



УДК 524.5-7
ББК 22.66-67

ЧИСЛЕННЫЕ МОДЕЛИ МЕЖЗВЕЗДНОЙ И МЕЖГАЛАКТИЧЕСКОЙ СРЕД: НЕРАВНОВЕСНАЯ ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА В ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ ¹

Васильев Евгений Олегович

Кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник НИИ физики
Южного федерального университета
eugstar@mail.ru
просп. Стачки, 194, 344090 г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация

Еремин Михаил Анатольевич

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
ereminmikhail@gmail.com, eremin@volsu.ru, tf@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Королев Виталий Владимирович

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
vitokorolev@gmail.com, tf@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. Описаны достижения и существующие проблемы в области численного моделирования химических процессов в межзвездной и межгалактической средах. Особое внимание уделено вопросам совместного моделирования неравновесной химической кинетики и газовой динамики. Представлена реализация метода самосогласованного моделирования динамических и химических процессов в межзвездной среде.

Ключевые слова: межзвездная среда, межгалактическая среда, химическая кинетика, газовая динамика, численные методы, молекулы, ионы.

Введение

Большое количество информации о межзвездной и межгалактической средах мы извлекаем из наблюдений ионного и молекулярного состава газа [1; 31]. Разнообразии химических соединений в этих средах свидетельствует о том, что межзвездная и межгалактическая среды являются химически реагирующими. Процессы в химически реагирующих газовых течениях, вообще говоря, исследуются во многих областях физики и техники (подробное описание можно найти в классической монографии Я.Б. Зельдовича и Ю.П. Райзера [4]). Взаимодействие газовых потоков и сопутствующие химические процессы в реагирующих течениях совместно описываются сложной системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. В статье представлен краткий обзор некоторых проблем в области численного моделирования химических процессов в межзвездной и межгалактической средах и вопросов совместного решения уравнений химической кинетики и газовой динамики.

1. Методы решения уравнений химической кинетики

Уравнения химической кинетики описывают локальные процессы в реагирующем течении и представляют собой взаимосвязанные нелинейные обыкновенные дифференциальные уравнения (далее – ОДУ) первого порядка. В общем виде уравнения химической кинетики могут быть записаны следующим образом:

$$\frac{dn_i}{dt} = F_i - D_i n_i, i = 1, \dots, n_s, \quad (1)$$

где n_i – концентрации химических компонентов; F_i и D_i – скорости образования и разрушения i -го компонента, зависящие от температуры газа.

Для решения систем ОДУ разработано множество методов [5]. Поскольку решение уравнений химической кинетики является наиболее трудоемкой частью процесса моделирования реагирующего течения, необходимы эффективные и точные алгоритмы для решения уравнений (1). Химические процессы обычно протекают в широком диапазоне временных масштабов, и система уравнений химической кинетики оказывается жесткой (напомним, что система является математически жесткой, когда матрица Якоби имеет собственные значения, различающиеся во много раз), что является основной вычислительной проблемой решения ОДУ. Для решения уравнений могут применяться как явные, так и неявные методы. Наиболее эффективными и часто используемыми методами решения жестких ОДУ являются обобщения метода Бурлиша-Штера [33], например, полуявный экстраполяционный метод Бейдера-Дьюфлхарда, и методы, использующие формулы обратного дифференцирования [5]. Последние представляют собой линейные многошаговые методы, порядок которых равен числу шагов. Метод первого порядка является обратным методом Эйлера. Часто именно этот метод используют для решения уравнений кинетики [8], поскольку он достаточно быстрый и обладает устойчивостью. Отметим, что из-за жесткости уравнений классические одношаговые (например, методы Рунге-Кутты) и многошаговые (например, методы Адамса) практически неприменимы для решения задач химической кинетики.

При выборе эффективного и точного метода решения уравнений химической кинетики нужно обратить внимание на следующие моменты. Во-первых, программная реализация численного метода должна включать адаптацию шага интегрирования в зависимости от локально-

го поведения решения. Изменение шага должно соответствовать требуемой точности решения. Даже если метод является абсолютно устойчивым, при большом шаге результаты могут иметь большие ошибки. Возможно, лучше использовать менее устойчивый метод, поскольку при большом шаге он может оказаться неустойчивым, что укажет на то, что размер шага велик. Во-вторых, если выбран метод, требующий вычисления матрицы Якоби, нужно учитывать, что вычисление якобиана довольно затратная процедура. И последнее, при совместном решении уравнений химической кинетики и газовой динамики равновесный режим практически никогда не достигается. Флуктуации температуры, плотности неизбежно приводят к отклонениям от равновесия и потере точности.

Реализация того или иного метода решения систем жестких ОДУ часто оказывается довольно сложной и требует значительных усилий. Поэтому для решения систем жестких ОДУ создано много удобных пакетов интегрирования, например, LSODAR [22], DVODE [11], часть методов, описанных в книге [33], также пригодна для этих задач.

Часто в химических реакциях выделяется или расходуется энергия, более того внутренняя энергия газа может значительно меняться за счет динамических процессов, поэтому вместе с системой уравнений (1) необходимо решать уравнение для температуры. Это обстоятельство существенно усложняет задачу, поскольку скорость охлаждения зависит от концентраций химических компонентов, которые в свою очередь быстро меняются с температурой. Однако, когда каждый из химических компонентов находится в локальном термодинамическом равновесии, скорости охлаждения могут быть определены как функции температуры и задача значительно упрощается. В этом случае уравнение для температуры может быть решено отдельно с помощью итерационного метода, в частности методом Ньютона.

