

УДК 524.8:52-54:533.7

МЕТОД РЕДУЦИРОВАННОГО МНОГОУРОВНЕВОГО АТОМА ДЛЯ РАСЧЕТА КИНЕТИКИ КОСМОЛОГИЧЕСКОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

М. С. Бургин

*Предлагается новый метод решения дифференциально-алгебраической системы уравнений, описывающих кинетику рекомбинации первичной плазмы в ранней Вселенной. Метод основан на использовании некоторых свойств исходной системы высокой размерности для построения системы малой размерности, которая в существенном математически эквивалентна исходной. Ценой некоторого усложнения алгоритма расчета коэффициентов, описывающих модельный атом с малым числом связанных состояний, по сравнению с обычно используемыми методами, достигается полное совпадение решения получаемой малоразмерной системы с соответствующими компонентами исходной системы. Описываемый метод позволяет построить алгоритм решения кинетики рекомбинации, по точности сравнимый с интегрированием полной многоуровневой системы уравнений кинетики, а по затратам вычислительных ресурсов в расчете на одну модель – с методом, используемым в коде *RECFAST*.*

Ключевые слова: Рекомбинация атомов, кинетические уравнения, точная редукция.

Разработка методов расчета кинетики космологической рекомбинации, пригодных для использования при интерпретации прецизионных измерений анизотропии реликтового фона, сталкивается с необходимостью удовлетворить двум в определенной степени противоречащим друг другу требованиям. С одной стороны, необходимо чтобы точность теоретических вычислений была адекватна точности наблюдений. С другой стороны, при определении космологических параметров путем сравнения модельных расчетов с наблюдениями требуется проводить вычисления для большого числа мо-

делей, что накладывает ограничения на вычислительные ресурсы, затрачиваемые для расчета каждой индивидуальной модели.

Одним из факторов, определяющих точность и трудоемкость расчетов, является то, насколько полно в используемой теоретической модели описывается структура спектра рекомбинирующего атома. Численные расчеты показывают, что удовлетворительная точность достигается в том случае, когда в модели учитывается не менее нескольких десятков или, в зависимости от цели расчета, сотен состояний [1, 2].

Что касается вычислительной сложности теоретических моделей, то прямое решение уравнений рекомбинации с использованием многоуровневого модельного атома сводится к интегрированию либо жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений, либо дифференциально-алгебраической системы. При высокой размерности решение задач такого типа является весьма трудоемким, что не позволяет непосредственно использовать такое прямое моделирование при интерпретации наблюдений. Основным методом снижения вычислительной сложности до приемлемого уровня служит переход от многоуровневого модельного атома к модельному атому с малым числом состояний. Такой переход будет далее называться редукцией задачи, а малоразмерный модельный атом – редуцированным.

Самым распространенным вариантом сведения полной системы кинетических уравнений к системе, описывающей рекомбинацию редуцированного атома, является использование тех или иных упрощающих физических предположений о населенностях возбужденных состояний. Этот подход использован, в частности, в [3, 1] при разработке кода RECFAST, где редукция выполнялась в два этапа. Во-первых, было использовано приближение l -равновесия, т.е. было принято, что при фиксированном главном квантовом числе n населенности подуровней тонкой структуры пропорциональны их статистическим весам. Далее, многоуровневый модельный атом был заменен эквивалентным двухуровневым с эффективным коэффициентом рекомбинации на второй уровень, приближенно учитывающим влияние каскадных переходов через высоковозбужденные состояния.

Погрешность редукции, возникающая вследствие принятия упомянутых выше упрощающих предположений, была частично скомпенсирована с помощью полуэмпирической поправки, выбранной таким образом, чтобы обеспечить по возможности наилучшее согласие решения для редуцированного атома с решением полной многоуровневой системы. Точность полученного в результате алгоритма оказалась достаточной для использования при обработке имеющихся в настоящее время наблюдений анизотропии ре-

ликтового фона. Однако погрешности, возникающие из-за неполной компенсации ошибок редукции, слишком велики для того, чтобы код мог быть использован при анализе планируемых высокоточных наблюдений в рамках эксперимента Planck [4].

