

Calcolo per l'astronomia
Relazione secondo esercizio

Studente: Matteo Gavioli
mail: matteo.gavioli2@studio.unibo.it

Matricola: 0000976888

Scopo generale

Lo scopo generale di questo esercizio è studiare l'evoluzione di un gas astrofisico sottoposto a processi di cooling radiativo. Per fare ciò dobbiamo innanzitutto stimare numericamente lo stato di ionizzazione del gas, composto da idrogeno ed elio, in funzione della temperatura con l'assunzione di equilibrio collisionale, ovvero lo stato di ionizzazione del gas è determinato solamente dalle collisioni tra gli ioni e gli elettroni liberi. Dopo di che dobbiamo calcolare la funzione di cooling, che è il tasso di raffreddamento radiativo in funzione della temperatura, da cui potremo determinare l'evoluzione temporale della temperatura del gas causata dall'emissione di radiazione. Per fare ciò consideriamo il gas come trasparente alla radiazione che emette.

Presentazione del problema

Il cooling radiativo è la perdita di energia termica di un gas o un plasma astrofisico attraverso meccanismi di emissione di radiazione. Questo è importante, per esempio, perché il gas che si trova nel mezzo interstellare deve raffreddarsi in maniera efficiente per innescare i meccanismi di collasso gravitazionale che danno vita alla formazione stellare.

In particolare, in questo esercizio studieremo il caso di un gas che si trova in equilibrio di ionizzazione collisionale composto da idrogeno, la cui frazione di massa la indichiamo con X , ed elio, la cui frazione di massa la indichiamo con Y . Dunque, come detto sopra, lo stato di ionizzazione del gas dipende solamente dalle collisioni tra gli ioni e gli elettroni liberi le quali portano alla ionizzazione, ovvero la perdita di un elettrone da parte di uno ione, ed alla ricombinazione, ovvero l'acquisto di un elettrone da parte di uno ione. Il tasso di tali collisioni dipende solamente dalla temperatura del gas. Essendo all'equilibrio, il tasso di distruzione di una specie ionica è pari al suo tasso di creazione, per cui siamo in grado di scrivere il sistema (1) di 6 equazioni in 6 incognite la cui soluzione ci fornisce lo stato di ionizzazione del gas.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Gamma_{eH_0} \tilde{n}_{H_0} &= \alpha_{H_+} \tilde{n}_{H_+} \\ \Gamma_{eHe_0} \tilde{n}_{He_0} &= (\alpha_{He_+} + \alpha_d) \tilde{n}_{He_+} \\ \alpha_{He_{++}} \tilde{n}_{He_{++}} &= \Gamma_{eHe_+} \tilde{n}_{He_+} \\ \tilde{n}_{H_0} + \tilde{n}_{H_+} &= 1 \\ \tilde{n}_e &= \tilde{n}_{H_+} + \tilde{n}_{He_+} + 2\tilde{n}_{He_{++}} \\ \tilde{n}_{He_0} + \tilde{n}_{He_+} + \tilde{n}_{He_{++}} &= y \end{array} \right. \quad (1)$$

Dove α_x indicano i tassi di ricombinazione, Γ_x indicano i tassi di ionizzazione, $y = Y/(4 - 4Y)$, e $\tilde{n}_x = n_x/n_H$ è il numero di particelle di uno ione diviso per n_H . Risolvere il sistema (1) significa assumere $n_H = 1 \text{ cm}^{-3}$, in caso in cui abbia valori differenti è sufficiente moltiplicare i risultati ottenuti per il valore di n_H .

La funzione di cooling totale, ovvero il tasso di raffreddamento per radiazione per unità di volume e di tempo del gas, è data dalla somma dei vari contributi come nell'espressione (2).

$$\Lambda = \Lambda_{ex} + \Lambda_{ion} + \Lambda_{rec} + \Lambda_{drec} + \Lambda_{ff} \quad (2)$$

Dove:

- ◆ Λ_{ex} è il contributo dell'eccitazione collisionale cioè quando un elettrone libero collide con un atomo portandolo ad uno stato eccitato, trasferendo dunque un elettrone legato a questo

atomo ad un livello di energia più elevato. Questo stato eccitato decade tramite l'emissione di un fotone causando una perdita netta di energia cinetica dell'elettrone libero, e quindi del gas;