Наконец, отметим, что результат решения уравнений химической кинетики в первую очередь зависит от данных скоростей химических реакций. Выбор скоростей реакций должен осуществляться довольно тщательно. Также необходимо проводить тесты для выяснения зависимости решения от включенных в модель реакций. Для компонентов, образование и разрушение которых осуществляется в результате быстрых реакций, достаточно решать уравнение равновесия.

2. Молекулы H_2 и CO в межзвездной среде

Значительную часть информации о звездообразовании в галактиках мы получаем из наблюдений молекулярной составляющей газа [1]. Именно молекулы водорода и оксида углерода служат индикатором областей зарождения звезд – молекулярных облаков – и показателем общего темпа звездообразования в галактиках. Поэтому важно выяснить какие физические условия способствуют образованию и разрушению молекул, насколько точно можно использовать молекулы в качестве индикаторов звездообразования.

Образование звезд определяется способностью газа быстро охлаждаться [35]. В ранней Вселенной основным агентом охлаждения являлся молекулярный водород [36]. Именно образование молекул водорода в необходимой концентрации привело к рождению первых звезд [40]. В работах [7; 16] представлены анализ химических реакций образования молекул водорода и их минимальный набор для моделирования эволюции первичного газа. В газе с первичным химическим составом образование молекул водорода наиболее эффективно происходит в реакциях между атомами водорода и ионами H^- и H_2^+ , а при высокой плотности становятся существенными трехчастичные реакции [32]. В обогащенном тяжелыми элементами газе добавляется процесс образования молекул на пылинках, который является наиболее существенным в локальной межзвездной среде (МЗС) [23].

Молекулы оксида углерода CO обнаружены в различных условиях в нашей Галактике [13] и в других галактиках [29]. Наряду с молекулами водорода они играют существенную роль в

охлаждении газа и звездообразовании и являются индикатором областей звездообразования. Вращательные переходы в молекулах CO эффективно способствуют перекачке тепловой энергии в инфракрасное и миллиметровое излучение, которое может свободно покидать молекулярные облака. Из-за исключительно важной роли этих молекул в тепловой эволюции газа и многочисленных наблюдений облаков и галактик в линиях CO нам необходимо хорошо понимать кинетику образования и разрушения молекул.

Из-за большого числа химических компонентов (например, минимальная модель, описанная в работе [30], включает 26 химических компонентов, а полная – 50) исследования кинетики CO в МЗС, в основном, проводились для лагранжевого элемента газа и в одномерном подходе. В работах [23; 28] достаточно детально исследованы процессы в газе молекулярных облаков и за фронтами ударных волн (многочисленность работ в этом направлении не позволяет осветить этот вопрос в полном объеме в столь короткой заметке, здесь приведены наиболее известные работы). Изучение широкого диапазона внешних условий требует увеличения числа реагентов, либо указания диапазона физических параметров газа, при которых данная модель химической кинетики оказывается применимой. Отметим, что оказывается возможной некоторая адаптация универсальной модели химической кинетики к конкретной задаче, то есть выделение наиболее существенных реагентов и реакций [44]. В частности, в работе [17] было проведено сравнение основных химических моделей кинетики молекул CO, исследованы пределы применимости той или иной модели. Указано, что в простых схемах, предложенных в работах [26; 27], эволюция основных химических реагентов, молекул H_2 и CO, близка к той, которая получается в модели кинетики, учитывающей 32 компонента и более 300 реакций. Конечно, область физических условий, при которых эти модели дают приемлемые результаты, ограничена, но использование модели [26] оказывается вполне допустимо при моделировании перехода от атомарного разреженного к плотному молекулярному газу, то есть позволяет адекватно проследить эволюцию образования молекулярных облаков.

Ограниченность одномерного описания динамики газа и наблюдательные подтверждения сложных турбулентных течений в МЗС [37] привели к необходимости исследования роли химической эволюции газа в динамике молекулярных облаков с помощью многомерных газодинамических моделей. Впервые в работе [27] была изучена динамическая и химическая эволюция молекулярных облаков в рамках трехмерного моделирования, включая простейшую химическую кинетику CO и перенос ультрафиолетового излучения. Прогресс в понимании химической структуры молекулярных облаков связан с выяснением взаимовлияния химических и динамических процессов [18]. Формирование молекулярных облаков, флуктуации молекулярного состава и металличности МЗС в значительной мере определяется турбулентными движениями газа [37], поэтому именно самосогласованные химико-динамические модели МЗС помогут корректной интерпретации наблюдений.

Значительное влияние на результаты химических моделей оказывает точность атомных данных. По мере получения более точных значений скоростей реакций необходимо проводить новые детальные расчеты химической кинетики газа. Приведем один из примеров. Как было упомянуто выше, охлаждение в линиях молекулярного водорода играет основную роль при формировании первых звезд, поэтому желательно знать функцию охлаждения как можно точнее. Однако долгое время существовал огромный, около порядка, разброс в определении скорости охлаждения [10; 16; 23]. Это приводило к неточности оценки массы первых звезд и, следовательно, их взаимодействия с окружающим газом.

