КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

Кафедра астрономии и космической геодезии

САХИБУЛЛИН Н.А

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ АСТРОФИЗИКА. ЗВЕЗДНЫЕ АТМОСФЕРЫ. ЧАСТЬ З

Учебное пособие

Казань - 2015

УДК 52.645

ББК В-22

Принято на заседании кафедры астрономии и космической геодезии Протокол № 12 от 15 мая 2015 года

Рецензент:

кандидат физико-математических наук, доцент,

старший научный сотрудник Института астрономии РАН

Н.С. Бахтигараев

Сахибуллин Н.А.

Теоретическая астрофизика. Звездные атмосферы. Часть 3 (Учебное пособие)

Сахибуллин Н.А., – Казань: Казан.ун-т, 2015. – 45 с.

Пособие посвящено критике самого фундаментального предположения классической теории звездных атмосфер – предположения о выполнении состояния локального термодинамического равновесия (ЛТР) в звездных атмосферах. Приводятся основные аргументы, свидетельствующие о невыполнении такого состояния. Это иллюстрируется на простых примерах. Формулируется общая задача решения основных уравнений этого нетрадиционного (не-ЛТР) подхода. В заключение приводятся методы реализации таких решений и приводятся результаты исследований казанских астрофизиков. Данное пособие является единственным в России.

© Сахибуллин Н.А, 2015

© Казанский университет, 2015

ОГЛАВЛЕНИЕ	CTP.
Комментарий к ЛТР	4
Аргументы против ЛТР	6
Уравнение статистического равновесия	12
Двухуровенная модель атома	17
Общая не-ЛТР задача	20
Ограниченная не-ЛТР задача	25
Интерпретация результатов решения ограниченной не-ЛТР задачи	30
Реализация метода решения ограниченной не-ЛТР задачи	33
Некоторые примеры решения не-ЛТР задачи	40
(на примерах результатов казанской школы астрофизиков/)	

Комментарий к ЛТР

В Пособиях 1 и 2 мы использовали предположение о полном термодинамическом равновесии (ПТР), которое применительно к звездным атмосферам (ЗА) реализовывалось в виде предположения о <u>локальном термодинамическом равновесии (ЛТР</u>). Ранее мы показали, что при ПТР поле излучения будет планковским. Что касается компонент среды (фотоны и частицы), то между ними должен происходить большой обмен энергией. Применительно к частицам это означает, что для установления ПТР должны быть интенсивные соударения между частицами, т.е. ударные скорости *С*_{ії} должны быть велики. Вообще для соблюдения ПТР должен выполняться следующий жесткий принцип <u>детального баланса:</u> равенство числа прямых процессов числу обратных процессов. Это ведет к установлению равновесных функций распределения. Эти функции следующие.

Распределение частиц по энергетическим уровням.

Принцип детального баланса применительно к переходам между уровнями означает, что *N P* ... *N P* ... – 0 (1)

$$N_i R_{ij} - N_j R_{ji} = 0. (1)$$

Здесь *N_i* и *N_j* есть населенности уровней, а *R_{ij}* и *R_{ji}* есть скорости радиационных переходов между этими уровнями (прямых и обратных). Эти скорости через коэффициенты Эйнштейна равны

$$R_{ij} = B_{ij}B_{\nu}(T), \quad R_{ji} = A_{ji} + B_{ji}B_{\nu}(T).$$
 (2)

Поле излучения здесь является планковским. Если теперь в (1) и (2) вставить следующие соотношения

$$A_{ji} = \frac{2hv^3}{c^2}B_{ji}, \ g_j B_{ji} = g_i B_{ij}, \ B_v = \frac{2hv^3}{c^2}(e^{\frac{hv}{kT}}-1)^{-1},$$

то в итоге для населенностей получаем <u>больцмановское</u> распределение по энергетическим уровням:

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{g_j}{g_i} e^{-h\nu/kT} = \left(\frac{N_j}{N_i}\right)^{JTP}$$

Вывод формулы Больцмана на основе классических представлений дан в Дополнении.

Распределение частиц по степеням ионизации.

Для процессов фотоионизации и фоторекомбинации, которые обеспечивают степень ионизации, используется также принцип детального баланса (1). Только в этом случае индекс *i* соответствует определенному уровню атома (иона) в одной степени ионизации, а индекс *j* соответствует состоянию атома (иона) в следующей степени ионизации. Обозначим это состояние как *k*. Отсылая читателя за деталями к книге Михаласа (стр. 177-179), для процессов фотоионизации и фоторекомбинации используем следующие формулы:

$$R_{ik} = 4\pi \int \frac{a_{ik}(v)B_{\nu}(T)dv}{h\nu}, \quad R_{ki} = N_k \left(\frac{N_i}{N_k}\right)^{JTP} 4\pi \int \frac{a_i(v)}{h\nu} \left(\frac{2hv^3}{c^2} + B_{\nu}(T)\right) e^{-\frac{hv}{kT}} dv.$$

Здесь a_{ik} сечение перехода (или коэффициент поглощения в континууме в расчете на 1 атом). Интегрирование ведется с предельной частоты ионизации до бесконечности. После подстановки этих выражений в (1) и проведения простых преобразований получим, что $(N_i / N_k) = (N_i / N_k)^{\mathcal{A}TP}$

Мы получили равновесное распределение для двух степеней ионизации, то есть распределение Саха. Иной вывод формулы Саха дан в Дополнении.

Максвелловское распределение частиц по скоростям.

Вывод этого распределения был изложен в Дополнении. Поэтому мы остановимся на применимости этого распределения к ЗА. Уже несколько раз отмечалось, что равновесное распределение по скоростям устанавливается при интенсивных столкновениях частиц. Причем один тип ударов способствует установлению такого распределения, а другой тип, наоборот, препятствует этому. С этой точки зрения все столкновения можно проклассифицировать таким образом.

- Упругие столкновения, при которых суммарная кинетическая энергия частиц до удара и после удара остается постоянной. Другими словами, при таких ударах не изменяется внутренняя энергия частиц. Пример таких ударов это столкновения свободных электронов. Перераспределение энергии между электронами способствует установлению равновесного распределения по скоростям. Подробности об этом см. в курсе статистической физики.
- Неупругие столкновения, при которых внутренняя энергия частиц изменяется. При этом такие удары (с передачей энергии) приводят к перераспределению скоростей ударяющих частиц в сторону меньших скоростей. Примеры таких столкновений следующие. При столкновении свободного электрона с атомом может произойти ударное возбуждение или ионизация (т. е. изменяется внутренняя энергия частицы и энергия электрона). При рекомбинации число свободных электронов уменьшается и, как следствие, уменьшается число упругих столкновений. Все это ведет к нарушению равновесного распределения по скоростям. Поэтому вопрос о выполнимости равновесного распределения частиц по скоростям это вопрос о конкуренции упругих и неупругих столкновений. Для этого можно сравнить средние времена между упругими столкновениями t₁ и между неупругими столкновениями t₂. Отсылая читателя за деталями к книге Миха-

ласа, приведем лишь итоговый результат. Было показано, что для условий в ЗА выполняется следующее соотношения: $t_1/t_2 \sim 10^3 - 10^7$. Таким образом, неупругие столкновения не могут по своей эффективности сильно нарушать устанавливаемое упругими ударами равновесное распределение по скоростям. <u>Итак: распределение Максвелла в ЗА выполняется с большой точностью!</u>

Выше шла речь, в основном, об электронах. Но возникает вопрос: выполняется ли распределение Максвелла и для других частиц (атомов и ионов) и при одинаковой температуре ($T_{ion}=T_e$). Теория и эксперименты с плазмой показывают, что при параметрах $N_e>10^{10}$ и 5000< $T_e<100000$ различие в температурах очень мало: $|T_e-T_{ion}| \sim 10^{-3}T_e$. Отсюда вывод: равновесное распределение по скоростям выполняется для ионов и атомов.

Применительно к системе «частицы + фотоны» ПТР устанавливается, если происходит сильный обмен между полем излучения и кинетической энергией частиц. Однако можно привести много аргументов в пользу того, что предположение о ЛТР является априорным и не имеющим достаточного физического обоснования. Мы приведем лишь несколько аргументов.

Аргументы против ЛТР

Аргумент 1.

Поскольку ТР устанавливается в результате сильного обмена энергиями при соударениях частиц, то следует оценить относительную роль таких ударов по сравнению с обменом энергией между полем излучения и средой. В простом варианте ударные скорости C_{ij} определяются как $C_{ij} \sim N_e \, / \sqrt{T}$.

Скорость конкурирующих радиационных переходов приближенно оценивается как

$$R_{ij} \sim T^{\alpha}, \quad \alpha > 1.$$

Поскольку в ЗА электронное давлении невелико, а температура излучения достаточно велика, то в среднем имеем, что *R_{ij}>>C_{ij}*. Это, разумеется, не способствует установлению ЛТР в ЗА.

Приведенные соображения помогают нам <u>очень приближенно</u> оценить, для каких звезд отклонения от ЛТР могут быть значимыми. Прежде всего, ясно, что чем выше эффективная температура, тем больше вероятность наличия не-ЛТР эффектов. Далее, если поглощение очень сильно (например, в ядрах линий или в ультрафиолете), то это означает, что видимый спектр образуется в более высоких слоях атмосферы, где концентрация ударяющихся частиц мала. Резюме: таким диапазоном звезд, удовлетворяющим этим двум условиям, является звезды с *Т_{еff}>10 000 К (О,В,Г* - звезды и сверхгиганты).

Аргумент 2.

Для возможности установления ТР важно соотношение между длиной свободного пробега фотона и длиной свободного пробега частицы (электрона). Напомним, что в Пособии 1 длину свободного пробега фотона мы оценили как $\Delta s_{\phi omoh} ~1/\alpha = 1/(\alpha'\rho)$. Соответственно время прохождения фотоном этого расстояния будет равно $t_{\phi o}$. $m_{oh} ~1/(\alpha c) = 1/(\alpha'\rho c)$. В этих формулах α есть коэффициент поглощения в расчете на единицу длины (см. Пособие-1). Среднее расстояние между столкновениями определено в Пособии 1: $\Delta s_{uacm} ~1/(\sigma N)$. Соответственно время между столкновениями равно $t_{uacm} ~1/(\sigma NV)$. Величина σ является сечением соударения с размерностью см², а V есть скорость частиц.

Для дальнейших оценок возьмем слой солнечной атмосферы на глубине т 5000=1 (см. справочник «Астрофизические величины», стр.236), у которого следующие характеристики:

$$T(\tau_{5000} = 1) = 6430K. \ T(\tau_{5000} = 0.5) = 5920K,$$

 $\log N(cm^{-3}) = 17.18$, $\log \rho(c cm^{-3}) = -6.46$, $\log k_{5000}(cm^2 c^{-1}) = -0.14$. Тогда средняя длина свободного пробега для атома водорода будет равна

$$\Delta s_{uacm} \approx 1/(\sigma N) \approx 1/(\pi u_0^2 N) \approx 1/(8.8 \times 10^{-17} \, cm^2 \times 10^{17.18}) \approx 0.08 \, cm.$$

Время прохождения этого пути *t_{част}* равно

$$t_{uacm} \approx 1/(\sigma NV) = 1/(\pi a_0^2 NV) \approx 1/(\pi a_0^2 \sqrt{\frac{2kT}{M}}) \approx 10^{-8} ce\kappa.$$

Средняя длина пробега фотона оценивается так:

$$\Delta s_{\phi omoh} \approx 1/\alpha \approx 1/(\alpha' \rho) \approx 1/(10^{-0.14} * 10^{-6.46}) \approx 40 \kappa M.$$

Время прохождения этого пути

$$t_{\phi omoh} \approx 1/(\alpha c) \approx 1/(\alpha' \rho c) \approx 10^{-4} cek$$

Из этих оценок можно сделать следующие выводы.

