

Calcolo per l'Astronomia - a.a 2021/2022
Cooling radiativo di un gas composto da idrogeno
ed elio in equilibrio di ionizzazione collisionale

Lorenzo Cavazzini

1	Introduzione al problema	2
2	Descrizione fisica del problema	2
2.1	Stato di ionizzazione	2
2.2	Funzione di <i>cooling</i>	3
2.3	Evoluzione temporale della temperatura	3
3	Approccio matematico e breve introduzione agli algoritmi utilizzati	4
3.1	Algoritmi utilizzati	4
3.1.1	Eliminazione di Gauss	4
3.1.2	Metodo Runge-Kutta	5
3.1.3	Metodo della secante modificato	6
4	Descrizione del programma	6
4.1	Descrizione della struttura del programma	6
4.1.1	Modulo <i>VARIABILI</i>	6
4.1.2	Modulo <i>INTEGRAZIONE</i>	7
4.1.3	Programma principale - Parte 1	7
4.1.4	Programma principale - Parte 2	7
5	Analisi critica dei risultati	8

1 Introduzione al problema

Lo scopo principale di questo progetto è quello di studiare lo stato di ionizzazione e l'evoluzione nel tempo di un gas composto da idrogeno ed elio.

Si parte da una stima dello stato di ionizzazione del gas sotto l'assunzione di equilibrio di ionizzazione collisionale per una temperatura che varia dai 10^4 ai 10^8 K.

Successivamente si calcola la funzione di *cooling* che rappresenta il tasso di raffreddamento del gas, ovvero l'energia irradiata per unità di tempo e volume. Si studia infine l'evoluzione temporale della temperatura del gas causata dall'emissione di radiazione, partendo da una temperatura di 10^6 K e imponendo la minima a 10^4 K.

2 Descrizione fisica del problema

2.1 Stato di ionizzazione

Il gas che studiamo si trova in equilibrio di ionizzazione collisionale: ciò significa che lo stato di ionizzazione del gas è determinato solamente dalle collisioni tra gli ioni stessi e gli elettroni liberi; la frequenza di tali collisioni dipende solo dalla temperatura del gas.

La conseguenza principale dell'assunzione di equilibrio è che il tasso di creazione di una specie chimica è uguale al suo tasso di distruzione; matematicamente possiamo dire che, nel caso dell'idrogeno,

$$\Gamma_{eH_0} n_e n_{H_0} = \alpha_{H+} n_e n_{H+}, \quad (1)$$

dove Γ_{eH_0} e α_{H+} sono il tasso di ionizzazione dell'idrogeno neutro e il tasso di ricombinazione dell'idrogeno ionizzato rispettivamente.

Possiamo allo stesso modo definire l'equilibrio collisionale dell'elio:

$$\Gamma_{eHe_0} n_e n_{He_0} = (\alpha_{He+} + \alpha_d) n_{He+} n_e; \quad (2)$$

$$\Gamma_{eHe+} n_e n_{He+} + (\alpha_{He+} + \alpha_d) n_{He+} n_e = \alpha_{He++} n_{He++} n_e + \Gamma_{eHe_0} n_e n_{He_0}; \quad (3)$$

$$\alpha_{He++} n_{He++} n_e = \Gamma_{eHe+} n_e n_{He+}. \quad (4)$$

Definiamo inoltre la conservazione della massa, per cui il numero totale di particelle di un certo elemento deve rimanere costante:

$$n_H = n_{H_0} + n_{H+}; \quad (5)$$

$$n_{He_0} + n_{He+} + n_{He++} = \frac{Y}{4(1-Y)} \times n_H = y \times n_H, \quad (6)$$

dove Y rappresenta la frazione di massa di elio del plasma.

La neutralità della carica (ovvero il fatto che complessivamente il plasma è neutro) è espressa da

$$n_e = n_{H+} + n_{He+} + 2n_{He++}. \quad (7)$$

A partire da (1), (2), (3), (4), (5) e (6) riusciamo a definire un sistema di 6 equazioni in 6 incognite, dove queste ultime sono le densità delle specie considerate: $n_e, n_{H_0}, n_{H+}, n_{He_0}, n_{He+}, n_{He++}$.