3. Ионный состав межгалактической среды

Температура газа в межгалактической среде варьируется от нескольких десятков тысяч до миллионов градусов, следовательно, межгалактическая среда (далее – МГС) – это преимущественно высокоионизованная плазма. Элементный состав МГС определяется процессами звездообразования в галактиках и механизмами выноса тяжелых элементов из галактик. Отметим, что для вычисления скорости охлаждения межгалактического газа необязательно производить расчет ионного состава всех химических элементов, поскольку основной вклад вносят только H, He, C, N, O, Ne, Mg, Si, S и Fe, что связано с обилием химических элементов в МГС.

Ионный состав МГС зависит от физических условий (температуры, плотности, спектра ионизирующего излучения) и эволюции газа. В расчетах ионного состава часто предполагается, что плазма находится в столкновительном равновесии (то есть свойства определяются только столкновениями электронов, ионов и нейтральных атомов). Вычисления свойств такой плазмы производились в большом количестве работ, например [12; 34; 39]. Однако ясно, что из-за широкого диапазона физических условий и динамических процессов, газ в МГС находится в состоянии далеко от равновесного. В эволюционирующем газе ионный состав и скорости охлаждения значительно (иногда в несколько раз) отличаются от равновесных значений [6; 20; 24; 39; 43]. Более того, ионизирующее излучение от галактик и квазаров может существенно менять ионный состав и скорость охлаждения газа как равновесной, так и неравновесной плазмы [43; 45].

Вообще говоря, применимость равновесного или неравновесного подхода зависит от физических условий в газе и его динамики. Однако из-за большого числа необходимых в самосогласованном расчете ионных состояний в численном моделировании, как правило, используются равновесные модели фотоионизации тяжелых элементов [14]. По этой же причине модели фотоионизации применяют для определения свойств абсорбционных систем в спектрах квазаров [38]. Широкое использование равновесных моделей обусловлено доступностью хороших программ для расчета, например, MAPPINGS [39], CLOUDY [15], и существенными трудностями учета неравновесных моделей в газовой динамике. Следует отметить, что значительные отличия равновесного и неравновесного ионного состава могут приводить к некорректным заключениям о физических условиях в газе при интерпретации наблюдательных данных [20; 42; 43]. Очевидно, что получение ограничений на физические условия в газе возможно только при корректном описании состояний ионизации тяжелых элементов и соотношений между их концентрациями, которые, в общем случае, зависят от эволюции газа. В этом можно убедиться на примере холодной фазы межгалактической среды. Наблюдения последних лет уверенно указывают на наличие в межгалактической среде изолированных, компактных, обогащенных тяжелыми элементами областей, которые представляют собой достаточно плотные и холодные конденсации с металличностью, различающейся на порядки [38]. Очевидно, что эти структуры (а следовательно их ионный состав) не могут находиться в равновесном состоянии. Похожий характер крайне неоднородного в широком интервале масштабов пространственного распределения тяжелых элементов получается в численном моделировании обогащения межгалактической среды [2], которое подтверждает, что образующиеся газовые структуры далеки от равновесного состояния. По этим причинам в последнее время чаще разрабатываются газодинамические модели, включающие неравновесные модели фотоионизации [9].

Замечания о влиянии точности атомных данных в молекулярной кинетике в равной степени относятся и к моделированию ионного состава плазмы. Так новые данные о скоростях радиационной и диэлектронной рекомбинаций позволили уточнить ионный состав газа в столкновительном равновесии [12].

4. Химическая кинетика и газовая динамика

Взаимовлияние химических и динамических процессов может быть исследовано только в самосогласованных химико-динамических моделях. Уравнения для моделирования газовых течений с химическими реакциями представляют собой нестационарные уравнения для плотности газа, плотностей химических компонентов, скорости и энергии [4; 5].

В частности уравнения сохранения массы химических компонентов можно записать в виде:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla(\rho_i v) - \nabla(\rho_i v_{d,i}) + F_i - D_i n_i, \quad (2)$$

где $\rho_i = A_i m_p n_i$, A_i , $v_{d,i}$ – плотность, атомный вес и диффузионная скорость i -го компонента.

При условии малой диффузии отдельных компонентов ($v \gg v_{d,i}$) уравнение сохранения массы i -го компонента можно рассматривать отдельно как перенос пассивного компонента (первое слагаемое) и химические превращения компонента (два последних слагаемых). Таким образом, для переноса каждого из химических компонентов записывается отдельное уравнение непрерывности и отдельно решается система уравнений химической кинетики (1). Уравнения переноса (адвекции) химических компонентов решаются в строгом соответствии с выбранной численной схемой для переноса плотности газа. Некоторые методы решения уравнений кинетики описаны в параграфе 2. При этом нужно учитывать тот факт, что характерные времена химических и связанных с ними тепловых процессов могут быть значительно короче газодинамического времени (времени Куранта). Поэтому для устойчивости шаг по времени должен быть меньше минимального из этих времен. Однако химические времена могут быть в десятки тысяч раз короче динамических и в таком случае решить задачу в разумные сроки невозможно. Поэтому чаще применяют следующий подход [8]. В пределах глобального шага по времени, который выбирается из условия Куранта и изменения энергии за счет охлаждения и нагрева, для каждой ячейки пространства выделяется несколько подшагов по времени. В зависимости от эффективности химических процессов в заданной области пространства число подшагов будет разным. Характерное время подшага должно быть выбрано из условия скорости изменения характерного химического компонента. В основном в этом качестве принимается время изменения степени ионизации газа, то есть $t_{sub} \sim \epsilon(n_e/\dot{n}_e)$, где $\epsilon < 1$. Описанный подход обладает достаточной устойчивостью и значительно сокращает время счета.

