

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор	В. Л. Береснев
Зам. главного редактора	А. Л. Карчевский
Отв. секретарь	В. А. Дедок

Журнал основан в 1998 году
Выходит 4 раза в год
Том 25, №3(91)
Июль - сентябрь 2022 г.

ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Г. В. Алексеев	С. Б. Медведев
Б. Д. Аннин	Р. Г. Новиков
В. С. Белоносов	Д. Е. Пальчунов
В. Н. Белых	П. И. Плотников
Ю. С. Волков	В. Г. Романов
В. П. Ильин	Е. М. Рудой
С. И. Кабанихин	В. М. Садовский
А. Н. Карапетянц	Д. И. Свириденко
М. В. Клибанов	А. С. Терсенов
С. С. Кутателадзе	В. С. Тимофеев
В. А. Левин	В. В. Шайдуров
Н. И. Макаренко	

СОДЕРЖАНИЕ

Данилин А. Р., Шабуров А. А. Асимптотическое разложение решения задачи оптимального управления с интегральным выпуклым критерием качества и дешёвым управлением	5
Дурдиев Д. К., Меражова Ш. Б. Обратная задача для двумерного уравнения смешанного парабола-гиперболического типа в цилиндрической области	14
Иванов В. В. Притягивающий предельный цикл модели нечётномерной кольцевой генной сети	25
Имомназаров Б. Х., Имомназаров Ш. Х., Маматкулов М. М., Худайназаров Б. Б. Фундаментальное решение для стационарного уравнения двухскоростной гидродинамики с равновесием фаз по давлению в диссипативном приближении	33
Ковалёв М. Д. О геометрическом определении шарнирного механизма, теореме Кемпе и перезрелой математике	41
• Куликов И. М., Черных И. Г., Ульяничев И. С., Тутуков А. В. Математическое моделирование ядерного горения углерода в белых карликах с использованием 7-изотопной сети реакций	55
Купцова Е. В. Осциллятор Ван дер Поля под действием случайного шума	67
Лазарева Г. Г., Максимова А. Г. Численное моделирование распространения паров вольфрама над нагреваемой поверхностью	81
Мамажонов М., Шерматова Х. М. Об одной краевой задаче для уравнения третьего порядка парабола-гиперболического типа в треугольной области с тремя линиями изменения типа уравнения	93
Минаков А. В., Лобасов А. С., Шебелев А. В., Зайцев Д. В., Кабов О. А. Режимы течения плёнки жидкости, увлекаемой потоком газа в плоском горизонтальном канале, в изотермических условиях	104
Митрофанов Г. М., Карчевский А. Л. Математическое моделирование для тонкослоистых упругих сред в сейсморазведке	120
Перцев Н. В., Топчий В. А., Логинов К. К. Численное стохастическое моделирование динамики взаимодействующих популяций	135
Романов В. Г., Бугуева Т. В. Задача об определении коэффициента при нелинейном члене квазилинейного волнового уравнения	154
Старовойтов В. Н., Старовойтова Б. Н. Усреднённая математическая модель периодической упругой структуры, насыщенной жидкостью Максвелла	170

НОВОСИБИРСК

ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

УДК 519.4

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДЕРНОГО ГОРЕНИЯ УГЛЕРОДА В БЕЛЫХ КАРЛИКАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 7-ИЗОТОПНОЙ СЕТИ РЕАКЦИЙ

© 2022 И. М. Куликов^{1a}, И. Г. Черных^{1b}, И. С. Ульяничев^{1c},
А. В. Тутуков^{2d}

¹*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
просп. Лаврентьева, 6, г. Новосибирск 630090, Россия*

²*Институт астрономии РАН,
ул. Пятницкая, 48, г. Москва 119017, Россия*

E-mails: ^akulikov@ssd.sscs.ru, ^bchernykh@parbz.sscs.ru, ^cwmzonacomvn@mail.ru,
^datutukov@inasan.ru

Поступила в редакцию 11.01.2022 г.; после доработки 13.02.2022 г.;
принята к публикации 22.06.2022 г.

В основе механизма взрыва сверхновых типа Ia лежит ядерное горение материала белых карликов. При моделировании сценариев эволюции белых карликов с последующим взрывом сверхновых важно достаточно полно учитывать неравновесную химокинетику основных изотопов в виде подсчетных процессов. Необходимость рассмотрения подробной сети ядерных реакций компенсируется тем, что далеко не все реакции вносят основной вклад как в итоговую массовую долю изотопов, так и в энергетику горения. Но даже рассмотрение общепринятых 7-, 13-, 19-, 21- или 34-изотопных сетей реакций достаточно дорогая процедура подсчетных процессов. В работе мы предлагаем «свёртку» альфа-сети ядерных реакций, аналитическую форму которой можно использовать в гидродинамической модели эволюции белых карликов и взрыва сверхновых типа Ia. Для построения такой модели мы использовали большое число вычислительных экспериментов, реализованных с помощью распределённой клиент-серверной системы вычислений.

Ключевые слова: вычислительная астрофизика, вычислительная химия, белые карлики, альфа-сеть ядерных реакций, изотопы.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.306

ВВЕДЕНИЕ

Сверхновые типа Ia являются главным источником элементов «жизни» во Вселенной. Математическое моделирование подобных феноменов требует помимо детального расчёта гидродинамических течений учёта ядерных реакций горения материала белых карликов в виде подсчетных процессов. Однако в вычислительной модели использование какой-либо сложной сети химических реакций ведёт к часто неподъёмной вычислительной нагрузке. В работе [1] экспериментально и теоретически обоснована важность учёта следующих изотопов: ^{12}C , ^{16}O , ^{20}Ne , ^{24}Mg , ^{28}Si , ^{56}Ni и альфа-частицы ^4He . Это ключевые элементы нуклеосинтеза как в части наблюдений, так и в части энергетики ядерных реакций.

Особенно важен химический состав остатка в сверхновых типа Iaх [2, 3], которые достаточно часто образуются при столкновении белых карликов [4]. Особо стоит выделить проблему

образования никеля в карликовых галактиках [5] и в остатках сверхновых, полученных в ходе двойной детонации [6, 7], железа в чандрасекаровских сверхновых [8], а также химического состава фронта горения материала [9], его устойчивости [10] и его поджига [11]. Построенная в работе модель химической эволюции основных изотопов совместно с моделью турбулентного горения материала белых карликов [12, 13] позволяет получить эффективную модель для описания эволюции сверхновых типа Ia от сценария взрыва до распространения остатка.