 Видно, что Δs_{фотон} >> Δs_{част}. Это означает, что поле излучения в данной точке определяется не локальными свойствами среды в этой точке, а свойствами среды в очень удаленной точке. Поэтому гипотеза <u>локального</u> термодинамического равновесия для поля излучения не выполнима для ЗА. 2) Два факта (Δs_{част}<<Δs_{фотон} и t_{част}<<t_{фотон}) свидетельствуют эффективности столкновений, что приводит к установлению состояния частиц в ЛТР.

3) Попутно заметим, что указанные соотношения ($\Delta s_{часm} << \Delta s_{фотон}$ и $t_{часm} << t_{фотон}$) подтверждают вывод Пособия-1 о незначительной роли переноса энергии теплопроводностью путем столкновений по сравнению с переносом энергии излучением.

<u>Аргумент 3</u>.

К этому надо добавить следующее. Из-за большой длины пробега фотона, он будет сильно "чувствовать" наличие верхней границы атмосферы. Вероятность выхода фотона из разных слоев будет разная из-за разной вероятности поглощения: малая для глубоких слоев и высокая - для поверхностных слоев. В поверхностных слоях может оказаться недостаток квантов, которые могут вызвать фотовозбуждение. Поэтому число актов фотовозбуждения будет меньше числа обратных спонтанных переходов, которые не зависят от числа фотонов. А это означает, что принцип баланса нарушается! Все это также приводит к тому, что и поле излучения будет сильно отклоняться от планковского.

Аргумент 4.

Возьмем для примера верхнюю границу ЗА с отсутствующим падающим на нее излучением. При ЛТР для двухуровенного атома его населенности должны быть равновесными и должно соблюдаться условие детального баланса:

$$N_1^{JTP}(R_{12} + C_{12}) - N_2^{JTP}(R_{21} + C_{21}) = 0.$$
(3)

При ЛТР ударные процессы компенсируются, т.е.

$$N_1^{JTP}C_{12} = N_2^{JTP}C_{21}.$$
 (4)

Тогда уравнение (3) перепишется так:

$$N_1^{LTE} R_{12} - N_2^{LTE} R_{21} = 0.$$
 (5)

При отсутствии падающего сверху излучения и при ЛТР средняя интенсивность равна

$$J_{\mathcal{V}}=\frac{1}{2}B_{\mathcal{V}}(T).$$

Тогда для радиационных скоростей имеем:

$$R_{12} = \frac{1}{2}B_{12}B_{\nu}(T), \quad R_{21} = A_{21} + \frac{1}{2}B_{21}B_{\nu}(T),$$

8

Напомним (см. Пособие 2), что здесь мы использовали коэффициенты Эйнштейна, рассчитанные на интенсивность. Используя соотношения

$$A_{21} = \frac{2hv^3}{c^2} B_{21}, \quad g_2 B_{21} = g_1 B_{12},$$
$$N_2^{LTE} = N_1^{LTE} \frac{g_1}{g_2} e^{-hv/kT}.$$
(6)

и подставляя их в уравнение баланса (3), имеем

Эти Мітерказывается ПВлиая концептуан Вная невостаятельность ИПР Приближения ! 1^{2} 1^{2} 2^{2} 1^{2

Теперь на уравнение (5) посмотрим следующим образом. Предположим, что поле излучения <u>не является</u> планковским, но населенности уровней остаются равновесными. Тогда (5) запишется следующим образом

$$N_{1}^{\mathcal{J}TP}R_{12} - N_{2}^{\mathcal{J}TP}R_{21} = N_{1}^{\mathcal{J}TP}B_{12}J_{\nu} - N_{2}^{\mathcal{J}TP}A_{21}J_{\nu} - N_{21}^{\mathcal{J}TP}B_{21}J_{\nu}$$

После подстановки в это равенство выражений (6) приходим к выводу, что больцмановская населенность обязательно приводит к тому, что интенсивность должна быть только <u>планковской. О</u>братное утверждение также справедливо.

Аргумент 6.

Рассмотрим для примера трехуровенный атом (рис. 1), у которого радиационный переход 1-3 более вероятен, чем переход 1-2 (это происходит, например, когда уровень 2 является метастабильным). В случае предположения о детальном балансе переходы между всеми уровнями должны компенсировать друг друга (см. левую часть рисунка). Это действительно происходит, если эти переходы контролируются столкновениями. Но если эти переходы контролируются полем излучения, то переходы 1-2 и 2-1, являющиеся по нашей модели маловероятными, вызовут перенаселение уровня 2 по сравнению с ЛТР.





Аргумент 7.

Рассмотрим для примера трехуровенный атом (рис. 1), у которого радиационный переход 1-3 более вероятен, чем переход 1-2 (это происходит, например, когда уровень 2 является метастабильным). В случае предположения о детальном балансе переходы между всеми уровнями должны компенсировать друг друга (см. левую часть рисунка). Это действительно происходит, если эти переходы контролируются столкновениями. Но если эти переходы контролируются полем излучения, то переходы 1-2 и 2-1, являющиеся по нашей модели маловероятными. Это приведет к перенаселению уровня 2 по сравнению с ЛТР.

Рассмотрим другую интересную проблему, связанную с правым рис. 1. Она иллюстрирует, как отклонения от ЛТР даже для одной линии приводит к отклонениям от ЛТР у других линий. Допустим, что линия 1-3 является резонансной, т. е. возникающей с основного уровня. Такие линии очень сильные, и они образуются в верхних слоях ЗА и, как следствие, более подвержены не-ЛТР эффектам. Но поскольку эта линия связана с линиями 3-2 и 3-1, то отклонения от ЛТР для линии 1-2 будут вызывать отклонения от ЛТР и для линий 3-2 и 3-1. Такой эффект называется "interlocking" ("взаимосвязь"). Вообще говоря, сильная линия, возникающая в верхних слоях ЗА, где отклонения от ЛТР ожидаются большими, и связанная со слабыми линиями, возникающими более глубоко, через intelocking-механизм будет давать дополнительные кванты в этих двух слабых линиях: эти линии становятся более слабыми. Хороший пример этого механизма это слабые красные линии *Ca II λ8498, λ8662 и λ8542 A*, которые связаны с сильными *H* и *K* резонансными линиями *Ca II около λ 3933*. В ЛТР – приближении никакое влияние одних линий на другие не учитывается.

<u>Аргумент 8.</u>

Использование при анализе астрофизической плазмы распределения Максвелла по скоростям обычно не вызывает сомнения: оно устанавливается из-за частых столкновений между частицами. Что же касается распределений атомов по состояниям возбуждения и ионизации, то они зависят от соотношения между энергиями фотонов и частиц. Выполняются ли соотношения Саха-Больцмана для населенностей энергетических уровней атомов в ЗА? Положительный ответ на этот вопрос зависит от того, насколько энергия частиц превышает энергию фотонов. Произведем оценки.

$$\rho(\phi omohu) = \frac{4\pi}{c} \int_{0}^{\infty} B_{\nu}(T) d\nu = \frac{4\pi}{c} \sigma T^{4}, \quad \rho(\mu a cmuuu) = \frac{3}{2} NkT,$$
$$R = \frac{\rho(\phi omohu)}{\rho(\mu a cmuuu)} = 36.5 \frac{T^{3}}{N}.$$

10

При R>1 следует ожидать, что будут иметься отклонения от ЛТР в распределении атомов по энергиям возбуждения и степеням ионизации.



Значения R приведены на рис. 2.

Рис. 2. Область возможных отклонений от ЛТР.

Видно, что значения R<1 соответствуют узкому интервалу концентраций частиц. Типичные значения концентрации частиц *N* в 1 см³ у звезд разных типов такая: О звезда: 10¹⁵, Солнце:

Из графика следует вывод: для звезд сверхгигантов учет отклонений от ЛТР абсолютно необходим. Только для звезд карликов возможно использование формул Больцмана-Саха. Справедливости ради, следует заметить, что последнее утверждение не является сильно обоснованным.

Аргумент 9.

Влияние границы атмосферы, о котором говорилось в аргументе 3, приводит дополнительно к следующему аргументу. Закон Стефана - Больцмана *F=* σT^4 выполняется при условии изотропности излучения и при отсутствующем (или очень малом) градиенте температуры в среде на расстоянии средней длины пробега фотона. В условиях звезд это реализуется в недрах звезды или в глубоких слоях атмосферы. На поверхности звезды, где формируется выходящее излучение, градиент температуры становится большим, среда становится прозрачной, возрастает вероятность выхода фотона из атмосферы. В итоге поле излучения приобретает неизотропный характер.

Эти и многие другие аргументы свидетельствуют, что гипотеза ЛТР в применении к ЗА является несостоятельной и внутренне противоречивой. Тем не менее, эта гипотеза использовалась в течение многих десятилетий. Главные причины этого следующие:

- отсутствие вычислительной техники и алгоритмов, необходимых для решения общей задачи с учетом отклонений от ЛТР; - недостаточная точность спектроскопических наблюдений для выявления таких отклонений;

- недостаток во многих атомных данных, необходимых для общей задачи.

Как мы покажем ниже, для решения не-ЛТР задачи необходимо использовать модель многоуровенного атома даже для исследования одной линии, образованной переходом только между 2 уровнями. При этом объем вводимой в расчеты информации (input physics) возрастает в разы.



Рис. 3. Модель атома натрия Na I. Число дискретных уровней NL=19. Последний двадцатый уровень соответствует состоянию Na II.

Допустим, что мы хотим исследовать линию Nal λ8183.3 A (рис. 3). При ЛТР подхоза нам нужно знать предварительно следующий объем информации: сила осциллятора 2D 2D 2F0 этой линии, энергия возбуждения двух уровней (3р и 3d), 3-4 параметра уширения линии. Всего необходимо 4-5 значений.

При не-ЛТР подходе объем вводимой информации существенно возрастет. Покажем на примере модели атома для *Nal* с 20 уровнями. При таком числе уровней возможны 190 разрешенных и запрещенных переходов. Для такой модели необходимы следующие атомарные данные: - энергия возбуждения (19), - стат. веса (20), - состояние ионизации (1-5), - ударные скорости *b-b* переходов (190), - ударные скорости *b-f* переходов (19), - сечения фотоионизации (19), - силы осцилляторов (для разрешенных переходов числом ~100), - параметры уширения линий (~300). Итого: ~600 значений. Нахождение всех этих данных является серьезной и большой работой. Использование ненадежных используемых данных может привести к существенно неверным результатам!

Уравнение статистического равновесия

Условие детального баланса является чрезвычайно жестким и трудно выполнимым для процессов, связывающих поле излучения и среду. Поэтому целесообразно это условие заменить более реалистичным предположением для уровня *i*: <u>суммарные</u> процессы, населяющие уровень, компенсируются всеми обратными процессами, опустошающими этот же уровень. Это выражается записью следующего уравнения:

$$N_{i}\sum_{j\neq i} (R_{ij} + C_{ij}) + N_{i} (R_{ik} + C_{ik}) = \sum_{j\neq i} N_{j} (R_{ji} + C_{ji}) + N_{k} (R_{ki} + C_{ki}).$$
(7)

Первый член слева это радиационное и ударное возбуждение уровня. Второй член слева это фотоионизация и ударная ионизация уровня. Первый член справа учитывает радиативное и ударное девозбуждение уровня. Второй член справа это фоторекомбинация и тройная (ударная) рекомбинация. Графическое представление уравнения (7) показано на рис. 4. Сплошными линиями показаны возможные радиативные и ударные процессы, опустошающие и населяющие выбранный уровень. Для некоторых переходов вследствие правила запрета могут реализовываться только ударные процессы (они показаны штриховыми линиями).



