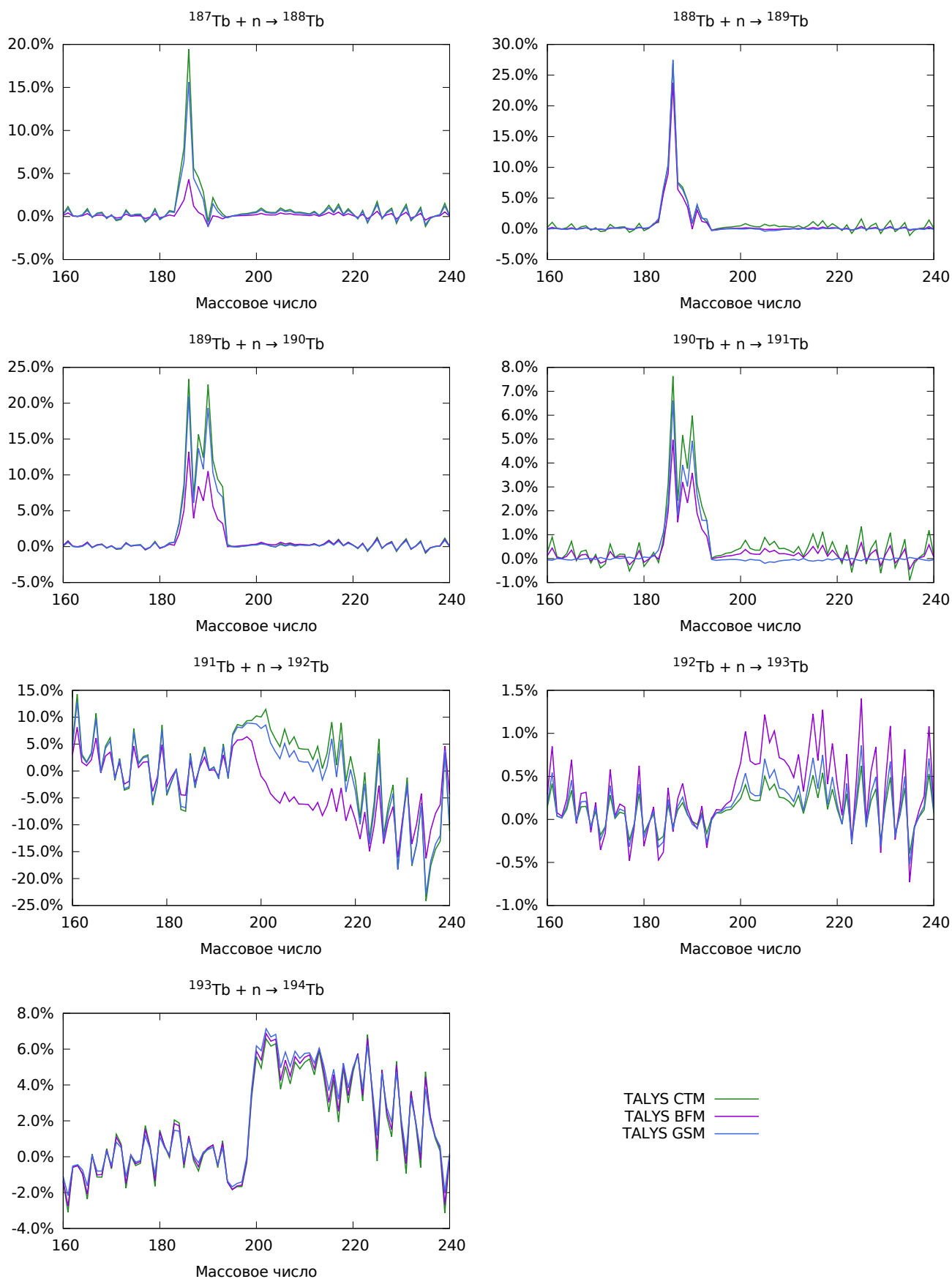


Рис. 9. Изменение концентраций в результирующем массовом распределении модели r -процесса после вычисления скоростей реакций при помощи различных моделей ядерных уровней. Изменениям подвергались скорости реакции (n, γ) на изотопах тербия $^{187-193}\text{Tb}$.

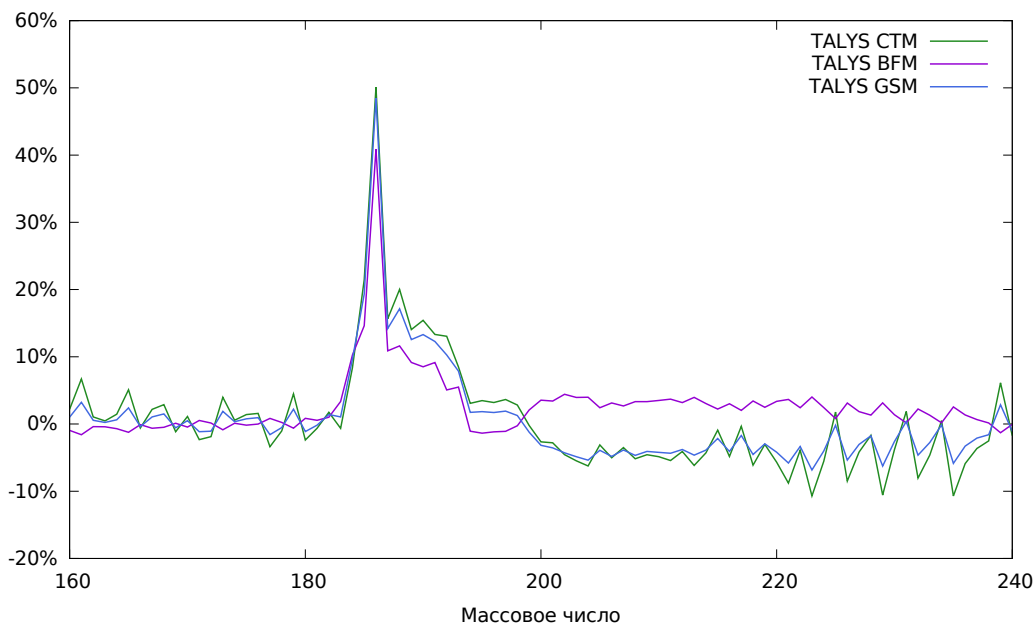


Рис. 10. Суммарное изменение концентраций при изменении скоростей нейтронного захвата с использованием различных моделей уровней для изотопов $^{187\div 193}\text{Tb}$.

или предравновесные реакции. TALYS же является универсальной программой, поэтому рост сечения оправдан учетом механизма предравновесных реакций. С другой стороны, при более высоких температурах распределение имеет высоко-энергетический “хвост”, и для ряда реакций вклад предравновесного процесса вполне может оказаться заметным.

Также на рис. 8 для изотопа ^{191}Tb на низких энергиях отсутствуют сечения всех моделей TALYS. Эта особенность обусловлена тем, что массовая модель, используемая TALYS по умолчанию, устанавливает высокий порог для данной реакции, из-за чего область ненулевых сечений обрезается. Подробно массовые модели будут обсуждены в разделе 2.3.