Альтернативный способ сведения полной системы кинетических уравнений к редуцированной предложен в [5]. Ценой усложнения алгоритма расчета коэффициентов, описывающих редуцированный атом, достигается полное совпадение решения редуцированной системы с соответствующими компонентами многоуровневой l -равновесной системы, т.е. погрешность второго этапа редукции в этом методе отсутствует. Однако ошибки, связанные с использованием приближения l -равновесия, делают невозможным использование этого метода в тех случаях, когда необходим корректный учет распределения по угловому моменту. В особенности это относится к расчетам интенсивностей спектральных линий, возникающих при рекомбинации, поскольку учет неравновесности распределения по подуровням тонкой структуры качественно меняет результаты расчетов космологического рекомбинационного спектра [6, 7].

В настоящей работе предлагается метод точной редукции, обобщающий результаты работы [5] на случай отказа от приближения l -равновесия. Описываемый метод позволяет построить алгоритм решения кинетики рекомбинации, по точности сравнимый с интегрированием полной многоуровневой системы уравнений кинетики, а по затратам вычислительных ресурсов в расчете на одну модель – с методом, используемым в коде RECFAST. Изложение ведется применительно к зоне рекомбинации водорода, однако описываемый метод редукции без каких-либо изменений применим и к обеим зонам рекомбинации гелия.

Основные физические предположения и исходные уравнения кинетики. В основе исходной математической модели лежит следующая физическая картина. Водород рекомбинирует в поле чернотельного излучения с температурой, равной кинетической температуре плазмы. Скорость радиационных переходов между всеми возбужденными состояниями (связанными и свободными) велика по сравнению с характерным временем изменения параметров плазмы из-за космологического расширения, так что населенности состояний с главным квантовым числом $n \geq 2$ можно определить в рамках квазистационарного приближения, т.е. из условия равенства скоростей процессов, населяющих и опустошающих эти состояния. Модельный атом имеет K связанных возбужденных состояний, которые делятся на две группы: r низковозбужденных состояний и $K - r$ высоковозбужденных.

Переходы в излучении и в поглощении между основным и высоковозбужденными состояниями точно компенсируют друг друга и могут поэтому не учитываться в уравнениях кинетики. Аналогичная ситуация имеет место и для переходов между основным состоянием и континуумом. Единственный канал образования атомов в основном состоянии – некомпенсированные переходы из r низковозбужденных состояний в основное. В квазистационарном приближении эти же переходы являются единственной причиной того, что связанные возбужденные состояния не находятся в полном равновесии с плазмой.

В большинстве работ, посвященных рассматриваемой задаче, принимается, что некомпенсированные переходы в основное состояние происходят только с уровня $n = 2$. В этом случае в приближении l -равновесия $r = 1$ и предлагаемый здесь подход приводит к методу, описанному в [5], а учет неравновесности распределения по угловому моменту дает значение $r = 2$. Случай $r > 2$ может реализовываться, в частности, при необходимости учитывать влияние двухфотонных переходов в основное состояние [8–11]. При этом следует кроме состояний $2S$ и $2P$ отнести к низковозбужденным несколько состояний nS, nD с $n > 2$.

Для записи системы уравнений рекомбинации и ее решения в компактной форме введем K -мерные вектора-столбцы, т.е. $K \times 1$ матрицы

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_K \end{pmatrix}, \quad \mathbf{N}^{(m)} = \begin{pmatrix} N_1^{(m)} \\ \vdots \\ N_K^{(m)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}^{(m)} = \begin{pmatrix} B_1^{(m)} \\ \vdots \\ B_K^{(m)} \end{pmatrix},$$

$K \times K$ матрицу

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R_{1,1} & \cdots & R_{1,K} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ R_{K,1} & \cdots & R_{K,K} \end{pmatrix},$$

и диагональные $K \times K$ матрицы

$$\mathbf{L}^{(m)} = \begin{pmatrix} L_1^{(m)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & L_K^{(m)} \end{pmatrix},$$

где $m = 0, 1$. Здесь компоненты вектора \mathbf{N} представляют собой населенности связанных возбужденных состояний, $\mathbf{N}^{(0)}$ – значение \mathbf{N} , соответствующее равновесию возбужденных уровней с плазмой, $\mathbf{N}^{(1)} = \mathbf{N} - \mathbf{N}^{(0)}$, а элементы матриц $\mathbf{B}^{(0)}$ и $\mathbf{B}^{(1)}$ равны