Per convenienza normalizziamo il sistema rispetto alla densità totale di idrogeno n_H .

Otteniamo il sistema normalizzato:

$$\begin{cases} \Gamma_{eH_0} n_{\tilde{H}_0} = \alpha_{H_+} n_{\tilde{H}_+} \\ \Gamma_{eH_{e0}} n_{\tilde{H}_{e0}} = (\alpha_{He_+} + \alpha_d) n_{\tilde{H}_{e+}} \\ \alpha_{He_{++}} n_{\tilde{H}_{e++}} = \Gamma_{eH_{e+}} n_{\tilde{H}_{e+}} \\ n_{\tilde{H}_0} + n_{\tilde{H}_+} = 1 \\ \tilde{n}_e = n_{\tilde{H}_+} + n_{\tilde{H}_{e+}} + 2n_{\tilde{H}_{e++}} \\ n_{\tilde{H}_{e0}} + n_{\tilde{H}_{e+}} + n_{\tilde{H}_{e++}} = y \end{cases}, \quad (8)$$

dove $y = \frac{Y}{4(1-Y)}$ e le quantità 'tilde' sono state normalizzate su n_H . La matrice dipende esclusivamente dalla temperatura, quindi una volta definita quest'ultima si possono calcolare i diversi valori di Γ e α per poi trovare le diverse densità.

2.2 Funzione di *cooling*

La funzione di *cooling* totale è data dall'espressione:

$$\Lambda = \Lambda_{ex} + \Lambda_{ion} + \Lambda_{rec} + \Lambda_{drec} + \Lambda_{ff} \text{ [erg/s cm}^3\text{]}, \quad (9)$$

i cui termini rappresentano, rispettivamente, il contributo della eccitazione collisionale, della ionizzazione collisionale, della ricombinazione radiativa, della ricombinazione dielettronica dell'elio e della bremsstrahlung. In condizioni di equilibrio di ionizzazione collisionale tali termini dipendono solo dalla temperatura (e dallo stato di ionizzazione del gas, che però abbiamo visto a sua volta dipendere solo dalla temperatura).

2.3 Evoluzione temporale della temperatura

Una volta trovata la funzione di *cooling* è possibile calcolare l'evoluzione temporale della temperatura del gas risolvendo la seguente equazione differenziale ordinaria:

$$\frac{du}{dt} = -\frac{n_H^2}{\rho} \left(\frac{\Lambda}{n_H^2} \right) = -\frac{\Lambda}{\rho}, \quad (10)$$

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 (supposti costanti nel tempo), ρ è la densità del gas (costante) e $\frac{\Lambda}{n_H^2}$ è la funzione di *cooling* trovata precedentemente.

Energia, densità n_H e peso molecolare medio sono messe in relazione tramite le seguenti equazioni chiave:

$$u = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{kT}{\mu m_p}; \quad (11)$$

$$n_H = X \frac{\rho}{m_p}; \quad (12)$$

$$\mu = \frac{1 + 4y}{1 + y + \frac{n_e}{n_H}}. \quad (13)$$

dove consideriamo un gas monoatomico, per cui $\gamma = \frac{5}{3}$.

Il tempo che la sorgente impiega a raffreddarsi è definito per mezzo del tempo scala

$$t_{cool} = \frac{u}{\frac{\Lambda}{\rho}}. \quad (14)$$

Per la risoluzione del problema risulta necessario adimensionalizzare tutte le quantità che compaiono nelle equazioni utili; riportiamo le costanti di adimensionalizzazione utilizzate nel problema, le quali coincidono con le condizioni iniziali del problema alla temperatura di $T = 10^6$ K :