В первом разделе мы опишем математическую модель сети ядерных реакций. Вторым раздел посвящён системе распределённых вычислений. В третьем разделе будут приведены основные вычислительные эксперименты. В четвёртом разделе мы построим «свёртку» модели ядерных реакций, а также рассмотрим дискуссионные вопросы. В заключении приведены основные выводы по статье.

1. 7-ИЗОТОПНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ УГЛЕРОДА

Будем рассматривать семь ключевых изотопов ^4He , ^{12}C , ^{16}O , ^{20}Ne , ^{24}Mg , ^{28}Si , ^{56}Ni и следующий набор ядерных реакций альфа-цепочки:

- 1) ядерное горение гелия: $3 \times ^4\text{He} \rightarrow ^{12}\text{C} + \gamma$;
- 2) синтез кислорода из углерода: $^{12}\text{C} + ^4\text{He} \rightarrow ^{16}\text{O} + \gamma$;
- 3) синтез неона из кислорода: $^{16}\text{O} + ^4\text{He} \rightarrow ^{20}\text{Ne} + \gamma$;
- 4) синтез магния из неона: $^{20}\text{Ne} + ^4\text{He} \rightarrow ^{24}\text{Mg} + \gamma$;
- 5) синтез кремния из магния: $^{24}\text{Mg} + ^4\text{He} \rightarrow ^{28}\text{Si} + \gamma$;
- 6) ядерное горение углерода: $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C} \rightarrow ^{24}\text{Mg}$;
- 7) ядерное горение углерода и кислорода $^{12}\text{C} + ^{16}\text{O} \rightarrow ^{28}\text{Si}$;
- 8) ядерное горение и синтез кислорода до никеля: $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O} + 6 \times ^4\text{He} \rightarrow ^{56}\text{Ni} + 6\gamma$;
- 9) ядерное горение и синтез кремния до никеля: $^{28}\text{Si} + 7 \times ^4\text{He} \rightarrow ^{56}\text{Ni} + 7\gamma$;
- 10) фотодезинтеграция кремния: $^{28}\text{Si} + \gamma \rightarrow ^{24}\text{Mg} + ^4\text{He}$;
- 11) фотодезинтеграция магния: $^{24}\text{Mg} + \gamma \rightarrow ^{20}\text{Ne} + ^4\text{He}$;
- 12) фотодезинтеграция неона: $^{20}\text{Ne} + \gamma \rightarrow ^{16}\text{O} + ^4\text{He}$;
- 13) фотодезинтеграция кислорода: $^{16}\text{O} + \gamma \rightarrow ^{12}\text{C} + ^4\text{He}$;
- 14) фотодезинтеграция углерода: $^{12}\text{C} + \gamma \rightarrow 3 \times ^4\text{He}$;
- 15) фотодезинтеграция никеля: $^{56}\text{Ni} + 7\gamma \rightarrow ^{28}\text{Si} + 7 \times ^4\text{He}$.

Таблица скоростей реакций k_i и выделяемая энергия Q_i приведены в работе [14]. Будем рассматривать следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений, записанных для эволюции массовой доли каждого элемента $M_{^4\text{He}}$, $M_{^{12}\text{C}}$, $M_{^{16}\text{O}}$, $M_{^{20}\text{Ne}}$, $M_{^{24}\text{Mg}}$, $M_{^{28}\text{Si}}$, $M_{^{56}\text{Ni}}$:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{^4\text{He}}}{dt} = & -3k_1 M_{^4\text{He}}^3 - k_2 M_{^{12}\text{C}} M_{^4\text{He}} - k_3 M_{^{16}\text{O}} M_{^4\text{He}} - k_4 M_{^{20}\text{Ne}} M_{^4\text{He}} - k_5 M_{^{24}\text{Mg}} M_{^4\text{He}} \\ & - 6k_8 M_{^{16}\text{O}}^2 M_{^4\text{He}}^6 - 7k_9 M_{^{28}\text{Si}} M_{^4\text{He}}^7 + k_{10} M_{^{28}\text{Si}} + k_{11} M_{^{24}\text{Mg}} + k_{12} M_{^{20}\text{Ne}} \\ & + k_{13} M_{^{16}\text{O}} + 3k_{14} M_{^{12}\text{C}} + 7k_{15} M_{^{56}\text{Ni}}, \quad (1) \end{aligned}$$

$$\frac{dM_{12C}}{dt} = k_1 M_{4He}^3 - k_2 M_{12C} M_{4He} - 2k_6 M_{12C}^2 - k_7 M_{12C} M_{16O} + k_{13} M_{16O} - k_{14} M_{12C}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_{16O}}{dt} = k_2 M_{12C} M_{4He} - k_3 M_{16O} M_{4He} \\ - k_7 M_{12C} M_{16O} - 2k_8 M_{16O}^2 M_{4He}^6 + k_{12} M_{20Ne} - k_{13} M_{16O}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{dM_{20Ne}}{dt} = k_3 M_{16O} M_{4He} - k_4 M_{20Ne} M_{4He} + k_{11} M_{24Mg} - k_{12} M_{20Ne}, \quad (4)$$

$$\frac{dM_{24Mg}}{dt} = k_4 M_{20Ne} M_{4He} - k_5 M_{24Mg} M_{4He} + k_6 M_{12C}^2 + k_{10} M_{28Si} - k_{11} M_{24Mg}, \quad (5)$$

$$\frac{dM_{28Si}}{dt} = k_5 M_{24Mg} M_{4He} + k_7 M_{12C} M_{16O} - k_9 M_{28Si} M_{4He}^7 - k_{10} M_{28Si} + k_{15} M_{56Ni}, \quad (6)$$

$$\frac{dM_{56Ni}}{dt} = k_8 M_{16O}^2 M_{4He}^6 + k_9 M_{28Si} M_{4He}^7 - k_{15} M_{56Ni}. \quad (7)$$

Для разрешения системы (1)–(7) будем использовать код ChemPAK [15], в основе которого используется неявный метод Эйлера пятого порядка точности, известный в литературе как RADAU5.