- ◆ Λ_{ion} è il contributo di ionizzazione collisionale cioè quando un elettrone libero collide con un atomo ionizzandolo. Anche in questo caso, l'energia necessaria alla ionizzazione viene persa dall'elettrone libero e di conseguenza dal gas;
- ◆ Λ_{rec} è il contributo di ricombinazione cioè quando un elettrone libero si ricombina con uno ione. In questo caso il potenziale di ionizzazione e l'energia cinetica dell'elettrone sono irradiate da uno o più fotoni;
- ◆ Λ_{drec} è il contributo di ricombinazione dielettronica cioè quando avviene la cattura di un elettrone con l'eccitazione simultanea del nucleo dello ione. In tal caso lo stato eccitato del nucleo viene poi stabilizzato tramite l'emissione di radiazione;
- ◆ Λ_{ff} è il contributo di Bremsstrahlung cioè quando un elettrone libero è accelerato da uno ione e a causa di tale accelerazione viene emessa radiazione.

Dalla funzione di cooling è possibile calcolare l'evoluzione temporale della temperatura del gas risolvendo la ODE (3).

$$\frac{du}{dt} = -\frac{n_H^2}{\rho} \left(\frac{\Lambda}{n_H^2} \right) \quad (3)$$

Dove u è l'energia interna per unità di massa del gas, n_H è il numero di atomi di idrogeno per unità di volume, $\rho = n_H m_p / X$ è la densità del gas (con m_p la massa del protone) e Λ/n_H^2 è la funzione di cooling. Per risolvere la (3) è necessario innanzitutto adimensionalizzarla scegliendo la scala dell'energia specifica e dei tempi. Per l'energia abbiamo scelto la scala dell'energia iniziale del gas:

$$u = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{kT}{\mu m_p} \quad (4)$$

Dove $\gamma = 5/3$, k è la costante di Boltzmann, T è la temperatura espressa in kelvin, μ è il peso molecolare medio e m_p è la massa del protone. Come scala dei tempi, invece, scegliamo quella del tempo di cooling:

$$t = \frac{u}{\left(\frac{\Lambda}{\rho} \right)} \quad (5)$$

Di conseguenza, ponendo $u = u_0 \tilde{u}$ e $t = t_0 \tilde{t}$, con u_0 l'energia interna iniziale e t_0 il tempo di cooling secondo le condizioni iniziali abbiamo:

$$\frac{du}{dt} = \frac{d(u_0 \tilde{u})}{d(t_0 \tilde{t})} = -\frac{n_H^2}{\rho} \left(\frac{\Lambda}{n_H^2} \right)$$

Siccome u_0 e t_0 sono costanti possiamo tirarli fuori dalla derivata:

$$\frac{u_0 d\tilde{u}}{t_0 d\tilde{t}} = -\frac{n_H^2}{\rho} \left(\frac{\Lambda}{n_H^2} \right)$$

Dunque l'equazione differenziale da risolvere diventa:

$$\frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} = -\frac{t_0}{u_0} \frac{n_H^2}{\rho} \left(\frac{\Lambda}{n_H^2} \right) \quad (6)$$

L'energia interna ottenuta dalla ODE (6) deve poi essere moltiplicata per u_0 a causa dell'adimensionalizzazione.

Per il calcolo dello stato di ionizzazione del gas e del suo tasso di raffreddamento dobbiamo calcolare la temperatura del gas partendo dalla sua energia specifica per unità di massa. Dato che il peso molecolare medio del gas μ dipende dalla temperatura dobbiamo trovare lo zero della funzione:

$$f(T) = T - (\gamma - 1) \frac{u\mu(T)m_p}{k} \quad (7)$$

Descrizione degli algoritmi numerici utilizzati

Eliminazione di Gauss

Per risolvere il sistema (1) di $N=6$ equazioni è necessario procedere con l'eliminazione di Gauss. Tale processo è composto da due fasi che sono l'eliminazione in avanti e la sostituzione all'indietro. La prima parte consiste in due cicli, il primo ($DO \ i=1, N-1$) sceglie la variabile da eliminare mentre il secondo ($DO \ j=i+1, N$) sceglie la riga su cui eliminare. Per effettuare l'eliminazione, ad una data riga bisogna sostituire se stessa meno la i -esima riga moltiplicata per il fattore $fakt=a(j,i)/a(i,i)$, dove a è la matrice costruita per risolvere il sistema. Lo stesso deve essere fatto per il termine noto $c(j)$. Passando alla seconda fase, partiamo dall'ultima equazione per trovare l'ultima soluzione ($x(n)=c(n)/a(n,n)$). Dopo di che bisogna ripetere la stessa cosa all'indietro, dunque con un ciclo $DO=N-1, 1, -1$, in modo da avere:

$$x_i = \frac{c_i - \sum_{j=i+1}^N a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$