Рис. 4. Процессы заселения и опустошения выбранного уровня.

Уравнение (7) является линейно зависимым, поскольку уравнение для последнего уровня являет-

ся линейной комбинацией других уравнений: все переходы на этот уровень и с него уже учтены в оставшихся уравнениях. Поэтому следует добавить (или заменить одно из уравнений). Вариантов может быть несколько. Можно использовать условие сохранения частиц, когда сумма населенностей всех уровней данного элемента должна равняться полному числу атомов данного элемента:

$$\sum_{i=1}^{NL_{e^l}} N_i^{e^l} = N^{e^l} = \varepsilon^{e^l} N_H.$$

Здесь *є*е есть содержание элемента по отношению к водороду. Можно использовать и другое условие – условие сохранения заряда:

$$\sum_{i} N_i Z_i = N_e.$$

Здесь *Z_i* есть заряд элемента. Суммирование ведется по всем включенным в рассмотрение химическим элементам. Некоторые исследователи предпочитаю заменить одно уравнение из системы (7) для уровня, у которого обнаруживается самая максимальная населенность.

С точки зрения математики эта система является линейной и независимой от других уравнений. Но на самом деле это не так. Допустим, что мы отыскиваем населенности уровней *N_i*. Для решения уравнений (7) необходимо знать радиативные скорости *R_{ij}*, которые зависят от средней интенсивности. Но чтобы найти среднюю интенсивность, надо решить уравнение переноса излучения. Но чтобы решить это уравнение, надо знать коэффициенты поглощения. Но чтобы знать коэффициенты поглощения, надо знать населенности уровней. Итак, возникает необходимость решать уравнение (7) совместно с уравнением переноса излучения, используя итерационный процесс.

Теперь, не вдаваясь в подробности, мы приведем формулы, по которым следует вычислять каждый член уравнения (7). При этом соответствующие формулы можно записать, используя как коэффициенты Эйнштейна, так и коэффициенты поглощения.

Радиативные скорости.

1) Скорости вверх (<u>фотовозбуждение</u> *i* → *j*):

$$\begin{split} R_{ij} &= B_{ij} \int_{0}^{\infty} \oint I_{\nu} \varphi_{\nu} d\nu \frac{d\omega}{4\pi}, \quad \rightarrow \quad R_{ij} = B_{ij} \int_{0}^{\infty} \varphi_{\nu} J_{\nu} d\nu = B_{ij} \overline{J}_{ij} \quad unu \\ R_{ij} &= 4\pi \int_{0}^{\infty} \frac{a_{ij}(\nu) J_{\nu} d\nu}{h\nu}, \quad mak \, \kappa ak \, a_{ij}(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} B_{ij} \varphi_{\nu}. \end{split}$$

Смысл последней формулы ясен: скорость процесса есть величина поглощенной энергии, поделенной на энергию каждого кванта. И все это интегрируется по сфере. Интегрирование по частотам производится в пределах ширины линии, определяемой коэффициентом поглощения. Коэффиценты Эйнштейна здесь взяты в расчете на интенсивность.

2) Скорости <u>фотоионизации</u> (переход *i → k, k –* состояние в континууме) определяются по аналогичной формуле

$$R_{ik} = 4\pi \int_{V_0}^{\infty} \frac{a_{ik}(v)J(v)dv}{hv}.$$

Отличие состоит только в том, что интегрирование по частоте ведется от предельной частоты ионизации для данного уровня.

3) Скорости фотодевозбуждения определяются по формуле:

$$\begin{split} R_{ji} &= A_{ji} + B_{ji} \int_{0}^{\infty} \oint I_{\nu} \varphi_{\nu} d\nu \frac{d\omega}{4\pi} = A_{ji} + B_{ji} \overline{J_{ij}} = \frac{g_i}{g_j} B_{ij} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + \overline{J_{ij}} \right) u\pi u \\ R_{ji} &= 4\pi \frac{g_i}{g_j} \int_{0}^{\infty} \frac{a_{ij}(\nu)}{h\nu} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + J_{\nu} \right) d\nu. \end{split}$$

Как видно, в этих формулах учтено вынужденное излучение.

4) Скорости <u>фоторекомбинации</u>с учетом спонтанных и вынужденных переходов можно определить, используя принцип детального баланса, так как фоторекомбинация фактически это ударный процесс. Не вдаваясь в детали (их можно найти в книге Михаласа), приведем окончательную формулу

$$R_{ki} = 4\pi \int \frac{a_{ik}(v)}{hv} G_{ki}(v) \left(\frac{2hv^3}{c^2} + J(v)\right) dv.$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$G_{ki} = N_e \Phi_i \exp(-h\nu/kT), \quad \Phi(T) = \frac{u^+}{u^0} \frac{2(2\pi n)^{3/2}}{h^3} (kT)^{3/2} e^{-\chi_{ion}/kT}.$$

и- суммы по состояниям.

Ударные скорости.

Удары с какими частицами важны? При низких температурах вещество нейтрально. Из-за обилия нейтрального водорода удары с этими атомами наиболее важны. У горячих звезд атомы ионизованы. Поэтому важны столкновения с ионами и электронами. Но наиболее важны удары с электронами, так как они двигаются с большими скоростями, чем ионы. Например,

$$\frac{V_{3}}{V_{uoh}} = \sqrt{\frac{m_{uoh}}{m_{3}}} = \sqrt{\frac{1840}{m_{3}}} = 43.$$

Поэтому сперва рассмотрим удары со свободными электронами.

5) <u>Ударное возбуждение</u>. Вероятность столкновений частиц пропорциональна сечению ударов σ^{coll} , скорости частицы V и времени *dt*. Общая скорость соударений равна потоку соударяющихся частиц относительно избранного атома (равный $N_{coll}*V$), помноженному на сечение σ^{coll} . Здесь N_{coll} есть концентрация частиц в см³. С учетом максвелловского распределения частиц *f*(V) по скоростям и ограничиваясь только соударениями с электронами, имеем, что

$$C_{ij} = N_{coll} \int_{V_0}^{\infty} \sigma_{ij}^{coll}(V) Vf(V) dV \rightarrow C_{ij} = N_e \int_{V_0}^{\infty} \sigma_{ij}^e(V) Vf(V) dV = N_e q_{ij}(T).$$

Здесь скорость V₀ определяется условием равенства кинетической энергии электрона и предельной энергии, необходимой для перехода *i→j*: ½ mV₀²=E_{ij}. Об определении величины q_{ii}(T) речь будет идти несколько ниже. 6) <u>Ударное девозбуждение</u>. Поскольку рассматриваемый процесс это ударный процесс, то для таких процессов соблюдается принцип детального баланса. Поэтому можно записать для скоростей ударного девозбуждения следующую формулу:

$$N_i^{\mathcal{I}TP}C_{ij} = N_j^{\mathcal{I}TP}C_{ji}.$$

Тогда в расчете на один атом в состоянии ј скорость определяется как

$$C_{ji} = \left(\frac{N_j}{N_i}\right)^{JTP} C_{ij} = \left(\frac{N_j}{N_i}\right)^{JTP} N_e q_{ij}(T).$$

7) Обратный процесс <u>ударной рекомбинации</u>, являющейся также ударным процессом, рассчитывается на основе принципа детального баланса, который реализуется для ударных процессов с электронами, имеющих максвелловское распределение скоростей. Итоговая формула будет аналогична выше приведенной формуле с заменой индекса *j* на *k*. Функция *q_{ik}* для этого случая будет обсуждена ниже.

8) Ко всем этим процессам некоторых случаях необходимо добавить еще два: <u>диэлек-тронная рекомбинация и автоионизация</u>. Эти два процесса должны быть включены в уравнение статистического равновесия. Для исследуемого атома среди дискретных энергетических уровней имеются так называемые дважды возбужденные состояния. Они возникают, когда переходит на верхний уровень не только валентный электрон, но и электрон из внутренней электронной оболочки. При этом энергия возбуждения может оказаться по значению выше энергии ионизации данного атома (см. рис. 5). Тогда возможны два противоположных двухступенчатых процесса. <u>Автоионизация</u> происходит по следующей цепочке:

1)b→ d: возбуждение электрона до дважды возбужденного состояния;
 2) d→ c: переход с уровня d на основное состояние c следующей степени ионизации с выделением свободного электрона. Вероятность этого перехода очень велика (A_{dc}=10¹³-10¹⁸ в секунду).



Рис. 5. Схема двухступенчатых процессов: автоионизации и диэлектронной рекомбинации:

b-связанное состояние атома,

d – дважды возбужденный уровень атома,

с — основное состояние следующей стадии ионизации (иона), Обратный процесс диэлектронной рекомбинации проходит по такой цепочке:

- с → d: захват ионом свободного электрона, образование атома с дважды возбужденным уровнем;
- 2) *d*→*b*: спонтанный переход на обычный уровень *b*.

9) Для поздних звезд большую роль играют столкновения с атомами нейтрального водорода. К сожалению, никаких достаточно точных формул для описания таких процессов не имеется. Обычно используется формула Дравина, описывающая столкновение атома массы *т*_А с атомом водорода массы *т*_{Н,}имеет следующий вид:

$$q_{ij}(T) = 16\pi u_0^2 \left(\frac{2kT}{\pi\mu}\right)^{1/2} \left(\frac{E_H}{E_{ij}}\right)^2 f_{ij} \frac{m_A}{m_H} \frac{m}{m_H + m} \Psi(u_0),$$

$$\Psi(u) = e^{-u} / (1 + 2/u), \quad \mu = m_A / (m_A + m_H).$$

Эта формула дает результат с точностью в 1-2 порядка.

Двухуровенный атом

Рассмотрение такой простой модели атома, состоящей из двух уровней и свободных электронов и в действительности нереализуемой, позволит нам <u>получить важные соотношения и физические прогнозы</u>. Кроме того, такая модель используется для решения многоуровенной не-ЛТР задачи, когда уравнения переноса излучения и статистического равновесия решаются точно в избранном переходе между избранными уровнями, а населенности других уровней и поле излучения в переходах между ними считается известными. Такой подход называется ETLA - эквивалентный двухуровенный атом. Например, реализация такого подхода осуществлена в известных программных комплексах PANDORA и ALTAIR.

Для такой модели уравнение (7) перепишется как

$$N_i (R_{ij} + C_{ij}) = N_j (R_{ji} + C_{ji})$$

или

$$N_{i}(B_{ij}J_{\nu} + C_{ij}) = N_{j}(A_{ji} + B_{ji}J_{\nu} + C_{ji}).$$
(8)

Коэффициенты поглощения и излучения в линии перехода *i-j* определяются как

$$\alpha_{\mathcal{V}}^{l} = (N_{i}B_{ij} - N_{j}B_{ji})J_{\mathcal{V}}, \quad \varepsilon_{\mathcal{V}}^{l} = N_{j}A_{ji}J_{\mathcal{V}}.$$

Тогда функция источника запишется следующим образом:

$$S_{\mathcal{V}}^{l} = \frac{\varepsilon_{\mathcal{V}}^{l}}{\alpha_{\mathcal{V}}^{l}} = \frac{N_{j}A_{ji}}{N_{i}B_{ij} - N_{j}B_{ji}} = \frac{A_{ji}}{\frac{N_{i}}{N_{j}}B_{ij} - B_{ji}}.$$
¹⁷

С учетом выражений (6) окончательно имеем:

$$S_{\nu}^{l} = \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{1}{\frac{N_{i}g_{j}}{N_{j}g_{i}} - 1}.$$
(9)

Заметим, что это выражение имеет общий характер, а не только для двухуровенного атома. Но пока эта запись ничего не говорит о роли тех процессов, которые определяют функцию источника через населенности.