2. СИСТЕМА РАСПРЕДЕЛЁННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Особенностью исследования подобной сети ядерных реакций является возможность распределённых вычислений для каждого набора массовой доли элементов, температуры и плотности вырожденного газа белых карликов. Для реализации распределённых вычислений мы будем использовать клиент-серверную архитектуру. DHCA (Distributed Hydrodynamic Computation Application) представляет собой клиент-серверную систему распределённых вычислений, состоящую из трёх основных компонентов: сервера, web-приложения и приложения на базе операционной системы Android. Сервер отвечает за хранение и распределение вычислительных блоков среди конечных мобильных устройств на базе Android. Сервер хранит результаты вычислений для каждого вычислительного блока и при успешном завершении вычислений аккумулирует общий результат всех блоков; хранит основную информацию о пользователях, необходимую для распределения работы. Web-приложение отвечает за создание задач распределённых вычислений, загрузку начальных условий, отслеживание хода вычислений и выгрузку результатов; является закрытым сегментом системы с ограниченным доступом. Android-приложение отвечает за обработку вычислительных блоков, полученных от сервера, согласно определённому алгоритму; осуществляет отправку результатов обратно на сервер; отвечает за регистрацию пользователей в системе. Работа приложения начинается с создания задачи на вычисления. Специалист с помощью web-приложения вносит основные сведения о задаче (название, описание и т. д.), а также загружает начальные условия задачи в виде файла определённого формата. При загрузке данных на сервер задача разбивается на определённое количество вычислительных блоков по алгоритму в зависимости от типа задачи. Количество блоков определяется из количества активных пользователей системы либо может быть задано специалистом при создании задачи. Работа пользователя с Android-приложением начинается с регистрации в системе. При регистрации пользователь вводит логин и пароль, под которыми будет осуществляться дальнейшая работа. При регистрации система устанавливает соединение с платформой Firebase Cloud Messaging (FCM), отвечающей за работу с уведомлениями. Успешное соединение с данной платформой сопровождается выдачей уникального токена для устройства, используя который сервер способен отправлять уведомления конкретному устройству. Токен заносится в учётную запись пользователя и используется в дальнейшем для распределения вычислительных блоков и ведения статистики. После регистрации

пользователю становится доступным просмотр и выбор текущих незавершённых задач. После запуска задачи на вычисление всем пользователям Android-приложения приходит уведомление о появлении новой задачи. При выборе задачи для вычисления приложение отправляет на сервер запрос на получение вычислительных блоков. При наличии свободных блоков сервер в качестве ответа отправляет первый доступный блок и резервирует его за пользователем с помощью токена FCM. Если свободные блоки отсутствуют, но есть блоки, зарезервированные за другими пользователями, но не получившие результата в течение суток, сервер отправляет первый подобный блок и резервирует его за новым пользователем. Приложение, получив ответ от сервера, в случае наличия вычислительных блоков записывает ответ в локальную базу данных и начинает вычисление блока в потокобезопасном коде на основе Kotlin Coroutines. Пользователь отслеживает процесс вычисления и может прервать его в любой момент. Также пользователь может отказаться от участия в задаче, в этом случае все зарезервированные за ним вычислительные блоки, не получившие результат вычислений, будут аннулированы и станут доступны другим пользователям. При успешном вычислении результат записывается в локальную базу данных, а затем осуществляется отправка его на сервер. В случае отсутствия интернет-соединения отправка результатов прерывается до появления соединения. В случае успешной отправки результата на сервер приложение осуществляет запрос свободных вычислительных блоков, при их наличии итерация повторяется, пока есть свободные блоки либо пока пользователь не прекратит работу приложения. При поступлении на сервер результатов сервер каждый раз проверяет, есть ли ещё вычислительные блоки, по которым нет результата, если таких блоков больше нет, то задача считается выполненной и сервер аккумулирует итоговый файл определённого формата. Также в этом случае задача отмечается в web и android-приложениях как выполненная и в web-интерфейсе становится доступным для скачивания итоговый файл. Для реализации системы распределённых вычислений (см. рис. 1) используются легковесные потоки.

Система является реализацией смеси шаблона для распределённых вычислений на мобильных устройствах и паттерна map/reduce. Также данная система является надёжной, так как перераспределяет блоки с недоступных узлов между доступными устройствами. В клиентской части вычисления в фоне организованы с помощью Kotlin Coroutines; при дальнейшей доработке мы надеемся на увеличение производительности с помощью этой технологии.

На данный момент клиентская часть работает на всех устройствах Android, начиная с версии 6.0 (Marshmallow), что даёт почти 94% охвата всех пользователей Android. Чем больше охват, тем большую конечную производительность сможет выдать система. В то же время у системы есть ряд нюансов. Добавление нового типа задач требует доработки как web-, так и клиентской части приложения. К тому же такие доработки требуют в конечном итоге обновления программного обеспечения у конечного пользователя мобильного устройства. Так как типы задач имеют обратную совместимость с версией приложения, то пользователь со старой версией клиента не сможет участвовать в задачах нового типа. Специалист, который будет открывать задачу, должен знать формат файла параметров для каждого типа задач. Данный недостаток может быть устранён посредством дальнейшей доработки web-приложения в части занесения параметров задачи, выделением обязательных для заполнения полей и автоматическим формированием файла параметров по занесённым данным. Также стоит отметить, что при должном уровне абстракции и параметризации каждого типа задач на этапе проектирования можно добиться большой вариативности в плане постановки условия.

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В качестве наиболее показательных рассмотрим четыре вычислительных эксперимента: горение углерода малой плотности, горение углерода высокой плотности, горение углерода и кислорода высокой плотности, интенсивное горение углерода высокой плотности. Отметим,