Metodi di Runge-Kutta al secondo ordine

Per la risoluzione dell'ODE (6) utilizziamo i metodi di Runge-Kutta, i quali stimano opportunamente i valori di $f(y(x), x)$ in modo da ottenere un'approssimazione di y_{n+1} di ordine più elevato del primo. Per metodi al secondo ordine abbiamo:

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2) \quad (8)$$

Dove $k_1 = f(y_n, x_n)$, $k_2 = f(y_n + a_{11}hk_1, x_n + c_1h)$ e h è un time step variabile, sfruttando la struttura ad un passo dei metodi di RK, che si adatta al tempo caratteristico fisico del processo che vogliamo modellare. In questo caso il tempo caratteristico è il tempo di cooling, per cui scegliamo $h = \tilde{t} \times 10^{-3}$. Inoltre $b_1 = 1 - b_2$ e $a_{11} = c_1 = (2b_2)^{-1}$. Di default $b_2 = \frac{1}{2}$ in modo da coincidere con il metodo di Heun.

Metodo della secante modificato

Per la ricerca degli zeri della funzione (7) abbiamo utilizzato il metodo della secante, un metodo aperto che ricerca gli zeri partendo da una stima iniziale ma non sempre arriva a convergenza. Il metodo della secante modificato si serve di una stima della derivata prima:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}$$

Con $h=0.01$ nel caso di questo esercizio, otteniamo il metodo della secante modificato:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = x_i - \frac{f(x_i)h}{f(x_i+h) - f(x_i)} \quad (9)$$

Risultati ottenuti

Abbiamo scelto l'eliminazione di Gauss per risolvere il sistema (1) poiché è la più conveniente in questo caso. Infatti l'eliminazione di Gauss-Jordan, rispetto a quella usata, richiede di normalizzare le righe all'unità prima di agire su di esse e l'eliminazione della variabile deve essere fatta su tutte le righe, sia sopra che sotto la diagonale principale. Questo si traduce in un maggior tempo di calcolo dovuto al numero di operazioni necessarie per risolvere l'algoritmo. Invece il metodo di Gauss-Seidel è un metodo iterativo approssimato che permette di risolvere sistemi con un gran numero di equazioni ma non è sempre garantita la convergenza sul risultato corretto.

In Figura (1), supponendo $n_H = 1 \text{ cm}^{-3}$ ed una composizione chimica avente $X = 0.76$, mostriamo il grafico dello stato di ionizzazione di H ed He, ovvero le frazioni $\frac{n_{H0}}{n_{H\text{tot}}}$, $\frac{n_{H+}}{n_{H\text{tot}}}$, $\frac{n_{He0}}{n_{He\text{tot}}}$, $\frac{n_{He+}}{n_{He\text{tot}}}$, $\frac{n_{He++}}{n_{He\text{tot}}}$ in funzione della temperatura. Abbiamo calcolato il grafico per temperature comprese tra 10^4 e 10^8 K in 200 punti equispaziati in logaritmo.