Из равенства (8) определим населенности:

$$\frac{N_{j}}{N_{i}} = \frac{1 + \frac{c^{2}}{2hv^{3}}J_{v} + \frac{C_{ji}}{A_{ji}}}{\frac{g_{i}}{g_{j}}\left[\frac{c^{2}}{2hv^{3}}J_{v} + e^{-\frac{hv}{kT}}\frac{C_{ji}}{A_{ji}}\right]}$$

Подстановка этого выражения в (9) приводит к следующим выражениям:

$$S_{\nu}^{l} = \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{\frac{c^{2}}{2h\nu^{3}} J_{\nu} + e^{-\frac{h\nu}{kT}} \frac{C_{ji}}{A_{ji}}}{1 + \frac{C_{ji}}{A_{ji}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right)} = \frac{1}{1 + \frac{C_{ji}}{A_{ji}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right)} J_{\nu} + \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{e^{-\frac{h\nu}{kT}} \frac{C_{ji}}{A_{ji}}}{1 + \frac{C_{ji}}{A_{ji}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right)} = \frac{2h\nu^{3} \left(e^{-\frac{h\nu}{kT}} - \frac{h\nu}{kT}\right)}{1 + \frac{C_{ji}}{A_{ji}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right)} = \frac{2h\nu^{3} \left(e^{-\frac{h\nu}{kT}} - \frac{h\nu}{kT}\right)}{1 + \frac{C_{ji}}{A_{jij}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right)}, \quad \varepsilon = \frac{\varepsilon'}{1 + \varepsilon'} \approx \frac{C_{ji}}{C_{ji} + A_{ji}},$$

окончательно получим, что

$$S_{\mathcal{V}}^{l} = (1 - \varepsilon)J_{\mathcal{V}} + \varepsilon B_{\mathcal{V}}(T) = \frac{J_{\mathcal{V}} + \varepsilon' B_{\mathcal{V}}(T)}{1 + \varepsilon'}$$

(В Пособии-1 для величины *є* мы использовали обозначение *γ*).

Физическое объяснение этого выражения такое: первый член с *J_v* ответственен за образование линий за счет рассеяния, а второй член является тепловым и представляет фотоны, которые возникли по цепочке: ударное возбуждение и последующее радиативное девозбуждение. Член в знаменателе ε' отражает те фотоны, которые "погибли", т.е. не излучились при фотодевозбуждении из-за ударного девозбуждения.

В частном случае, когда в глубоких слоях имеется преобладание ударных процессов, имеем $\varepsilon' >>1$ и $\varepsilon=1$. Это означает, что тепловой член доминирует. В другом частном случае, когда в поверхностных слоях удары не важны, имеем $\varepsilon'=0$ и $\varepsilon=0$. Это означает, что доминирует член рассеяния. Таким образом, функция источника будет вести себя по-разному:

$$\begin{split} C_{ji} >> A_{ji}, \quad \varepsilon = 1 \quad \Rightarrow \quad S_{\nu}^{l} = B_{\nu}(T), \\ C_{ji} << A_{ji}, \quad \varepsilon \approx 0 \quad \Rightarrow \quad S_{\nu}^{l} = J_{\nu}. \end{split}$$

Соответственно и профиль линии будет определяться тем, насколько ее излучение связано с локальными свойствами среды (прежде всего с температурой, см. рис. 6).



Рис. 6. Поведение линий в зависимости от параметра *є*.

После таких предварительных, но важных замечаний

рассмотрим решение не-ЛТР проблемы. Не-ЛТР подход применительно к теории ЗА реализуется в двух вариантах: общий и ограниченный подходы. В «общей задаче» с учетом отклонений от ЛТР решаются все уравнения теории звездных атмосфер и создаются модели атмосфер и теоретические спектры. В «ограниченной» задаче для анализа конкретного химического элемента решаются только уравнение переноса излучения и уравнение статистического равновесия. Модель атмосферы в этом случае не рассчитывается, а химический элемент не должен влиять на строение модели атмосферы. К таким элементам относятся практически все элементы, за исключением водорода и гелия: их содержание в ЗА очень незначительное.

Общая не-ЛТР задача

Итак, в <u>общем подходе</u> решаются все уравнения теории моделирования, которые приведены ниже: <u>dP</u> = - go (a) уранение гидростатического равновесия,

 $\frac{dP}{dz} = -g\rho$ (a) уранение гидростатического равновесия, $Cos \theta \frac{dI_v}{dz} = -\alpha_v I_v + \varepsilon_v$ (b) уравнение переноса излучения; $\int F_v dv = \sigma T_{eff}^4$ (c) условие лучистого равновесия;

 $N_l \sum_{u \neq l} P_{lu} = N_u \sum_{u \neq l} N_u P_{ul}$ (d) уравнение статистического равновесия.

Здесь использованы следующие обозначения:

- **Т** температура на данной глубине,
- *N_e* концентрация электронов в 1см³,
- N_{tot} полное число всех атомов всех элементов в 1 см³,

(N₁.....N_{NL})_{Nel} - населенности для уровней в количестве N_{NL} для всех химических элементов в количестве N_{eb} типичные значения: N_{NL} ~100, N_{el} ~10.

(J₁.....J_{NF}) – средние интенсивности для всех частот в количестве *Jtot*, типичные значения *NF* ~10000 (в континууме и профилях линий).

Как указывалось выше, эти уравнения прежде всего сильно взаимосвязанные. Например, нельзя решить уравнение (b), не решив уравнение (d), так как для вычисления коэффициентов излучения и поглощения надо знать населенности уровней. Другой пример: условие (c) можно проверить только после решения уравнения переноса излучения (b). Эти уравнения также связаны глобально по всей атмосфере из-за большой длины свободного пробега фотона (см. выше). Дополнительно, эти уравнения являются и нелинейными.

<u>Первый шаг в решении уравнений</u> с использованием численных методов - это произвести их дискретизацию. Это означает, что непрерывную функцию *f*(*x*,*y*,*z*...) следует представить как набор ее дискретных значений *f*(*x*_{*i*},*y*_{*j*},*z*_{*k*}...) в точках деления *i*=1...*I*, *j*=1...*J*, *k*=1...*K*. Поэтому во всех формулах надо интегралы заменить квадратурами.

<u>Дискретизация по глубинам:</u> Такая дискретизация должна обеспечивать с большой точностью представление производных, стоящих в уравнениях переноса излучения, гидростатического равновесия и др. Она необходима, в частности, для определения характеристик поля излучения (потока, интенсивности и др.). ЗА представляется в виде

параллельных слоев. Число таких слоев *ND* порядка 50-70. При этом дискретизации делается малой для поверхностных слоев, и умеренно большой – для глубоких слоев. Некоторые исследователи используют равномерную шкалу по величине $log \tau$. Обычно при изменении глубины в десять раз, число точек на интервале выбирается порядка 5-10. Для выбора меры глубины можно брать оптическую глубину τ или массу *m*. Выбранная оптическая глубина может быть разной: средней росселандовской τ_R , моно-хроматической τ_v или $\tau_{\lambda=5000A}$. Но выбор массы является более предпочтительным, так как коэффициент поглощения, который входит в определение оптической глубины на фиксированной частоте. Независимо от выбора меры глубины выбор самой поверхностной (первой) точки должно соответствовать значению $\tau_{v,d=1} <<1$ для всех частот. Последней (самой глубокой) точкой с номером *d=ND* модели атмосферы выбирается глубина, соответствующая условию $\tau_{v,ND} > 1$.

<u>Дискретизация по частотам</u>. Интегралы по частоте встречаются в теории моделирования во многих важных ситуациях. Например, они присутствуют в условии лучистого равновесия и в уравнении гидростатического равновесия. Они необходимы и при расчете радиативных скоростей. Поэтому точность численного представления интегралов вида [*f(v)dv* должна быть очень высокой. Для таких интегралов также используется квадратура вида

Обозначим число точек деления как *NF*. Выбор число точек и их распределение по спектру во многом зависит от того, каков вид функции $f_1(v)$. Если $f_1(v)$ есть излучение в непрерывном (следовательно, слабо зависящем от частоты) спектре, то достаточно использовать простые квадратуры (например, квадратура Симпсона) с не очень большим числом точек деления. При этом только нужно учесть то, что излучение может иметь скачки, вызванные скачками в коэффициентах поглощения.

Для многочисленных узких линий выбор квадратуры более принципиальный. Профили каждой линии состоят из узкого допплеровского ядра и сильных крыльев. Это необходимо учитывать при выборе числа точек и при их распределении по профилю линии. Разумеется, заранее до не-ЛТР расчетов мы не знаем, какова линия - сильная или слабая. В Казани мы разрешаем эту проблему, определив профили линий в ЛТР приближении. Это дает возможность определить силу линии и выбрать число точек и их распределение по частотам линии. Заметим очень важное и полезное обстоятельство: для определения радиативных скоростей в переходах в линиях, важную роль играют допплеровские ядра. И именно в этой области профиля линии следует проявлять особое внимание при выборе точек дискретизации. Общее число точек по частоте может достигнуть величин 10⁵-10⁶. <u>Дискретизация по направлениям:</u> Такая дискретизация, в частности, необходима при вычислении средней интенсивности. Для интегралов вида ∫*f(µ)dµ*:

$$\int_{-1} f_2(\mu) d\mu \approx \sum_j \beta_j f_2(\mu_j) = \sum_j \beta_j f_{2,j}.$$

Можно использовать различные варианты квадратур (Симпсона, Ньютон-Котеса и др.). Но предпочтительней использовать квадратуру Гаусса, как это делал Чандрасекар в теории серых атмосфер (см. Пособие-1). Еще большую точность дает двойная квадратура Гаусса, когда точки деления и веса берутся не по всей сфере, а отдельно для выходящего и входящего на данной глубине излучения.

Число точек деления NMU может быть не очень большим. Опыт показывает, что выбор трех точек деления квадратуры Гаусса в каждой полусфере (выходящего и выходящего излучения) обеспечивает хорошую точность.

В тех случаях, когда берется интеграл одновременно по частотам ν и по направлениям μ , целесообразно точки по μ_i и по ν_k сгруппировать в одну последовательность с индексом *i* так, что:

$$(\mu_i, \nu_i) = (\mu_k, \nu_k), \quad i = j + (k-1)NMU,$$

 $k = 1, 2...NMF, \quad NMF = NMU * NF.$

<u>Дискретизация атомов</u>. Каждый атом представляется набором уровней разных степеней ионизации. Выбор таких уровней (модели атома) представляет серьезную пред варительную работу. Некоторые детали такого выбора уровней описаны ниже в параграфе «Реализация метода решения "ограниченной" не-ЛТР задачи».

<u>Второй шаг в решении дифференциальных уравнений</u> с использованием численных разностных методов - это заменить производные малыми приращениями. Другими словами, представить дифференциальное уравнение следующим образом:

$$\frac{dy}{dx} = \varphi(x, y) \rightarrow \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \approx \eta(x, y).$$

Здесь $\eta(x,y)$ есть некое приближенное значение функции $\varphi(x,y)$ в интервалах (x_{i-1}, x_i) и (y_{i-1}, y_i) , например, $\eta(x,y) \approx \varphi(x_{i-1}, y_{i-1})$.

