Astronomický ústav AV ČR Ondřejov

SFÉRICKY SYMETRICKÉ MODELY HVĚZDNÝCH ATMOSFÉR

Kandidátská disertační práce

RNDr. Jiří Kubát

Školitel: RNDr. Petr Heinzel, CSc.

Práce byla dokončena v srpnu 1993

Abstrakt

Tato práce se zabývá modelováním statických sféricky symetrických modelů hvězdných atmosfér v hydrostatické, zářivé a statistické rovnováze. Základem předkládané metody konstrukce modelů atmosfér je metoda perturbace lambda operátoru, známá v numerické matematice spíš jako metoda rozdělení operátoru (operator splitting). Pomocí této metody, která dosud nebyla pro konstrukci statických sféricky symetrických modelů atmosfér použita, lze podstatně snížit počet rovnic, které je nutno současně řešit. Práce předkládá dvě metody pro výpočet modelu atmosféry. První metoda využívá Newtonovu-Raphsonovu metodu (známou v astrofyzice spíš jako linearizaci), druhá počítá model atmosféry po hloubkách metodou prediktor-korektor. Obě metody lze úspěšně kombinovat. Veškeré výpočty jsou prováděny vlastním programem ATA, jehož stručný popis je uveden. Jsou provedeny numerické testy rychlosti konvergence a uvedeny výsledky výpočtů vybraných modelů atmosfér včetně porovnání s dříve publikovanými modely spočtenými jinými metodami.

Kapitola 1

Úvod

Hvězdná atmosféra je oblast obklopující hvězdu, z níž může záření volně unikat do okolního prostoru. Jelikož jediným zdrojem informace o hvězdě je záření a to je pochopitelně ovlivněno prostředím, z něhož vychází, je i veškerá další informace o hvězdě ovlivněna ději ve hvězdné atmosféře. Z toho vyplývá nutnost podrobného pochopení fyzikálních procesů probíhajících v atmosféře.

Strukturou atmosféry budeme nadále rozumět prostorovou závislost makroskopických fyzikálních veličin (např. teploty, hustoty, chemického složení, atd.). Pokud bychom ji znali, nebylo by spočtení vystupujícího záření v principu nijak složité. Jednalo by se pouze o řešení rovnice přenosu záření při zadané opacitě a emisivitě. Potíž je však v tom, že strukturu atmosféry předem neznáme. Složitost problému je dána do značné míry tím, že záření, které nám dává informace o atmosféře, nezanedbatelně ovlivňuje strukturu samotné atmosféry. Strukturu atmosféry je tedy nutné určovat současně s řešením rovnice přenosu záření.

Určení struktury atmosféry je značně nesnadný problém. Proto k jeho řešení používáme modelování. Modelem atmosféry budeme rozumět její strukturu určenou za jistých zjednodušujících nebo omezujících předpokladů. Model atmosféry se od skutečné atmosféry bude lišit. Naše úspěšnost v interpretaci spekter hvězd bude tedy záviset na tom, jak se nám podaří přiblížit se ke skutečnosti.

Zde vystupuje nápadně do popředí nutnost podrobných výpočtů, s jejichž pomocí můžeme zjistit a ověřit mnohé nečekané efekty nebo zpochybnit často přijímané závěry. Jako příklad nám může sloužit řada pionýrských prací Auera a Mihalase (Auer a Mihalas, 1969a, b, c; 1970b; 1972; Mihalas a Auer 1970a, b) o NLTE modelech planparalelních atmosfér. V těchto pracích autoři podrobně propočítali základní efekty, které se objeví při opuštění předpokladu LTE. Jiným příkladem je existence emisních křídel u čáry H_α za předpokladu NLTE planparalelní atmosféry v hydrostatické a zářivé rovnováze (Hubený a Leitherer, 1989). Tento jev býval považován pouze za důsledek existence rozsáhlé rotující obálky.

Výše uvedené příklady si kladly za cíl podtrhnout nutnost podrobných výpočtů konzistentních modelů. Statická sféricky symetrická atmosféra je prvním krokem k takovémuto modelu.

Konstrukce modelu atmosféry znamená vlastně určení prostorové závislosti vybraných fyzikálních veličin. Jejich vzájemné vztahy jsou popsány řadou rovnic, jejichž počet a složitost závisí na míře zjednodušení či zobecnění studovaného problému.