$$\Lambda_0 = \Lambda; \quad (15)$$

$$\mu_0 = \frac{1 + 4y}{1 + y + \frac{n_e}{n_{H_{tot}}}}; \quad (16)$$

$$u_0 = \frac{kT}{(\gamma - 1) \mu_0 m_p}; \quad (17)$$

$$\rho_0 = \mu_0 (n_{H_{tot}} + n_{He_{tot}} + n_e) m_p; \quad (18)$$

$$t_0 = u_0 \frac{\rho_0}{\Lambda_0}. \quad (19)$$

3 Approccio matematico e breve introduzione agli algoritmi utilizzati

La risoluzione del problema si basa sulla ricerca delle densità degli ioni ad ogni temperatura; per ricavarle risolviamo il sistema lineare algebrico tramite l'eliminazione di Gauss.

La risoluzione dell'equazione differenziale determina l'evoluzione nel tempo dell'energia interna del sistema; essa viene effettuata con il metodo di Runge-Kutta al secondo ordine.

Per ottenere la temperatura al tempo $t + dt$ si deve utilizzare la formula che esprime la relazione tra temperatura ed energia, per cui occorre trovare lo zero della funzione:

$$f(T) = T - \frac{(\gamma - 1) \mu m_p}{k}. \quad (20)$$

Il metodo della secante modificato ci permette di farlo.

3.1 Algoritmi utilizzati

3.1.1 Eliminazione di Gauss

L'eliminazione di Gauss è un algoritmo che serve per risolvere sistemi lineari algebrici. E' composto da una prima fase, la *forward elimination*, la quale trasforma la matrice quadrata di dimensione n in una matrice triangolare superiore, e da una seconda, la *backward substitution*, nella quale si ottengono i valori delle incognite a partire dall'ultima equazione.

Per effettuare la *forward elimination* occorre eliminare i coefficienti dalla prima alla penultima colonna ($i = 1, n-1$) partendo dalla $i+1$ -esima riga j ; per fare ciò bisogna sostituire a una data riga se stessa riscalata di un fattore $fakt = \frac{a(j,i)}{a(i,i)}$

(lo stesso vale per i termini noti c).

Otteniamo quindi, supponendo di lavorare con una matrice 3x3,

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & c'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & c''_3 \end{bmatrix} \quad (21)$$

Procediamo poi con la *backward substitution*:

$$\begin{cases} x_3 = \frac{c''_3}{a''_{33}} \\ x_2 = \frac{c'_2 - a'_{23}x_3}{a'_{22}} \\ x_1 = \frac{c_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}} \end{cases} \quad (22)$$

Il procedimento può essere generalizzato a n dimensioni attraverso:

$$x_n = \frac{C_n}{a_{nn}}, \quad (23)$$

$$x_i = \frac{c_i - \sum_{j=i+1}^N a_{ij}x_j}{a_{ii}}, \quad (24)$$

dove l'indice i parte dalla penultima equazione ed arriva alla prima.

Il problema di questo algoritmo è che la presenza di elementi nulli sulla diagonale non ci permette di trovare una soluzione per la matrice 6x6; nel programma ovviamo a questo problema suddividendo il SLA di dimensione 6 in sistemi più piccoli che non abbiano elementi nulli sulla diagonale. Questo problema viene spiegato in dettaglio nella descrizione del programma (capitolo 4).

L'algoritmo è implementato nella subroutine 'gauss'.

3.1.2 Metodo Runge-Kutta

I metodi di Runge-Kutta (RK) non utilizzano i valori della soluzione dell'ODE in p nodi di discretizzazione, ma stimano opportunamente i valori di $f(y, x)$ in modo tale da ottenere un'approssimazione di y_{n+1} di un ordine più elevato del primo.

Nel nostro codice utilizziamo RK al secondo ordine, ma una sua formulazione più generale è descritta da:

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(y_n, x_n; h), \quad (25)$$

dove per un metodo a 2 stadi, come nel nostro caso,

$$\begin{cases} \Phi(y_n, x_n, h) = b_1k_1 + b_2k_2 \\ k_1 = f(y_n, x_n) \\ k_2 = f(y_n + a_{11}hk_1, x_n + c_1h); \end{cases} \quad (26)$$

dobbiamo quindi determinare i valori di b_1, b_2, a_{11} e c_1 in modo tale che sia riprodotta l'espansione di Taylor di y_{n+1} in x_n fino al secondo ordine.