Все выше перечисленные переменные в уравнениях (a-d) определяются через решение соответствующих уравнений (для каждой из глубин из числа ND):

- для нахождения *NMF* значений интенсивности надо решить *NMF* уравнений переноса излучения для всего набора частот *v*_k и направлений *µ*_j,

- для определения полного числа атомов *N_{tot}* необходимо решить уравнения гидростатического равновесия; - для нахождения температуры необходимо учесть условие лучистого равновесия;

- для нахождения электронной концентрации N_e, необходимо включить условие сохранения заряда;

- для определения населенностей уровней надо решить *N_{NL}* уравнений статистического равновесия;

- и, наконец, необходимо учесть, что N_{el}= \mathcal{E}_{el} *N_H.

Таким образом, число решаемых уравнений на одной глубине достигает значения NN=(NMF+NL+NC). Величина NC отражает число дополнительных уравнений (сохранение числа частиц, сохранение заряда и др.). В результате дискретизации система уравнений (a-d) становится разностной. Решение этой системы из-за упомянутых выше ее особенностей требует выбора специального итеративного подхода. Одним из мощных методов решения является <u>метод линеаризации</u> уравнений, другими словами, превращение нелинейной системы в линейную. Идея метода очень проста: искомые переменные представляются как сумма текущего x_0 (т.е. предварительно выбранного значения) и поправки к нему δx . Затем производится подстановка этих величин в основные уравнения, в которых нужно пренебречь величинами второго порядка малости. В результате будем иметь линейную систему уравнений, которую можно решить стандартными методами. Затем итерации повторяются до достижения необходимой точности решения. Простой пример линеаризации приведен ниже.

$$a_{1}x + a_{2}y^{2} = b_{1} \qquad x = x_{0} + \delta x$$

$$a_{3}xy + a_{4}y = b_{2} \qquad y = y_{0} + \delta y$$

$$a_{1}(x_{0} + \delta x) + a_{2}(y_{0} + \delta y)^{2} = b_{1}$$

$$a_{3}(x_{0} + \delta x)(y_{0} + \delta y) + a_{4}(y_{0} + \delta y) = b_{2}$$

$$a_{1}x_{0} + a_{1}\delta x + a_{2}y_{0}^{2} + 2a_{2}y_{0}\delta y + a_{2}\delta y^{2} = b_{1}$$

$$a_{3}x_{0}y_{0} + a_{3}x_{0}\delta y + a_{3}y_{0}\delta x + a_{3}\delta x \delta y + a_{4}y_{0} + a_{4}\delta y = b_{2}$$

$$a_{1}\delta x + 2a_{2}y_{0}\delta y = b_{1} - a_{1}x_{0} - a_{2}y_{0}^{2}$$

$$a_{3}y_{0}\delta x + (a_{3}x_{0} + a_{4})\delta y = b_{2} - a_{3}x_{0}y_{0} - a_{4}y_{0}$$

$$x_{n} = x_{n-1} + \delta x$$

$$y_{n} = y_{n-1} + \delta y$$

Для уравнений (a-d), записанных для конкретной глубины с индексом *d*, введем общее обозначение

 $f_d(\overline{\Psi}_d) = 0, \ \overline{\Psi}_d = \overline{\Psi}(T, N_e, N_{tot}, N_{el}, (N_1...N_{NL})_{el}, J_1...J_{NFM})_d.$ Как видно, размерность вектора Ψ_d равна (NL+NFM+NC)², при этом

NL – полное число уровней атомов в уравнении статистического равновесия;

NF – число частот для средней интенсивности J;

NC=4 – число уравнений, определяющих величины *T*, *N*_e, *N*_{tot}, *N*_e (см. выше).

Подставим теперь $\overline{\Psi}_d = \overline{\Psi}_d^0 + \delta \overline{\Psi}_d$. Причем величина $\delta \overline{\Psi}_d$ будет содержать все поправки: δT , $\delta N_e \, \delta N_{tot}$ и др. В общем виде линеаризованное уравнение будет выглядеть так:

$$f_d(\Psi_d^0) + \sum_i \frac{\partial f_d}{\partial \Psi_{d,i}} \partial \Psi_{d,i} = 0$$
(10).

Суммирование происходит по всем неизвестным величинам. Линеаризованный вид всех уравнений теории ЗА приведен в нашей монографии (стр.134-148). Мы для примера приведем лишь видного одного уравнения - условия лучистого равновесия. Запишем его в таком виде:

$$\int (\alpha_{v} - \sigma_{e} N_{e}) J_{v} dv = \int \varepsilon_{v} dv,$$

$$\sum_{k} \omega_{k} (\alpha_{kd} - \sigma_{e} N_{ed}) J_{kd} = \sum_{k} \omega_{k} \varepsilon_{kd}.$$
(11)

Линеаризуем его по всем переменным:

$$J_{n} = J_{n-1} + \delta J, \ \varepsilon_{n} = \varepsilon_{n-1} + \delta \varepsilon,$$

$$\alpha_{n} = \alpha_{n-1} + \delta \alpha, \ N_{e,n} = N_{e,n-1} + \delta N,$$

$$T_{n} = T_{n-1} + \delta T.$$

Тогда (11) запишется так :

$$\sum_{k} \omega_{k} (\alpha_{kd} - \sigma_{e} N_{ed}) \delta J_{kd} + \delta T_{d} \sum_{k} \omega_{k} (J_{kd} \frac{\partial \alpha_{kd}}{\partial T} - \frac{\partial \varepsilon_{kd}}{\partial T}) + \delta N_{ed} \sum_{k} \omega_{k} \left(J_{kd} \frac{\partial \alpha_{kd}}{\partial N_{e}} - \frac{\partial \varepsilon_{kd}}{\partial N_{e}} - \sigma_{e} J_{kd} \right) + \sum_{l} \delta N_{ld} \left[\omega_{k} \left(J_{kd} \frac{\partial \alpha_{kd}}{\partial N_{l}} \right) - \frac{\partial \varepsilon_{kd}}{\partial N_{l}} \right] = \sum_{k} \omega_{k} \left[\varepsilon_{kd} - (\alpha_{kd} - \sigma_{e} N_{ed}) J_{kd} \right].$$
(12)

Оказывается, что все линеаризованные уравнения можно записать в блочном тридиагональном виде (см. рис. 5):

$$-\hat{A}_d \,\delta \Psi_{d-1} + \hat{B}_d \,\delta \Psi_d - \hat{C}_d \,\delta \Psi_{d+1} = \hat{L}_d \,. \tag{13}$$

В нашем частном случае (условия лучистого равновесия) сравнением (12) и (13) можно установить, что

- \hat{L}_d содержит правую часть уравнения (12); \hat{A}_d

содержит нулевые элементы;

-
$$\hat{B}_d$$
 содержит левую часть уравнения (12);
- \hat{C}_d содержит нулевые элементы.

Достоинство такого представления основных уравнений в виде (13) заключается в том, что они могут быть решены рекурсивным способом согласно следующей схеме:

$$\begin{split} \overline{D}_d &= \left(\overline{B}_d - \overline{A}_d \overline{D}_{d-1}\right)^{-1} C_d; \quad \overline{D}_1 = \overline{B}_1^{-1} \overline{C}_1; \\ \overline{v}_d &= \left(\overline{B}_d - \overline{A}_d \overline{D}_d\right)^{-1} \left(\overline{L}_d + \overline{A}_d \overline{v}_{d-1}\right); \quad \overline{v}_1 = \overline{B}_1^{-1} \overline{L}_1; \\ \delta \overline{\Psi}_d &= \overline{D}_d \, \delta \overline{\Psi}_{d+1} + \overline{v}_d; \quad \delta \overline{\Psi}_{d+1} = 0. \end{split}$$

Заметим, что эта процедура связана с обращением матрицы. Поэтому время счета будет порядка

$$t \propto (NFM + NL + NC)^3 * ND * N_{iter}$$

Ограниченная не-ЛТР задача

Изложенная выше общая не-ЛТР задача была решена для нескольких наиболее важных случаев, например, для водородо-гелиевых атмосфер (Михалас и Ауэр). Дело в том, что водород и гелий являются самыми обильными элементами в ЗА и во многих случаях являются самыми главными агентами поглощения в ЗА. Поэтому отличие населенностей их уровней от равновесных значений будет изменять эффективность поглощения как в континууме, так и в линиях, что автоматически приведет и к изменению структуры ЗА. Другими словами, при таком подходе одновременно рассчитываются модели ЗА и их выходящий спектр.

Учет не - ЛТР эффектов в многочисленных линиях тяжелых элементов представляет весьма трудную в вычислительном отношении проблему. Поэтому эта задача решается на мощных суперкомпьютерах для очень ограниченных случаев. Но в большинстве случаев можно пойти несколько другим более простым путем:

- использовать уже готовую ЛТР модель ЗА (исследователи предпочитают модели Куруца),

- для этой модели провести не-ЛТР расчеты для тех линий в спектре, которые представляют интерес для исследователя.

Такой подход мы называем "ограниченной не-ЛТР задачей". Поскольку в этом случае модель ЗА уже зафиксирована, то при решении этой задачи нет необходимости решать уравнение гидростатического равновесия и учитывать условие лучистого равновесия. В

этой задаче сильно упрощается модель атома (она включает всего десятки уровней исследуемого элемента), существенно уменьшается число точек по частоте (включаются только разрешенные переходы с малым числом точек и излучение в континууме). Все это сильно снижает требования к вычислительным возможностям компьютеров.

Основными уравнениями теперь будут уравнение переноса излучения, записанное для всего набора частот (v_k , k=1... NF), для набора дискретных глубин (d=1...ND) и для N_{tot} уравнений статистического равновесия. Теперь вектор $\overline{\Psi}_d$ (удет содержать следующие компоненты:

$$\overline{\Psi}_d = \overline{\Psi}_d(J_1, J_2, \dots, J_{NF}; N_1, N_2, \dots, N_{NL})$$

Линеаризация уравнения переноса излучения.

Прежде всего, запишем уравнение переноса излучения в форме, предложенной Фортри. Эта форма подробно изложена в нашей монографии (стр. 59-62). Поэтому дадим лишь основные идеи.

УПИ запишем в следующей форме:

$$\mu \frac{dI_{\nu}(z,\mu)}{dz} = \alpha_{\nu} \left[-I_{\nu}(z,\mu) + \frac{\varepsilon_{\nu}}{\alpha_{\nu}} + \frac{\sigma_{e}N_{e}}{\alpha_{\nu}}J_{\nu} \right],$$
$$\mu \frac{dI_{\nu}(z,\mu)}{dz} = \alpha_{\nu} \left[S_{\nu}(z) - I_{\nu}(z,\mu) \right].$$

Следует обратить внимание, что рассеяние на электронах выделено в отдельный член.