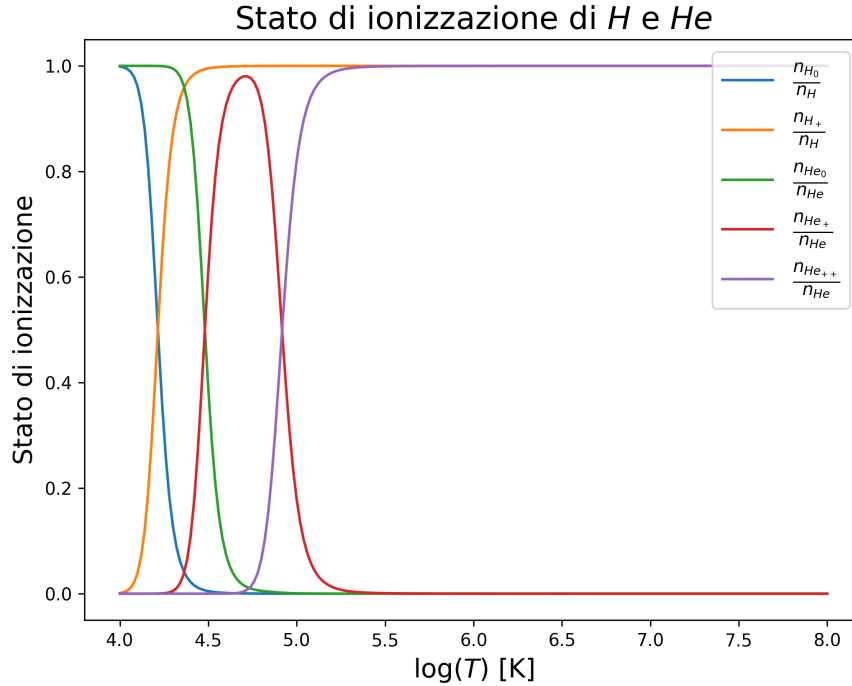


Figura 1: Stato di ionizzazione di H ed He in funzione della temperatura

Dal grafico si può osservare come, all'aumentare della temperatura, gli ioni prendono il posto degli atomi neutri fino ad arrivare ad una temperatura dell'ordine di $10^{5.3}$ K dove sono presenti solamente H_+ ed He_{++} .

Sempre supponendo $n_H = 1 \text{ cm}^{-3}$, generiamo ora le curve di cooling nei casi in cui $X = 0.76$, come riportato in Figura (2), e in cui $X = 1.00$, come riportato in Figura (3). Anche per questi grafici abbiamo calcolato il grafico per temperature comprese tra 10^4 e 10^8 K in 200 punti equispaziati in logaritmo.

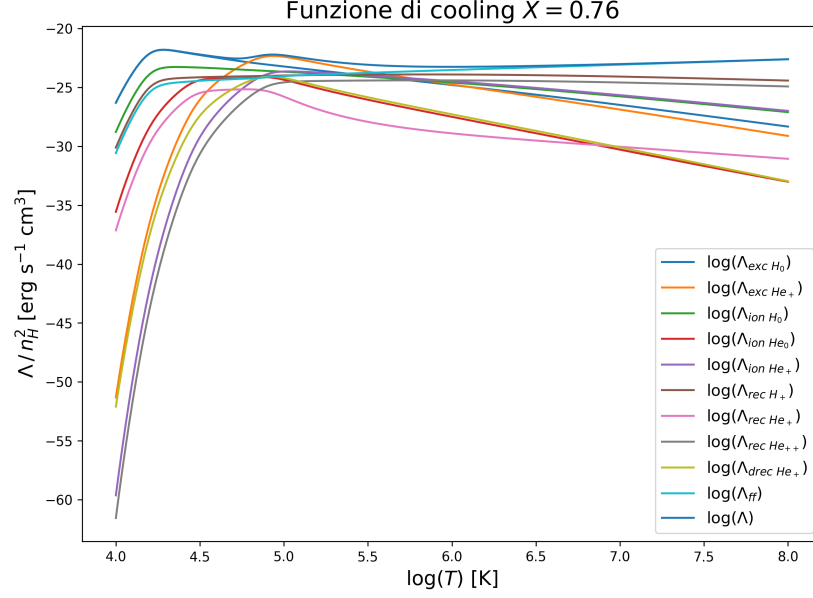


Figura 2: Curve di cooling dei diversi contributi nel caso $X = 0.76$

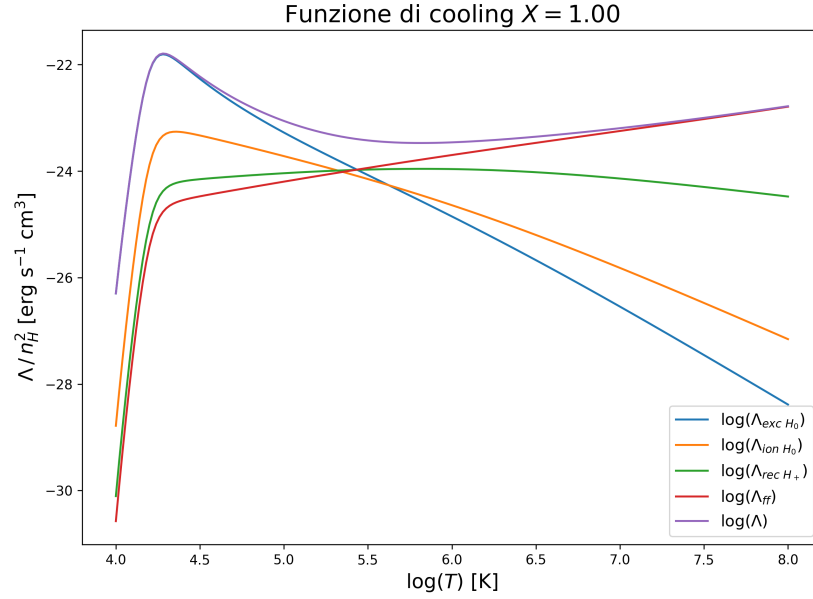


Figura 3: Curve di cooling dei diversi contributi nel caso $X = 1.00$

Nel secondo grafico possiamo notare che ci sono meno contributi alla curva di cooling totale perché, avendo una composizione chimica composta da solo idrogeno, sono assenti tutti i contributi derivanti dall'elio.