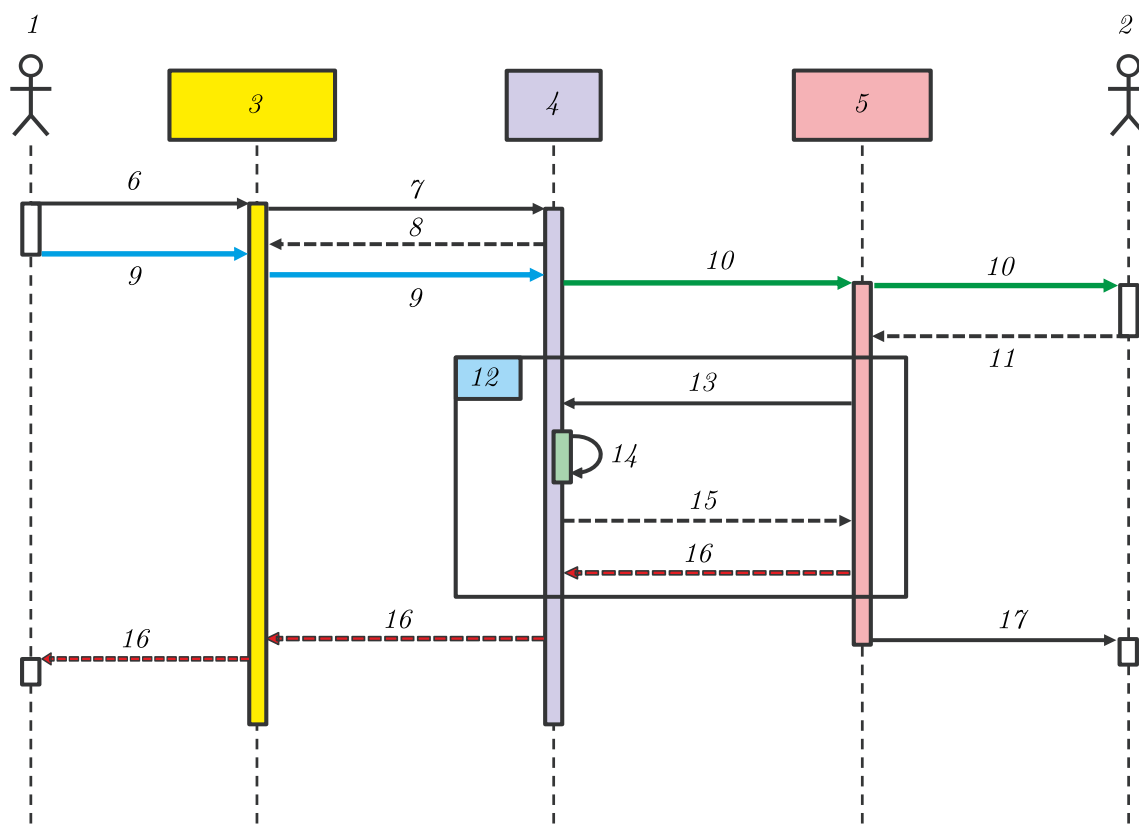


Рис. 1. Концептуальная схема работы системы:

- 1 — исследователь, 2 — пользователь, 3 — веб-приложение, 4 — сервер,
 5 — мобильное приложение, 6 — ввод данных, 7 — запись данных, 8 — отображение данных,
 9 — запуск вычислений, 10 — уведомление о новом задании, 11 — взятие в работу,
 12 — петля, 13 — запрос данных, 14 — проверка наличия свободных данных,
 15 — передача данных, 16 — результат, 17 — отображение результата

что большинство результатов по эволюции массовой доли мы будем рассматривать не только в линейной, но и логарифмической шкале. Это связано с тем, что характерное гидродинамическое время при взрыве сверхновых типа Ia составляет порядка 10^3 с, а характерное время взрыва сверхновых типа Ia порядка 1–10 с. Тем не менее взрывом сверхновой процесс не заканчивается, и мы рассмотрим эволюцию изменения массовой доли до времён порядка нескольких десятков лет, за которые сформируется остаток.

Для первого вычислительного эксперимента рассмотрим вырожденный газ, полностью состоящий из углерода ^{12}C с плотностью $\rho = 10^7$ г/см³ и температурой $T = 10^9$ К. Такое условие является нижней границей горения углерода по плотности и температуре. Результаты моделирования эволюции массовой доли M элементов в течение времени t в секундах представлены на рис. 2.

Моделирование показывает, что за характерное время формирования остатков взрыва сверхновых при минимальных допустимых параметрах горения углерода основными продуктами горения являются неон 28%, магний 38% и кремний 33%, а остальные элементы не превосходят одного процента. Формирование неона происходит за счёт горения углерода и фотодезинтеграции магния на начальных временах, затем основным источником неона является горение кислорода с расходом изотопа гелия. Как только гелий заканчивается, останавливается и выработка неона. Горение углерода и связки углерода и кислорода позволяют получить

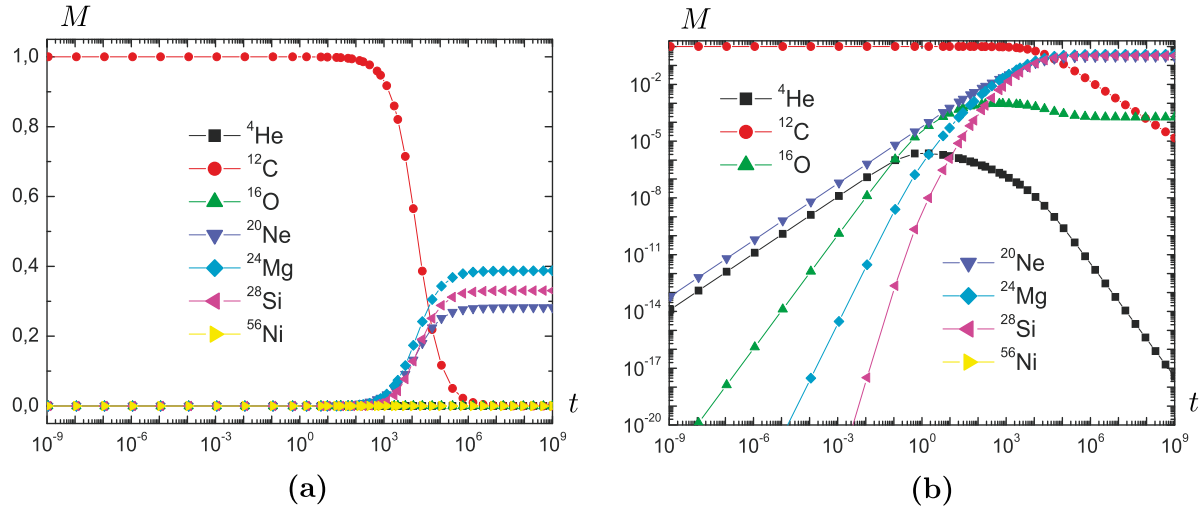


Рис. 2. Изменение массовой доли элементов при горении углерода при минимальных допустимых значениях плотности и температуры для первого эксперимента: в линейной (а) и в логарифмической (б) шкалах

высокое содержание магния и кремния. Заметим, что на гидродинамических временах образование элементов достаточно хорошо описывается линейной функцией для логарифмических значений массовой доли и времени. Таким образом, массовая доля приближённо описывается функцией $M = 10^A \times t^B$. Заметим также, что при этих условиях отсутствует образование никеля. Используя метод наименьших квадратов, мы определили следующие приближённые функции для изменения массовой доли за гидродинамическое время:

$$M_{4\text{He}} = 1.122 \times 10^{-5} \times t^{0.9997}, \quad M_{16\text{O}} = 0.776 \times 10^{-6} \times t^{1.6392}, \quad M_{20\text{Ne}} = 6.623 \times 10^{-5} \times t^{1.0007}, \\ M_{24\text{Mg}} = 0.158 \times 10^{-14} \times t^{1.1106}, \quad M_{28\text{Si}} = 0.316 \times 10^{-23} \times t^{1.4256}.$$

Заметим, что образование магния и кремния на гидродинамических временах достаточно мало, при том на временах порядка формирования остатка эти элементы определяют основную массовую долю элементов.