скоростям образования атомов в возбужденных состояниях, соответственно, при фото-рекомбинации и при переходах с основного состояния. Матрица \mathbf{R} описывает переходы между возбужденными состояниями, а матрицы $\mathbf{L}^{(0)}$ и $\mathbf{L}^{(1)}$ – уменьшение населенностей возбужденных состояний из-за фотоионизации и переходов в основное состояние соответственно. Из принципа детального равновесия следуют равенства $\mathbf{R}\mathbf{N}^{(0)} = 0$ и $\mathbf{L}^{(0)}\mathbf{N}^{(0)} = \mathbf{V}^{(0)}$.

Упорядочение элементов матриц выбирается таким образом, что первые r элементов вектора \mathbf{N} относятся к низковозбужденным состояниям, поэтому $L_i^{(1)}, B_i^{(1)} = 0$ при $i > r$. Величины $\mathbf{L}^{(0)}$, \mathbf{R} и $\mathbf{V}^{(0)}/N_e^2$ зависят только от температуры плазмы T и не зависят от электронной плотности N_e и населенности основного состояния N_g . Поскольку в рассматриваемых условиях $N_i \ll N_g$, то N_e и N_g связаны соотношением $(N_e + N_g)a^3 = \text{const}$, где a – масштабный фактор.

При описанных выше физических предположениях система уравнений, описывающая изменение концентрации атомов водорода в основном состоянии N_g и населенности возбужденных состояний \mathbf{N} может быть записана в виде

$$\mathbf{N} = -(\mathbf{R} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{V}, \quad (1)$$

$$\frac{dN_g}{dt} = \sum_{i=1}^r (B_i - L_i N_i) - 3HN_g, \quad (2)$$

где $H(t)$ – параметр Хаббла. Наиболее трудоемкой частью решения этой системы служит вычисление \mathbf{N} из уравнения (1), т.к. при этом требуется производить операции в векторном пространстве высокой размерности K .

Однако населенность основного состояния меняется только за счет переходов между основным и низковозбужденными состояниями. Поэтому для вычисления правой части (2) достаточно знать N_i лишь для состояний с $i \leq r$, число которых значительно ниже, чем полное число состояний модельного атома, используемого при точных расчетах. Основная идея описываемого метода редукции состоит в том, чтобы заменить решение системы уравнений (1) порядка K на решение системы порядка $r \ll K$ для неизвестных N_i , $i = 1, \dots, r$. Это позволяет провести расчет указанных компонент вектора \mathbf{N} , а следовательно и интегрирование уравнений кинетики рекомбинации, с гораздо меньшими затратами вычислительных ресурсов, чем при непосредственном решении исходной системы.

Точная редукция уравнений кинетики рекомбинации. Введем $r \times K$ матрицу $\mathbf{\Pi}$ с элементами $\Pi_{ij} = \delta_{ij}$, где δ_{ij} – символ Кронекера, и ее транспонированную $\mathbf{\Pi}^T$. Для

произвольного K -мерного вектора-столбца \mathbf{V} обозначим $\widehat{\mathbf{V}} = \Pi\mathbf{V}$, а для произвольной $K \times K$ матрицы \mathbf{M} обозначим $\widehat{\mathbf{M}} = \Pi\mathbf{M}\Pi^T$. Тогда $\widehat{\mathbf{V}}$ является r -мерным вектором-столбцом, а $\widehat{\mathbf{M}}$ — $r \times r$ матрицей.

