



DOI: <https://doi.org/10.15688/jvolsu1.2016.6.16>

УДК 524.5-7

ББК 22.66-67

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ ОБЛАКОВ H I ¹

Павел Витальевич Ивахненко

Магистрант физико-технического института,
Волгоградский государственный университет
ivakravel@yandex.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Михаил Анатольевич Еремин

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

Виталий Владимирович Королев

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

Аннотация. В рамках самосогласованного подхода, учитывающего химическую, тепловую и динамическую эволюцию межзвездного газа, проведено численное моделирование столкновений облаков нейтрального водорода H I. В качестве химической модели межзвездного газа была выбрана хорошо известная модель Нельсона – Лангера (1997). Установлено, что при радиативном режиме столкновений происходит разрушение облаков с образованием плотных холодных филаментов, которые преимущественно находятся в атомарной фазе. Обилие молекулярного водорода в филаментах не превышает 0,1, угарный газ практически отсутствует. При адиабатическом режиме взаимодействия облака полностью разрушаются и все вещество облаков переходит в теплую фазу межзвездной среды.

Ключевые слова: межзвездная среда, химическая кинетика, газовая динамика, численные методы, облака HI.

Введение

Межзвездная среда (далее – МЗС) является многофазной и состоящей, в том числе, из теплой ($T \approx 10^4$ К) и холодной ($T \approx 10^2$ К) фаз в состоянии теплового и динамического равновесия [1]. Холодная фаза МЗС находится преимущественно в форме сгустков или облаков, различающихся по размерам, массам и химическому составу. В МЗС обнаружено достаточно большое количество химических соединений, что свидетельствует о том, что межзвездная среда является химически активной. Сетка химических реакций в МЗС на данный момент по астрохимическому каталогу UMIST (2012 г.) составляет 6 173 реакции, которые связаны с 467 элементами [14].

В межзвездной среде наблюдаются облака нейтрального водорода HI, взаимодействие которых между собой оказывает существенное влияние на звездообразование, диссипацию кинетической энергии и структуру газа в галактиках. Проведенные оценки показывают, что столкновения облаков происходят относительно часто, приблизительно одно столкновение облаков каждые 100 лет в Галактике [12; 13]. Поскольку столкновения облаков являются одним из механизмов обмена материей и энергией между различными фазами МЗС, они влияют на формирование структуры газовых дисков галактик, в частности, могут быть причиной наблюдаемого спектра масс плотных облаков.

Для моделирования реальных объектов в рамках самосогласованного подхода необходимо рассматривать совместно динамическую, химическую и тепловую эволюцию. В настоящее время задачи подобного рода находятся далеко за границами наших вычислительных возможностей. Широкое распространение получили подходы, при которых предполагается использование различных редуцированных химических моделей, позволяющих отслеживать эволюцию нескольких наиболее важных реагентов [4; 5; 9; 10; 11].

Основной целью данной работы является компьютерное многомерное моделирование неупругих лобовых столкновений облаков с учетом химической, тепловой и динамической эволюции межзвездного газа. Отметим, что, в отличие от предыдущих исследований по моделированию столкновений облаков HI [6; 7; 8; 12; 13], в данной статье впервые используется самосогласованная химико-динамическая модель.

1. Постановка задачи

1.1. Уравнения газовой динамики химически реагирующих газов

Течение смеси химически активных газов в одножидкостном приближении может быть описано следующей системой уравнений в частных производных:

$$\frac{\partial \rho \chi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \chi_i) = \rho \sigma_i, i = 1, K, n_s, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p, \quad (3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ([E + p] \vec{u}) = -L, \quad (4)$$