Dopo diversi passaggi (non riportati) otteniamo le seguenti relazioni:

$$b_1 = 1 - b_2 \quad (27)$$

$$a_{11} = c_1 = \frac{1}{2}b_2. \quad (28)$$

Otteniamo infiniti schemi di RK al secondo ordine al variare del parametro b_2 .

Ponendo $b_2 = \frac{1}{2}$ otteniamo il metodo di Heun, mentre con $b_2 = 1$ quello del punto medio.

Nel programma si utilizza $b_2 = \frac{2}{3}$, il caso del metodo di Ralston, il quale minimizza l'errore di troncamento.

Il metodo Runge-Kutta è implementato nella subroutine 'runge kutta 2'.

3.1.3 Metodo della secante modificato

Utilizzeremo il metodo della secante modificata per individuare lo zero di una funzione al posto del metodo di Newton-Raphson, in quanto quest'ultimo impone la necessità di calcolare la derivata prima della funzione.

Con il metodo della secante la derivata prima viene sostituita dalle differenze finite, dove dato un incremento piccolo h si ha

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}, \quad (29)$$

così da ottenere:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)h}{(f(x_{i-1}) - f(x_i))} = x_i - f(x_i) - f'(x_i). \quad (30)$$

La convergenza a una soluzione è raggiunta quando la differenza tra x_i ed x_{i+1} risulta minore di 10^{-6} .

Il metodo della secante è implementato nella subroutine 'secante' all'interno del modulo 'INTEGRAZIONE'.

4 Descrizione del programma

In questa sezione ripercorreremo la struttura del programma per spiegarne i passaggi e le procedure utilizzate.

4.1 Descrizione della struttura del programma

4.1.1 Modulo *VARIABILI*

Questo modulo contiene tutte le funzioni che rappresentano il tasso di ionizzazione e ricombinazione e tutti i contributi alla funzione di *cooling*.

Esso contiene inoltre la subroutine 'cooling function', la quale suddivide il sistema lineare algebrico di 6 equazioni in 6 incognite in una matrice 2x2 per la risoluzione di n_{H_0} e n_{H_1} e in una matrice 3x3 per la risoluzione di $n_{He_0}, n_{He_1}, n_{He_2}$; infine, la densità elettronica è determinata dalla neutralità della carica netta:

$$n_e = n_{h_1} + n_{he_1} + n_{he_2}.$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{\alpha_{He_1} + \alpha_d}{\Gamma_{He_0}} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{\alpha_{He_0}}{\Gamma_{He_1}} \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} n_{He_0} \\ n_{He_1} \\ n_{He_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ y \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{-\alpha_{H_1}}{\Gamma_{H_0}} \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} n_{H_0} \\ n_{H_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Le matrici vengono risolte chiamando la subroutine per l'eliminazione di Gauss. Successivamente la subroutine si occupa della normalizzazione delle variabili: infatti, dato che per ottenere i sistemi lineari abbiamo diviso le densità per quella numerica totale di idrogeno, per trovare i valori veri è necessario moltiplicarle per n_H . Infine dalle densità si ricavano le funzioni di *cooling* parziali e totali sommando i vari contributi.

4.1.2 Modulo *INTEGRAZIONE*

In questo modulo sono contenute tutte le subroutine e le funzioni necessarie all'integrazione dell'equazione differenziale, tra cui il metodo RK del secondo ordine, il metodo della secante, la funzione (20) e la sua derivata.