Для тех же ядер $^{187\div 193}\text{Tb}$ помимо сечений были рассчитаны скорости нейтронного захвата при температуре среды 1.2 ГК с использованием каждой из трех описанных выше вариаций модели Ферми-газа. Для каждой полученной скорости была проведена симуляция звездного r -процесса согласно модели, описанной в разделе 2.1. На рис. 9 показаны степени отклонения концентраций, вычисленных с модифицированными скоростями, от результатов первоначального расчета со стандартными скоростями из библиотеки REACLIB. Как видно, для самых легких из рассмотренных изотопов отклонения представляют собой всплески вплоть до 30% массовых числах, соответствующих рассматриваемым реакциям, с сохранением общего фона. Для реакций на изотопах $^{191\div 193}\text{Tb}$ результаты наглядно показывают, что изменение модели расчета одной единственной реакции способно существенно изменить распределение концентраций, причем достаточно непредсказуемо.

На рис. 10 представлены результаты моделирования r -процесса с одновременным изменением скоростей реакции нейтронного захвата на всех изотопах $^{187\div 193}\text{Tb}$ по описанным выше моделям ядерных уровней. Видно, что неопределенность выбора модели уровней накапливается и в данном случае достигает

50% для рассматриваемых ядер, а для близких к ним по массам до 10 %.

2.3. Массовые модели

При расчете сечений ядерных реакций необходимо знать массы исходных и конечных ядер, так как эти величины используются при вычислении энергетических порогов процессов и приведенной массы взаимодействующих частиц. Характеристики стабильных и долгоживущих изотопов, которые могут быть получены экспериментально, определяются с хорошей точностью и могут быть найдены в банках ядерных данных, таких как AME [2, 14]. Для экзотических же ядер получение точных масс представляет большую трудность. Существующие модели не могут быть проверены экспериментально и, как выясняется, существенно расходятся между собой. Предсказание масс экзотических r -нуклидов в области нейтроноизбыточных изотопов, для которых практически отсутствуют экспериментальные данные, является актуальной проблемой современной физики.

2.3.1. Модель FRDM

Приближение жидкой капли — наиболее простое представление о ядре, которое может быть расширено путем учета микроскопических структурных эффектов. Примером такого расширения является модель FRDM [15], в которой для вычисления макроскопического вклада в энергию используется продвинутое многокомпонентное приближение жидкой капли, а оболочечные эффекты учитываются при помощи метода усреднений Струтинского [16].

В 1995 году были опубликованы теоретические массы и параметры деформации, рассчитанные при помощи модели FRDM1992, для 8979 изотопов вплоть до массового числа 339. Всего существует несколько версий данной микромакроскопической модели, каждая из которых уточняет предыдущую. В программе TALYS массы, полученные с помощью FRDM2012, представлены в качестве одной из опций теоретической массовой модели. Массы FRDM1992 используются в программе NON-SMOKER по умолчанию, они же представлены в библиотеке скоростей астрофизических реакций REACLIB в качестве рекомендованных.

2.3.2. Метод Хартри-Фока-Боголюбова

Построение теоретических массовых моделей, явно учитывающих микроскопическую структуру, затруднено тем фактом, что ядро представляет из себя сложную квантовомеханическую систему многих тел. Для детального описания подобных систем в квантовой химии, ядерной и атомной физике часто применяется метод самосогласованного поля. Идея заключается в построении эффективного потенциала силы, действующей на одну частицу со стороны всей системы и складывающейся из каждого парного взаимодействия. Метод Хартри-

Фока-Боголюбова (HFB) является широко используемой вариацией этого метода, учитывающей парные корреляции частиц.

На базе метода Хартри-Фока-Боголюбова строятся многочисленные модели, использующие различный вид потенциала самосогласованного поля. В программе TALYS они представлены моделями HFB с потенциалами Скирма и Гоньи. Данные метода HFB с потенциалом Скирма используются в программе по умолчанию, сечения, показанные в разделе 2.2 на рис. 8, рассчитаны именно с этой массовой моделью.

2.3.3. Погрешность предсказания масс нейтроноизбыточных ядер

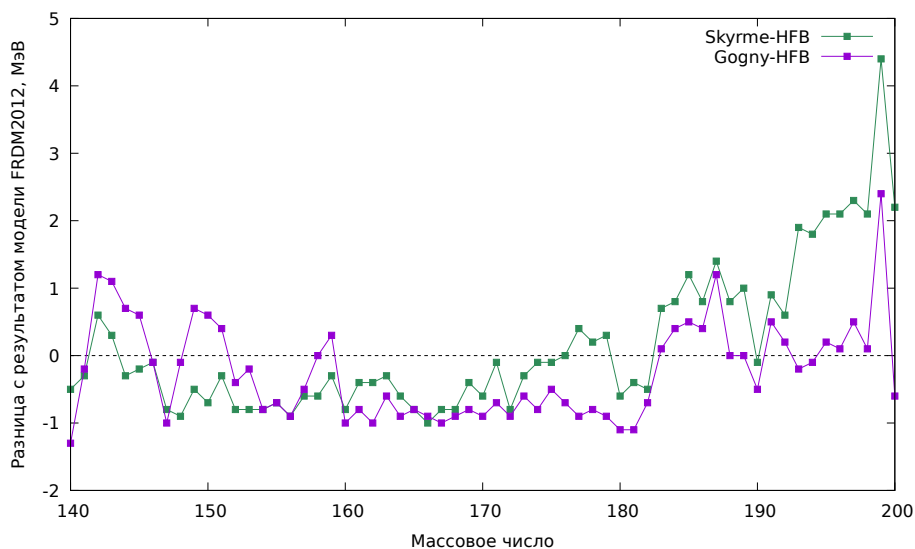


Рис. 11. Разница масс изотопов тербия, рассчитанных с использованием метода HFB с двумя разными потенциалами, и массы, полученной в модели FRDM.

На рис. 11 представлена разность масс изотопов тербия, рассчитанных при помощи метода Хартри-Фока-Боголюбова с потенциалами Скирма и Гоньи, и массы, полученной в макро-микроскопическом приближении FRDM. Как видно, для самых тяжелых нейтроноизбыточных ядер погрешность превышает 4 МэВ. Это согласуется с данными обзора [3], согласно которому разница между массами, полученными различными современными ядерными моделями, может достигать 10 МэВ.