1.1 Základní předpoklady v modelování statických atmosfér

Během posledních třiceti let zaznamenal vývoj modelů atmosfér značný pokrok. Zpočátku se výzkum soustředil na konstrukci planparalelních modelů v hydrostatické (HE), zářivé (RE) a lokální termodynamické (LTE) rovnováze. V uvedeném případě uvažujeme rovnici hydrostatické rovnováhy, rovnici zářivé rovnováhy a rovnici přenosu záření. Všechny uvedené předpoklady (HE, RE a LTE) nejsou samozřejmě splnitelé v celé atmosféře. Předpoklad hydrostatické rovnováhy vylučuje jakéchkoli makroskopické pohyby v atmosféře. Uvolníme-li tento předpoklad, přejdeme od rovnice hydrostatické rovnováhy k hydrodynamické pohybové rovnici. Podobně předpoklad zářivé rovnováhy nepřipouští přeměnu celkové zářivé energie na jiné druhy energie a naopak. Opustíme-li tento předpoklad, musíme zahrnout do výpočtů i zářivé ztráty v atmosféře. Nejčastěji je opouštěn předpoklad lokální termodynamické rovnováhy a je nahrazován předpokladem statistické rovnováhy, jemuž se v astrofyzice běžně, ale nepřesně říká NLTE nebo non-LTE. Pěkný rozbor pojmů LTE a NLTE vypracoval Hubený (1976). Astrofyzikální NLTE nadále předpokládá rovnovážné rozdělení rychlostí částic. Výpočetně je toto zobecnění značně náročné, neboť obsazení energetických hladin atomů je nyní ovlivněno nejen teplotou a hustotou, ale i zářením a je nutné řešit soustavu rovnic statistické rovnováhy současně s rovnicí přenosu záření.

Posledním předpokladem (avšak ne co do významu) je planparalelnost atmosféry. Tento předpoklad znamená, že výška atmosféry je zanedbatelná vzhledem k poloměru hvězdy. Tento předpoklad je u velkého množství hvězdných atmosfér splněn. Je dobře použitelný i v jiných případech, například sluneční protuberance nebo akreční disky lze v prvním přiblížení považovat za planparalelní atmosféry. Avšak existuje nezanedbatelný počet hvězd, jejichž atmosféra má výšku srovnatelnou s poloměrem hvězdy. V tomto případě už nemůžeme předpokládat planparalelnost a musíme vzít v úvahu obecnější geometrii. Nejjednodušším zobecněním je předpoklad sféricky symetrické atmosféry. Ačkoli se jedná o trojrozměrný model, předpoklad středové symetrie způsobí, že můžeme stejně jako v planparalelním případě řešit jednorozměrný problém. Pochopitelně je možné geometrii atmosféry dále zobecňovat a uvažovat odchylky od symetrie způsobené aktivitou hvězd, o níž lze jen velmi těžko předpokládat, že bude zachovávat sférickou symetrii.

1.2 Stručný přehled metod modelování statických hvězdných atmosfér

1.2.1 Planparalelní atmosféry za předpokladu NLTE

Existuje značné množství metod modelování planparalelních LTE atmosfér. Přehled nejvýznamnějších metod uvádí Mihalas (1978) v kapitole 7. V této práci se jimi nebudeme zabývat a případné zájemce odkazujeme na výše citovanou knihu.

Velkým krokem kupředu v teorii hvězdných atmosfér se stala metoda úplné linearizace Auera a Mihalase (1969c). Je to vlastně vícerozměrná Newtonova-Raphsonova metoda. Ve spojení s metodou proměnných Eddingtonových faktorů (Auer a Mihalas, 1970a) se stala základem řady programů pro výpočet modelů planparalelních atmosfér (Mihalas, 1972; Mihalas *et al.*, 1975, Kudritzki, 1973, 1976; Heinzel *et al.*, 1987; Hubený, 1981, 1988). Metoda úplné linearizace přes řadu úspěchů je při výpočtech paměťově i časově značně náročná. Proto se zhruba před deseti lety začaly hledat i jiné metody pro sestrojení NLTE modelů atmosfér.