Прежде разделим излучение на две полусферы: верхняя полусфера имеет положительные значения *+µ,* а нижняя полусфера будет иметь отрицательные значения *-µ.* Запишем УПИ для этих полусфер:

$$-\mu \frac{dI_{\nu}(\tau,-\mu)}{d\tau} = I_{\nu}(\tau,-\mu) - S_{\nu}(\tau) - выходящее излучение,$$
$$+\mu \frac{dI_{\nu}(z,+\mu)}{d\tau} = I_{\nu}(\tau,+\mu) - S_{\nu}(\tau) - входящее излучение.$$
(14)

Если ввести комбинации

$$j_{V}(\tau,\mu) = [I_{V}(\tau,\mu) + I_{V}(\tau,-\mu)]. \qquad h_{V}(\tau,\mu) = [I_{V}(\tau,\mu) - I_{V}(\tau,-\mu)]/2$$

то путем вычитания и сложения легко получить дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\mu^2 \frac{d^2 j_{\nu}(\tau, \mu)}{d\tau^2} = j_{\nu}(\tau, \mu) - S_{\nu}(\tau).$$

26

Заменяем производные на малые разности:

$$\begin{split} &\left(\frac{dX}{d\tau}\right)_{d+1/2} \approx \frac{\Delta X_{d+1/2}}{\Delta \tau_{d+1/2}} = \frac{X_{d+1} - X_d}{\tau_{d+1} - \tau_d}, \\ &\left(\frac{d^2 X}{d\tau^2}\right)_d \approx \frac{1}{\Delta \tau_d} \left[\left(\frac{dX}{d\tau}\right)_{d+1/2} - \left(\frac{dX}{d\tau}\right)_{d-1/2} \right] = \\ &\frac{X_{d-1}}{\Delta \tau_{d-1/2} \Delta \tau_d} - \frac{X_d}{\Delta \tau_d} \left(\frac{1}{\Delta \tau_{d+1/2}} + \frac{1}{\Delta \tau_{d-1/2}}\right) + \frac{X_{d+1}}{\Delta \tau_{d+1/2} \Delta \tau_d} \end{split}$$

В разностной форме УПИ будет иметь следующий вид (индекс по частоте опущен):

$$\frac{\mu_{j}^{2} j_{d-1}(\mu_{j})}{\Delta \tau_{d} \Delta \tau_{d-1/2}} - \frac{\mu_{j}^{2} j_{d}(\mu_{j})}{\Delta \tau_{d}} \left(\frac{1}{\Delta \tau_{d+1/2}} + \frac{1}{\Delta \tau_{d-1/2}} \right) + \frac{\mu_{j}^{2} j_{d+1}(\mu_{j})}{\Delta \tau_{d} \Delta \tau_{d+1/2}} = j_{d}(\mu_{j}) - \frac{\varepsilon_{d}}{\alpha_{d}} - \frac{\sigma_{e} N_{e}}{\alpha_{d}} J_{d}.$$
(15)

Если это уравнение проинтегрировать по *μ* и ввести так называемый фактор Эддингтона 1

$$f_{\mathcal{V}} = \frac{\int\limits_{0}^{1} \mu^2 j_{\mathcal{V}}(\mu) d\mu}{\int\limits_{0}^{1} j_{\mathcal{V}}(\mu) d\mu},$$

то уравнение (15) перепишется следующим образом:

$$\frac{f_d J_{d-1}}{\Delta \tau_d \Delta \tau_{d-1/2}} - \frac{f_d J_d}{\Delta \tau_d} \left(\frac{1}{\Delta \tau_{d+1/2}} + \frac{1}{\Delta \tau_{d-1/2}} \right) + \frac{f_{d+1} J_{d+1}}{\Delta \tau_d \Delta \tau_{d+1/2}} = J_d(\mu_j) - \frac{\varepsilon_d}{\alpha_d} - \frac{\sigma_e N_e}{\alpha_d} J_d.$$
(16)

Видно, что уравнение (16) опять имеет тридиагональную форму (10):

$$-\overline{A}_d\overline{J}_{d-1} + \overline{B}_d\overline{J}_d - \overline{C}_d\overline{J}_{d+1} = \overline{L}_d.$$
(17)

Вид матриц устанавливается сравнением (16) и (17). Отсылая читателя к нашей монографии для определения вида матриц (стр. 134-140 и 248), приведем лишь список переменных, по которым производится линеаризация:

- по средней интенсивности *J*;

- по коэффициентам поглощения α_ν и излучения ε_ν, а это означает - по населенностям энергетических уровней *N*.

В результате получим аналогичное (17) уравнение, но только для величин *δЈ* и со своими матрицами.

Линеаризация уравнения статистического равновесия.

Можно показать (см. Михалас), что основное уравнение (7) для выбранного энергетического уровня с обозначением "/" можно записать в следующем виде:

$$\sum_{ul}^{NK} \left(R_{lu} + N_e C_{lu}\right)\right] - \sum_{u>l}^{NK} N_u \left(\frac{N_l}{N_u}\right)^{JTP} \left(R_{ul} + N_e C_{ul}\right) = 0.$$

Здесь введено обозначение NK - номер последнего уровня, соответствующий ионизованному состоянию в модели атома. Число дискретных уровней обозначим через NL. Видно, что эту систему уравнений можно представить в матричном виде:

$$\overline{A}\overline{N} = \overline{B}.$$

Матрица А имеет размер NK*NK, а вектора N и B - размер NK. Для первых NL=NK-1 строк матрица А содержит следующие элементы (см. также рис. 7):

$$\begin{aligned} A_{lu} &= -\left(R_{ul} + N_e C_{ul}\right), \quad u < l, \\ A_{ll} &= \left[\sum_{u < l} \left(\frac{N_u}{N_l}\right)^{JTP} \left(R_{lu} + N_e C_{lu}\right) + \sum_{u > l}^{NK} \left(R_{lu} + N_e C_{lu}\right)\right], \\ A_{lu} &= -\left(\frac{N_l}{N_u}\right)^{JTP} \left(R_{ul} + N_e C_{ul}\right), \quad u > l. \end{aligned}$$

Следует отметить, что эта система уравнений является вырожденной, позволяющей определить только отношения населенностей. Чтобы замкнуть систему, надо использовать дополнительное уравнение, например, условие сохранения числа частиц данного элемента: <u>NK-1</u>

$$\sum_{i=1}^{K} N_i + N_{NK} = \varepsilon_{el} N_H.$$
(17)

Тогда в строке *NK* первые (*NK-1*) элементов матрицы *А* будут равны *A_{NK,j}=1* при j<*NK* и *A_{NK,NK}=1*.

Вектор *N* содержит в качестве первых *(NK-1)* элементов населенности уровней (*i=1...NK-1*), а в позиции *NK* содержится число атомов исследуемого элемента в следующей стадии ионизации. Вектор *B* содержит в качестве первых *(NK-1)* элементов величины

$$B_i = N_e N_{NK} \Phi(T) \Big(R_{NK,j} + N_e C_{i,NK} \Big)$$

а в позиции *NK* содержится элемент $B_{NK} = \varepsilon_{el} N_H$ (см. равенство (18). Напомним, Ф(Т) есть фактор Саха:

$$\Phi(T) = \frac{N_i^{JTP}}{N_e^2} = \frac{g_i}{g_{NK}} C_1 T^{-3/2} e^{\chi_i / kT}$$

Поскольку населенности уровней зависят от температуры *T*, электронной концентрации *N_e* и средней интенсивности *J*, то линеаризация будет такой:



Рис. 7. Матричный вид уравнения статистического равновесия.

Текущее решение уравнения статического равновесия определяется как

$$\overline{N} = \overline{A}^{-1}\overline{B}.$$

Тогда производная от N по любой переменной x будет такой:

$$\frac{\partial \overline{N}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{A}^{-1} \overline{B} \right) = \overline{A}^{-1} \left(\frac{\partial \overline{B}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{A}}{\partial x} \overline{N} \right).$$
(19)

29

На стр. 143-148 нашей монографии приведена вся процедура определения выражения (19). В результате опять получаем тридиагональную систему уравнений вида (17):

$$-\overline{A}_d\overline{J}_{d-1}+\overline{B}_d\overline{J}_d-\overline{C}_d\overline{J}_{d+1}=\overline{L}_d.$$

Метод линеаризации дает квадратичную сходимость решения. Но главное, что любая поправка к любой переменной на одной глубине обеспечивает ее влияние на все другие переменные на всех других глубинах. Поэтому эта схема гарантирует глобальную сходимость по всей ЗА. Но все же следует отметить важное замечание. Читателю следует знать, что любой метод, который предназначен для учета взаимосвязи многих переменных и основан на обращении матриц (как в описанном методе линеаризации), имеет существенный недостаток: время счета пропорционально кубу числа переменных. Для уравнения переноса время пропорционально *NF*³.

Чтобы избежать этой трудности, можно поступить следующим способом. Среди всех переменных есть такие, которые являются более значимыми и их можно включить в отдельную группу и их находить более детально. Другие менее важные переменные можно выделить в другую группу и их находить итерациями.

Интерпретация результатов не-ЛТР расчетов

Прежде всего, напомним, что не-ЛТР задача является нелинейной, сильно взаимосвязанной и глобальной по всей атмосфере. Мало того, решение этой задачи зависит от большого числа атомных данных (input physics). Как следствие этого, нельзя сформулировать какое либо однозначное правило анализа результатов. Можно лишь отметить некоторые принципиальные моменты, позволяющие сделать некоторые выводы. Нижеследующие выводы сделаны на основе идеализированной двухуровенной модели атома. Включение третьего уровня (особенно континуума) может существенно изменить выводы.

Основным результатом расчетов являются населенности уровней и вышедшее теоретическое излучение в частотах линий. Обычно населенности масштабируются по отношению к равновесным (ЛТР) населенностям

$$b_i = N_i / N_i^{\mathcal{I}TP}.$$

Однако разные авторы нормализацию этого отношения производят разным способом:

- можно отношение *b*_i нормализовать к числу атомов на нижнем уровне атома следующей степени ионизации. Другими словами, используется частная формула Саха-Больцмана для двух соседней степеней ионизации; - можно это отношение нормализовать к полному числу атомов. Другими словами, используется полная формула Саха-Больцмана с учетом всех степеней ионизации:

$$b_i = (N_i / N_i^{\Pi TP}) / (N_{tot} / N_{tot}^{\Pi TP}).$$

Мы будем использовать первый вариант.

Для анализа результатов не-ЛТР расчетов лучше всего проанализировать все скорости переходов между уровнями, что позволит определить, какие переходы являются определяющими при заселении и опустошении уровней. Но на первом этапе можно поступить и следующим образом. Основной формулой для анализа является формула для выходящего излучения:

$$I_{\nu}(\tau_{\nu}=0,\mu>0) = \int_{0}^{\infty} S_{\nu}(t_{\nu})e^{-\frac{t_{\nu}}{\mu}}\frac{dt_{\nu}}{\mu}.$$

Эта интенсивность (или поток, профиль, эквивалентная ширина) линии определяются тремя факторами:

- какова <u>шкала оптических глубин</u> *t* _v в частотах линий и где в этой шкале образуется линия (*t* _v =1);

- какое поведение функции источника S_v в области формирования линий

$$S_{\nu} = \frac{\varepsilon_{\nu}}{\alpha_l} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\frac{g_u}{g_l} \frac{N_l}{N_u} - 1}.$$

- (атомными параметрами линии).

<u>Рассмотрим роль оптической глубины.</u> Она, разумеется, определяется коэффициентом поглощения, который, в свою очередь, определятся населенностью уровня, переход с которого дает линию:

$$dt_{\nu} \sim \alpha_{\nu}^{l} \sim N_{i} \left(1 - \frac{N_{j}}{N_{i}} \frac{g_{i}}{g_{j}} \right) \sim b_{i} \left(1 - \frac{b_{j}}{b_{i}} e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right)$$

Множитель в скобках учитывает вынужденное излучение. Рассмотрим предельные случаи:

$$\frac{h\nu}{kT} >>1 \implies \alpha_{\nu}^{l} \sim b_{i}$$

$$b_{i} >1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem bon b u e$$

$$JTP - з h a u e h u s, Juhus by dem cunbhee (z ny b w e)$$

$$JTP - np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u e h m no z no u e h u s by dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi u u e h m no z no u e h u s mo s dem meh b u e$$

$$JTP = np o \phi u n s;$$

$$b_{i} <1 \implies -\kappa o \Rightarrow \phi \phi (1 - \frac{b_{i}}{b_{i}}) - s \implies u u s y c no s u s mo s me mo s me me b u e$$

Рассмотрим теперь роль функции источника в линии *I*, которую через *b*-факторы можно записать так:

$$S_{\nu}^{l} = \frac{\varepsilon_{\nu}^{l}}{\alpha_{\nu}^{l}} = \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{1}{\frac{g_{u}}{g_{l}} \frac{N_{l}}{N_{u}} - 1} = \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{1}{\frac{g_{u}}{g_{l}} \frac{b_{l}N_{l}^{LTE}}{b_{u}N_{u}^{LTE}} - 1} = \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{1}{\frac{b_{l}}{b_{u}} e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Рассмотрим также предельные случаи.

$$\frac{h\nu}{kT} <<1 \implies S_{\nu}^{l} \sim \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \left(\frac{b_{j}}{b_{i}}-1\right)^{-1} \rightarrow \textit{возможны варианты линии в поглощении или в эмиссии.}$$

Для примера рассмотрим результаты расчетов для модели атома *Ca* I для модели атмосферы с параметрами, указанными на рис. 8. Отметим два результата, следующих из этого рисунка. Во-первых, *b*- факторы всех уровней на большой глубине равны единице. Это и следовало ожидать, так как на больших глубинах выполняется условие ЛТР.