2.3.4. Результаты расчетов

С помощью TALYS для трех теоретических массовых моделей были вычислены сечения реакции нейтронного захвата на ядрах $^{187-193}\text{Tb}$. В качестве модели ядерных уровней оставлена СТМ, использующаяся в TALYS по умолчанию. Результаты расчета представлены на рис. 12. Как в случае рис. 8, наблюдается серьезное расхождение с результатами расчета посредством программы NON-SMOKER для самых тяжелых ядер. Так же становится ясно, что реакция $^{191}\text{Tb}(n, \gamma)^{192}\text{Tb}$ в рамках моделей, основанных на методе HFB, обладает вы-

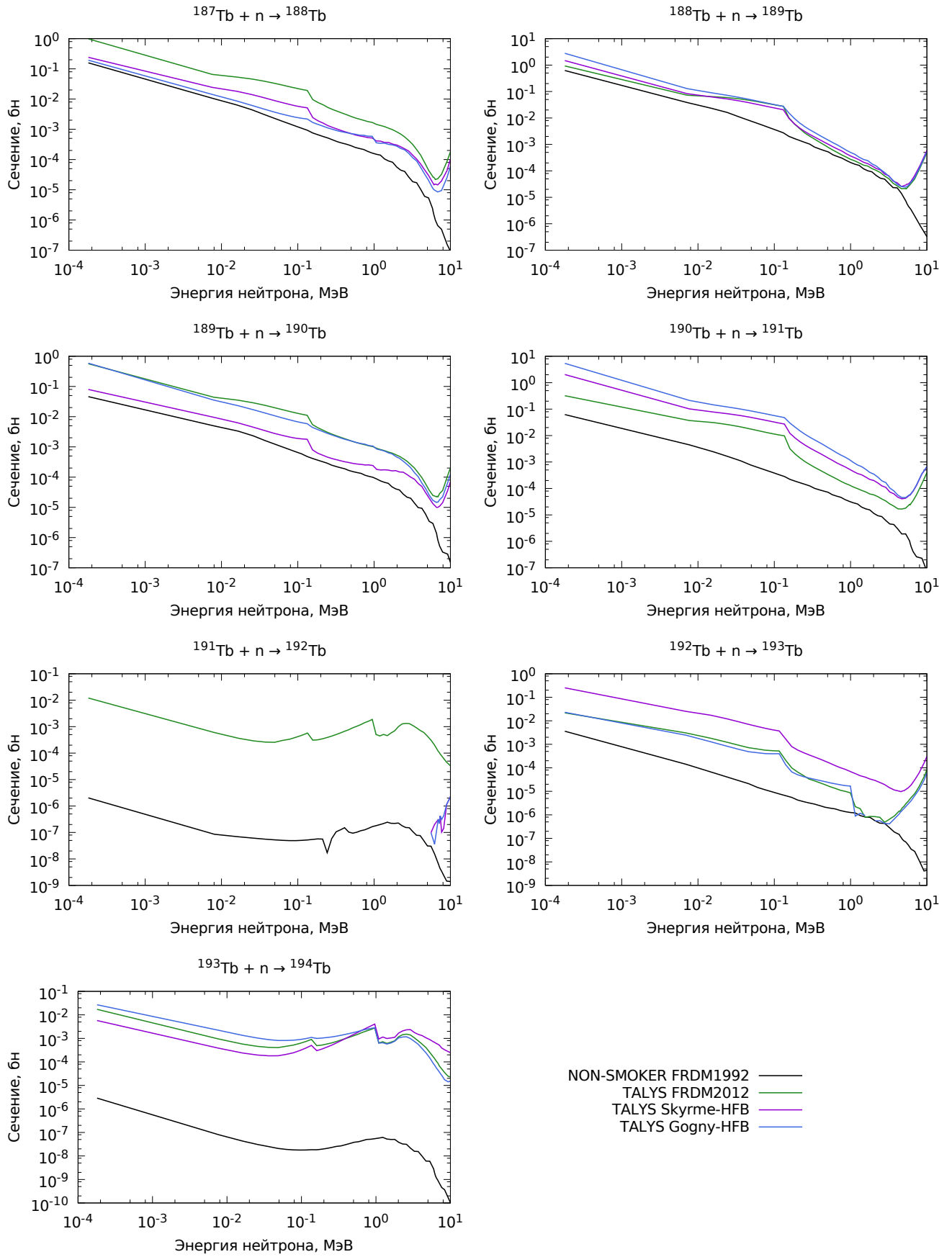


Рис. 12. Сечения реакций (n, γ) на ядрах $^{187\div 193}\text{Tb}$, рассчитанные при помощи программ NON-SMOKER и TALYS для трех массовых моделей: Хартри-Фока-Боголюбова с потенциалами Скирма и Гоньи и жидкокапельной модели FRDM.

