

# ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ ПРОТОПЛАНЕТНЫХ ДИСКОВ: ОБРАБОТКА СОБЫТИЙ В ТРЕХФАЗНОЙ МОДЕЛИ

М. Ю. Кискин<sup>1</sup>, В. В. Акимкин<sup>2</sup>, А. И. Васюнин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Уральский федеральный университет,*

<sup>2</sup>*Институт астрономии РАН*

В случае трехфазного (газ — поверхность — мантия) астрохимического моделирования вид системы балансных дифференциальных уравнений зависит от текущего состояния решения этой системы. Таким образом, уравнения оказываются с разрывной правой частью и не интегрируются в классическом понимании. Подобные уравнения также носят название уравнений с «событиями». Игнорирование этого факта может приводить к ошибкам и проблемам в работе численного интегратора. Наше исследование показало, что учет событий является критически важным для астрохимического моделирования в широком диапазоне физических параметров, характерных для протопланетных дисков. Для повышения стабильности и скорости расчетов в численный код MONACO были добавлены отслеживание событий и дальнейшая корректировка хода решения.

## NUMERICAL STUDIES OF THE CHEMICAL EVOLUTION OF PROTOPLANETARY DISKS: EVENT TREATMENT IN THE THREE-PHASE MODEL

M. Yu. Kiskin<sup>1</sup>, V. V. Akimkin<sup>2</sup>, A. I. Vasyunin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ural Federal University,*

<sup>2</sup>*Institute of Astronomy, Russian Academy of Sciences*

In the case of three-phase (gas-surface-bulk) astrochemical modeling, the form of the system of differential rate equations depends on the current state of the solution of this system. Thus, the equations turn out to have a discontinuous right-hand side and are not integrated in the classical sense. Similar equations are also called equations with "events". Ignoring this fact can lead to errors and problems in the operation of the numerical integrator. Our study showed that accounting for events is critical for astrochemical modeling in a wide range of physical parameters typical of protoplanetary disks. To improve the stability and speed of calculations, event tracking and further correction of the solution progress were added to the MONACO numerical code.

## Введение

Протопланетные диски — объекты межзвездной среды, богатые пылью и газом, в которых могут образовываться планетные системы. Исследования молекулярного содержания таких объектов ведут к пониманию химических составов будущих экзопланет. Однако численное астрохимическое моделирование протопланетных дисков сопряжено с рядом проблем, связанных, в первую очередь, с большим разнообразием физических условий по всему диску и со стабильностью работы численных интеграторов во всем этом диапазоне параметров.

В двухфазных моделях (газ — пыль) поверхность и ледяная мантия пылевых частиц не различаются, что является заметным упрощением по сравнению со структурой реального многослойного льда. В трехфазных моделях молекулы поверхности могут погружаться

вглубь ледяной мантии, тем самым ограничивая количество молекул, доступных для прямой десорбции с поверхности. Предоставление аналитического якобиана при двухфазном моделировании показало свою эффективность [1]. Тем не менее трехфазное астрохимическое моделирование представляет собой более сложную численную задачу из-за добавления в систему новых дифференциальных уравнений (ДУ), которые не являются непрерывными. В трехфазном случае подход с заранее вычисляемым символьным якобианом не принес существенного улучшения работы численного кода.

Мы продолжаем разрабатывать вычислительный код, способный эффективно рассчитывать эволюцию химического состава протопланетных дисков, и представляем решение, связанное с обработкой событий, влекущих за собой разрывы в правой части дифференциальных уравнений.

## Химическая модель

В случае трехфазной модели эволюция молекулярного состава определяется следующей системой дифференциальных уравнений [2]:

$$\begin{cases} \frac{dn_i}{dt} = \sum_{jk} k_{jk} n_j^{\text{gas}} n_k^{\text{gas}} - n_i^{\text{gas}} \sum_{il} k_{il} n_l^{\text{gas}} - k_{\text{acc}} n_i^{\text{gas}} + D_i^{\text{des}} \\ \frac{dn_i^{\text{surf}}}{dt} = \left( \frac{dn_i^{\text{surf}}}{dt} \right)^{\text{chem}} + \left( \frac{dn_i^{\text{surf}}}{dt} \right)^{\text{tran}} + \left( \frac{dn_i^{\text{surf}}}{dt} \right)^{\text{diff}} \\ \frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} = \left( \frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} \right)^{\text{chem}} - \left( \frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} \right)^{\text{tran}} - \left( \frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} \right)^{\text{diff}} \end{cases}, \quad (1)$$

где  $\frac{dn_i}{dt}$ ,  $\frac{dn_i^{\text{surf}}}{dt}$  и  $\frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt}$  — изменение содержания молекул в газовой фазе, на поверхности и в мантии пылинки, соответственно. Изменение содержаний твердой фазы происходит в результате химических реакций («chem»-члены уравнения (1)), процессов адсорбции/десорбции с поверхности пыли («tran») и диффузии молекул между поверхностью и ледяной мантией пылинки («diff»).