В системе (1)–(4) $\chi_i = \rho_i / \rho$ – массовая доля (концентрация) i -го газа; σ_i – массовая скорость производства i -го компонента, определяемая набором химических реакций; n_s – количество реагентов в смеси, $E = \rho \left(\frac{u^2}{2} + e \right)$ – объемная энергия, e – удельная внутренняя энергия, $L = \Lambda - \Gamma$ – функция неравновесных тепловых потерь, $\Lambda = \Lambda(T, \rho^{(j)})$ – скорость (темп) объемного охлаждения, $\Gamma = \Gamma(T, \rho^{(j)})$ – скорость объемного нагрева, остальные обозначения стандартные. Для замыкания системы (2)–(4) использовалось уравнение состояния для идеального газа в виде $p = \rho e(\gamma - 1) = \frac{\rho k_B T}{\mu m_p}$, где γ – показатель адиабаты (для одноатомного газа $\gamma = 5/3$); k_B – постоянная Больцмана; μ – средняя молекулярная масса смеси газов.

1.2. Химическая и тепловая модель

Для исследования химической эволюции МЗС использовалась модифицированная химическая модель Нельсона – Лангера (1997), впервые предложенная в работе [11]. Сетка реакций данной модели включает 10 реакций, три из которых – фотореакции и одна реакция с космическими лучами. Данная химическая модель позволяет отслеживать эволюцию следующих реагентов H , H_2 , H^+ , C^+ и CO .

Неравновесная модель охлаждения и нагрева газа представлена в виде функции, в которой учтены 10 процессов охлаждения и 4 процесса нагрева: $L = \sum_i \Lambda_i - \sum_j \Gamma_j$ [3]. Нагрев включает в себя такие процессы, как фотоэлектрический нагрев, УФ-накачка H_2 , формирование H_2 на частицах пыли, ионизация космическими лучами. Охлаждение вызвано следующим рядом процессов: охлаждение в линиях металлов C^+ , O и Si^+ , колебательно-вращательные переходы H_2 , колебательно-вращательные переходы CO , переходы H , столкновительная ионизация H , рекомбинация H^+ , свободно-свободные переходы H^+ , столкновительная диссоциация H_2 , рекомбинация на частицах пыли, столкновения частиц газа.

2. Численное моделирование и обсуждение результатов

Для численного моделирования неупругих лобовых столкновений идентичных облаков HI использовался параллельный AstroChemHydro, разработанный для моделирования химической, тепловой и динамической эволюции межзвездной среды [2].

В начальный момент времени предполагалось, что облака и межзвездная среда находились в состоянии равновесия по давлению. Параметры облаков и межзвездной среды до начала столкновения $T_{cl} = 80$ К, $n_{cl} = 10$ см⁻³, радиус облаков 1 пк, $T_{wim} = 8\,000$ К, $n_{wim} = 0,1$ см⁻³. Химический состав облаков и среды в начальный момент времени имеет небольшие отличия: в облаке небольшая часть газа находится в форме H_2 (обилие $x(H_2) = 0,1$), степень ионизации ниже, чем в межоблачной среде, тогда как практически весь водород в межоблачной среде находится в атомарной форме. Во всех моделях задавались следующие параметры: солнечная металличность, температура реликтового фонового излучения 2,72 К.

Скорости облаков направлены друг к другу и выражаются относительным числом Маха $M_r = u / c_{wim}$, где c_{wim} – скорость звука в теплой межзвездной среде. В работе рассматривались следующие скорости в единицах Маха: 0,25; 0,5; 0,75; 1,0; 1,5.

Нами были рассмотрены модели с высоким пространственным разрешением 0,02 пк по осям X и Y . На рисунках 1а и 1б приведены распределения обилий молекулярного водорода и угарного газа в момент времени 8 млн лет для модели с $M_r = 1,5$ и внешним излучением $G_0 = 0,1$ в единицах Хабинга.

Результаты проведенного моделирования позволяют сделать вывод о существенных различиях в динамической и химической эволюциях облаков в зависимости от реализуемого режима столкновения – адиабатического или радиативного.