Per la risoluzione dell'equazione differenziale ordinaria (6) abbiamo scelto i metodi di Runge-Kutta che sono metodi ad un passo, dunque ci permettono di implementare un time step variabile come richiesto dall'esercizio, ed hanno come vantaggio quello che la soluzione deve essere nota solamente nel nodo di discretizzazione immediatamente precedente a quello di interesse. Tutto ciò a discapito di un maggior numero di valutazioni della funzione $f(y(x), x)$, e dunque un maggior tempo di calcolo, per ottenere l'accuratezza richiesta.

Invece, per trovare lo zero della funzione (7) abbiamo utilizzato il metodo della secante poiché è uno dei più veloci ad arrivare a convergenza utilizzando un metodo approssimato per calcolare la derivata prima della funzione. In particolare, utilizzando il metodo della secante modificato, non è nemmeno necessario mantenere in memoria le due stime precedenti (x_{i-1} e x_i). Tutto ciò al prezzo che non sempre tale metodo è in grado di arrivare a convergenza su uno zero.

In Figura (4) possiamo osservare l'evoluzione della temperatura in funzione del tempo espresso in unità di t_{cool} . Per il calcolo abbiamo considerato delle composizioni chimiche aventi $X = 0.76$ ed $n_H = 0.1 \text{ cm}^{-3}$, $n_H = 1.0 \text{ cm}^{-3}$ e $n_H = 10 \text{ cm}^{-3}$ partendo da una temperatura iniziale $T_{in} = 10^6 \text{ K}$ fino ad imporre una temperatura minima di $T_{min} = 10^4 \text{ K}$.