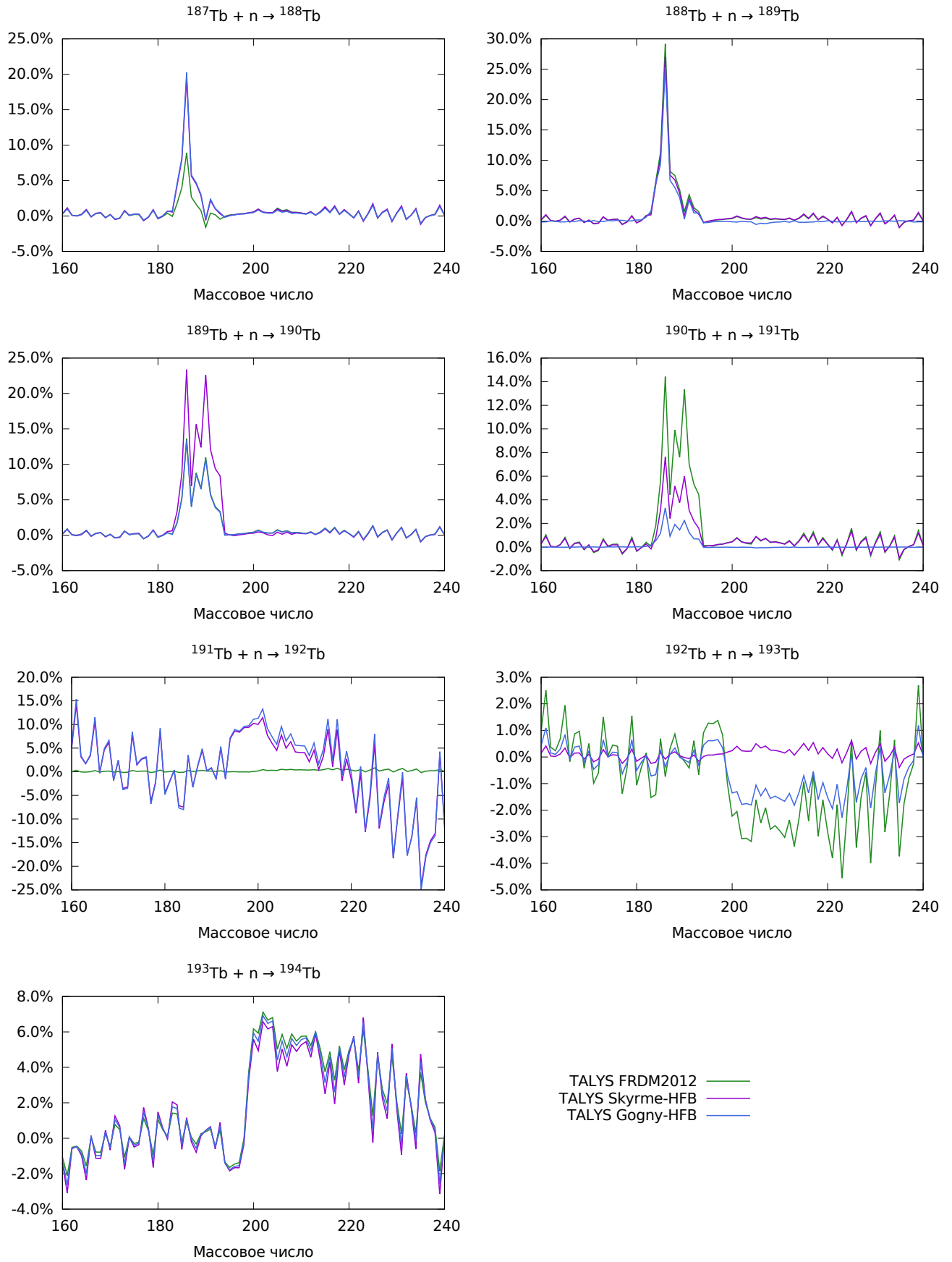


Рис. 13. Изменение концентраций в результирующем массовом распределении модели r -процесса после изменения скоростей реакций при помощи различных массовых моделей. Изменениям подвергались скорости реакции (n, γ) на изотопах тербия $^{187\div 193}\text{Tb}$.

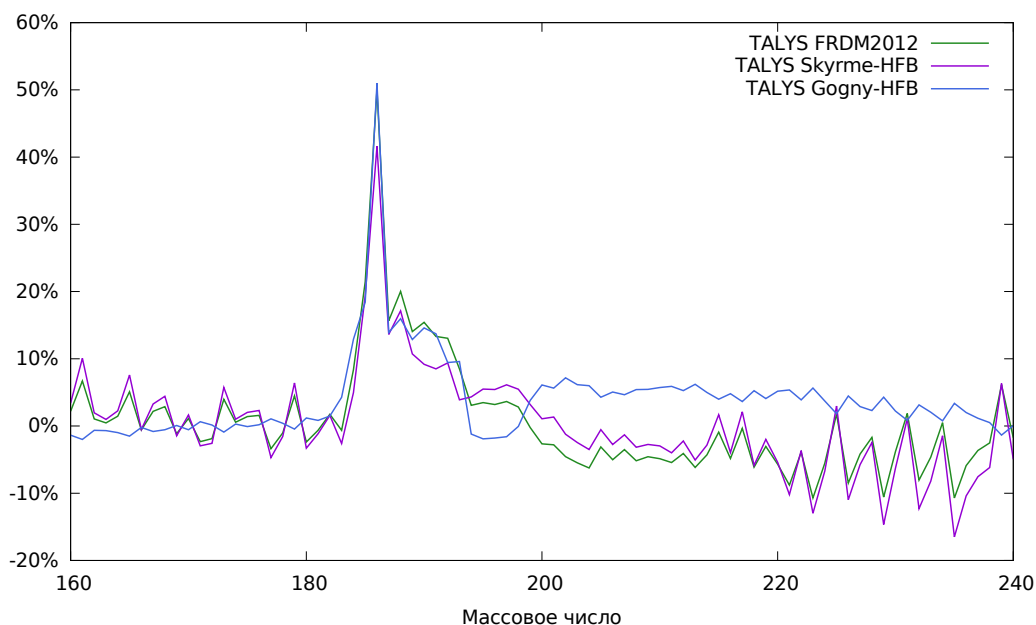


Рис. 14. Суммарное изменение концентраций при изменении скоростей нейтронного захвата с использованием различных массовых моделей для изотопов $^{187-193}\text{Tb}$.

соким энергетическим порогом, что и является причиной отсутствия сечений низкоэнергетической реакции.

Обращает на себя внимание сильное различие низкоэнергетических сечений, полученных с помощью различных массовых моделей TALYS. Это показывает роль массовых моделей, на основе которых рассчитываются такие важные параметры реакции, как энергетический порог.

Результаты моделирования r -процесса с рассчитанными таким образом скоростями реакций представлены на рис. 13. Изменение результирующих массовых распределений такое же существенное, как и в случае с моделями уровней, относительные отклонения достигают 30 %. Наименее предсказуемая картина наблюдается для трех самых тяжелых ядер, сечения реакций на которых малы и, судя по рис. 12, кардинально расходятся в различных моделях.

Результаты расчета r -процесса с одновременным изменением скоростей реакции нейтронного захвата на всех изотопах $^{187-193}\text{Tb}$ по описанным выше теоретическим массовым моделям представлены на рис. 14. Как видно, степень неопределенности для массовых моделей сопоставима с неопределенностью, связанной с выбором модели уровней.

2.4. Итоги исследования влияния моделей ядерных реакций

На основании представленных результатов можно сделать промежуточный вывод: ошибка расчета, связанная с выбором различных теоретических моделей при расчете скоростей протекания ядерных реакций, весьма существенна. Сечения реакций нейтронного захвата на тяжелых изотопах тербия, полученные с использованием различных моделей ядерных уровней и масс, расходятся между собой вплоть до трех порядков, что дает сопоставимые различия при вычислении скоростей протекания тех же реакций. Эти расхождения приводят

к тому, что итоговое массовое распределение, полученное при моделировании r -процесса, демонстрирует отклонения вплоть до 50%.

Необходимо также отметить, что влияние точности расчета скоростей на разных изотопах существенно отличается. Среди рассмотренных нами реакций минимальные изменения в конечном массовом распределении наблюдались для нейтронных захватов на трех самых тяжелых изотопах: ^{191}Tb , ^{192}Tb и ^{193}Tb . Эти изотопы находятся близко к статистическому равновесию относительно реакции (n, γ) , в чем можно убедиться по рис. 6. Изменение скоростей прямых реакций на них дает минимальный эффект на конечном распределении концентраций r -процесса.

Зависимость изменения результирующих концентраций от изменения скоростей представляется сильно нелинейной, имеющей тенденцию к накоплению и увеличению по мере изменения скоростей все большего числа реакций. Минимизировать эти ошибки возможно лишь посредством совершенствования наших представлений об экзотических нейтроноизбыточных ядрах, что довольно сложно в условиях отсутствия экспериментальных данных.

Подходя к проблеме усовершенствования существующих методов компьютерного моделирования процессов звездного горения, являющейся непростой задачей самой по себе, необходимо помнить о неопределенности, вносимой входными данными расчета.

3. Численный расчет звездного горения

Как уже отмечалось, главным методом исследования нуклеосинтеза тяжелых ядер и в целом процессов 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 этой системы, усложняющих ее решение: огромные размеры матриц, различие коэффициентов уравнений на десятки порядков, неопределенность начальных условий. В связи с этим многие существующие численные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений при расчете процессов нуклеосинтеза оказываются либо недостаточно точны, либо слишком трудоемки для использования в программах глобальной симуляции звездной эволюции.