Во втором вычислительном эксперименте рассмотрим также газ, полностью состоящий из углерода ^{12}C с характерной для области подрыва плотностью $\rho = 10^9$ г/см³ и температурой горения углерода $T = 10^9$ К. Результаты моделирования эволюции массовой доли M элементов в течение времени t в секундах для второго эксперимента представлены на рис. 3.

Моделирование показывает, что качественно поведение массовой доли изотопов соответствует предыдущему эксперименту. Основное отличие заключается в формировании массовой доли остатков взрыва сверхновых, значение которых достигает для неона 29%, магния 34% и кремния 36%, а остальные элементы также не превосходят одного процента. Приближённые функции для изменения массовой доли за гидродинамическое время приобретают следующий вид:

$$M_{4\text{He}} = 1.701 \times 10^{-2} \times t^{0.9857}, \quad M_{16\text{O}} = 3.539 \times 10^{-2} \times t^{1.9514}, \quad M_{20\text{Ne}} = 1.254 \times 10^{-1} \times t^{0.9998}, \\ M_{24\text{Mg}} = 0.576 \times 10^{-3} \times t^{1.1107}, \quad M_{28\text{Si}} = 0.281 \times 10^{-9} \times t^{1.5264}.$$

Заметим, что основное отличие в законах изменения массовой доли, по сравнению с предыдущим экспериментом, находится в степенях коэффициента перед показательной функции от времени.

Для третьего эксперимента сохраним параметры плотности и температуры из второго эксперимента, но рассмотрим газ с равными массовыми долями кислорода и углерода. Резуль-

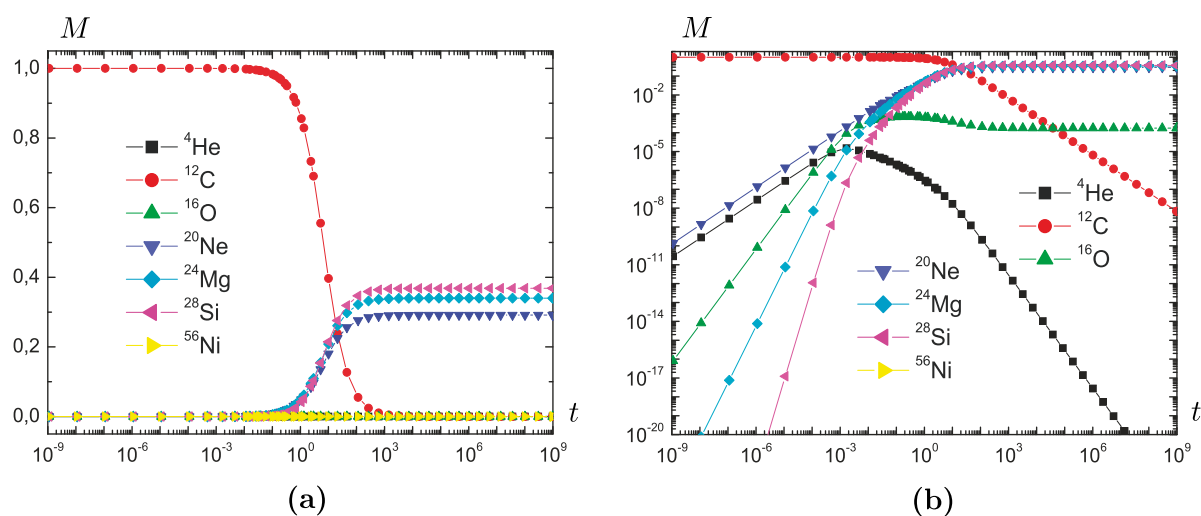


Рис. 3. Изменение массовой доли элементов при горении углерода при минимальных допустимых значениях плотности и температуры для второго эксперимента: в линейной (a) и в логарифмической (b) шкалах

таты моделирования эволюции массовой доли M элементов в течение времени t в секундах для третьего эксперимента представлены на рис. 4.

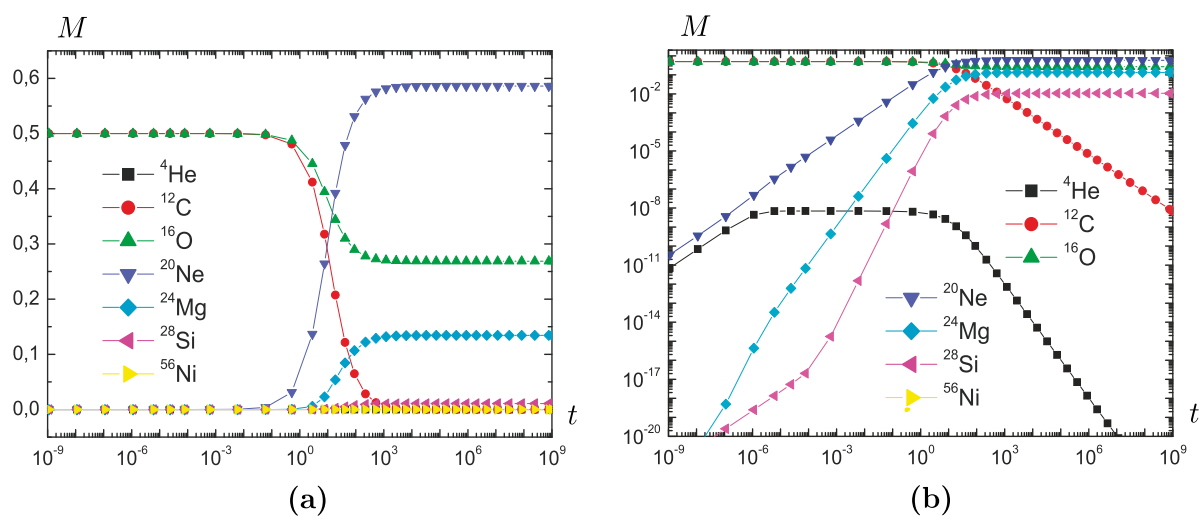


Рис. 4. Изменение массовой доли элементов при горении углерода при минимальных допустимых значениях плотности и температуры для третьего эксперимента: в линейной (a) и в логарифмической (b) шкалах

