

**Порівняння швидкостей пошуку  
оптимального кроку інтегрування у  
базовому алгоритмі для детального  
розрахунку дифузного йонізуючого  
випромінювання небулярних об'єктів  
під ОС LINUX Ubuntu 10.10 та  
Windows 7**

*Бугаєнко О.С., Мелех Б.Я.*

Кафедра астрофізики

Львівський національний університет імені Івана Франка

# Фотоіонізаційне моделювання

Побудова фотоіонізаційних моделей (ФМС) дає можливість отримати фізичні умови у різних частинах небулярних об'єктів, які визначаються переносом іонізуючого випромінювання.



Для побудови моделей ми використовуємо код Г.Ферланда Cloudy.

# Основні рівняння у ФМС

Рівняння перенесення випромінювання

$$\frac{1}{c} \frac{dI_\nu}{dt} + \mathbf{n} \nabla I_\nu = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu,$$

Рівняння переходу

$$\frac{dn_i}{dt} + \nabla(n_i \mathbf{v}) = G_i + \sum_{j \neq i} R_{j \rightarrow i} n_j - n_i \left( S_i + \sum_{j \neq i} R_{i \rightarrow j} \right),$$

# Фотоіонізаційне моделювання

Встановлення рекомбінаційної рівноваги:

Various time scales characterize the approach to equilibrium of an ionized gas (see Spitzer, 1962, and Ferland 1979 for a specific application). Generally, for an ionized gas with nebular temperatures ( $\approx 10^4$  K), the longest is the  $H^+$  recombination time scale,

$$T_{rec} = \frac{1}{\alpha_A(T_e)n_e} = 7.6 t_4^{0.8} n_4^{-1} \text{ years} = 0.66 t_4^{0.8} n_9^{-1} \text{ hours} \quad (1)$$

where  $t_4$  is the temperature in units of  $10^4$  K, and  $n_9$  is the electron density in units of  $10^9 \text{ cm}^{-3}$ , and case A recombination is assumed.

For situations where molecules are important the time scales are usually far more ponderous. Generally among the longer of the time scales is the time to form  $H^-$ , an important pacesetter for  $H_2$  formation in grain-free environments. This time scale is roughly given by

$$T_{molecule} = \frac{1}{\alpha_{rad}(T_e)n_e} = 0.3 t_3^{-0.8} n_9^{-1} \text{ years} \quad (2)$$

where  $t_3$  is the temperature in units of  $10^3$  K.

Для типових PNe:  $n_e \approx 1000 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_e \approx 10000^\circ\text{K} \rightarrow T_{rec} = 100 \text{ p.r}$

# ФМС

Іонізаційно – рекомбінаційна рівновага:

$$n_{ion}^*(X^i, r) + n_{ion}^d(X^i, r) + n_{ion}^c(X^i, r) + n_{ion}^{ch}(X^i, r) = n_{rec}^{rad}(X^{(i+1)}, r) + n_{rec}^{di}(X^{(i+1)}, r) + n_{rec}^{ch}(X^{(i+1)}, r)$$

$$n_{ion}^*(X^i, r) = N(X^i, r) \frac{R^2}{r^2} \int_{\nu_0(X^i)}^{\nu_{max}} F_{\nu}^* e^{-\tau_{\nu}(r)} \sigma_{\nu}(X^i) \frac{d\nu}{h\nu}; \quad n_{ion}^d(X^i, r) = N(X^i, r) \int_{\nu_0(X^i)}^{\nu_{max}} \sigma_{\nu}(X^i) \frac{4\pi J_{\nu}^d(r)}{h\nu} d\nu;$$

$$n_{ion}^c(X^i, r) = N(X^i, r) n_e(r) q_c(X^i); \quad n_{ion}^{ch}(X^i, r) = N(X^i, r) [N(H^+, r) k^{->}(X^i, H^+) + N(He^+, r) k^{->}(X^i, He^+)];$$

$$n_{rec}^{rad}(X^{i+1}, r) = N(X^{i+1}, r) n_e(r) \alpha_{rad}^{rec}(X^{i+1}) \quad n_{rec}^{di}(X^{i+1}, r) = N(X^{i+1}, r) [\alpha_{high}^{di}(X^{i+1}) + \alpha_{low}^{di}(X^{i+1})];$$

$$n_{rec}^{ch}(X^{i+1}, r) = N(X^{i+1}, r) [N(H^0, r) k^{<-}(X^{i+1}, H^0) + N(He^0, r) k^{<-}(X^{i+1}, He^0)];$$