5. Химико-динамические процессы в атомарном и молекулярном межзвездном газе

Приведенные выше рекомендации были успешно использованы при разработке и реализации параллельного кода AstroChemHydro, предназначенного для моделирования химической, тепловой и динамической эволюции межзвездной среды [3]. В данном коде численное решение уравнений, описывающих течения смеси химически реагирующих газов, строится с использованием явной конечно-объемной схемы годуновского типа, имеющей второй порядок по времени и третий по пространству на гладких участках течений. Реализованная схема неубывания полной вариации (TVD) относится к классу монотонных противопоточных схем (MUSCL) [21; 25]. Для вычисления потоков величин через границы дискретных ячеек в целях экономии используется приближенный метод Хартена-Лакса-ван Леера с учетом контактного разрыва (HLLC), хорошо зарекомендовавший себя на решении целого ряда тестовых задач [41]. Для моделирования процессов в гигантских молекулярных облаках (далее – ГМО) авторами была произведена существенная переработка химического модуля. В настоящий момент в коде AstroChemHydro возможно использование двух различных химических моделей формирования CO в межзвездной среде: модели NL97 [27] и NL99 [26]. Эти модели позволяют проследить эволюцию основных химических реагентов в гигантских молекулярных облаках: H_2 , C^+ и C (в

NL99). Конечно, модели являются сильно редуцированными, но их точность вполне достаточна для изучения образования молекулярных облаков [17]. Несомненным преимуществом этих моделей является простота реализации и высокая скорость счета.

Для демонстрации возможностей разработанного кода приведем результаты двумерного компьютерного моделирования турбулентной межзвездной среды. Нами были рассмотрены модели с высоким пространственным разрешением 512×512 и 1024×1024 ячеек. В численных моделях использовались периодические граничные условия в расчетной области размером 20×20 пк. В начальный момент времени газ предполагался однородным с плотностью 300 см^{-3} и температурой 100 К. Для генерации поля турбулентных скоростей мы использовали алгоритм, описанный в работе [19].

На рисунках 1a и 1b приведены распределения плотности газа и обилия молекулярного водорода в момент времени 8 млн лет для модели с сеточным разрешением 512×512 ячеек. На рисунке 1a изображено пространственное распределение логарифма безразмерной плотности $\tilde{\rho} = \rho/\rho_0$, где $\rho_0 = 1.67 \cdot 10^{-24} \text{ г/см}^3$. Проведенные расчеты показывают, что 1) существует корреляция между пространственным распределением H_2 и CO ; 2) 70 % атомарного водорода переходят в молекулярный к моменту времени 4 млн лет; 3) приблизительно 62 % ионов C^+ переходят в CO .

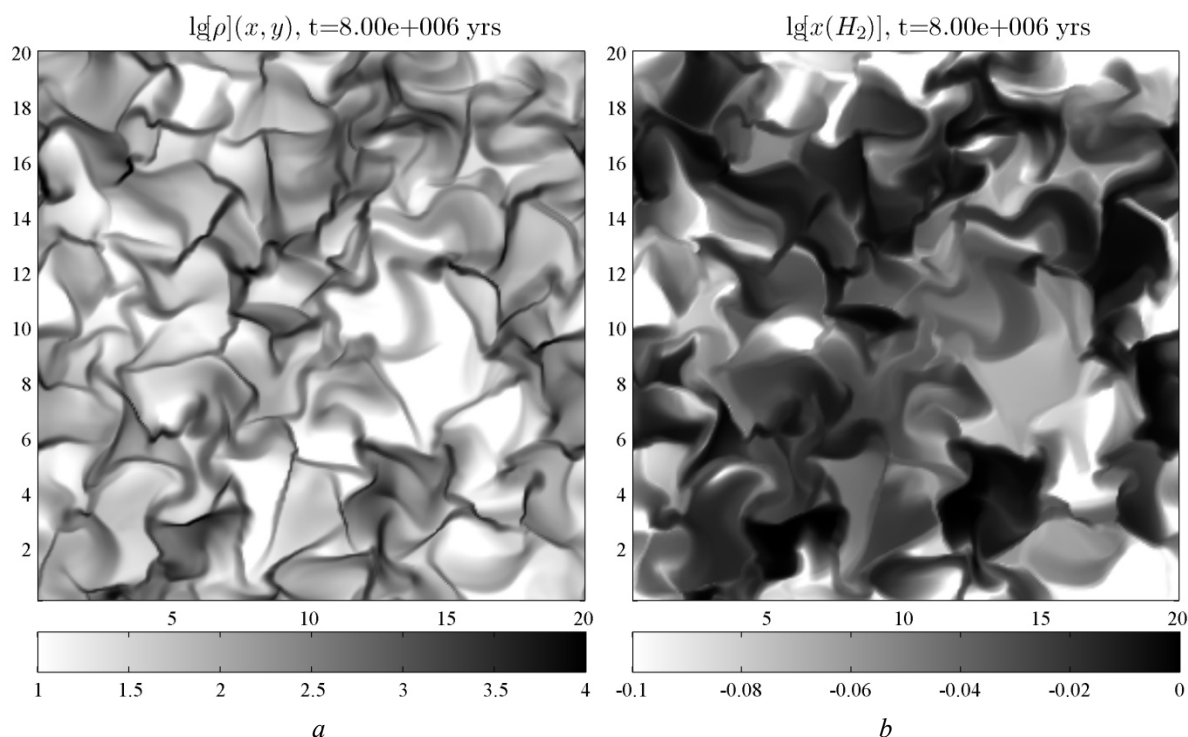


Рис. 1. Пространственные распределения логарифма плотности (рис. 1a, слева) и логарифма обилия H_2 (рис. 1b, слева) в момент времени 8 млн лет