Význačné místo dnes zaujímá metoda perturbace operátoru (Cannon, 1973a, b) známá v numerické matematice jako "operator splitting". Základní rozdíl oproti metodě úplné linearizace je v zahrnutí rovnice přenosu záření. Metoda úplné linearizace zahrnuje rovnici přenosu přímo do linearizace a pole záření je explicitní součástí řešení. V důsledku to přináší velký počet rovnic v kroku linearizace. Metoda perturbace operátoru zahrnuje rovnici přenosu přibližně. Pole záření se vyjádří zjednodušenou závislostí na fyzikálních parametrech, zpravidla lokálních. Tím vypadne pole záření z linearizace a počet rovnic se prudce sníží. Pak je ale nutné určit chybu, jíž jsme se dopustili v určení pole záření a s opravenou hodnotou postup opakovat, a to několikrát až do uspokojivé konvergence. Tento postup vyvinul Werner (1987a, b) a v současné době nachází řadu aplikací v modelování konkrétních hvězd (částečný přehled viz Werner a Heber, 1991).

Jiný úspěšný přístup je postup Andersona (1985, 1987), který detailní frekvenční spektrum pole záření nahradí množinou obecně nesouvislých frekvenčních bloků a řeší linearizaci pro tento menší počet proměnných.

1.2.2 Přenos záření ve sférické geometrii

Téměř až do konce šedesátých let se astrofyzikové soustředili převážně na řešení rovnice přenosu záření v rovinné geometrii. Pro značnou řadu případů je přiblížení rovinné geometrie vhodné. Proto práce o přenosu záření ve sférické geometrii byly spíše ojedinělé a vycházely z omezených výpočetních možností své doby (Taylor, 1927; McCrea, 1928; Chandrasekhar, 1934; Kosirev, 1934) a nepostihovaly jeden význačný čistě geometrický rys záření ve sférické geometrii – tzv. směrování záření (forward peaking). Na tento jev upozornil Chapman (1966). Pro rozsáhlé atmosféry je totiž ve vnějších vrstvách téměř všechno záření soustředěno do úzkého kužele kolem úhlu $\theta = 0$, takže pro momenty intenzity záření platí $J_\nu \approx H_\nu \approx K_\nu$ a Eddingtonův faktor[1] $f_\nu \approx 1$. Každá metoda řešící rovnici přenosu záření ve sférické geometrii musí být schopna tento efekt postihnout.

K řešení rovnice přenosu záření ve sférické geometrii ve statickém případě existuje řada metod, ne všechny jsou však hojně užívané. Nejrozšířenější a nejúspěšnější v modelování atmosfér jsou v současné době paprskové metody, ať už diferenciální, které rozebereme blíže v kapitole 2.1.1, nebo integrální (Schmid-Burgk, 1975; Schmid-Burgk a Scholz, 1984). Paprskové metody byly použity ke konstrukcím řady modelů atmosfér. Nadějná je polomomentová metoda (half-range moment method), kterou formulovali Rogers (1981) a Martin *et al.* (1984). Pro úplnost se zmiňme ještě o momentové metodě (metodě sférických harmonik) (Sen, 1949; Krook, 1955; Flannery *et al.* 1980) a o metodě diskrétních souřadnic (Schmidt a Wehrse, 1987; Peraiah, 1987), které však nebyly dosud úspěšně použity pro modelování atmosfér.

[1]Momenty intenzity záření a Eddingtonův faktor jsou zavedeny v kapitole 2.1.1

1.2.3 Modelování sférických atmosfér

Na možnost existence rozsáhlých atmosfér u některých hvězd upozornil Kosirev (1934). Studium rozsáhlých atmosfér se od té doby rozdělilo na dva směry. První směr studuje fotosféry a druhý expandující obálky. Teprve nedávno se objevily první pokusy o spojení obou směrů při konstrukci "unifikovaných" modelů atmosfér (Gabler *et al.*, 1989).

V této práci se budeme zabývat výhradně prvním směrem (fotosféry) a druhý odložíme na pozdější dobu.

První sférické LTE modely centrálních hvězd planetárních mlhovin spočetl Cassinelli (1971) pomocí diskrétní S_N metody (Carlson, 1963). Castor (1974) spočetl LTE modely horkých hvězd metodou iterace poměrů κ_F/κ_R, κ_J/κ_P (jedná se o příslušné střední opacity) a Eddingtonových faktorů. Integrální metodu pro řešení LTE modelů atmosfér vyvinuli Hundt *et al.* (1975) a poté s ní řada autorů počítala LTE modely chladných hvězd. Přehled těchto prací viz Bennett (1991). Tuto metodu využívající integrální tvar rovnice přenosu zobecnili pro případ NLTE Höflich a Wehrse (1987) a Höflich *et al.* (1987). Jejich modely nejsou ale plně konzistentní, protože jsou výsledkem "nalepení" sféricky symetrické obálky na fotosféru. Touto metodou spočítal Höflich (1988) několik modelů obálek Be hvězd.