В данном разделе проводится исследование различных методов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на предмет их применимости к задаче термоядерного астрофизического горения. В частности, предпринимается попытка программной реализации методов QSS [17, 18] и специальной явной схемы [19, 20] на основе системы астрофизической симуляции MESA [21]. Выводы, сделанные в настоящей работе, должны помочь в поиске наиболее оптимальной расчетной схемы, на основе которой в дальнейшем можно будет с большей эффективностью моделировать r -процесс и другие механизмы звездного нуклеосинтеза.

3.1. Постановка задачи

3.1.1. Система уравнений ядерных превращений

Эволюция концентрации каждого отдельного изотопа в ядерной астрофизической системе описывается дифференциальным уравнением следующего вида:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{k \in K_i} \lambda_k g_k \prod_{l \in L_k} y_l, \quad (8)$$

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 -й 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.

Записанные для каждого изотопа, эти уравнения образуют систему:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}|_{t=0} = \mathbf{y}_0, \quad (9)$$

где $\mathbf{y}$, $\mathbf{f}$ — векторы значений концентраций изотопов и правых частей уравнений (8) соответственно, $\mathbf{y}_0$ содержит начальные концентрации.

В качестве примера рассмотрим реакцию $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$, протекающую со скоростью λ . Запишем фрагмент системы уравнений 9, определяемый этой реакцией:

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

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. Итоговая система обладает очень большой размерностью.

3.1.2. Особенности задачи звездного горения

Системы уравнений, подобные 9, задающие эволюцию некоторого вектора под действием многих факторов, часто встречаются в физике, химии, экономике и других областях науки. Для их решения разработано множество численных методов, многие из которых реализованы в виде пакетов компьютерных вычислений. Тем не менее ни один из этих методов не является универсальным. Широко применяющиеся классические явные численные схемы, среди которых семейство методов Рунге-Кутты и, в частности, метод Эйлера, оказываются неприменимы к некоторым задачам, которые принято называть жесткими. Понятие жесткости довольно нестрогое, можно ограничиться следующим определением: жесткими называются такие системы ОДУ, решение которых при помощи явных численных методов дает неконтролируемый рост ошибки, который не может быть устранен путем уменьшения шага интегрирования.

Задача моделирования астрофизических ядерных процессов является сверхжесткой. Ее жесткость обусловлена большим разбросом коэффициентов уравнений, то есть величин скоростей протекания реакций. В предыдущем разделе 2 мы убедились, что даже расчет сечений одной и той же реакции нейтронного захвата с учетом разных ядерных моделей может давать значения, различающиеся на порядки. В общем случае скорости различных астрофизических реакций могут различаться на десятки порядков. При этом понижать жесткость задачи путем пренебрежения некоторыми реакциями недопустимо, так как целью моделирования процессов нуклеосинтеза является установление мельчайших выходов самых малораспространенных изотопов.

Итак, моделирование звездного нуклеосинтеза требует применения численных методов, специализированных для решения сверхжестких задач.

3.2. Неявные численные методы

Общепринятым способом решения жестких задач является применение неявных методов, которые, в отличие от явных, обладают большей устойчивостью. Однако в неявные разностные схемы неизвестная величина, то есть значение решения на следующем шаге, входит не единожды, поэтому для ее нахождения

приходится решать алгебраическое уравнение. Тем самым на один шаг интегрирования неявный метод затрачивает значительно большее число операций, чем требовалось бы явному, если он применим к рассматриваемой задаче.

3.2.1. Неявный метод Эйлера

Библиотека симуляции процессов нуклеосинтеза SkyNet, представленная в разделе 2 и применявшаяся нами для моделирования r -процесса с измененными скоростями некоторых реакций, использует неявную модификацию метода Эйлера для расчета эволюции концентраций изотопов. Неявный метод Эйлера задает значение решения в следующем узле $\mathbf{y}_{n+1}$ при помощи уравнения

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}), \quad (10)$$

где h — длина шага по времени. Как видно, неизвестная величина $\mathbf{y}_{n+1}$ в общем случае не может быть выражена явно. Разрешение этого уравнения относительно $\mathbf{y}_{n+1}$ процедурой Ньютона требует вычисления якобиана, что значительно повышает трудоемкость расчета. Кроме того существует опасность, что итерационный процесс не сойдется к допустимой величине ошибки за конечное время, что существенно снижает надежность метода. На практике обычно ограничиваются конечным числом итераций, а требуемая точность достигается путем параллельного расчета на двух разных сетках интегрирования — тогда ошибку оценить по разности решений с различным шагом.

При использовании конечного числа итераций неявный метод Эйлера фактически превращается в явную схему, которую можно применять для решения жестких систем уравнений. Для одной итерации метода Ньютона, которой часто и ограничиваются, формула для расчета решения на следующем шаге имеет вид

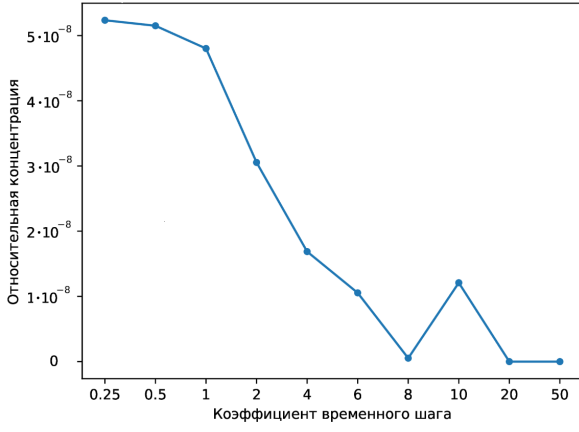
$$(\mathbf{I}/h - \mathbf{J}) \cdot \Delta = \mathbf{f}(\mathbf{y}_n), \quad (11)$$

где $\mathbf{I}$ — единичная матрица, $\mathbf{J}$ — якобиан правых частей, $J_k^i = \partial f_i / \partial y_k$, $\Delta = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n$ — искомое изменение вектора концентраций.

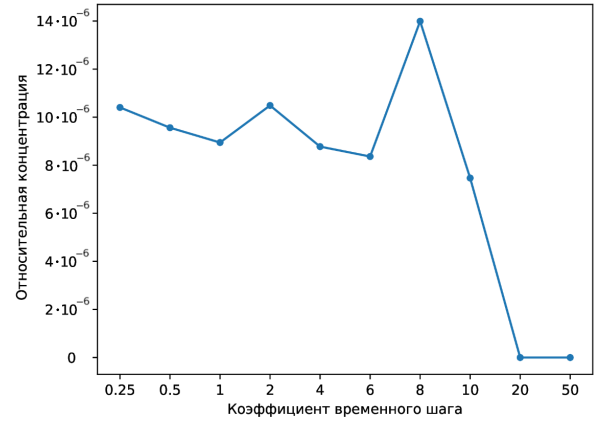
Основным недостатком неявного метода Эйлера является его большая трудоемкость, сохраняющаяся даже при выборе конечного числа итераций процедуры Ньютона. Большое число требуемых операций обусловлено необходимостью вычисления якобиана $\mathbf{J}$ и последующей работы с ним. Расчет односекундного r -процесса на персональном компьютере посредством библиотеки SkyNet занимал около 20 минут. Для крупномасштабных симуляций астрофизических процессов такие времена получения решения неприемлемы.