В заключение отметим, что проблемы численного моделирования межзвездного и межгалактического газа не ограничиваются учетом химических процессов. Известно, что межзвездное и межгалактическое вещество сильно турбулентно, в газе присутствуют магнитные поля, пылевые частицы, оказывающие существенное динамическое и химическое влияние на его эволюцию, звезды и галактики излучают большое количество ионизирующих квантов. Учет этих процессов требует создания самосогласованных моделей и новых подходов.

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Евгений Олегович Васильев и Виталий Владимирович Королев благодарны поддержке РФФИ (проект № 12-02-00365), работа Михаила Анатольевича Еремина поддержана Министерством образования и науки (213.01-11/2014-5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бочкарев, Н. Г. Основы физики межзвездной среды / Н. Г. Бочкарев. – М. : Либроком, 2010. – 352 с.
2. Васильев, Е. О. Химическая неоднородность постинионизационной Вселенной / Е. О. Васильев, С. Ю. Дедикив, Ю. А. Щекинов // *Астрофиз. бюл.* – 2009. – № 64. – С. 333–340.
3. Еремин, М. А. Astrochemhydro: параллельный код для моделирования химико-динамической эволюции межзвездной среды / М. А. Еремин, Е. О. Васильев, В. Н. Любимов // *Вестник УГАТУ.* – 2012. – Т. 16, № 3 (48). – С. 99–107.
4. Зельдович, Я. Б. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. – М. : Наука, 1966. – 688 с.
5. Оран, Э. Численное моделирование реагирующих потоков / Э. Оран, Дж. Борис. – М. : Мир, 1990. – 660 с.
6. Сучков, А. А. Ионный состав охлаждающегося межзвездного газа с переменной плотностью / А. А. Сучков, Ю. А. Щекинов // *Астрономический журнал.* – 1986. – Т. 63. – С. 470–475.
7. Abel, T. Modeling primordial gas in numerical cosmology / T. Abel, P. Anninos, Yu Zhang, M. L. Norman // *New Astronomy.* – 1997. – Vol. 2, № 3. – P. 181–207.
8. Anninos, P. Cosmological Hydrodynamics with Multi-Species Chemistry and Nonequilibrium Ionization and Cooling / P. Anninos, Yu. Zhang, T. Abel, M. L. Norman // *New Astronomy.* – 1997. – Vol. 2, № 3. – P. 209–224.
9. Avillez, M. A. NEI Modelling of the ISM – Turbulent Dissipation and Hausdorff Dimension / M. A. Avillez, D. Breitschwerdt // *Highlights of Astronomy.* 2009. – Vol. 15. – P. 468–469.
10. Bourlot, J. le. The Cooling of Astrophysical Media by H₂ / J. le Bourlot, G. Pineau des Forets, D. Flower // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.* – 1999. – Vol. 305. – P. 802–810.
11. Brown, P. N. VODE: a Variable-Coefficient ODE Solver / P. N. Brown, G. D. Byrne, A. C. Hindmarsh // *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* – 1989. – № 5. – P. 1038–1051.
12. Bryans, P. Collisional Ionization Equilibrium for Optically Thin Plasmas. I. Updated Recombination Rate Coefficients for Bare through Sodium-like Ions / P. Bryans [et al.] // *Astrophysical Journal Supplement Series.* – 2006. – Vol. 167. – P. 343–356.
13. Combes, F. Distribution of CO in the Milky Way / F. Combes // *Annual Review of Astronomy and Astrophysics.* – 1991. – Vol. 29. – P. 195–237.
14. Crain, R. Galaxies-Intergalactic Medium Interaction Calculation – I. Galaxy Formation as a Function of Large-Scale Environment / R. Crain [et al.] // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.* – 2009. – Vol. 399. – P. 1773–1794.
15. Ferland, G. J. CLOUDY 90: Numerical Simulation of Plasmas and Their Spectra / G. J. Ferland [et al.] // *Publications of the Astronomical Society of the Pacific.* – 1998. – Vol. 110. – P. 761–778.
16. Galli, D. The Chemistry of the Early Universe / D. Galli, F. Palla // *Astronomy and Astrophysics.* – 1998. – Vol. 335. – P. 403–420.
17. Glover, S. C. O. Approximations for Modelling CO Chemistry in Giant Molecular Clouds: a Comparison of Approaches / S. C. O. Glover, P. C. Clark // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.* – 2012. – Vol. 421. – P. 116–131.
18. Glover, S. C. O. Modelling CO Formation in the Turbulent Interstellar Medium / S. C. O. Glover, C. Federrath, M.-M. Mac Low, R. S. Klessen // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.* – 2010. – Vol. 404. – P. 2–29.