Nejúspěšnější byla pro řešení NLTE modelů atmosfér metoda úplné linearizace Auera a Mihalase (1969c). Tuto metodu zobecnili pro případ sférické geometrie (za předpokladu sféricky symetrické atmosféry) Mihalas a Hummer (1974). Touto metodou spočítali řadu statických modelů Kunasz *et al.* (1975) a s nepatrnými změnami metody Gruschinske a Kudritzki (1979).

1.2.4 Modelování expandujících obálek ve sférické geometrii

Přesto, že se tato práce zabývá statickými atmosférami, uvedeme zde stručný přehled již dosažených výsledků v modelování expandujících obálek.

Přenos záření ve sférické geometrii v pohybujícím se prostředí je velmi složitý problém. Vlivem makroskopických pohybů dochází k Dopplerovu posuvu spektrálních čar, což má za následek, že i pouhé formální řešení rovnice přenosu záření se stává při praktických výpočtech velmi zdlouhavé.

Problém přenosu záření v pohybujícím se prostředí lze v zásadě studovat ve dvou základních souřadných systémech, a to v inerciálním systému pozorovatele (observer frame) nebo v klidovém souřadném systému pohybující se hmoty (comoving frame - CMF). Rozbor výhod a nevýhod obou souřadných systémů lze najít v práci Mihalase a Kunasze (1986). Instruktivní je také práce Rybickiho (1970).

Základní prací formulující řešení rovnice přenosu záření ve sférické geometrii v inerciálním souřadném systému pozorovatele se započtením rychlostí je práce Kunasze a Hummera (1974b). Pro řešení NLTE problémů (konzistentní určení obsazení energetických hladin a pole záření) se tento postup nevyužívá. Hlavním důvodem je značná početní náročnost. Nachází však uplatnění pro formální řešení rovnice přenosu záření (Mihalas, 1979, 1980c, Mihalas a Kunasz, 1986).

Řešit rovnici přenosu záření v čarách pomocí CMF navrhli poprvé McCrea a Mitra (1936). Tento postup lze ale jednoduše použít jen pro rychlosti monotónně závislé na radiální vzdálenosti. Podstatným krokem kupředu k praktickým aplikacím byla řada prací Mihalase, Kunasze a Hummera, kteří systematicky studovali přenos záření a řešení NLTE problému v pohybujícím se prostředí v CMF a postupně uvažovali: řešení ekvivalentního dvouhladinového atomu (Mihalas *et al.*, 1975), tzv. “picket fence model” (Mihalas *et al.*, 1976a), vliv členů řádu v/c na řešení rovnice přenosu záření (Mihalas *et al.*, 1976b), frekvenčně závislou vydatnost (Mihalas *et al.*, 1976c), řešení vícehladinového atomu (Mihalas a Kunasz, 1978) a úhlově závislou parciální redistribuci (Mihalas, 1980b).

Pokud přejdeme k vyšším rychlostem, pro něž je tepelná rychlost částic mnohem menší než rychlost expanze, můžeme použít tzv. Sobolevovu aproximaci (Sobolev, 1947). Je to prosté využití faktu, že fotony vyzářené v dané hloubce v čáře už nemohou být touto čárou opět zachyceny jako ve statickém případě, ale unikají stejně jako fotony vyzářené v kontinuu. Sobolevovu metodu dále rozvíjeli Castor (1970), Lucy (1971) a Rybicki a Hummer (1978). Hamann (1981) studoval systematické chyby způsobené Sobolevovou aproximací. Hummer a Rybicki (1985) a Puls a Hummer (1988) zahrnuli do výpočtu Sobolevovou metodou i opacitu v kontinuu a nedávno Sellmaier *et al.* (1993) zavedli tzv. Sobolevovu aproximaci 2.řádu.

Pro ještě vyšší rychlosti je nutné uvažovat relativistické efekty. Touto problematikou se zabývali Castor (1972), Mihalas (1980a, 1981), Mihalas a Klein (1982), Thorne *et al.* (1981) a v poslední době Nobili *et al.* (1991, 1993) a Hauschildt (1992).