Адиабатический режим столкновений возникает при сверхзвуковом относительном движении облаков HI [7; 8]. Можно выделить три фазы столкновения: 1) фаза сжатия; 2) фаза перерас-

ширения и 3) фаза растворения. При адиабатическом столкновении охлаждение на фазе сжатия неэффективно, так как вся тепловая энергия, выделившаяся на стадии сжатия, идет на прогрев облаков. В результате таких столкновений облака за счет действия газодинамических неустойчивостей Кельвина – Гельмгольца и Рэля – Тейлора полностью разрушаются и переходят в теплую межоблачную среду.

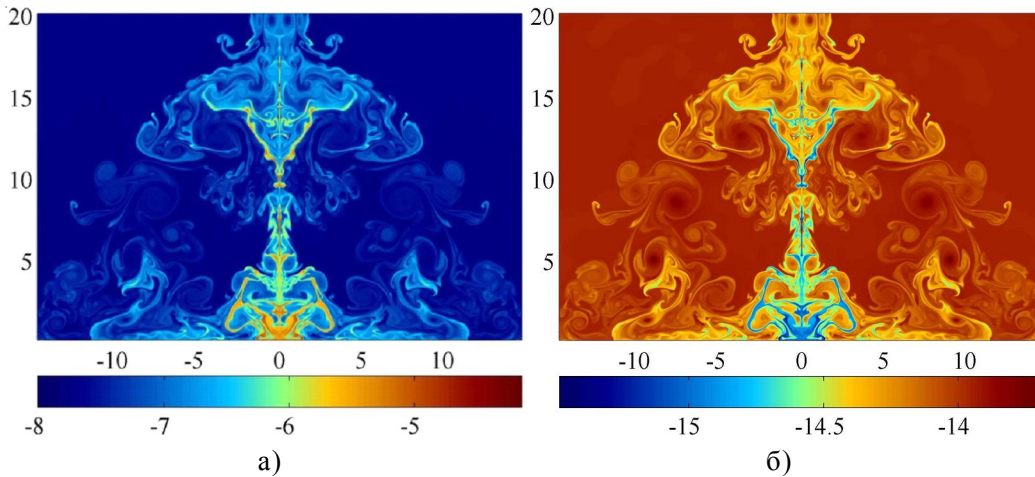


Рис. 1. Пространственные распределения логарифма обилия H_2 (а) и логарифма обилия CO (б) в момент времени 8 млн лет для модели с числом Маха $M_r = 1,5$

При радиативном режиме столкновений, реализуемом при дозвуковом относительном столкновении облаков, охлаждение способно отводить тепло. Эффективность данного процесса существенным образом зависит от параметров задачи. Отметим, что это препятствует переходу облачного вещества в теплую межоблачную среду. После взаимодействия облака разрушаются, все вещество концентрируется к центру взаимодействия, образуются плотные и холодные филаментные структуры. Температура таких структур порядка $T_f \cong 80\text{--}100$ К, а плотность достигает $n_f \cong 10\text{--}30$ см⁻³. На рисунках 2а и 2б изображено пространственное распределение логарифма обилий H_2 и CO в модели с $M_r = 0,25$ и внешним излучением $G_0 = 0,1$ в единицах Хабинга в момент времени 8 млн лет.