19. Glover, S. C. O. Simulating the Formation of Molecular Clouds. II. Rapid Formation from Turbulent Initial Conditions / S. C. O. Glover, M.-M. Mac Low // *Astrophysical Journal*. – 2007. – Vol. 659. – P. 1317–1337.
20. Gnat, O. Time-Dependent Ionization in Radiatively Cooling Gas / O. Gnat, A. Sternberg // *Astrophysical Journal Supplement Series*. – 2007. – Vol. 168. – P. 213–230.
21. Harten, A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws / A. Harten // *Journal of Computational Physics*. – 1983. – Vol. 49, № 3. – P. 357–593.
22. Hindmarsh, A. C. ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers / A. C. Hindmarsh // *Scientific Computing*. – Amsterdam, 1983..
23. Hollenbach, D. Molecule Formation and Infrared Emission in Fast Interstellar Shocks. I Physical Processes / D. Hollenbach, C. F. McKee // *Astrophysical Journal Supplement Series*. – 1979. – Vol. 41. – P. 555–592.
24. Kafatos, M. Time-Dependent Radiative Cooling of a Hot Low-Density Cosmic Gas / M. Kafatos // *Astrophysical Journal*. – 1973. – Vol. 182. – P. 433–448.
25. Leer, B. van. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second Order Sequel to Godunov's methods / B. van Leer // *Journal of Computational Physics*. – 1979. – Vol. 32, № 1. – P. 101–136.
26. Nelson, R. P. On the Stability and Evolution of Isolated BOK Globules / R. P. Nelson, W. Langer // *Astrophysical Journal*. – 1999. – Vol. 524. – P. 923–946.
27. Nelson, R. P. The Dynamics of Low-Mass Molecular Clouds in External Radiation Fields / R. P. Nelson, W. Langer // *Astrophysical Journal*. – 1997. – Vol. 482. – P. 796–826.
28. Neufeld, D. A. Fast molecular shocks. I – Reformation of molecules behind a dissociative shock / D. A. Neufeld, A. Dalgarno // *Astrophysical Journal*. – 1989. – Vol. 340. – P. 869–893.
29. Omont, A. Molecules in galaxies / A. Omont // *Reports on Progress in Physics*. – 2007. – Vol. 70. – P. 1099–1176.
30. Omukai, K. Thermal and Fragmentation Properties of Star-forming Clouds in Low-Metallicity Environments / K. Omukai, T. Tsuribe, R. Schneider, A. Ferrara // *Astrophysical Journal*. – 2005. – Vol. 626. – P. 627–643.
31. Osterbrock, D. E. *Astrophysics of Gaseous Nebulae and Active Galactic Nuclei* / D. E. Osterbrock, G. J. Ferland. – University Science Books, 2006.
32. Palla, F. Primordial Star Formation – The Role of Molecular Hydrogen / F. Palla, S. W. Stahler, E. E. Salpeter // *Astrophysical Journal* – 1983. – Vol. 271. – P. 632–641.
33. Press, W. H. *Numerical Recipes in Fortran 90* / W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery – Cambridge : Cambridge Univ. Press, 500 p.
34. Raymond, J. C. Radiative Cooling of a Low-Density Plasma / J. C. Raymond, D.P. Cox, B.W. Smith // *Astrophysical Journal*. – 1976. – Vol. 204. – P. 290–292.
35. Rees, M. J. Cooling, Dynamics and Fragmentation of Massive Gas Clouds – Clues to the Masses and Radii of Galaxies and clusters / M. J. Rees, J. P. Ostriker // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 1977. – Vol. 179. – P. 541–559.
36. Saslaw, W. C. Molecular Hydrogen in Pre-galactic Gas Clouds / W. C. Saslaw, D. Zipoy // *Nature*. – 1967. – Vol. 216, № 5119. – P. 976–978.
37. Scalo, J. Interstellar Turbulence II: Implications and Effects / J. Scalo, B. G. Elmegreen // *Annual Review of Astronomy & Astrophysics*. – 2004. – Vol. 42. – P. 275–316.
38. Simcoe, R. A. Observations of Chemically Enriched QSO Absorbers near $z \sim 2.3$ Galaxies: Galaxy Formation Feedback Signatures in the Intergalactic Medium / R. A. Simcoe, W. L. W. Sargent, M. Rauch, G. Becker // *Astrophysical Journal*. – 2006. – Vol. 637. – P. 648–668.
39. Sutherland, R. S. Cooling Functions for Low-Density Astrophysical Plasmas / R. S. Sutherland, M. A. Dopita // *Astrophysical Journal Supplement Series*. – 1993. – Vol. 88, № 1. – P. 253–327.
40. Tegmark, M. How Small Were the First Cosmological Objects? / M. Tegmark, J. Silk, M. J. Rees, T. Abel, F. Palla // *Astrophysical Journal*. – 1997. – Vol. 474. – P. 1–12.
41. Toro, E. F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction* / E. F. Toro. – Berlin : Springer, 1997. – 624 p.