Рис. 8. Слева: b-факторы для атома Са І. Справа: профили линий Са І.

На рисунке вертикальными штрихами обозначены глубины образования избранных линий, т.е. у них $t_v=1$. На этих глубинах мы, например, для линии $\lambda 4226 A$ (переход 4s-4p) имеем, что b(4p)/b(4s)>1. Это приводит к тому, что $S_v>B_v$. А это означает, линия будет наполняться дополнительной эмиссией по сравнению с ЛТР профилем. Это отражено на рис. 6 справа.

Реализация метода решения "ограниченной" не-ЛТР задачи

Ниже мы дадим описание некоторых наиболее важных шагов такой реализации, отсылая читателя за деталями к нашей монографии (стр.261-276).

<u>Выбор модели атмосферы</u>.

Первым шагом в таком исследовании является выбор модели атмосферы, которая по своим параметрам (*Teff, logg*, химический состав) близка к параметрам исследуемой звезды. Если предполагается проведение расчетов сразу для сетки моделей атмосфер с разными параметрами, то выбирается эта сетка из опубликованных ранее моделей атмосфер.

Для горячих звезд с плоскопараллельной или протяженной атмосферой имеются не-ЛТР модели атмосфер с учетом линий, полученные И. Хубены (<u>http://tlusty.gsfc.nasa.gov</u>) по программе TLUSTY и группой немецких коллег (<u>http://www.usm.uni-vuenchen.de/people/adi/Programs /Programs. html</u>).



Рис. 9. Слева: перечень используемых программ расчета МА. Справа: диапазон параметров рассчитанных МА.

Для поздних звезд с молекулярным поглощением имеются модели программы PHOE-NIX (<u>http://phoenix.phyast.uga.edu/</u>). Наиболее используемыми моделями являются ЛТР-модели Куруца Р. (Kurucz R, <u>http://kurucz.harvard.edu/grids.html</u>), учитывающие учет поглощения в 17 млн. линий в программе. Диапазон параметров 3А для двух сеток моделей приведен на рис. 9.

Выбор модели атома.

На следующем этапе исследования необходимо создать модель атома изучаемого элемента, то есть набор включаемых энергетических уровней со всеми необходимыми для него атомарными данными. При выборе такой модели надо предварительно знать, в каких преимущественных степенях ионизации будет находиться элемент при выбранных параметрах модели атмосферы. Эти степени ионизации обязательно должны быть включены в модель атома. Отсутствие в модели атома преимущественной стадии ионизации будет грубейшей ошибкой. Дело в том, что полное число атомов исследуемого элемента фиксируется как $N_{el}=\varepsilon_{el}*N_{H}$. Если преимущественная степень ионизации в модели атома не включена, то тем самым мы число атомов в этой степени искусственно переводим на уровни включенной в модель атома степени ионизации. Из-за большой разницы в энергии ионизации обычно достаточно включение 2-3 соседних степеней ионизации.

Далее необходимо для этих степеней продумать набор энергетических уровней, для которых будет решаться уравнение статистического равновесия. Поскольку уровни имеют вырожденность, то можно все подуровни объединить в один уровень с одним суммарным статистическим весом и для него определять населенность. При необходимости в конце не-ЛТР расчетов населенность уровня можно расщепить пропорционально статистическим весам подуровней.

Иногда для более точного выполнения условия числа частиц желательно включить дополнительное число уровней, для которых уравнение статистического равновесия не решается. Для таких уровней можно считать их населенности больцмановскими. Обычно к таким уровням принадлежать уровни высоким потенциалом возбуждения.

Подбор атомарных данных.

К этой процедуре следует подходить очень тщательно, так как неточные атомарные данные могут дать совершенно искаженное представление о роли не-ЛТР эффектов в образовании линий. Для модели атома необходимо знание их потенциалов возбуждения E_i и ионизации χ_i и статистические веса g_i . Поскольку эти уровни связаны между собой радиационными переходами, то для всех этих разрешенных переходов (а также и для ударных переходов) необходимо задать силы осцилляторов. Они обычно отбираются из многочисленных справочников или баз данных после критического анализа этих данных

Для <u>*b-f*</u> переходов необходимо задать сечения фотоионизации. К сожалению, данные по многим атомам либо отсутствуют, либо не обладают достаточной точностью. Обычно в таких случаях применяют водородоподобное приближение, которое в ряде случаев плохо воспроизводит реальное поведение коэффициента поглощения *a_v* в зависимости от частоты *v* (см. рис. 10-11).



Рис. 10. Пример удовлетворительного водородоподобного приближения для двух уровней натрия.



Рис. 11. Наличие резонансов в коэффициенте поглощения не позволяет его описать водородоподобным приближением

Много необходимых сведений о вероятностях переходов и сечениях для большого ряда химических элементов приведены в следующих статьях и базах данных, созданных усилиями международных научных групп:

- "Opacity Project" (OP),
- "IRON Project (IP)",
- TOPbase (Z = 1 14, 16, 18, 20, 26; Ion = 1 24): <u>http://vizier.u-strasbg.fr</u>
- Vienna Atomic Line Data (VALD), содержит данные для элементов с Z = 1 82 и стадий ионизации I, II, III), http://www.astro.univie.ac.at/~vald.
- Kurucz R.L. 1992, CD-ROM N 18; http://cfaku5.harvard.edu
 содержит силы осцилляторов для ~50 мл данные для атомарных линий в диапазоне 100 – 100000 Å;

Разумеется, что модель атома должна включать по возможности большое число уровней. Но включение населенностей всех этих уровней в процедуру линеаризации существенно увеличит время счета и даже вызовет некоторые вычислительные проблемы (например, деление на ноль). Поэтому целесообразно, как было сказано выше, для верхних уровней считать населенности в ЛТР приближении, исключив их из процедуры линеаризации.

Расчет радиативных скоростей.

Формулы для расчета этих скоростей были даны выше, и их расчет в виде квадратуры не представляет большой трудности, если выбрано правильное число точек по частоте для численного интегрирования. Во-первых, для каждого из всех <u>b-b</u> переходов надо определить разумное число точек NF(t) по профилю каждой линии. Недостаточное число точек приведет к неточности в квадратуре. Излишнее число точек просто приведет к увеличению времени счета. Априори установить эту величину трудно, поскольку каждая линия имеет свою ширину. Поэтому разумно произвести предварительный расчет ширин линий (можно даже в ЛТР), который позволит определить NF(t). Опыт показывает, что для сильных линий достаточно положить NF(t)=15-20, а для слабых линий достаточно и NF(t)=8-12.

Выбор числа точек по частоте для <u>b-f</u> - переходов определяется предельной частотой ионизации данного уровня и наличием скачков в суммарном по всем химическим элементам коэффициенте непрерывного поглощения.

Необходимые данные о сечениях фотоионизации можно найти в приведенных выше базах данных. Но следует отметить, что точность не всегда удовлетворительна (см. табл. 1).

Расчет ударных скоростей.

Мы уже отметили выше, что столкновения с электронами более эффективны, чем столкновения с более тяжелыми частицами. Столкновения с атомами водорода, скорости которых в 43 раза меньше, начинают играть значительную роль при низких температурах, когда степень ионизации атомов низка и падает электронная концентрация, либо в звездах с дефицитом металлов – основных поставщиков электронов.

Удобно эффективность ударных процессов вычислять с помощью "эффективной силы удара", представленной в виде

$$Y_{ij} = \int_{0}^{\infty} \Omega_{ij} \exp\left(-E/kT\right) \cdot d\left(E/kT\right).$$
(20)

HI							
He I	He II						
CI	C II	CIII	CIV				
NI	NII	NIII	NIV	NV	N VI		
οι	0 11	0 111	O IV	0 V	O VI		
FI	<u>FII</u>	<u>FIII</u>	<u>FIV</u>	<u>F V</u>	FVI		
Ne I	<u>Ne II</u>	<u>Ne III</u>	Ne IV	Ne V	Ne VI		
Na I	<u>Na II</u>	Na III	Na IV	<u>Na V</u>	Na VI		
MgI	MgII	Mg III	MgIV	Mg V	<u>Mg VI</u>		
AII	AIII	AIIII	ALIV	AI V	AI VI		
5i I	Si II	Si III	Si IV	Si V	Si VI		
PI	PII	<u>PIII</u>	<u>PIV</u>	PV	P VI		
SI	S II	<u>5 III</u>	<u>5 IV</u>	s v	S VI	S VII	
<u>C I</u>	<u> (] 11</u>	<u>CI III</u>	CIIV	<u>CI V</u>	<u>C[VI</u>		
ArI	ArII	ArIII	<u>Ar VI</u>	Ar V	Ar VI	Ar VII	Ar VII
ΚI	K II	K III	KIV	KV	K VI		
Ca I	Ca II	Ca III	Ca IV	Ca V	Ca VI		
TiI	Ti II	Ti III	<u>Ti IV</u>	Ti V			
VI	VII	VIII	VIV	٧¥			
CrI	Cr II	Cr III	Cr IV	<u>Cr V</u>	Cr VI		
Mn I	<u>Mn</u> II	Mn III	Mn IV	<u>Mn</u> V	Mn VI		
FeI	Fe II	Fe III	Fe IV	Fe V	Fe VI	Fe VII	Fe VIII
Co I	Co II	Co III	<u>Co IV</u>	Co V	Co VI	Co VII	
NiI	Ni II	Ni III	Ni IV	Ni V	Ni VI	Ni VII	Ni VIII
CuI	CuII	<u>Cu III</u>	Cu IV	Cu V	Cu VI		
Zn I	ZnII	Zn III					

Табл. ¹ Точность определения параметров для радиационных переходов (в соответствии с указанным шрифтом): *С* II – отличная, *Не II* – хорошая, <u>*F III*</u> – посредственная, V II - плохая.

Здесь *E* – энергия налетающего электрона, а Ω_{ij} – сила столкновительного перехода в свою очередь, связанная с сечением процесса

$$\Omega_{ij} = \sigma_{ij} g_i E^2 / \pi a_0^2.$$

Коэффициент скорости C_{ij} связан с эффективной силой соотношением

$$i \rightarrow j \quad C_{ij} = N_e \, \frac{8.631^* \, 10^{-6}}{T^{1/2}} \frac{\Omega_{ij}}{g_i}, \quad \left(\Omega_{ij} - c u \pi a \, y \partial a p \sigma b\right)$$

Обозначения в этой формуле такие:

,

для запрещенных переходов $\Omega_{ij} \approx 1$,

для разрешенных переходов

$$\Omega_{ij} \approx 1.6 * 10^6 \frac{g_i}{g_j} f_{ij} \lambda_{ij} \Gamma\left(\frac{E_{ij}}{kT}\right), \ \Gamma\left(\frac{E_{ij}}{kT}\right) = \max\left(\overline{g}, 0.276 * e^{\frac{E_{ij}}{kT}} E_1\left(\frac{E_{ij}}{kT}\right)\right)$$
38

 $\overline{g} = 0.7$ для переходов $nl \rightarrow nl'$. $\overline{g} = 0.3$ для переходов $nl \rightarrow n'l'$.