4.1.3 Programma principale - Parte 1

Vengono creati i file in cui salvare i dati dello stato di ionizzazione ('densità_relative.dat') e dei contributi alla funzione di *cooling* ('cooling_function.dat'). Attraverso un ciclo DO si definiscono gli intervalli di temperatura su cui calcolare lo stato di ionizzazione e la funzione di *cooling* richiamando la subroutine 'cooling function', per poi salvare ogni dato ottenuto nei file. Questo procedimento viene effettuato per un gas composto da solo idrogeno, $X = 1$, e per un gas di H ed He con $X = 0.76$, dove X è la frazione in massa di H .

4.1.4 Programma principale - Parte 2

I dati relativi all'evoluzione temporale sono calcolati attraverso un ciclo DO che seleziona le densità n_H richieste dal problema.

Si definiscono le condizioni iniziali corrispondenti alla temperatura $T = 10^6$ e, tramite un ciclo DO WHILE, il sistema viene integrato per un tempo di 10 volte il tempo di *cooling* corrispondente alla temperatura iniziale. Il *time step* ha un passo iniziale di 10^{-2} , che però cambia durante il ciclo in maniera proporzionale rispetto al tempo di *cooling*. Dunque anche il tempo di *cooling* varia durante l'integrazione secondo:

$$h = \text{passo} \times t_{cooling} \quad (31)$$

dove $t_{cooling_1}$ costituisce il valore aggiornato del tempo di *cooling*.

I dati vengono salvati in scala logaritmica nel file 'temp_evolution_xxx.dat' diversi a seconda della densità: $n_h = 0, 1$, $n_h = 1.0$ oppure $n_h = 10 \text{ [cm}^{-3}\text{]}$.

5 Analisi critica dei risultati

Abbiamo deciso di rappresentare i dati ricavati tramite specifici grafici, che mostrano l'andamento delle quantità significative rispetto alla temperatura.

La Figura 1 rappresenta l'andamento dello stato di ionizzazione dell'idrogeno e quello dell'elio in funzione della temperatura.

Come si può osservare nel caso dell'idrogeno si ha un netto calo di H neutro appena la temperatura aumenta rispetto a $T = 10^4$ K, di conseguenza l'idrogeno diventa ionizzato.

Si arriva ad una temperatura di $\sim 10^{4.5}$, per cui tutto l'idrogeno è ionizzato.

A differenza dell'idrogeno, invece, l'elio presenta 2 elettroni quindi si hanno 2 possibili stati di ionizzazione.

Si può notare che a $T \sim 10^{4.3}$ inizia la prima ionizzazione, che raggiunge il suo massimo a $T \sim 10^{4.6}$, mentre da $T \sim 10^{5.3}$ in poi tutto l'elio è completamente ionizzato.

La Figura 2 rappresenta la funzione di *cooling* al variare della temperatura per due composizioni chimiche, $X = 0.76$ e $X = 1.0$. Sono stati rappresentati tutti i contributi alla funzione di *cooling* totale, oltre alla funzione di *cooling* totale stessa:

- contributo di eccitazione collisionale;
- contributo di ionizzazione collisionale;
- contributo di ricombinazione;
- contributo di ricombinazione dielettronica;
- contributo di Bremsstrahlung (free-free).

La principale differenza che possiamo notare tra i due grafici è l'assenza del contributo della ricombinazione dielettronica nel grafico con una composizione chimica $X = 1.0$. Ciò è dovuto alla mancanza dell'elio, in quanto la ricombinazione dielettronica dipende dalla densità n_{He+} .

La Figura 3 rappresenta l'evoluzione temporale della temperatura del gas con tre diverse densità di idrogeno, $n_H = 0.1 \text{ cm}^{-3}$, $n_H = 1.0 \text{ cm}^{-3}$ e $n_H = 10.0 \text{ cm}^{-3}$. Come si può subito notare tutti e tre i grafici sono identici, questo ci fa dedurre che l'evoluzione della temperatura non dipende dalla densità del gas.