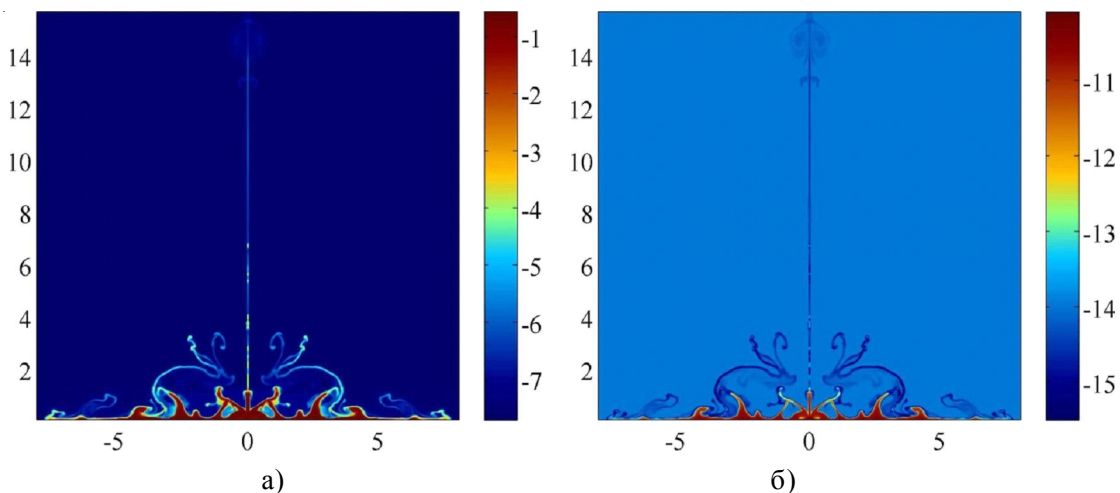


Рис. 2. Пространственные распределения логарифма обилия H_2 (а) и логарифма обилия CO (б) в момент времени 8 млн лет для модели с числом Маха $M_r = 0,25$

Проведенные расчеты показывают, что 1) при радиативном режиме взаимодействия облака разрушаются, образуя холодные филаментные структуры; водород находится преимущественно

в атомарной форме, обилие H_2 в филаментах не превышает 0,1; 2) при адиабатическом режиме взаимодействия облака полностью разрушаются, все вещество переходит в теплую фазу; 3) угарный газ вследствие малой оптической плотности среды оказывается сильно подвержен разрушению, максимальное обилие CO не превышает 10^{-7} .

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 15-42-02682_p_поволжье_a).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бочкарев, Н. Г. Основы физики межзвездной среды / Н. Г. Бочкарев. – М. : Либроком, 2010. – 352 с.
2. 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.
3. Galli, D. The chemistry of the early Universe / D. Galli, F. Palla // *Astronomy and Astrophysics*. – 1998. – Vol. 335. – P. 403–420.
4. 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.
5. Glover, S. C. O. Simulating the formation of molecular clouds. I. Slow formation by gravitational collapse from static initial conditions / S. C. O. Glover, M. M. Mac Low // *The Astrophysical Journal Supplement Series*. – 2007. – Vol. 169. – P. 239–268.
6. Hausman, M. A. Collisional mergers and fragmentation of interstellar clouds / M. A. Hausman // *The Astrophysical Journal*. – 1981. – Vol. 245. – P. 72–91.
7. Hydrodynamics of cloud collisions in two dimensions: the fate of clouds in a multiphase medium / F. Miniati, T. W. Jones, A. Ferrara, D. Ryu // *The Astrophysical Journal*. – 1997. – Vol. 491. – P. 216–232.
8. Magnetohydrodynamics of cloud collisions in a multiphase interstellar medium / F. Miniati, D. Ryu, A. Ferrara, T. W. Jones // *The Astrophysical Journal*. – 1999. – Vol. 510. – P. 726–746.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. Stone, M. E. Collisions between HI clouds. I. One-dimensional model / M. E. Stone // *The Astrophysical Journal*. – 1970. – Vol. 159. – P. 277–292.
13. Stone, M. E. Collisions between HI clouds. II. Two-dimensional model / M. E. Stone // *The Astrophysical Journal*. – 1970. – Vol. 159. – P. 293–307.
14. The UMIST Database for Astrochemistry 2012. – Electronic text data. – Mode of access: <http://udfa.ajmarkwick.net/>. – Title from screen.

REFERENCES

1. Bochkarev N.G. *Osnovy fiziki mezhzvezdnoj sredy* [Fundamentals of Physics of the Interstellar Medium]. Moscow, Librokom Publ., 2010. 352 p.
2. 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 Chemo-Dynamical Evolution of Interstellar Medium]. *Vestnik UGATU*, 2012, vol. 16, no. 3 (48), pp. 99-107.
3. Galli D., Palla F. The Chemistry of the Early Universe. *Astronomy and Astrophysics*, 1998, vol. 335, pp. 403-420.
4. 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.