Здесь *E_{ij}* есть разность энергий возбуждения уровней, а *E*₁ - интегрально-показательная функция первого порядка (см. Пособие 1)

<u>Для ударного девозбуждения</u> справедливо выражение (4). Поэтому

$$C_{ji} = C_{ij} \frac{g_i}{g_{ij}} e^{E_0/kT}.$$
 (21)

<u>Для ударной ионизации</u> общая формула имеет такой же вид как и (20), только под интегралом будет стоять сечение о_{ік}- сечение ударной ионизации. Часто используемая формула Ситона для этого процесса такова:

$$C_{ik} = N_e \frac{1.55*10^{13}}{T^{1/2}} \bar{g} a_{ik}^{\phi omouoh} (v_{ik}) \frac{e^{-E_i/kT}}{E_i/kT},$$

$$\bar{g} = 0.1 \quad \partial \pi \text{ ионов } c \quad Z = 1,$$

$$\bar{g} = 0.2 \quad \partial \pi \text{ ионов } c \quad Z = 2,$$

$$\bar{g} = 0.3 \quad \partial \pi \text{ ионов } c \quad Z = 3.$$

Для ударной рекомбинации используется соотношение, аналогичное (4):

$$\frac{C_{ik}}{C_{ki}} = \frac{2u_k}{u_i} \frac{(2\pi m kT)^{3/2}}{h^3} e^{-E_0/kT}$$

Если для горячих звезд учет столкновений только с электронами вполне оправдан, то для атмосфер холодных звезд соударения с водородом начинают играть доминирующую роль. Однако, надежные теоретические и экспериментальные результаты в этой области весьма скудные. По этой причине приходится использовать различные приближенные формулы. Обычно в расчетах применяют формулу следующего вида

$$C_{ij} = 16\pi a_0^2 \left(\frac{2kT}{\pi\mu}\right)^{1/2} \left(\frac{I_H}{E_j - E_i}\right) f_{ij} \frac{m_A}{m_H} \eta \left(1 + \frac{2}{w}\right) \frac{e^{-w}}{1 + \left(\frac{2\eta}{w}\right)^2} k_h,$$
$$\mu = \frac{m_A m_H}{m_A + m_H}, \quad w = \frac{E_j - E_i}{kT}, \quad \eta = \frac{m_e}{m_H + m_e}.$$

Здесь *m_A, m_H, m_e* – массы рассматриваемого атома, атома водорода и электрона соответственно. Величина *k_h* является поправочным множителем, который может меняться в пределах 1.0-0.01. Для пользователей будет полезны коллекции расчетов ударных сечений по проектам ADAS (http://www.adas.ac.uk/man/appxa-02.pdf), AMODS (http://amods.kaeri.re.kr) и NIST (http://physics.nist.gov/ PhysRefData/Ionization/intro.html).

Некоторые примеры применения

<u>«общего» и «ограниченного» не-ЛТР подхода.</u>

К настоящему времени создано несколько компьютерных кодов для решения не-ЛТР задачи. Из них несколько программ решают полную задачу – расчет моделей атмосфер и выходящего спектра:

NCAR code – первая программа, созданная Михаласом и Ауэром в Центре Атмосферных Исследований в Колорадо. Основана на методе полной линеаризации. Из-за компьютерных ограничений число дискретных точек было не очень большим: *NL=15, NF=120*. Программа была применена для расчета водородо-гелиевых атмосфер горячих звезд.

TMAP - (Tubingen Model Atmosphere Package). Уравнение переноса решается методом лямбда-итераций, остальные уравнения – методом полной линеаризации. Учтен покровной эффект.

TLUSTY (авт. Hubeny I.) – Во многом аналогична предыдущей программе.

РНОЕNIX (авт. Hauschildt P. H. И др.(ФРГ)) - рассчитывает модели атмосфер (в основном, поздних звезд) с учетом большого количества линий и химических элементов. Включены около 2000 источников непрерывного поглощения и более 55 млн., для которых учтены не-ЛТР отклонения.

Остальные программы решают ограниченную не-ЛТР задачу для уже фиксированной модели атмосферы (см. табл. 2).

	Автор	Число уровней NK	Число линий в усло- вии лучистого погло- щения	Агенты непрерыв- ного поглощения
	Giddings			
DETAIL	(Англия)	~20	500 000 000	H, He, CNO металлы, молекулы
Kiel code	Steenbock W. Holweger Η.(ΦΡΓ)	~20	500 000 000	H, He, CNO металлы, молекулы
MULTI	Carlsson M.(Швеция)	~20	500 000 000	H, He, CNO металлы, молекулы

NONLTE3	Сахибуллин Н. (Россия)	~20	500 000 000	H, He, CNO металлы, молекулы

Табл.	2	Программы решения полной	и ограниченной не-ЛТР задач.
-------	---	--------------------------	------------------------------

Дадим краткий обзор некоторых результатов не-ЛТР исследований казанских астрофизиков. Перечень исследованных химических элементов, проведенных казанскими астрофизиками дан в табл. 3.

Эффект сверхионизации.

При ЛТР исследованиях F звезд обнаружился следующий факт: содержание железа, определенное линиям Fe I, оказалось меньше содержания, определенного по линиям Fell. На основе не-ЛТР анализа было установлено, что в атмосферах таких звезд происходит избыточная ионизация (сверхионизация) (рис.12).





Рис. 12. Эффект "сверхионизации" в атмосферах F - звезд.

Физическое объяснение этому эффекту такое. Дело в том, что непрерывное излучение в ультрафиолетовой области спектра оказывается выше планковского излучения. т.е. $J_v > B_v(T)$. Это приводит к дополнительной ионизации с нижних уровней *Fe I*. Населенности этих уровней становятся меньше ($b_i < 1$). Соответственно уменьшается интенсивность излучения в линиях. С учетом описанного механизма проблема несоответствия в содержании была решена.

Подобный эффект имеет место и для звезд, бедных металлами. Только в этом случае неравенство *J_v* > *B_v*(*T*) обусловлено тем, что из-за малого содержания тяжелых элементов поглощение в непрерывном спектре ослабляется.

<u>Эффект «сверхрекомбинации».</u>

При ЛТР исследованиях *F*-сверхгигантов был установлен следующий факт: с ростом светимости содержание натрия также растет. Не-ЛТР исследования показали, что для атома *Na I* имеет место избыточная рекомбинация на его уровни. Это приводит к усилению спектральных линий поглощения и уменьшению содержания натрия. Поправка к содержанию достигает величины - 0.7 *dex*. Надо отметить, что различие между механизмами для *Fe I* и *Na I* вызвано просто различными свойствами атомов- сильным различием в сечениях фотоионизации (см. табл. 4).

Атом	Предел	a _{λ0} cm ²
	ионизации λ_0	
Fe I (a⁵D)	1569 A	4.06 * 10-18
Na I (3s ¹ S)	2415 A	0.09 * 10-18
K I (4s ¹ S)	2860 A	0.01 * 10-18

Табл. 4. Сечения фотоионизации для некоторых переходов.

Механизм образования калия в ЗА.

Подобный эффект сверхрекомбинации имеется и для атома калия. Его сечение фотоионизации с основного уровня еще меньше: он в 400 раз меньше, чем у железа (см табл. 4). Этот эффект приводит не только к поправке к содержанию калия, определенного ЛТР методом, величиной в до -0. 60 *dex*, но и к установлению механизма образования калия при термоядерных реакциях.

До недавнего времени были предложены два альтернативных механизма такого образования калия: путем взрывного или статичного горения кислорода при вспышках Сверхновых Nell. Но ЛТР исследования не позволяют сделать выбор в пользу между гипотезами (см. рис. 13). Однако не-ЛТР подход (см рис. 13) дает однозначный ответ в пользу гипотезы взрывного характера происхождения калия.



Рис. 13. Сравнение ЛТР и не-ЛТР результатов с прогнозами двух механизмов образования калия:

- сплошная линия - прогноз теории взрывного происхождения калия;

 - штриховая линия - прогноз теории статичного происхождения калия

Линии эмиссии в спектрах звезд горячих карликов.

В спектрах 0 и ранних В-звезд обнаружилась на первый взгляд интересная особенность. Покажем это на примере линий углерода *СШ*. Было установлено, что в спектрах *O* - звезд наблюдается эмиссионная линия *СШ* λ9720 А. Этот факт было трудно объяснить, потому что, во-первых, эти звезды являлись карликами, а не гигантами с протяженными атмосферами, и, во-вторых, последующая по каскадному переходу линия *СШ*λ4650 А наблюдалась в поглощении (см. рис. 14). Многие объяснения этого эффект были несостоятельными. Казанскими астрофизиками было показано, что этот эффект является результатом не-ЛТР эффектов.



Рис. 14. Модель атома С III. Линия λ9720 А, показывающая эмиссию, отображена жирной стрелкой. Линия λ4650 А, показывающая поглощение, показана жирной пунктирной стрелкой.

Предел ионизации *СШ* находится на длине волны λ 259 А. В этой ультрафиолетовой области поток непрерывного излучения для O - B звезд сильно меняется при изменении температуры. Поэтому у O - звезд происходит ионизация *С Ш* с нижних уровней с последующей рекомбинацией на верхние уровни. Это создает предпосылки для эмиссии в линиях, в частности в линии λ 9720 А. Линия λ 4650 А будет в поглощении из-за конкурирующих переходов с уровня *Зр*. У В-звезд из-за меньшего потока излучения в далекой ультрафиолетовой области предпочтительно происходит ионизация с верхних уровней с последующей рекомбинацией на более нижние уровни. Это уже не способствует образованию эмиссии.

<u>Заключение</u>

В заключение разумно для молодых исследователей привести следующее соображение. В 2013 году скончался известный американский астрофизик Дмитрий Михалас, основатель не - ЛТР подхода в теории звездных атмосфер. С ним связана одна очень поучительная история. Когда он был аспирантом в 1960-е годы в Принстонском университете, в его комнату зашел Лайман Спицер (известный астрофизик мирового уровня) и спросил: «Чем Вы занимаетесь, молодой человек?». Когда Михалас ответил, что он моделирует в ЛТР звездные атмосферы, мгновенная реакция Спитцера была такой: «Это совершенно бесперспективное дело, так как масса атмосферы составляет ничтожную часть массы звезды!». К счастью для науки Михалас не последовал этому совету и в итоге создал сетку очень важных ЛТР моделей.

Чуть позднее к нему зашел другой известный астрофизик Ричард Томас (один из основателей теории образования солнечной короны) с тем же вопросом. После ответа Михаласа, Томас в своей обычной экспрессивной манере воскликнул: « Это совершенно бесперспективное дело, так как в теории звездных атмосферах главным является учет не-ЛТР эффектов!» К счастью для науки Михалас прислушался к этой идее и впоследствии создал новое направление в астрофизике, учитывающие большую роль неравновесных явлений.

Резюме из вышесказанного: «Чтобы оценить чужой авторитет, необходимо иметь собственный!» Поле деятельности в теории звездных атмосфер весьма широко для этого!