V přenosu záření ve sférických expandujících atmosférách hraje velkou roli tzv. hvězdný vítr řízený zářením (radiatively-driven stellar wind). Základy jeho teorie položili Lucy a Solomon (1970) a Castor *et al.* (1975). Podrobnosti lze najít ve vynikající přehledové práci Lucyho (1986). Metodu určení síly vzniklé tlakem záření publikovali Pauldrach *et al.* (1986), Kudritzki *et al.* (1987) a Puls (1987). Velmi podrobný výpočet zahrnující řešení NLTE problému pro 4000 energetických hladin 26 prvků provedl touto metodou Pauldrach (1987).

V poslední době se pro řešení NLTE problému v expandujících atmosférách používají i přibližné lambda operátory. Systematicky se této problematice věnuje Hamann, který nejprve řešil NLTE problém (Hamann, 1985, 1986, 1987), poté Hamann a Wessolowski (1990) a Hamann *et al.* (1991) zahrnuli do výpočtu i korekce teplot pomocí rovnice zářivé rovnováhy. Jiný přístup pomocí tzv. přibližného Newtonova-Raphsonova operátoru zvolili pro řešení NLTE problému

Hempe a Schönberg (1986) a Schönberg a Hempe (1986). Jejich metodu pro zahrnutí rovnice zářivé rovnováhy zobecnil Hillier (1990). Puls (1991) zavedl přibližný lambda operátor využívající i Sobolevovy aproximace. Tento operátor použili pro řešení NLTE problému Sellmaier *et al.* (1993).

Přenos záření v pohybujících se sférických atmosférách je natolik složitý problém, že dosud nikdo (pokud je autorovi známo) nezpracoval metodu současného určení závislosti teploty, hustoty a rychlosti na radiální vzdálenosti pro NLTE atmosféru. Všechny dosud publikované metody předpokládaly předem zadaný chod alespoň dvou výše uvedených veličin.

Vyvrcholením snah o co nejvěrnější popis rozsáhlých atmosfér jsou pokusy o konstrukci sjednocených (unified) modelů atmosfér (Gabler *et al.*, 1989, 1991, 1992; Sellmaier *et al.*, 1993). Jedná se o důmyslné výpočty, kde hustotu a rychlost expanze určují pomocí programu pro pohybující se atmosféry (Pauldrach *et al.*, 1986) při zadané teplotní struktuře a teplotní strukturu určují pomocí upraveného programu Gruschinskeho a Kudritzkeho (1979). Formální řešení rovnice přenosu záření provádějí konzistentně pro pohybující se atmosféru. Je otázkou, zda takto propojené výpočty dávají vždy realistické výsledky. Na druhou stranu jsou to v současné době asi nejlepší modely expandujících atmosfér.

1.3 Cíl práce

Modelování sférických atmosfér v plné obecnosti je značně nesnadný problém. Předkládaná práce si klade za cíl zvládnout základní krok na cestě k obecné sféricky symetrické atmosféře – modelování statické sféricky symetrické atmosféry.

Pokud je autorovi známo, existují v současné době na světě čtyři programy, které počítají NLTE modely statických sféricky symetrických atmosfér. Jedná se o původní program Mihalase a Hummera (1974), program Gruschinskeho a Kudritzkeho (1979), program Höflicha a Wehrseho (1987) a program Rosenzweigové a Andersona (1988). První dva programy používají metodu úplné linearizace, třetí využívá integrální metody řešení rovnice přenosu záření a speciální iterační postup a čtvrtý je založen na Andersonově (1985, 1987) metodě blokování záření. Program vytvořený v této práci je vyvinut nezávisle na výše zmíněných programech a navíc využívá metodu přibližných lambda operátorů, která dosud nebyla pro konstrukci modelů sférických atmosfér použita.

Lze se ptát, zda má smysl pracně vyvíjet nový program na řešení problému, který již někdy řešil někdo jiný. Odpoveď zní jednoznačně: ano. Důvodů je několik:

1. Chceme-li v další práci pokračovat například zahrnutím rychlostí, je nutné vyjít se statického modelu jako základu. Máme tedy volbu buď dokonale prostudovat cizí program nebo vytvořit vlastní. Vzhledem k tomu, že podrobné studium cizího programu je mnohdy (u složitých programů zcela jistě) náročnější než vlastní tvorba, lze vývoj vlastního programu jen doporučit.