Обозначим $\mathbf{Q} = \mathbf{R} - \mathbf{L}^{(0)}$ и запишем решение (1) в виде

$$\mathbf{N} = -\mathbf{S}\mathbf{B}, \quad (3)$$

где $\mathbf{S} = (\mathbf{Q} - \mathbf{L}^{(1)})^{-1}$. Поскольку $\mathbf{L}^{(1)} = \Pi^T\widehat{\mathbf{L}}^{(1)}\Pi$, то применяя формулу для изменения обратной матрицы при малоранговой модификации исходной и обозначая $\mathbf{P} = \mathbf{Q}^{-1}$ получаем

$$\mathbf{S} = \mathbf{P} + \mathbf{P}\Pi^T\widehat{\mathbf{D}}^{-1}\Pi\mathbf{P}, \quad (4)$$

где

$$\widehat{\mathbf{D}} = (\widehat{\mathbf{L}}^{(1)})^{-1} + \widehat{\mathbf{P}}. \quad (5)$$

Подстановка (4) в (3) дает следующее решение для населенностей низковозбужденных состояний:

$$\widehat{\mathbf{N}} = \widehat{\mathbf{N}}^{(0)} - \widehat{\mathbf{P}} \left(\widehat{\mathbf{D}}^{-1} \left(\Pi\mathbf{P}\mathbf{B}^{(0)} + \widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{B}}^{(1)} \right) + \widehat{\mathbf{B}}^{(1)} \right). \quad (6)$$

Система (6, 2), являющаяся редуцированным аналогом системы (1, 2), полностью описывает изменение населенности атомов в основном состоянии и представляет собой дифференциально-алгебраическую систему размерности $r + 1$, что существенно ниже размерности исходной системы. Однако попытка непосредственного численного решения редуцированной системы стандартными методами показывает, что упрощение, полученное при редукции задачи, является в определенной степени кажущимся. Дело в том, что входящие в (6) выражения $\widehat{\mathbf{D}}$, $\widehat{\mathbf{P}}$ и $\Pi\mathbf{P}\mathbf{B}^{(0)}$ хотя и являются, соответственно, $r \times r$ матрицами и r -мерным вектором, одним из необходимых этапов их вычисления является обращение $K \times K$ матрицы \mathbf{Q} , которое при стандартном подходе к вычислению (6) необходимо производить на каждом шаге интегрирования. Затраты вычислительных ресурсов на эту операцию при увеличении числа учитываемых возбужденных состояний резко растут и быстро становятся доминирующими. Т.е. ситуация идентична той, которая имеет место при решении полного уравнения (1), и при поиске решения для единичной космологической модели использование редуцированной системы вместо исходной не дает заметных преимуществ.

При интерпретации наблюдений, однако, необходимо производить расчеты для большого числа наборов космологических параметров, а в этой ситуации возможно кардинальное уменьшение затрат ресурсов в расчете на одну модель. Как было указано выше,

в используемой здесь физической картине рекомбинации величины \widehat{P} и $\text{ПРВ}^{(0)}/N_e^2$ являются функциями только температуры T . Если их предварительно затабулировать на интересующем нас диапазоне температур и затем использовать при интегрировании редуцированной системы, то вычисление значений правой части (6) сведется к нескольким простым алгебраическим операциям над векторами и матрицами низкой размерности r .

Работа выполнена в рамках реализации ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 годы при финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований 08–02–00493-а.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] S. Seager, D. D. Sasselov, and D. Scott, *Astrophys. J. Supp.* **128**, 407 (2000).
- [2] М. С. Бургин, *Астрон. журн.* **80**, 771 (2003).
- [3] S. Seager, D. D. Sasselov, and D. Scott, *Astrophys. J. Letters* **523**, L1 (1999).
- [4] The Planck Collaboration, arXiv:astro-ph/0604069v1 (2006).
- [5] М. С. Бургин, *Краткие сообщения по физике* **36**(4), 26 (2009).
- [6] J. A. Rubiño-Martín, J. Chluba, and R. A. Sunyaev, *Mon. Not. Royal Astron. Soc.* **371**, 1939 (2006).
- [7] В. К. Дубрович, Н. Н. Шахворостова, *Письма в Астрон. журн.* **30**, 563 (2004).
- [8] В. К. Дубрович, С. И. Грачев, *Письма в Астрон. журн.* **31**(6), 403 (2005).
- [9] W. Y. Wong and D. Scott, *Mon. Not. Royal Astron. Soc.* **375**, 1441 (2007).
- [10] J. Chluba and R. A. Sunyaev, *Astron. Astrophys.* **480**, 629 (2008).
- [11] C. M. Hirata, *Phys. Rev. D* **78**(2), 023001 (2008).

Поступила в редакцию 13 ноября 2009 г.