3.2.2. Влияние шага интегрирования

Очевидно, что величина временного шага h существенно влияет на результат моделирования. Для оценки этого влияния расчет r -процесса неявным методом Эйлера при помощи библиотеки SkyNet был проведен нами на различных сетках интегрирования, величина шага модифицировалась искусственно.



(a) $A = 56$



(b) $A = 208$

Рис. 15. Влияние размера шага на конечные концентрации изотопов для двух массовых чисел A . Расчет при помощи библиотеки SkyNet.

Результаты для изотопов с массовыми числами 56 и 208 приведены на рис. 15. Как видно, вариации шага в пределах порядка могут привести к исчезновению изотопов с малыми концентрациями, представляющих интерес при изучении распространенности ядер.

Для получения оптимальной густоты сетки интегрирования пользуются всевозможными реализациями метода адаптивного выбора шага, сводящегося к оценке величины полученной на текущем шаге ошибки и принятия программой решения о необходимости уменьшить шаг для повышения точности расчета или увеличить его для сокращения времени симуляции.

3.2.3. Численный метод системы MESA

Продвинутые неявные методы обладают большей точностью и производительностью. В библиотеке астрофизического моделирования MESA в качестве штатной схемы интегрирования используется неявный метод переменного порядка точности [22, 23], 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:

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

Для оценки точности эта последовательность действий выполняется на каждом шаге как минимум два раза с разными значениями m , то есть с разной точностью. Ошибка определяется как разность результатов двух прогонок. Значение ошибки используется в методе адаптивного шага: если ошибка превышает

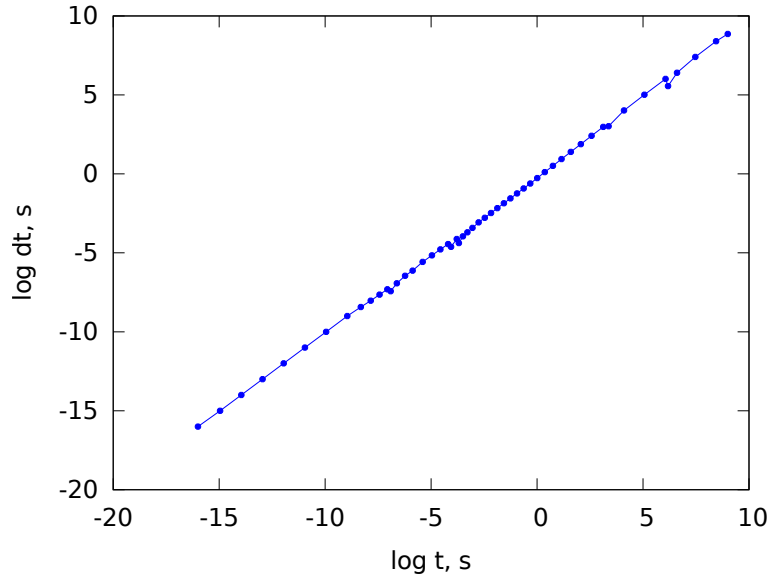


Рис. 16. Изменение размера шага во время работы штатной схемы [22] системы MESA.

желаемую, шаг уменьшается, а при удовлетворительной ошибке увеличивается. Пример поведения шага при моделировании процесса горения звездного вещества описанной схемой MESA приведен на рис. 16. В целях контроля точности в алгоритме также варьируются значения m .

Скорость расчета модельных ядерных систем, описывающих конкретные процессы астрофизического нуклеосинтеза и включающих лишь десятки изотопов, при помощи данного неявного метода очень высока. Однако симуляция таких глобальных явлений, как r -процесс, требует единовременного отслеживания изменения концентраций тысяч изотопов. При этом требуется вычислять якобиан огромной системы уравнений и совершать с ним матричные операции, что многократно повышает трудоемкость метода. Тем самым метод MESA, будучи чрезвычайно точным и эффективным на малых системах ядерных реакций, не подходит для расчета r -процесса.

3.2.4. Якобиан системы уравнений

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

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

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

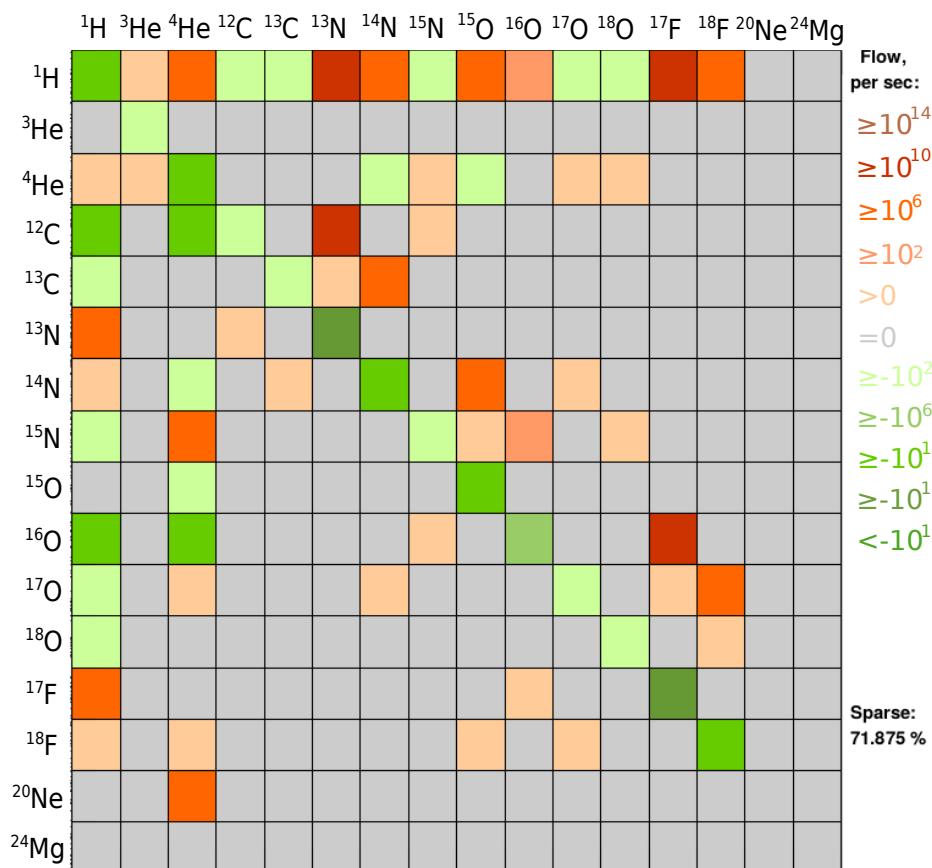


Рис. 17. Пример якобиана модельной системы из 16 изотопов. Цветом показаны порядки ненулевых элементов.