2. Předkládaná práce je prvním použitím přibližných lambda operátorů pro konstrukci statických sféricky symetrických modelů atmosfér. Tvorba nového programu nebo alespoň jeho podstatné části je nevyhnutelná.

3. I kdybychom vytvořili program přesně podle již zpracované metody, avšak *nezávisle* na existujícím programu, měla by naše práce smysl. Fungujících programů je na světě zatím příliš málo a každý nový funkční program je přínosem.

Předkládaná práce si klade za hlavní cíle:

1. Použít metodu přibližných lambda operátorů v modelování statických sféricky symetrických atmosfér.

2. Vytvořit nezávislý program pro výpočet modelů statických sféricky symetrických atmosfér.

3. Vytvořit základ pro další práce na modelování sférických atmosfér za obecnějších předpokladů (např. započtení rychlostí a narušení sférické symetrie).

Kapitola 2 rozebírá základní fyzikální rovnice popisující atmosféru, v kapitole 3 jsou formulovány dvě metody řešení, kapitola 4 se zabývá podrobněji výpočetní procedurou. V 5. kapitole jsou uvedeny výsledky výpočtů a 6. kapitola tvoří závěr.

Kapitola 2

Základní rovnice popisující statickou sféricky symetrickou atmosféru

V této kapitole rozebereme jednotlivé rovnice, které popisují statickou sféricky symetrickou atmosféru a procesy v ní probíhající a které jsme zahrnuli do výpočtu modelu. Jsou to rovnice přenosu záření, rovnice hydrostatické rovnováhy, rovnice zářivé rovnováhy, rovnice statistické rovnováhy, vztahy popisující absorpční a emisní vlastnosti atmosféry a definiční rovnice pro Rosselandovu optickou hloubku. Uveďme si nejprve předpoklady, z nichž budeme vycházet při formulaci základních rovnic a při následné konstrukci modelů atmosfér.

- *Atmosféra je sféricky symetrická*

  Předpoklad symetrie atmosféry vzhledem ke středu hvězdy je zobecněním předpokladu planparalelnosti atmosféry v tom smyslu, že dovoluje uvažovat rozsáhlé atmosféry, jejichž tloušťka je srovnatelná s poloměrem hvězdy. Na druhou stranu je výhoda předpokladu sférické symetrie v tom, že můžeme při značném geometrickém zobecnění podobně jako v planparalelním případě uvažovat všechny fyzikální veličiny jako funkce jen jedné prostorové proměnné, vzdálenosti r od středu hvězdy.

Ačkoli je sférická atmosféra blíže skutečnosti než planparalelní, neumožňuje popisovat jevy, které sférickou symetrii porušují, např. přenos hmoty mezi složkami dvojhvězd, akreční disky, či třeba jen atmosféru z jedné strany ozářenou sousední hvězdou. Pro všechny tyto případy je třeba uvažovat obecnější geometrii nebo zahrnout více prostorových dimenzí.

- *Atmosféra je statická*

Předpoklad statičnosti vylučuje všechny makroskopické pohyby hmoty v atmosféře vzhledem ke středu hvězdy včetně rotace nebo sféricky symetrické expanze a kolapsu. Mikroskopické pohyby však uvažujeme.

Striktní vyloučení všech makroskopických pohybů staví spočtené modely dále od skutečnosti, než bychom si přáli. Právě pro rozsáhlé atmosféry, kvůli nimž přecházíme od planparalelních atmosfér ke sféricky symetrickým, není tento předpoklad v naprosté většině případů splněn. Předpoklad statičnosti nám však dovoluje řešit současně rovnici zářivé rovnováhy, hydrostatické rovnováhy i přenosu záření, a tak získat první přiblížení k rozsáhlým atmosférám. Současné řešení odpovídajících rovnic (energetické rovnice, pohybové rovnice a rovnice přenosu záření pro pohybující se prostředí) v pohybující se atmosféře by bylo značně obtížné.

Navíc výše uvedený předpoklad statičnosti způsobí vymizení všech členů v pohybové rovnici, které obsahují rychlost. Kromě toho implicitně neuvažujeme vliv magnetického pole, tj. v pohybové rovnici plazmatu neuvažujeme členy obsahující $\vec{j} \times \vec{B}$.