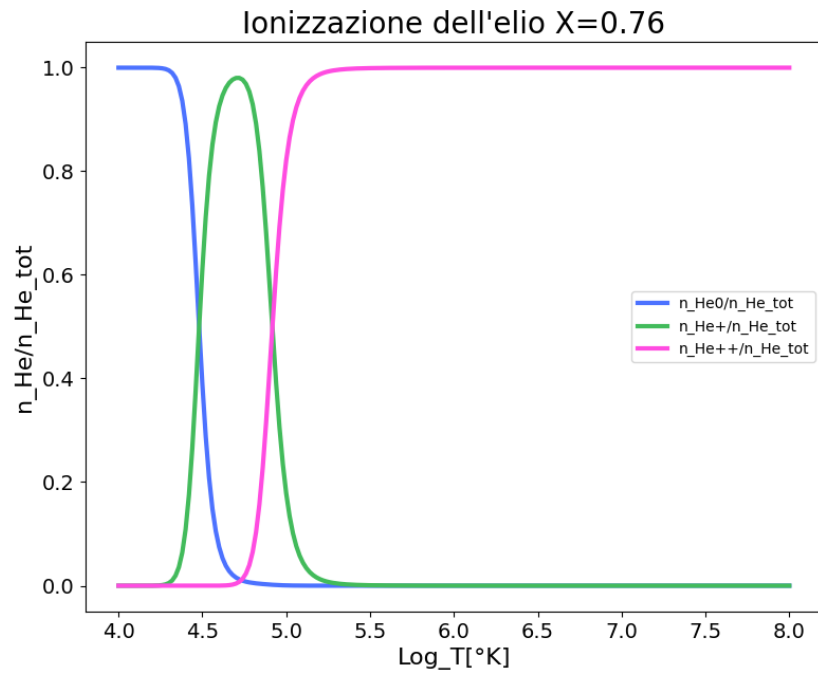
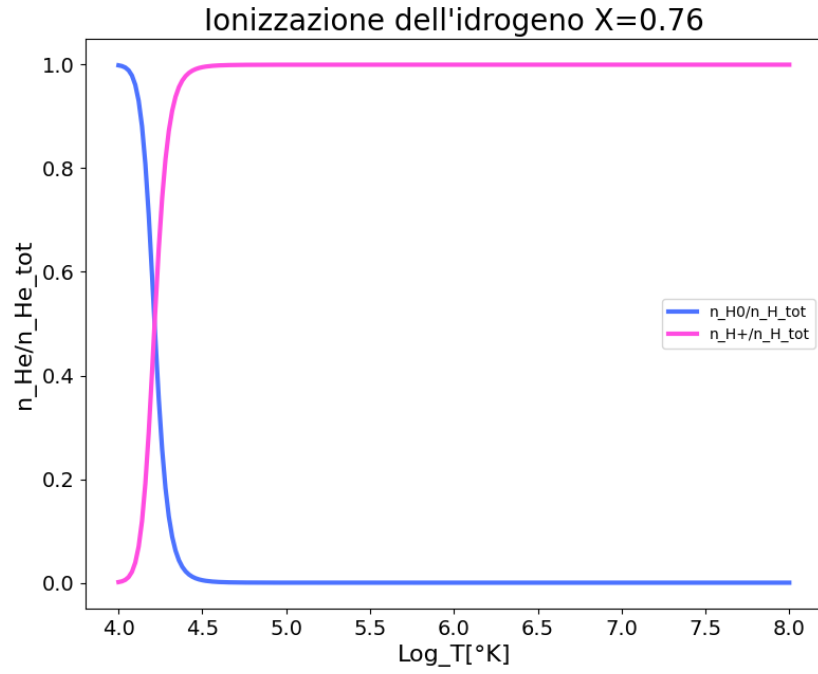


Figure 1: Grafici dei livelli di ionizzazione di idrogeno (sopra) ed elio (sotto).