Час вст. рівноваги:  $t_T \sim \frac{n_e k T_e}{C}$  Для типових PNe:  $n_e \approx 1000 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_e \approx 10000 \text{ K} \rightarrow t_T = 10 \mu\text{r}$

Рівняння теплової рівноваги:

$$\sum_{X^i} \int_{\nu_0(X^i)}^{\nu_{max}} \left[ \frac{R^2}{r^2} F_{\nu}^* e^{-\tau_{\nu}(r)} + 4\pi J_{\nu}^d(r) \right] \sigma_{\nu}(X^i) h(\nu - \nu_0(X^i)) \frac{d\nu}{h\nu} = \epsilon_{cl} + \epsilon_{ci} + \epsilon_{rad} + \epsilon_{di}^h + \epsilon_{di}^l + \epsilon_{f-f}$$

Рівняння статистичної рівноваги:

$$\sum_{i=1}^{j-1} n_i b_{ij} + \sum_{k=j+1}^N n_k (A_{kj} + a_{kj}) = n_j \left[ \sum_{i=1}^{j-1} (A_{ji} + a_{ji}) + \sum_{k=j+1}^N b_{jk} \right]; \quad \sum_{k=1}^N n_k = 1.$$

# Алгоритм розрахунку ФМС

1. Ввід вхідних параметрів:  $n_H$ , розподілу енергії в  $L_c$ -спектрі, хімічного складу, фактору наповнення, фактору покриття (у випадку сферичної симетрії), внутрішнього радіусу тощо.
2. Оболонка туманності розбивається на достатньо тонкі шари (у випадку сферичної або аксіальної симетрії), або ж кубики (у випадку 3D моделей), в кожному з яких фізичні умови вважаються постійними.
3. Для внутрішнього шару приймається  $\tau_\nu = 0$ . Розраховується інтеграл в  $n_{ion}^*$  і  $G$ .
4. Приймається перше наближення  $T_e$  (найчастіше  $T_e \approx 10^4 K$ ).
5. Розв'язується система рівнянь іонізаційно-рекомбінаційної рівноваги з якої визначаються іонні концентрації в шарі.
6. Розв'язується система рівнянь статистичної рівноваги для всіх необхідних іонів.
7. Розраховуються функції нагріву  $G$  і охолодження  $\Lambda$  газу.

# Алгоритм розрахунку ФМС

8. Перевірка умови енергетичного балансу: якщо не виконується, то ітераційним методом (напр. методом Ньютона) підбирається нове значення  $T_e$  і кроки 4-7 повторюються.
9. Кроки 3-7 повторюються для кожного наступного шару, при чому  $\tau_\nu$  розраховується підсумовуванням по всіх попередніх шарах.
10. Розрахунок лінійчатого емісійного спектру.
11. Якщо приймається уточнене "outward-only" (напр. "outward-inward-only") наближення, або ж детальний розрахунок дифузного випромінювання (напр. 3D моделювання методом Монте-Карло), то розрахунки повторюються з урахуванням значень  $T_e(r)$  і  $\tau(r)$ , отриманих на попередній ітерації поки не буде досягнута задовільна збіжність по цих параметрах.

# Рівняння перенесення випромінювання

$$\frac{1}{c} \frac{dI_\nu}{dt} + \mathbf{n} \nabla I_\nu = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu,$$

Де  $j_\nu$  – коефіцієнт випромінювання,  $\kappa_\nu$  – коефіцієнт поглинання на частоті  $\nu$ ,  $\mathbf{n}$  – напрямок поширення світла. І тоді, повний потік випромінювання:

$$\mathbf{F}_\nu = \int_{4\pi} \mathbf{n} I_\nu d\Omega.$$

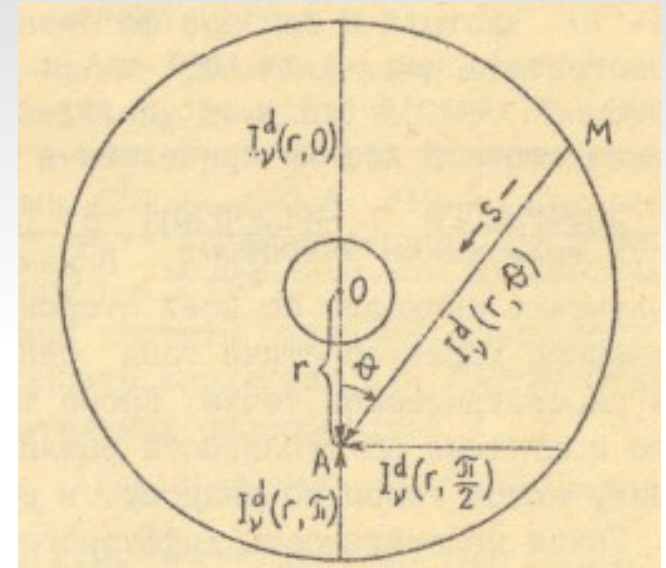


# Детальний метод розрахунку ДІВ

Детальний метод розрахунку полягає в точному розв'язку рівняння перенесення випромінювання.

- $$\frac{dI_{\nu}^d(s)}{ds} = -\alpha_{\nu}(s)I_{\nu}^d(s) + j_{\nu}^d(s)$$

Для цього модель розбивається на комірки, і для кожної розв'язується вище згадане рівняння. Для цього необхідне інтегрування за напрямками.



# Наближені розрахунки дифузного іонізуючого випромінювання

Для розрахунку дифузного іонізуючого випромінювання (ДІВ) у Cloudy використовуються наступні наближення:

- On the spot апроксимація робить припущення про велику оптичну товщину середовища для ДІВ – кванти ДІВ поглинаються у місці їх виникнення.
- Outward only апроксимація робить припущення про виключно радіальне поширення ДІВ.

# Оптимізація детального методу

Для побудови точніших моделей прийнято рішення імплементувати детальний метод розрахунку ДІВ у Cloudy. Однак, цей метод є досить громіздким, і потребує оптимізації, зокрема, обрання оптимального розбиття моделі на комірки та кроку інтегрування за кутами.

# Оптимізація кута інтегрування

Для знаходження оптимального кута інтегрування ми написали програму, що приймає як вхідні параметри коефіцієнта поглинання та випромінювання для кожного шару з відповідних файлів Cloudy. Далі, для кожного шару, програма виконує наступні дії:

*Головні ітерації.* Для різних значень кроку інтегрування повторюються внутрішні процедури, пов'язані зі знаходженням потоків ДІВ. Порівнюємо поля іонізуючого випромінювання, отримані на попередній і на поточній ітерації. Якщо розбіжність в межах похибки — покидаємо головні ітерації.

Виводимо дані щодо поточного шару: фізичні умови, оптимальний крок інтегрування, кількість ітерацій.

# Внутрішні процедури

*Внутрішні процедури.* Підсумовуємо потоки ДІВ за всіма напрямками. Згідно з припущенням про сферичну симетрію, поле іонізуючого випромінювання в межах шару однаково.

# Порівняння швидкості збіжності

У даній роботі ми поставили собі за мету порівняти швидкість виконання програми під різними ОС для різних попередньо заданих точностей збіжності та з використанням різних методів інтегрування: метод прямокутників, метод трапецій та метод Сімпсона.

# Методи інтегрування

- Метод прямокутників

$$\int_a^b f(x) dx \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a)$$

- Метод трапецій

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{f(a) + f(b)}{2}(b-a)$$

- Метод Сімпсона

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_2(x) dx = \frac{b-a}{6} \left( f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

# Умови розрахунків

Для чистоти експеременту розрахунки проводилися на одному компютері з наступною конфігурацією:

Тип ПК: ACPI x64-based PC

Тип процесора: Intel (R) Core i3 CPU 2.13GHz

Системна плата: LENOVO Base motherboard v1.02

Оперативна пам'ять: DDR3 2 x 2GB

Під обидвома ОС програма компілювалася однаковими версіями Intel C++ Compiler 2013 XE.



# Результати розрахунків



Метод	Точність, %	Ubuntu 10.4	Windows 7
Прямокутники	2	6 хв. 21 сек	8 хв. 20 сек
	5	2 хв. 18 сек	2 хв 56 сек
Трапеції	2	7 хв. 29 сек	10 хв. 21 сек
	5	2 хв. 55 сек	3 хв. 45 сек
Сімпсона	2	14 хв. 03 сек	19 хв. 45 сек
	5	4 хв. 12 сек	6 хв. 37 сек

# Висновки

З отриманих результатів можна зробити висновок, що Ubuntu 10.10 працює швидше ніж Windows 7. Тому, для подальших розрахунків ми використовуватимемо ОС Ubuntu.