Результаты эксперимента показали, что за время формирования остатка массовая доля кислорода падает с 50% до 27%, в то же время массовая доля неона достигает 58%, что происходит в основном за счёт горения кислорода. Массовая доля магния падает по сравнению с предыдущим экспериментом до 13% и кремний до 2% в основном за счёт меньшей массовой доли углерода. Отметим, что изменение массовой доли кремния, магния и неона соответствует предыдущему эксперименту на малых временах. Заметим, что при равной массе углерода и кислорода выход на максимум массовой доли изотопа гелия особо выражен.

В четвёртом эксперименте рассмотрим предельный случай горения углерода при температуре $T = 10^{10}$ К с характерной для области подрыва плотностью $\rho = 10^9$ г/см³. Результаты моделирования эволюции массовой доли M элементов в течение времени t в секундах для

третьего эксперимента представлены на рис. 5.

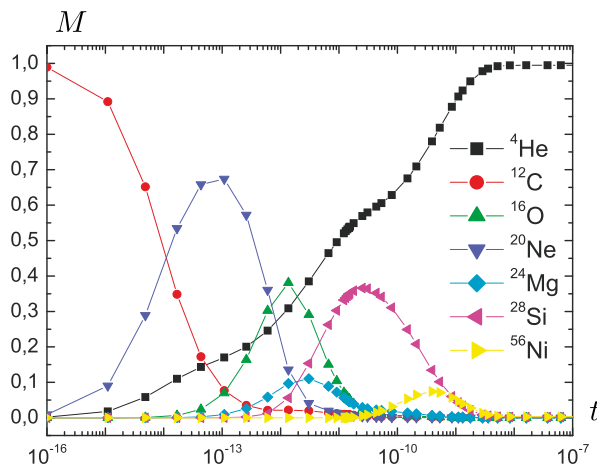


Рис. 5. Изменение массовой доли элементов при горении углерода при характерном значении плотности и высокой температуры для четвертого эксперимента

За характерное гидродинамическое время происходят все реакции горения углерода с промежуточным образованием в том числе и никеля. Таким образом, мы имеем значимый интервал для температуры от 10^9 до 10^{10} К, от которого зависит показатель степени для изменения массовой доли элементов. В следующем разделе в качестве дискуссии мы предложим одну аппроксимацию изменения массовой доли элементов, которая может быть использована для конструирования подсчетного процесса горения материала.

4. ДИСКУССИЯ

В части дискуссии мы приведем «свёртку» подсчетной модели горения материала белых карликов. Разумеется, мы строим только приближённую модель ядерных реакций, которая в первом приближении способна достаточно хорошо описать изменение массовой доли элементов. Это нам позволит значительно уменьшить вычислительные затраты на описание ядерных реакций, так как в одной ячейке их счёт за характерное гидродинамическое время достигает порядка секунды. Так как на протяжении десятка тысяч шагов по времени в каждой из порядка миллиарда расчётных ячеек вместо расчёта системы ОДУ (1)–(7) мы будем использовать аналитические функции, то такая задача может быть принципиально посчитана на доступных суперЭВМ в трёхмерной постановке. В дальнейшем мы планируем представить результаты подобных расчётов с использованием такой модели. Приведем основные допущения при построении «свёртки»:

1. При температуре порядка $T = 10^{10}$ К на временах порядка 10^{-10} с будем использовать гауссовы функции для изменения массовой доли элементов альфа-цепочки ядерных реакций.
2. Для перехода от температуры $T = 10^9$ К к температуре $T = 10^{10}$ К будем использовать сигмоиду.
3. Учтём экспериментальный факт, что образование неона на 50% происходит за счёт горения кислорода.
4. Углерод и кислород являются основными источниками образования всех элементов, при этом кислород «ответствен» только за образование неона.
5. Для определённости будем считать изменение коэффициентов в массовой доле изотопов линейными от десятичного логарифма плотности.
6. В работе [1] утверждается, что 7-изотопная модель ядерных реакций достаточна с точки зрения описания энергетики горения.

7. Несомненно, такой небольшой набор изотопов не в полном объёме описывает химическое разнообразие состава. В частности, при рассмотрении никеля мы говорим не о самом никеле, а о изотопах группы железа. Фактически мы в полном объёме описываем материал белых карликов (углерод, кислород, неон), первые элементы горения (магний и кремний), а также группу железа (никель). Однако мы считаем, что такого состава достаточно для описания энергетики горения, а также для описания химического состава основных элементов межзвёздной среды.

Определим безразмерные величины $T9 = T/10^9$ К: температуру в 10^9 К, ρ — плотность в г/см^3 и t — время в секундах, а также две вспомогательные функции:

$$\sigma(T) = \frac{1}{1 + e^{-2 \times T9 + 10}}, \quad g(t, \mu, c) = \frac{1}{c\sqrt{2\pi}} e^{-(t-\mu)/(2c^2)},$$