5. Glover S.C.O., Mac Low M.M. Simulating the Formation of Molecular Clouds. I. Slow Formation by Gravitational Collapse from Static Initial Conditions. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 2007, vol. 169, pp. 239-268.
6. Hausman M.A. Collisional Mergers and Fragmentation of Interstellar Clouds. *The Astrophysical Journal*, 1981, vol. 245, pp. 72-91.
7. Miniati F., Jones T.W., Ferrara A., Ryu D. Hydrodynamics of Cloud Collisions in Two Dimensions: The Fate of Clouds in a Multiphase Medium. *The Astrophysical Journal*, 1997, vol. 491, pp. 216-232.
8. Miniati F., Ryu D., Ferrara A., Jones T.W. Magnetohydrodynamics of Cloud Collisions in a Multiphase Interstellar Medium. *The Astrophysical Journal*, 1999, vol. 510, pp. 726-746.
9. 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.
10. Nelson R.P., Langer W. On the Stability and Evolution of Isolated BOK Globules. *Astrophysical Journal*, 1999, vol. 524, pp. 923-946.
11. Nelson R.P., Langer W. The Dynamics of Low-Mass Molecular Clouds in External Radiation Fields. *Astrophysical Journal*, 1997, vol. 482, pp. 796-826.
12. Stone M.E. Collisions Between HI Clouds. I. One-Dimensional Model. *The Astrophysical Journal*, 1970, vol. 159, pp. 277-292.
13. Stone M.E. Collisions Between HI Clouds. II. Two-Dimensional Model. *The Astrophysical Journal*, 1970, vol. 159, pp. 293-307.
14. *The UMIST Database for Astrochemistry 2012*. Available at: <http://udfa.ajmarkwick.net/>.

NUMERICAL MODELLING OF CHEMICAL AND DYNAMIC EVOLUTION OF COLLIDING HI CLOUDS

Pavel Vitalyevich Ivakhnenko

Master Student, Institute of Physics and Engineering,
Volgograd State University
ivakpavel@yandex.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Mikhail Anatolyevich Eremin

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

Vitaliy Vladimirovich Korolev

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

Abstract. Interstellar clouds collisions have a strong influence on star formation, dissipation of kinetic energy and gaseous structure of galaxies. In addition, clouds collisions are one of the most important physical processes that are responsible for transitions between different phases of the interstellar medium and observed mass spectrum of diffuse HI clouds.

The main aim of the article is high resolution numerical simulations of diffusion clouds collisions in two dimensions in the frame of the self-consistent model. This approach implies concurrent consideration of dynamical, thermal and chemical processes in the interstellar

medium with particular attention to formation of H_2 and CO during clouds inelastic collisions. The approach of Nelson and Langer (1997) for modeling of chemistry of the interstellar medium was chosen. The thermal model of the interstellar medium includes the most relevant cooling and heating processes for temperature interval between 10 and $2 \cdot 10^4$ K.

We assume that clouds are characterized by temperature $T_{cl} = 80$ K and number density $n_{cl} = 10 \text{ sm}^{-3}$, radius of the clouds are 1 pc before collision. Initially clouds are in pressure equilibrium with the warm surrounding intercloud medium with temperature $T_{wim} = 8000$ K, $n_{wim} = 0,1 \text{ sm}^{-3}$. The chemical composition of the clouds and intercloud medium is basically the same, except for H_2 . The abundance of H_2 in clouds are $x(H_2) = 0,1$, all gas in intercloud medium is in the form of HI.

We have found that in radiative regime of head-on collisions of equal mass clouds the destruction of clouds takes place with formations of cold clouds filaments. The fractional abundance of H_2 in filaments does not exceeds 0,1, CO fraction is very small. In adiabatic regime of interaction clouds are destroyed completely, so all the clouds material is converted in warm phase of the ISM.

Key words: interstellar medium, chemical kinetics, gas dynamics, numerical methods, HI clouds.