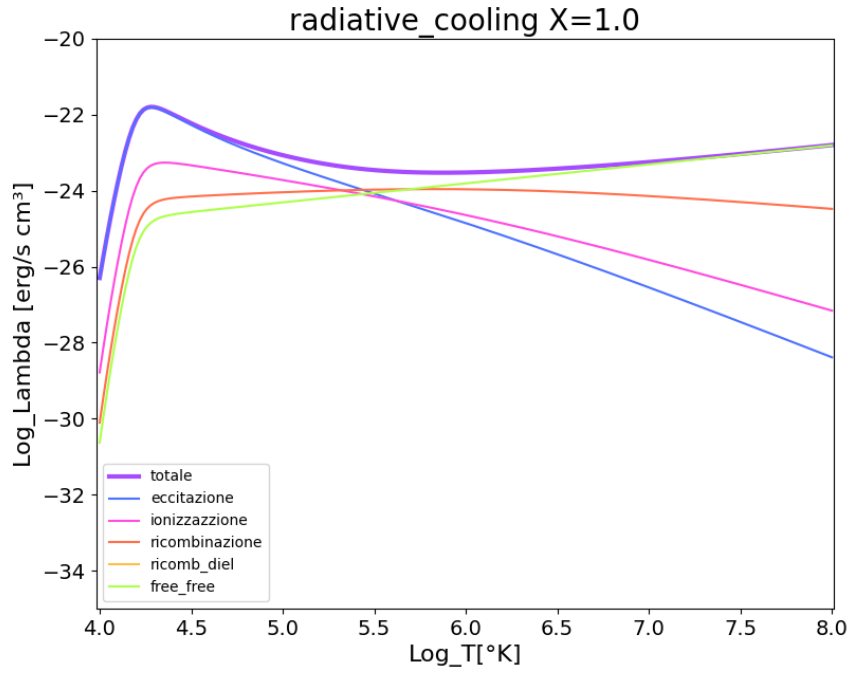
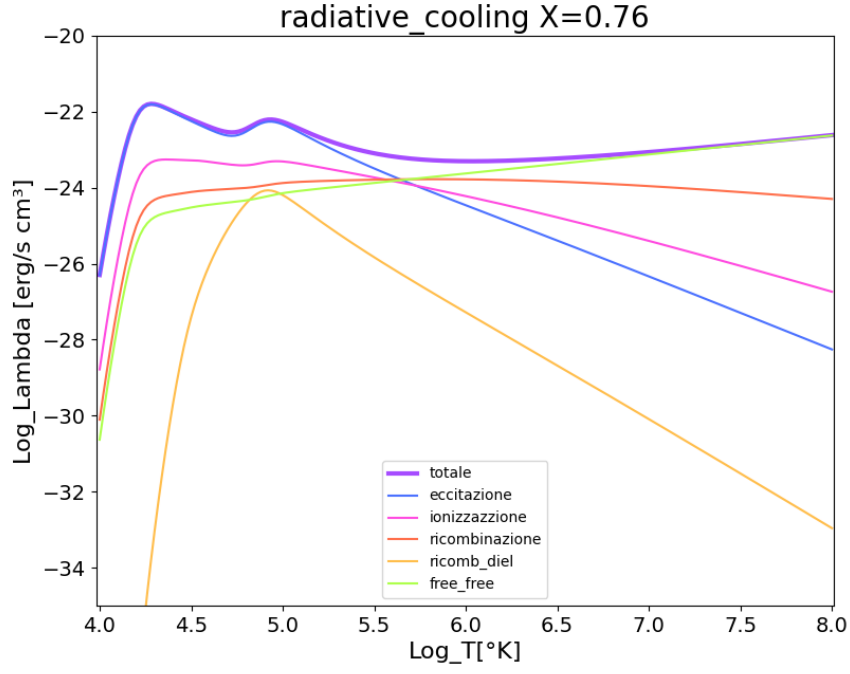
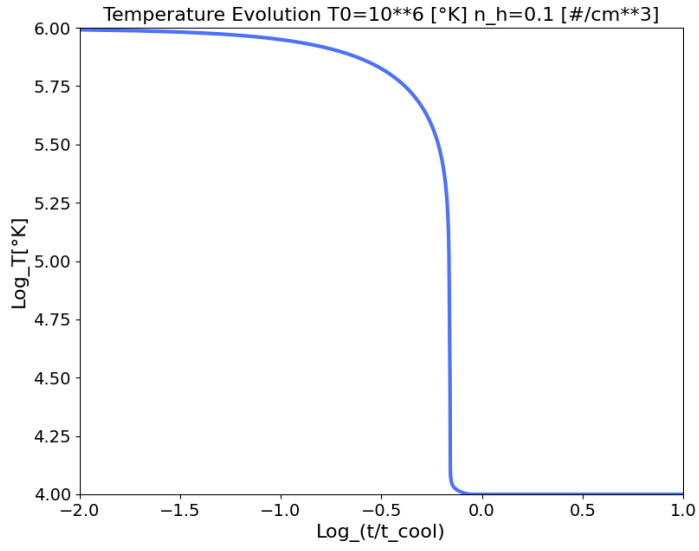
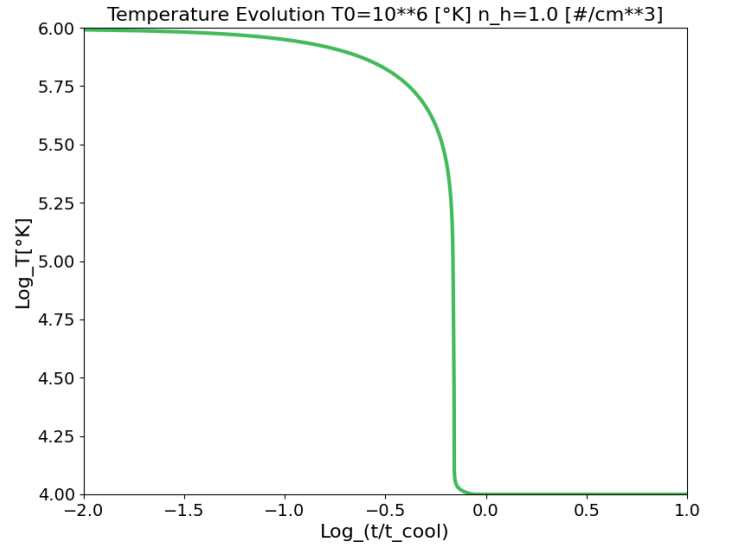