42. Vasiliev, E. O. Extended O VI haloes of Starforming Galaxies / E. O. Vasiliev, M. V. Ryabova, Yu. A. Shchekinov // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 2015. – Vol. 446, № 3. – P. 3078–3088.
43. Vasiliev, E. O. Non-Equilibrium Ionization States and Cooling Rates of the Photoionized Enriched Gas / E. O. Vasiliev // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 2011. – Vol. 414, № 4. – P. 3145–3157.
44. Wiebe, D. Reduction of Chemical Networks. I. The Case of Molecular Clouds / D. Wiebe, D. Semenov, Th. Henning // *Astronomy and Astrophysics*. – 2003. – Vol. 399. – P. 197–210.
45. Wiersma, R. The Effect of Photoionization on the Cooling Rates of Enriched, Astrophysical Plasmas / R. Wiersma, J. Schaye, B. D. Smith // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 2009. – Vol. 393, № 1. – P. 99–107.

REFERENCES

1. Bochkarev N.G. *Osnovy fiziki mezhzvezdnoy sredy* [Fundamentals of Physics of the Interstellar Medium]. Moscow, Librokom Publ., 2010. 352 p.
2. Vasilyev E.O., Dedikov S.Yu., Shchekinov Yu.A. Khimicheskaya neodnorodnost postionizatsionnoy Vselennoy [Chemical Inhomogeneity of Post-Ionized Universe]. *Astrofizicheskiy byulleten*, 2009, no. 64, pp. 333-340.
3. Eremin M.A., Vasilyev E.O., Lyubimov V.N. Astrochemhydro: parallelnyy kod dlya modelirovaniya khimiko-dinamicheskoy evolyutsii mezhzvezdnoy sredy [Astrochemhydro: a Parallel Code for Numerical Simulations of Chemical and Dynamical Evolution of Interstellar Medium]. *Vestnik UGATU*, 2012, vol. 16, no. 3 (48), pp. 99-107.
4. Zeldovich Ya.B., Rayzer Yu.P. *Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy* [Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena]. Moscow, Nauka Publ., 1966. 688 p.
5. Oran E., Boris Dzh. *Chislennoe modelirovanie reagiruyushchikh potokov* [Numerical Simulation of Reactive Flows]. Moscow, Mir Publ., 1990. 660 p.
6. Suchkov A.A., Shchekinov Yu.A. Ionnyy sostav okhlazhdayushchegosya mezhzvezdnogo gaza s premennoy plotnostyu [Ionic Composition of Cooled Interstellar Gas With Variable Density]. *Astronomicheskii zhurnal*, 1986, vol. 63, pp. 470-475.
7. Abel T., Anninos P., Yu Zhang, Norman M.L. Modeling Primordial Gas in Numerical Cosmology. *New Astronomy*, 1997, vol. 2, no. 3, pp. 181-207.
8. Anninos P., Yu Zhang, Abel T., Norman M.L. Cosmological Hydrodynamics With Multi-Species Chemistry and Nonequilibrium Ionization and Cooling. *New Astronomy*, 1997, vol. 2, no. 3, pp. 209-224.
9. Avillez M.A., Breitschwerdt D. NEI Modelling of the ISM – Turbulent Dissipation and Hausdorff Dimension. *Highlights of Astronomy*, 2009, vol. 15, pp. 468-469.
10. Bourlot J. le., Pineau des Forets D., Flower G. The Cooling of Astrophysical Media by H₂. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1999, vol. 305, pp. 802-810.
11. Brown P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C. VODE: a Variable-Coefficient ODE Solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1989, no. 5, pp. 1038-1051.
12. Bryans P., Badnell N.R., Gorczyca T.W., Laming J.M., Mitthumsiri W., Savin D.W. Collisional Ionization Equilibrium for Optically Thin Plasmas. I. Updated Recombination Rate Coefficients for Bare Through Sodium-Like Ions. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 2006, vol. 167, pp. 343-356.
13. Combes F. Distribution of CO in the Milky Way. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 1991, vol. 29, pp. 195-237.
14. Crain R., Theuns T., et al. Galaxies-Intergalactic Medium Interaction Calculation – I. Galaxy Formation as a Function of Large-Scale Environment. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2009, vol. 399, pp. 1773-1794.
15. Ferland G.J., Korista K.T., Verner D.A., Ferguson J.W., Kingdon J.B., Verner E.M. CLOUDY 90: Numerical Simulation of Plasmas and Their Spectra. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 1998, vol. 110, pp. 761-778.