которые будем использовать для описания изменения массовых долей изотопов. Приведём формулы для их изменения:

$$\frac{dM_{4\text{He}}}{dt} = \sigma(T) \times g(t, 10^{-3}, 1/\sqrt{2\pi}) + (1 - \sigma(T))((0.0085 \times \lg \rho - 0.0594) \times t^{1.0487 - 0.007 \times \lg \rho}),$$

$$\frac{dM_{12\text{C}}}{dt} = -\frac{dM_{4\text{He}}}{dt} - \frac{dM_{16\text{O}}}{dt} - \frac{dM_{20\text{Ne}}}{dt} - \frac{dM_{24\text{Mg}}}{dt} - \frac{dM_{28\text{Si}}}{dt} - \frac{dM_{56\text{Ni}}}{dt},$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_{16\text{O}}}{dt} &= \sigma(T) \times g(t, 10^{-12}, 3/\sqrt{2\pi}) \\ &+ (1 - \sigma(T))((0.0176 \times \lg \rho - 0.1238) \times t^{0.5465 + 0.1561 \times \lg \rho}) - \frac{M_{16\text{O}}}{5 + 5e^{\lg t + 3}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_{20\text{Ne}}}{dt} &= \sigma(T) \times g(t, 10^{-13}, 1/\sqrt{\pi}) \\ &+ (1 - \sigma(T))((0.0627 \times \lg \rho - 0.4386) \times t^{1.0038 - 0.0004 \times \lg \rho}) + \frac{M_{16\text{O}}}{5 + 5e^{\lg t + 3}}, \end{aligned}$$

$$\frac{dM_{24\text{Mg}}}{dt} = \sigma(T) \times g(t, 10^{-11}, 3) + (1 - \sigma(T))((0.00029 \times \lg \rho - 0.0021) \times t^{1.1102 - 0.00005 \times \lg \rho}),$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_{28\text{Si}}}{dt} &= \sigma(T) \times g(t, 10^{-10}, 3/\sqrt{2\pi}) \\ &+ (1 - \sigma(T))(10^{-9}(0.1405 \times \lg \rho - 0.9835) \times t^{1.0728 + 0.0504 \times \lg \rho}), \end{aligned}$$

$$\frac{dM_{56\text{Ni}}}{dt} = \sigma(T) \times g(t, 10^{-9}, 4).$$

Приведённые приближённые функции могут быть использованы для изменения массовой доли изотопов на временах от $t = 10^{-15}$ с до $t \approx 1$ с, что позволяет описывать процессы взрыва не только на начальных этапах горения, но и на характерных временах взрыва сверхновой типа Ia и на временах порядка формирования остатка.

Рассмотрим равновесное решение исходной системы ОДУ (1)–(7), приравняв к нулю левую часть уравнений. Дополнительно определим условие $M_{4\text{He}} = 0$, т. е. альфа-частицы считаем исчерпанными. Это ведёт к равенству $M_{56\text{Ni}} = 0$, что говорит об отсутствии изотопов группы железа при исчерпании альфа-частиц. Мы пойдём ещё дальше и исключим из рассмотрения неон и магний, т. е. $M_{20\text{Ne}} = 0$ и $M_{24\text{Mg}} = 0$. Это даёт нам возможность записать следующие соотношения:

$$k_7 M_{12\text{C}} M_{16\text{O}} = k_{10} M_{28\text{Si}},$$

$$k_{13}M_{16\text{O}} = 2k_6M_{12\text{C}}^2 + k_7M_{12\text{C}}M_{16\text{O}} + k_{14}M_{12\text{C}}.$$

В результате мы приходим к одному равновесному состоянию:

$$k_{13}M_{16\text{O}} = 2k_6M_{12\text{C}}^2 + k_{10}M_{28\text{Si}} + k_{14}M_{12\text{C}}.$$

Такое состояние определяет неполное сгорание углеродно-кислородного карлика с образованием изотопа кремния, который лежит в основе межзвёздной пыли.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена «свёртка» альфа-сети ядерных реакций для 7-изотопной системы. Рассмотрены изотопы гелия, углерода, кислорода, неона, магния, кремния и никеля. Модель ядерных реакций на основе множества вычислительных экспериментов была записана в достаточно простой аналитической форме, которую можно использовать в гидродинамической модели эволюции белых карликов и взрыва сверхновых типа Ia.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Timmes F.X., Hoffman R.D., Woosley S.E.* An inexpensive nuclear energy generation network for stellar hydrodynamics // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2000. V. 129. P. 377–398.
2. *Zhou P., Leung S.-C., Li Z., Nomoto K., Vink J., Chen Y.* Chemical abundances in Sgr A East: evidence for a type Ia Supernova Remnant // *Astrophys. J.* 2021. V. 908. Article Number 31.
3. *Leung S.-C., Nomoto K.* Explosive nucleosynthesis in near-chandrasekhar mass White Dwarf models for type Ia Supernovae: dependence on model parameters // *Astrophys. J.* 2020. V. 900. Article Number 54.
4. *Куликов И.М., Черных И.Г., Тутуков А.В.* Математическое моделирование высокоскоростного столкновения белых карликов — механизма взрыва сверхновых типа Ia/Iax // *Сиб. журн. индустр. математики.* 2022. Т. 25, № 1. С. 80–91.
5. *Kobayashi C., Leung S.-C., Nomoto K.* New type Ia Supernova yields and the manganese and nickel problems in the Milky Way and Dwarf Spheroidal Galaxies // *Astrophys. J.* 2020. V. 895. Article Number 138.
6. *Tanikawa A., Nomoto K., Nakasato N.* Three-dimensional simulation of double detonations in the double-degenerate model for type Ia Supernovae and interaction of ejecta with a surviving White Dwarf companion // *Astrophys. J.* 2018. V. 868. Article Number 90.
7. *Tanikawa A., Nomoto K., Nakasato N., Maeda K.* Double-detonation models for type Ia Supernovae: trigger of detonation in companion White Dwarfs and signatures of companions' stripped-off materials // *Astrophys. J.* 2019. V. 885. Article Number 103.
8. *Leung S.-C., Nomoto K.* Explosive nucleosynthesis in near-chandrasekhar-mass White Dwarf models for type Ia Supernovae: dependence on model parameters // *Astrophys. J.* 2018. V. 861. Article Number 143.
9. *Woosley S.E., Kerstein A.R., Aspden A.J.* Flames in type Ia Supernova: deflagration-detonation transition in the oxygen-burning flame // *Astrophys. J.* 2011. V. 734. Article Number 37.
10. *Glazyrin S.I., Blinnikov S.I., Dolgov A.* Flame fronts in type Ia Supernovae and their pulsational stability // *Monthly Notices Royal Astronom. Soc.* 2013. V. 433. P. 2840–2849.
11. *Iapichino L., Brueggen M., Hillebrandt W., Niemeyer J.C.* The ignition of thermonuclear flames in type Ia Supernovae // *Astronomy & Astrophysics.* 2006. V. 450. P. 655–666.
12. *Arash N., Peyman G., Danie L.* Modeling and simulation of turbulent nuclear flames in type Ia Supernovae // *Progress in Aerospace Sci.* 2019. V. 108. P. 156–179.
13. *Куликов И.М.* Математическое моделирование турбулентного горения углерода в задачах слияния белых карликов и взрыва сверхновых типа Ia // *Сиб. журн. индустр. математики.* 2021. Т. 24, № 3. С. 30–38.
14. *Fowler W.A., Caughlan G.R., Zimmerman B.A.* Thermonuclear reaction rates, II // *Annu. Rev. Astronomy and Astrophysics.* 1975. V. 13. P. 69–112.
15. *Chernykh I., Stoyanovskaya O., Zasyapkina O.* ChemPAK software package as an environment for kinetics scheme evaluation // *Chemical Product and Process Modeling.* 2009. V. 4, N 4. Article Number 3.