вклад. Пример модельного якобиана, полученного в ходе исследования численных схем, приведен на рис. 17. В соответствующем реальной астрофизической системе якобиане число элементов достигает сотен тысяч, что позволяет представить трудоемкость такого расчета.

3.3. 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 [17] и [20], а в исследовании [18] 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 (8) превращений заключается в том, что все процессы, которым соответствуют элементы суммы в правой части,

делятся на нарабатывающие и расходуемые — первые имеют положительные значения, вторые отрицательные. Тогда для i -й компоненты системы можно записать:

$$\frac{dy_i}{dt} = f_i(t) = q_i(t) - p_i(t)y_i(t) \quad (12)$$

3.3.1. Специальная явная схема

Метод, описанный в работе [19, 20], применяет возможность разделения положительных $q_i(t)$ и отрицательных $p_i(t)y_i(t)$ вкладов следующим образом:

$$y_{i,n+1} = \frac{y_{i,n} + hq_i(\tilde{\mathbf{y}})[1 + \frac{1}{2}hq_j(\tilde{\mathbf{y}})]}{1 + hp_i(\tilde{\mathbf{y}}) + \frac{1}{2}h^2p_j^2(\tilde{\mathbf{y}})}, \quad \tilde{\mathbf{y}} = \frac{1}{2}(\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_n) \quad (13)$$

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 : $dl^2 = \sum_{j=0}^N du_j^2$, 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. 18a), на порядки отличающиеся от результатов эталонной схемы (рис. 18b). 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.

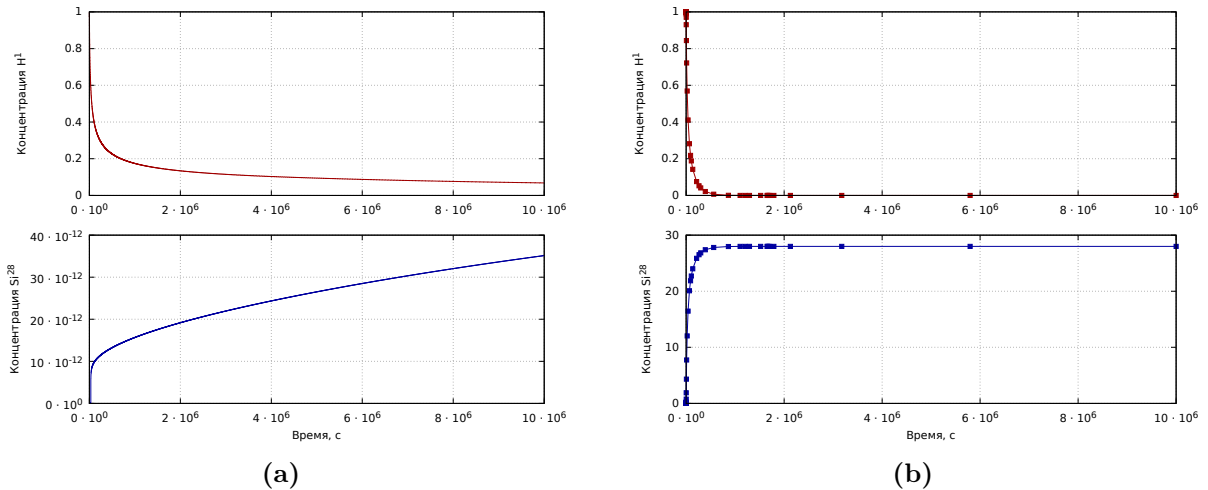


Рис. 18. Сравнение результатов расчета системы из 31 изотопа специальной схемой (a) и неявным методом MESA (b) для изотопов ^1H и ^{28}Si .

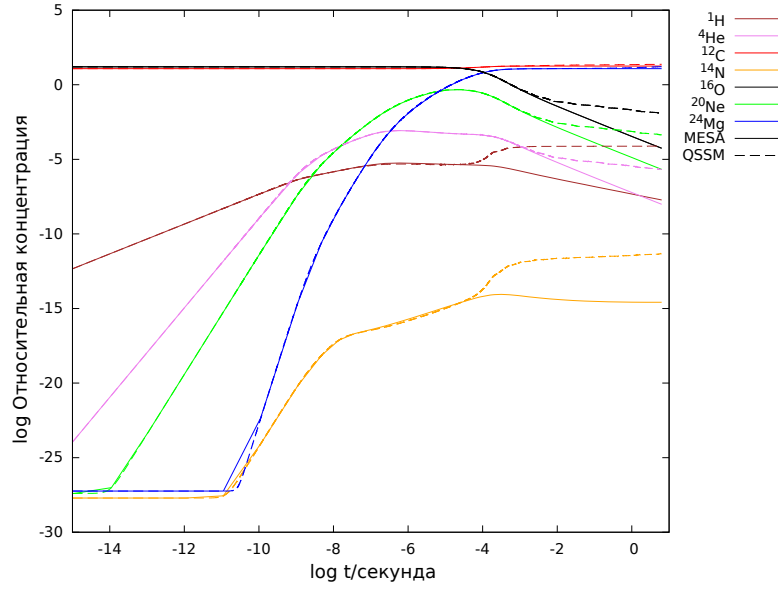


Рис. 19. Сравнение результатов моделирования «горячего» CNO-цикла, полученных при помощи штатного интегратора библиотеки MESA и исследуемого метода QSS.

Из-за этой особенности метод, по всей видимости, неприменим к поставленной задаче.

3.3.2. Метод QSS

Другой явный метод, предложенный в работе [17], был исследован в работе [18] 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 (12). Анализ этих решений позволил построить два выражения:

$$y_p = y_0 + \frac{\Delta t(q_0 - p_0 y_0)}{1 + \alpha(\Delta t p_0) \Delta t p_0}, \quad y_c = y_0 + \frac{\Delta t(\tilde{q} - \bar{p} y_0)}{1 + \alpha(\Delta t \bar{p}) \Delta t \bar{p}} \quad (14)$$

Величины y_p и y_c 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:

$$\alpha(r) = \frac{1 - (1 - e^{-r})/r}{1 - e^{-r}} \quad (15)$$

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 выше. 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. 19. 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.

3.4. Итоги исследования численных схем

По результатам изучения представленных в данном разделе методов решения жестких систем ОДУ можно сделать ряд выводов, важных для дальнейшей работы в этой области. Из всех рассмотренных нами численных схем неявный метод MESA на данный момент остается самым точным и оптимизированным. При этом совершенно ясно, что неявные методы подходят для решения задач трансмутации ядер на малых системах реакций с числом изотопов не более сотен. Ограничение обусловлено необходимостью расчета матриц огромных размеров, оценить которые можно по рис. 17. При моделировании крупномасштабных процессов взрывного нуклеосинтеза, таких как r -процесс, размеры матрицы якобиана делают процесс моделирования неприемлемо трудоемким.