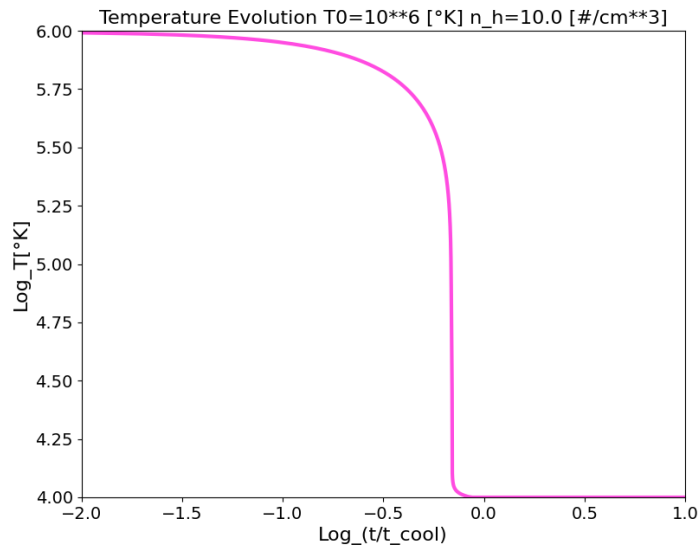
Figure 2: Grafici delle funzioni di *cooling* per $X = 0.76$ (sopra) e $X = 1.0$ (sotto).



(a)



(b)



(c)

Figure 3: Evoluzione della temperatura nel tempo per $n_H = 0.1 \text{ cm}^{-3}$ in alto a sinistra, per $n_H = 1.0 \text{ cm}^{-3}$ in alto a destra e per $n_H = 10.0 \text{ cm}^{-3}$ in basso.