UDC 519.4

MATHEMATICAL SIMULATION OF NUCLEAR CARBON BURNING
IN WHITE DWARFS USING A 7-ISOTOPE REACTION NETWORK© 2022 I. M. Kulikov^{1a}, I. G. Chernykh^{1b}, I. S. Ulyanichev^{1c},
A. V. Tutukov^{2d}¹*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS,
pr. Akad. Lavrentyeva 6, Novosibirsk 630090, Russia,*²*Institute of Astronomy RAS,
ul. Pyatnitskaya 48, Moscow 119017, Russia*E-mails: ^akulikov@ssd.sgcc.ru, ^bchernykh@parbz.sgcc.ru, ^cwmzonacomvn@mail.ru,
^datutukov@inasan.ru

Received 11.01.2022, revised 13.02.2022, accepted 22.06.2022

Abstract. The mechanism of explosion of type Ia Supernovae is based on nuclear burning of the white dwarf material. When modeling scenarios for the evolution of white dwarfs followed by a Supernova explosion, it is important to fully take into account the nonequilibrium chemical kinetics of major isotopes in the form of subgrid processes. It is necessary to consider a detailed network of nuclear reactions, but in this case not all reactions make major contributions both to the final mass fraction of isotopes and to the energy of burning. It is a rather expensive procedure of subgrid processes to consider even the conventional 7-, 13-, 19-, 21-, or 34-isotope networks of reactions. We propose a «compression» of an alpha network of nuclear reactions whose analytical form can be used in a hydrodynamic model of the evolution of white dwarfs and a type Ia supernova explosion. To construct such a model, a large number of computational experiments with a distributed client-server computational system is used.

Keywords: computational astrophysics, computational chemistry, white dwarfs, alpha network of nuclear reactions, isotopes.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.306

REFERENCES

1. Timmes F.X., Hoffman R.D., Woosley S.E. An inexpensive nuclear energy generation network for stellar hydrodynamics. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 2000, Vol. 129, pp. 377–398.
2. Zhou P., Leung S.-C., Li Z., Nomoto K., Vink J., Chen Y. Chemical abundances in Sgr A East: evidence for a type Iax Supernova Remnant. *Astrophys. J.*, 2021, Vol. 908, article number 31.
3. Leung S.-C., Nomoto K. Explosive nucleosynthesis in near-chandrasekhar mass White Dwarf models for type Iax Supernovae: dependence on model parameters. *Astrophys. J.*, 2020, Vol. 900, article number 54.
4. Kulikov I.M., I. G. Chernykh, A. V. Tutukov Matematicheskoe modelirovanie vysokoskorostnogo stolknoveniya belykh karlikov — mekhanizma vzryva sverkhnovykh tipa Ia/Iax [Mathematical modeling of high-speed collision of white dwarfs — explosion mechanism of type Ia/Iax supernovae]. *Sibir. Zhurn. Indust. Mat.*, 2022, Vol. 25, No. 1, pp. 80–91 (in Russian).
5. Kobayashi C., Leung S.-C., Nomoto K. New type Ia Supernova yields and the manganese and nickel problems in the Milky Way and Dwarf Spheroidal Galaxies. *Astrophys. J.*, 2020, Vol. 895, article number 138.
6. Tanikawa A., Nomoto K., Nakasato N. Three-dimensional simulation of double detonations in the double-degenerate model for type Ia Supernovae and interaction of ejecta with a surviving White Dwarf companion. *Astrophys. J.*, 2018, Vol. 868, article number 90.

7. Tanikawa A., Nomoto K., Nakasato N., Maeda K. Double-detonation models for type Ia Supernovae: trigger of detonation in companion White Dwarfs and signatures of companions' stripped-off materials. *Astrophys. J.*, 2019, Vol. 885, article number 103.
8. Leung S.-C., Nomoto K. Explosive nucleosynthesis in near-chandrasekhar-mass White Dwarf models for type Ia Supernovae: dependence on model parameters. *Astrophys. J.*, 2018, Vol. 861, article number 143.
9. Woosley S.E., Kerstein A.R., Aspden A.J. Flames in type Ia Supernova: deflagration-detonation transition in the oxygen-burning flame. *Astrophys. J.*, 2011, Vol. 734, article number 37.
10. Glazyrin S.I., Blinnikov S.I., Dolgov A. Flame fronts in type Ia Supernovae and their pulsational stability // *Monthly Notices Royal Astronom. Soc.* 2013. Vol. 433. pp. 2840–2849.
11. Iapichino L., Brueggen M., Hillebrandt W., Niemeyer J.C. The ignition of thermonuclear flames in type Ia Supernova. *Astronomy & Astrophysics*, 2006, Vol. 450, pp. 655–666.
12. Arash N., Peyman G., Daniel L. Modeling and simulation of turbulent nuclear flames in type Ia Supernovae. *Progress in Aerospace Sci.*, 2019, Vol. 108, pp. 156–179.
13. Kulikov I.M. Matematicheskoe modelirovanie turbulentnogo goreniya ugleroda v zadachakh sliyaniya belykh karlikov i vzryva sverkhnovykh tipa Ia [Mathematical simulation of turbulent combustion of carbon in the problems of white dwarf mergers and explosions of the type Ia supernovae]. *Sibir. Zhurn. Indust. Mat.*, 2021, Vol. 24, No. 3, pp. 30–38 (in Russian).
14. Fowler W.A., Caughlan G.R., Zimmerman B.A. Thermonuclear reaction rates, II. *Annu. Rev. Astronomy and Astrophysics*, 1975, Vol. 13, pp. 69–112.
15. Chernykh I., Stoyanovskaya O., Zasyapkina O. ChemPAK software package as an environment for kinetics scheme evaluation. *Chemical Product and Process Modeling*, 2009, Vol. 4, No. 4, article number 3.