Как мы убедились на примере неявного метода Эйлера, реализованного в библиотеке SkyNet, применение неявных схем к задаче расчета r -процесса принципиально возможно, однако время получение решения слишком велико для интегрирования этих алгоритмов в системы крупномасштабной астрофизической симуляции. Более того, при моделировании эволюции звезд рассчитывать изменение концентраций изотопов необходимо сразу в нескольких зонах, кардинально отличающихся термодинамическими параметрами и составом вещества, из-за чего трудоемкость схемы расчета будет сказываться еще драматичнее.

В качестве альтернативы неявным методам, лишенной проблемы повышенной трудоемкости, мы рассматриваем явные схемы, основывающиеся на специфике конкретной задачи и потому сохраняющие устойчивость на ней. Специальная явная схема [19, 20] оказалась неподходящей для моделирования процессов нуклеосинтеза из-за свойства неконсервативности. Метод QSS [17, 18] расходится с эталонным интегратором MESA, а его программная реализация требует оптимизации, однако сам метод прост и демонстрирует лучшие результаты, чем специальная явная схема, поэтому его исследование целесообразно продолжать.

Выводы

В ходе настоящей работы было проведено исследование ряда важных аспектов численного расчета астрофизического r -процесса. В разделе 2 исследовалось влияние неопределенности выбора теоретических моделей ядерных масс и плотностей уровней при расчете скоростей реакций на конечный результат компьютерного расчета r -процесса. В качестве эталонного источника использовалась библиотека скоростей астрофизических ядерных реакций REACLIB [6]. Скорости рассчитывались при помощи программы TALYS [8], полученные данные передавались для расчета в симуляцию r -процесса, основанную на библиотеке моделирования нуклеосинтеза SkyNet [5].

По результатам расчетов установлено, что применение различных моделей реакций может приводить к расхождениям распределений концентраций изотопов, наработанных в r -процессе, с эталонными данными вплоть до 50%. При этом величина отклонения зависит от изменения входных данных сильно нелинейно, ее чрезвычайно сложно контролировать. Минимизировать величину погрешности выбора модели возможно лишь за счет углубления наших знаний реакциях на нейтроноизбыточных ядрах.

Скорости астрофизических ядерных реакций являются необходимыми входными данными расчета эволюции ядерных систем. Само компьютерное моделирование так же является важным этапом исследования r -процесса. В разделе 3 данной работы был изучен ряд численных методов на предмет применимости к моделированию крупномасштабных механизмов нуклеосинтеза, вовлекающих тысячи изотопов. Из-за повышенной жесткости системы уравнений, задающей эволюцию вектора концентраций ядер, классические явные методы оказываются неприменимы к этой задаче. Было установлено, что неявные методы, такие как неявная модификация схемы Эйлера и схема пакета MESA [21], слишком трудоемки, чтобы использовать их как часть программ глобальной симуляции звездной эволюции.

В связи с этим большой интерес представляют специализированные явные схемы, учитывающие особенности математической формулировки задачи и потому обладающие повышенной устойчивостью на ней. В таких методам относятся специальная явная схема [19, 20] и метод QSS [17, 18], изначально разработанные для задач химической кинетики, изученные и реализованные в рамках данной работы. Специальная явная схема из-за свойства неконсервативности оказалась неприменима к рассматриваемой задаче. Результаты метода QSS оказались более оптимистичными, хотя реализация этой схемы требует доработки и оптимизации. Наша работа над усовершенствованием основанной на методе QSS программы продолжается, планируется реализовать доработанный алгоритм выбора шага интегрирования и контроль баланса концентраций.

Заключение

Сегодня изучение процессов звездного нуклеосинтеза в значительной степени осложнено неполнотой наших знаний о его условиях протекания, невозможностью проверки теории экспериментальными данными для экзотических нуклидов и недостатками методов компьютерного моделирования. Было установлено, что использование различных ядерных моделей способно существенно изменить распределение масс, получаемое при численном моделировании звездного r -процесса. Это мотивирует на уточнение существующих представлений о реакциях на нейтроноизбыточных изотопах и усовершенствование моделей ядерных реакций.

Недостатки неявных численных методов применительно к задаче эволюции реалистичных звездных ядерных систем не позволяют проводить полномасштабные астрофизические симуляции с расчетом многозонного горения. Тем не менее в перспективе видится возможность замещения неявных численных схем специализированными явными методами, построенными на основе особенностей конкретной задачи и потому сохраняющих устойчивость решения для нее. Такие методы значительно менее трудоемки, точны и просты. Должным образом реализованные и оптимизированные, они способны многократно облегчить и ускорить процесс расчета термоядерного горения в звездах, что важно как с точки зрения исследования процессов нуклеосинтеза, так и для изучения глобальных астрофизических явлений.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] Lodders, K. *ApJ* 591 (2003) 1220
- [2] Huang, W.J. et al *Chin. Phys.* 41 (2017) 030002
- [3] Arnould, M., Goriely, S., Takahashi, K. *Phys. Rep.* 450 (2007) 97
- [4] Ишханов, Б.С., Капитонов И.М., Тутынь И.А., «*Нуклеосинтез во вселенной*», М., Изд. МГУ (1998)
- [5] Lippuner, J., Roberts, L.F. *arXiv:1706.06198* (2017)
- [6] Cyburt, R.H. et al *ApJ* 189 (2010) 240
- [7] Rauscher, T., Thielemann, F.-K. *ADNDT* 75 (2000) 1
- [8] Koning, A.J. et al *Nuclear Data Sheets* 155 (2019) 1
- [9] Mengoni, A., Nakajima, Y. *JNST* 31 (1994) 151
- [10] Capote, R. *Nuclear Data Sheets* 110 (2009) 3107
- [11] Gilbert, A., Cameron, A.G.W. *Can. J. Phys.* 43 (1965) 1446
- [12] Dilg, W., Schantl, W., Vonach, H., Uhl, M., *Nucl. Phys.* A217 (1973) 269
- [13] Ignatyuk, A.V., Weil, J.L., Raman, S., Kahane, S. *Phys. Rev.* C47 (1993) 1504
- [14] Audi, G., Wapstra, A.H. *Nucl. Phys.* A729 (2003) 129
- [15] Möller, P., Nix, J.R., Myers, W.D., Swiatecki, W.J. *ADNDT* 59 (1995) 185
- [16] Strutinsky, V.M. *Nucl. Phys.* A122 (1968) 1
- [17] Mott, D. *dissertation* (1999)
- [18] Guidry, M.W., Harris, J.A. *Comput. Sci. Disc.* 6 (2013) 015002
- [19] Белов, А. А. *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша* 71 (2015) 12
- [20] Булатов, П.Е., Белов, А.А., Калиткин, Н.Н. *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша* 173 (2018) 32
- [21] Paxton, B. et al *ApJ* 192 (2011) 3
- [22] Bader, G., Deuhard, P. *Numer. Math.* 41 (1983) 373
- [23] Timmes, F.X. *ApJ* 124 (1999) 241