Основная проблема численного решения системы уравнений (1) заключается в том, что вид «tran»-членов изменяется в зависимости от реализуемого сценария в процессе решения. Данные члены уравнений описывают не реальный физический процесс переноса молекул, а мгновенное изменение поверхности в результате адсорбции новых молекул на пылинку (первый вариант «tran»-членов) или десорбции внешних молекул с поверхности пыли (второй вариант) и служат поправкой к скорости изменения молекул конкретного типа на поверхности. Условием для переключения между вариантами «tran»-членов уравнений служит направление общей скорости изменения содержания всех молекул на поверхности за счет химических реакций, адсорбции и десорбции. Если происходит накопление молекул на поверхности, то часть молекул «закапывается» и считается частью мантии (первый вариант), если же в результате процессов десорбции количество молекул на поверхности уменьшается, то часть мантийных молекул становится поверхностными (второй вариант). Таким образом, система дифференциальных уравнений (1) содержит уравнения с разрывной правой частью.

## Численное решение ДУ с разрывной правой частью

Основная идея численного интегрирования подобных уравнений заключается в дополнительном отслеживании условий переключения между различными вариантами уравнений и последующем корректировании хода решения. Для этого вводится функция события

$g(t, y)$ , которая в момент срабатывания условия для переключения (в момент события)  $t'$ :  $g(t', y(t')) = 0$  [3].

Для расчета эволюции химического состава протопланетных дисков мы используем численный код MONACO [4], который основан на интеграторе DVODE [5]. В качестве функции события принимается общая скорость изменения содержания всех молекул на поверхности в результате химических реакций и процессов адсорбции и десорбции  $g(t, y) = \sum \left( \frac{dn_i^{\text{surf}}}{dt} \right)^{\text{chem}}$ .

При первом запуске интегрирования системы уравнений, исходя из начальных содержаний, определяется знак функции  $g(t, y)$  и выбирается соответствующий вариант уравнений. Впоследствии, если в ходе решения знак функции  $g(t, y)$  меняется, то есть происходит событие, интегрирование прерывается и запускается новое для другого варианта уравнений, соответствующего текущему состоянию решения. В качестве начальных содержаний для следующего интегрирования принимаются содержания, полученные на последнем шаге предыдущего интегрирования. Таким образом, результатом решения системы является последовательный набор непрерывных дифференцируемых функций, «сшитых» в точках событий (точках разрыва дифференциальных уравнений). Такой подход позволяет избежать ошибок численного интегратора, приводящих к остановке его работы.

## Результаты

Для тестовых расчетов использовалась модель протопланетного диска вокруг звезды типа Т Тельца с массой  $M_* = 1M_{\odot}$  [6]. Эволюция молекулярного состава рассчитывалась для периода времени  $10^6$  лет.

С помощью нашего нового подхода на данный момент мы смогли успешно рассчитать эволюцию химического состава для области диска 60–1000 а. е. (2000 точек модели с различными физическими параметрами), в то время как применение трехфазного численного кода MONACO к протопланетным дискам без дополнительной обработки разрывов ДУ в большинстве случаев (96 %) приводило к ошибкам в работе интегратора и расчеты не завершались успешно.

Как показали тестовые запуски численного интегрирования системы ДУ (1) в условиях протопланетных дисков, количество срабатываний событий для переключения между вариантами уравнений может достигать  $\sim 30\,000$  в процессе одного расчета. По всей видимости, такое большое количество переключений является причиной некорректной работы интегратора без дополнительного учета событий в процессе численного решения системы ДУ.

Следовательно, правильный учет разрывности уравнений системы (1) необходим для успешного численного расчета химического состава протопланетных дисков, так как пренебрежение этим фактом влечет за собой изменение хода решения интегратора и накопление дополнительных ошибок, которые могут привести к остановке работы интегратора.

## Заключение

Ввиду разрывности трехфазных балансных дифференциальных уравнений, определяющих эволюцию химического состава объектов межзвездной среды, для их корректного численного решения требуется дополнительная регулировка процесса решения. Для этого была выполнена модификация астрохимического кода MONACO: добавлена обработка событий, которые приводят к разрывам в правой части дифференциальных уравнений. Применение данного подхода позволит более успешно использовать код MONACO для физических условий, типичных для протопланетных дисков.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема FEUZ-2020-0038.

## Библиографические ссылки

- [1] *Kiskin M. Y., Vasyunin A. I., Akimkin V. V.* A numerical approach to model chemistry of complex organic molecules in a protoplanetary disk // *Open Astron.* — 2022. — Vol. 31, № 1. — P. 80–91.
- [2] *Vasyunin A. I., Caselli P., Dulieu F., Jiménez-Serra I.* Formation of complex molecules in prestellar cores: a multilayer approach // *Astrophys. J.* — 2017. — Vol. 842, № 1. — P. 33.
- [3] *Fredriksson E., Andersson C., Åkesson J.* Discontinuities handled with events in Assimulo, a practical approach // *Proc. 10th Int. Modelica Conf.* — 2014. — P. 827–836.
- [4] *Vasyunin A. I., Herbst E.* Reactive desorption and radiative association as possible drivers of complex molecule formation in the cold interstellar medium // *Astrophys. J.* — 2013. — Vol. 769, № 1. — P. 34.
- [5] *Brown P. N., Byrne G. D., Hindmarsh A. C.* VODE: A variable-coefficient ODE solver // *SIAM journal on scientific and statistical computing.* — 1989. — Vol. 10, № 5. — P. 1038–1051.
- [6] *Molyarova T., Akimkin V., Semenov D. et al.* Gas mass tracers in protoplanetary disks: CO is still the best // *Astrophys. J.* — 2017. — Vol. 849, № 2. — P. 130.