16. Galli D., Palla F. The Chemistry of the Early Universe. *Astronomy and Astrophysics*, 1998, vol. 335, pp. 403-420.
17. Glover S.C.O., Clark P.C. Approximations for Modelling CO Chemistry in Giant Molecular Clouds: a Comparison of Approaches. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2012, vol. 421, pp. 116-131.
18. Glover S.C.O., Federrath C., Mac Low M.M., Klessen R.S. Modelling CO Formation in the Turbulent Interstellar Medium. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2010, vol. 404, pp. 2-29.
19. Glover S.C.O., Mac Low M.-M. Simulating the Formation of Molecular Clouds. II. Rapid Formation From Turbulent Initial Conditions. *Astrophysical Journal*, 2007, vol. 659, pp. 1317-1337.
20. Gnat O., Sternberg A. Time-Dependent Ionization in Radiatively Cooling Gas. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 2007, vol. 168, pp. 213-230.
21. Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *Journal of Computational Physics*, 1983, vol. 49, no. 3, pp. 357-593.
22. Hindmarsh A.C. ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers. Stepleman R.S. et al., eds. *Scientific Computing*, Amsterdam, 1983.
23. Hollenbach D., McKee C.F. Molecule Formation and Infrared Emission in Fast Interstellar Shocks. I Physical Processes. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 1979, vol. 41, pp. 555-592.
24. Kafatos M. Time-Dependent Radiative Cooling of a Hot Low-Density Cosmic Gas. *Astrophysical Journal*, 1973, vol. 182, pp. 433-448.
25. Leer B. van Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second Order Sequel To Godunov's Methods. *Journal of Computational Physics*, 1979, vol. 32, no. 1, pp. 101-136.
26. Nelson R.P., Langer W. On the Stability and Evolution of Isolated BOK Globules. *Astrophysical Journal*, 1999, vol. 524, pp. 923-946.
27. Nelson R.P., Langer W. The Dynamics of Low-Mass Molecular Clouds in External Radiation Fields. *Astrophysical Journal*, 1997, vol. 482, pp. 796-826.
28. Neufeld D.A., Dalgarno A. Fast Molecular Shocks. I - Reformation of Molecules Behind a Dissociative Shock. *Astrophysical Journal*, 1989, vol. 340, pp. 869-893.
29. Omont A. Molecules in galaxies. *Reports on Progress in Physics*, 2007, vol. 70, pp. 1099-1176.
30. Omukai K., Tsuribe T., Schneider R., Ferrara A. Thermal and Fragmentation Properties of Star-forming Clouds in Low-Metallicity Environments. *Astrophysical Journal*, 2005, vol. 626, pp. 627-643.
31. Osterbrock D.E., Ferland G.J. *Astrophysics of Gaseous Nebulae and Active Galactic Nuclei*. University Science Books, 2006.
32. Palla F., Stahler S.W., Salpeter E.E. Primordial Star Formation – The Role of Molecular Hydrogen. *Astrophysical Journal*, 1983, vol. 271, pp. 632-641.
33. Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. *Numerical Recipes in Fortran 90*. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 500 p.
34. Raymond J.C., Cox D.P., Smith B.W. Radiative Cooling of a Low-Density Plasma. *Astrophysical Journal*, 1976, vol. 204, pp. 290-292.
35. Rees M.J., Ostriker J.P. Cooling, Dynamics and Fragmentation of Massive Gas Clouds – Clues to the Masses and Radii of Galaxies and Clusters. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1977, vol. 179, pp. 541-559.
36. Saslaw W.C., Zipoy D. Molecular Hydrogen in Pre-galactic Gas Clouds. *Nature*, 1967, vol. 216, no. 5119, pp. 976-978.
37. Scalo J., Elmegreen B.G. Interstellar Turbulence II: Implications and Effects. *Annual Review of Astronomy & Astrophysics*, 2004, vol. 42, pp. 275-316.
38. Simcoe R.A., Sargent W.L.W., Rauch M., Becker G. Observations of Chemically Enriched QSO Absorbers near $z \sim 2.3$ Galaxies: Galaxy Formation Feedback Signatures in the Intergalactic Medium. *Astrophysical Journal*, 2006, vol. 637, pp. 648-668.
39. Sutherland R.S., Dopita M.A. Cooling functions for low-density astrophysical plasmas. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 1993, vol. 88, no. 1, pp. 253-327.
40. Tegmark M., Silk J., Rees M.J., Abel T., Palla F. How Small Were the First Cosmological Objects? *Astrophysical Journal*, 1997, vol. 474, pp. 1-12.

41. Toro E.F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction*. Berlin, Springer, 1997, 624 p.
42. Vasiliev E.O. Non-Equilibrium Ionization States and Cooling Rates of the Photoionized Enriched Gas. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2011, vol. 414, no. 4, pp. 3145-3157.
43. Vasiliev E.O., Ryabova M.V., Shchekinov Yu.A. Extended O VI Haloes of Star-Forming Galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2015, vol. 446, no. 3, pp. 3078-3088.
44. Wiebe D., Semenov D., Henning Th. Reduction of Chemical Networks. I. The Case of Molecular Clouds. *Astronomy and Astrophysics*, 2003, vol. 399, pp. 197-210.
45. Wiersma R., Schaye J., Smith B.D. The Effect of Photoionization on the Cooling Rates of Enriched, Astrophysical Plasmas. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2009, vol. 393, no. 1, pp. 99-107.

NUMERICAL MODELS OF THE INTERSTELLAR AND INTERGALACTIC MEDIA: NON-EQUILIBRIUM CHEMICAL KINETICS IN GAS DYNAMICS

Vasilyev Evgeniy Olegovich

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Leading Researcher of Research Institute of Physics of Southern Federal University
eugstar@mail.ru
Prosp. Stachki, 194, 344090 Rostov-on-Don, Russian Federation

Eremin Mikhail Anatolyevich

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
ereminmikhail@gmail.com, eremin@volsu.ru, tf@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Korolev Vitaliy Vladimirovich

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Associate Professor, Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
vitokorolev@gmail.com, tf@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. The advances and current problems in the numerical simulations of chemical processes in the interstellar and intergalactic medium are described. The special attention is paid to coupled simulation of non-equilibrium chemical kinetics and gas dynamics. The code for self-consistent simulation of dynamical and chemical processes in the interstellar medium is presented.

Key words: interstellar medium, intergalactic medium, chemical kinetics, gas dynamics, numerical methods, molecules, ions.