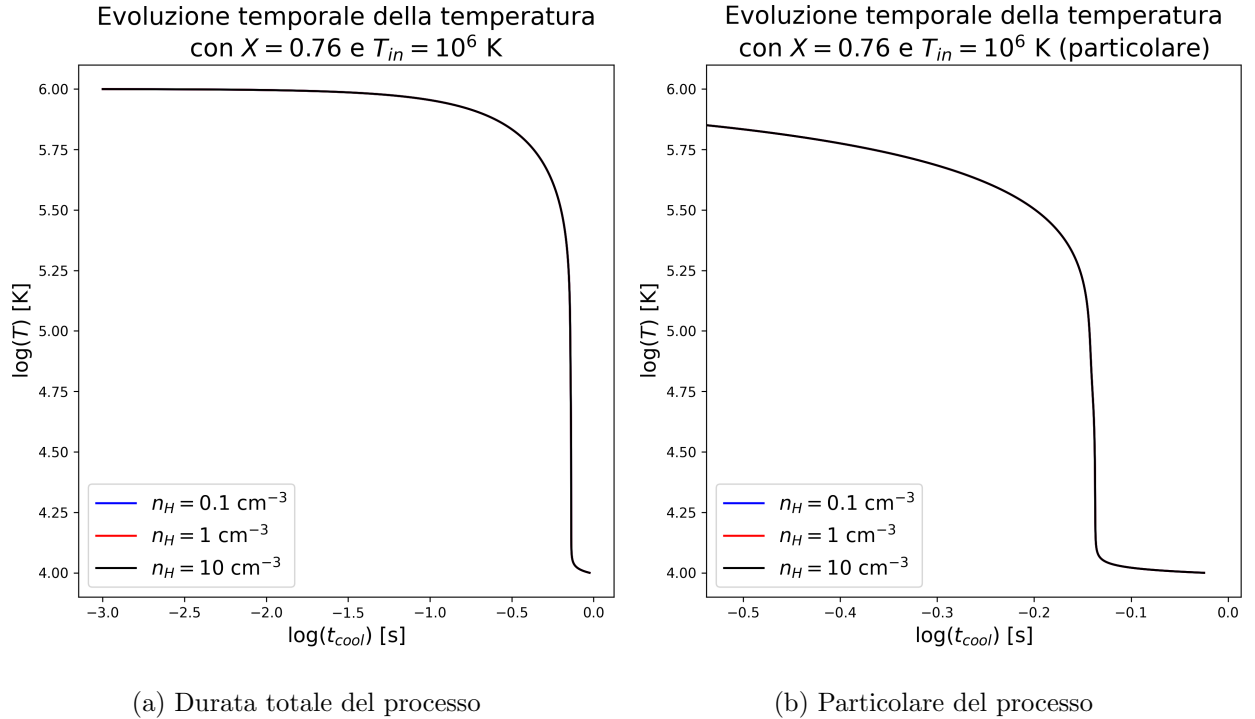


Figura 4: Evoluzione temporale della curva di cooling

Dai grafici possiamo osservare come le curve coincidono a causa della scelta del time step per il calcolo dell'equazione differenziale.

Infine, nella Figura (5) possiamo sempre osservare l'evoluzione temporale della temperatura per la sola composizione chimica avente $X = 0.76$ ed $n_H = 1.0 \text{ cm}^{-3}$ ma partendo da una temperatura iniziale $T_{in} = 10^7 \text{ K}$.

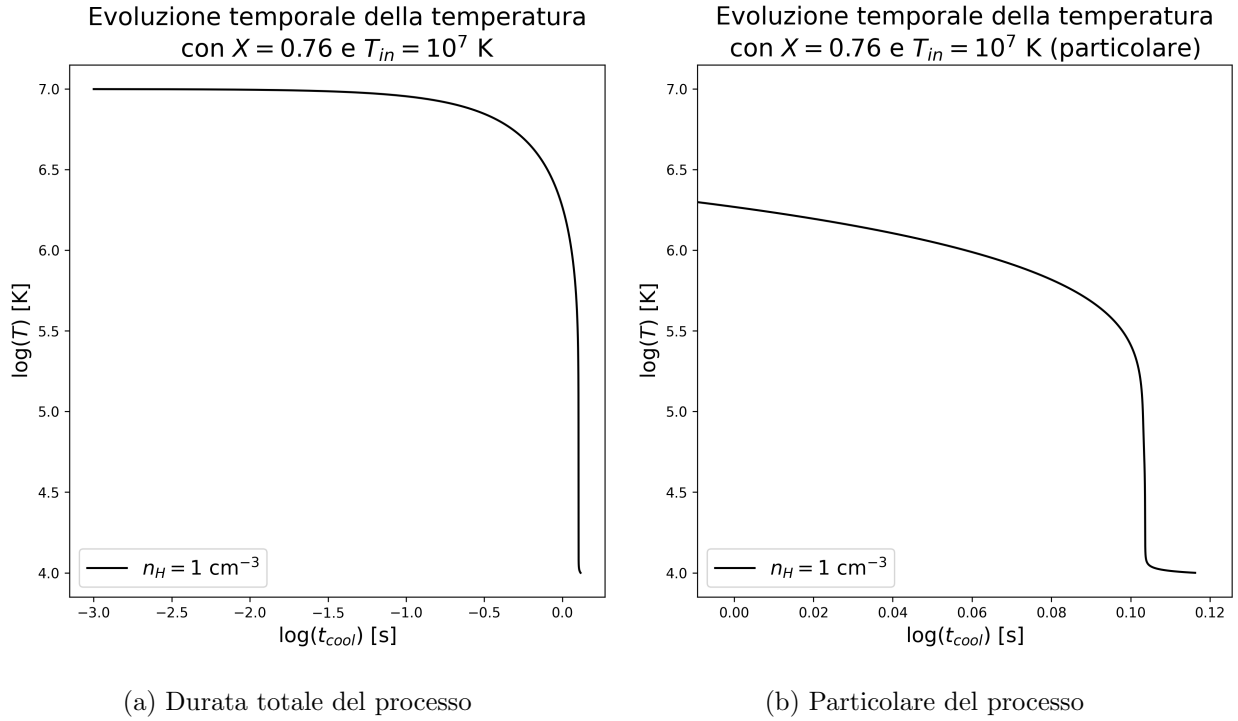


Figura 5: Evoluzione temporale della curva di cooling

Facendo un confronto tra la Figura (4b) e la Figura (5b) osserviamo come la prima curva cambia drasticamente la propria pendenza ad un tempo di circa -0.15 mentre nel secondo grafico essa cambia ad un valore di 0.10 , ovvero nel primo grafico il gas si raffredda più velocemente rispetto al secondo.