- *Atmosféra je v zářivé rovnováze*

Předpoklad zářivé rovnováhy znamená, že veškerá zářivá energie, která se v daném místě pohltí, se v tomtéž místě opět vyzáří. Na první pohled je zřejmé, že je to velmi silný předpoklad. V důsledku neumožňuje zahrnout konvekci ani jiný mechanismus přenosu energie (vedení, vlny, turbulence). Za tohoto předpokladu nemůžeme dobře modelovat atmosféry chladných hvězd, kde konvekce v atmosféře hraje význačnou roli. Pokud však chceme modelovat atmosféry horkých hvězd, kde se konvekce neuplatňuje, předpoklad zářivé rovnováhy nám z tohoto důvodu nevadí. Přesto jsme však omezeni, protože předpoklad zářivé rovnováhy nedovoluje započítat pro určení teploty jiné mechanismy než záření. V opačném případě (například při expanzi s $dv/dr \neq 0$) je nutné uvažovat přeměnu zářivé energie na jiné druhy energie (v našem případě na mechanickou).

- *Populace energetických hladin atomů jsou ve statistické rovnováze*

  Tento předpoklad bývá standardně nazýván NLTE nebo non-LTE. Podrobný rozbor tohoto předpokladu provedl Hubený (1976). Numericky tento předpoklad znamená, že pro určení populací energetických hladin musíme řešit rovnice statistické rovnováhy, v nichž vystupuje explicitně i pole záření, které je zase ovlivňováno populacemi energetických hladin. Tento předpoklad znamená značné zvýšení početních nároků oproti předpokladu lokální termodynamické rovnováhy (LTE), kdy jsou populace energetických hladin určeny Sahovou a Boltzmannovou rovnicí.

- *Rozdělení mikroskopických rychlostí částic je rovnovážné (maxwellovské)*

  Tento předpoklad vylučuje jiné než rovnovážné rozdělení částic. Pro statickou atmosféru je to vhodný předpoklad. Jeho opuštění však může vést k zajímavým a užitečným výsledkům (např. jiné než maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů může vysvětlit ohřev okolohvězdné hmoty, viz Scudder, 1992a,b).

Lze namítnout, že bychom měli uvažovat více rovnic (například magnetohydrodynamické rovnice), případně některé z uvažovaných brát v obecnějším tvaru (např. místo rovnice hydrostatické rovnováhy brát pohybovou rovnici plazmatu).

Jsme však vedeni snahou postupovat od jednoduššího problému ke složitějšímu a tato práce by chtěla být základním kamenem v budování modelů reálné hvězdné atmosféry. I když se náš přístup může zdát značně omezený, přesto je to v teorii hvězdných atmosfér standardní a nikterak snadný problém. Nicméně, řadu vztahů uvedených v této kapitole lze použít i ve složitějších případech.

2.1 Rovnice přenosu záření ve sférické geometrii

Vyjdeme ze základní rovnice

$$\mu \frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial \mu} = -\chi_{\nu\mu}(r) I_{\nu\mu}(r) + \tilde{\eta}_{\nu\mu}(r), \tag{2.1}$$

kde $I_{\nu\mu}(r)$ je specifická intenzita záření (užíváme zápis běžný v teorii přenosu záření: $I(\nu, \mu, r) = I_{\nu\mu}(r)$), $\tilde{\eta}_{\nu\mu}$ je celková emisivita, $\chi_{\nu\mu}$ je celková opacita, $\mu = \cos\theta$ (θ je úhel, který svírá paprsek s radiálním směrem) a r je vzdálenost od středu symetrie. Odvození rovnice (2.1) viz např. Mihalas (1978).

V teorii přenosu záření bývá zvykem zavádět tzv. vydatnost (source function)[1] vztahem

$$S_{\nu\mu} = \frac{\tilde{\eta}_{\nu\mu}}{\chi_{\nu\mu}}.$$

Potom můžeme rovnici přenosu přepsat do tvaru

$$\mu \frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial \mu} = -\chi_{\nu\mu}(r) \left[I_{\nu\mu}(r) - S_{\nu\mu}(r) \right].$$

Tento zápis má pro praktické výpočty své výhody i nevýhody. Vzhledem k tomu, že na vydatnost lze pohlížet pouze jako na pomocnou veličinu vyjadřující

[1] Vydatnost bývá v českých textech někdy nazývána překladem anglického výrazu zdrojovou funkcí nebo funkcí zdroje. Je sporné, ke kterému označení se přiklonit. V této práci se přidržíme výrazu, který autorovi osobně doporučil Hubený (1985) a který vystihuje podstatu věci lépe než např. funkce zdroje.

poměr emisivity a opacity, není její zavedení nevyhnutelné. Naopak, její zavedení a následné opomenutí toho, jaké procesy vlastně zahrnuje, může vést k vážným chybám a "překvapivým" výsledkům. V dalším budeme vydatnost používat pouze pro speciální případy a rovnici přenosu budeme formulovat s pomocí opacity a emisivity, které mají jasnou souvislost s atomárními procesy.

Důležitým zdrojem opacity v atmosférách horkých hvězd je rozptyl záření na volných elektronech (Thomsonův rozptyl). Pro započtení ve hvězdných atmosférách je postačující tento rozptyl považovat za izotropní (Mihalas, 1978, kap.4.5). Přepíšeme nyní rovnici (2.1) tak, aby v ní byly explicitně uvedeny členy odpovídající rozptylu:

$$\begin{aligned}\mu\frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial r}+\frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial\mu} &= -\left[\kappa_{\nu\mu}(r)+\sigma_{\nu\mu}(r)\right]I_{\nu\mu}(r)+\eta_{\nu\mu}(r)\\ &+\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\sigma_{\nu\mu'}(r)I_{\nu\mu'}(r)\mathrm{d}\mu',\end{aligned}$$

kde $\chi_{\nu\mu}(r) = \kappa_{\nu\mu}(r)+\sigma_{\nu\mu}(r)$ a $\tilde{\eta}_{\nu\mu}(r) = \eta_{\nu\mu}(r)+\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\sigma_{\nu\mu'}(r)I_{\nu\mu'}(r)\mathrm{d}\mu'$. Ve statické atmosféře jsou opacita $\kappa_{\nu\mu}$ a emisivita $\eta_{\nu\mu}$ nezávislé na směru. Budeme-li dále předpokládat izotropii rozptylu, dostaneme rovnici přenosu ve tvaru

$$\begin{aligned}\mu\frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial r}+\frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial I_{\nu\mu}(r)}{\partial\mu} &= -\left[\kappa_{\nu}(r)+\sigma_{\nu}(r)\right]I_{\nu\mu}(r)+\eta_{\nu}(r)\\ &+\sigma_{\nu}(r)J_{\nu}(r),\end{aligned}\tag{2.2}$$

kde $J_\nu = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}I_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu$ je střední intenzita záření. Tato rovnice nám poslouží jako základ dalších úvah.

I když to nemusí být na první pohled zřejmé, je rovnice přenosu záření v podstatě nelineární i při zadané struktuře atmosféry (teplotě a hustotě). Absorpční a emisní koeficienty závisejí na obsazení jednotlivých energetických hladin a ty v případě, že neplatí předpoklad LTE (což je případ většiny hvězdných atmosfér), závisejí přes rovnice statistické rovnováhy na intenzitě záření. To znamená, že pokud chceme konzistentně vyřešit NLTE problém, musíme spolu s rovnicí přenosu záření řešit i rovnice statistické rovnováhy.

Často se však spokojíme s řešením rovnice přenosu při zadané opacitě a emisivitě. Tomuto řešení říkáme *formální řešení*. Je to plně vyhovující v případě LTE a pokud LTE neplatí, používáme formální řešení jako část iteračního postupu.

2.1.1 Formální řešení rovnice přenosu - paprsková metoda

Jak jsme již uvedli, rozumíme formálním řešením rovnice přenosu záření její řešení za předpokladu, že η_ν a χ_ν jsou zadané. Pokud opacita i emisivita závisejí na intenzitě záření, užívá se formální řešení k určení intenzity v i-tém iteračním kroku.

K formálnímu řešení ve sférické geometrii bývá často užívána tzv. paprsková metoda (viz např. Mihalas, 1985). Podstata paprskové metody spočívá v řešení rovnice přenosu podél paprsků (přímek - viz obr. 2.1) pro specifickou intenzitu a následném určení střední intenzity. Každý paprsek je charakterizován vzdáleností p od středu hvězdy. Paprsky, jejichž vzdálenost od středu je menší než vzdálenost nejnižšího hloubkového bodu od středu (minimální vzdálenost, pro niž počítáme model atmosféry), nazýváme paprsky protínající jádro, ostatní paprsky nazýváme tečnými.

Jelikož pro diferenciální operátor z rovnice (2.2) platí

$$\mu\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial}{\partial\mu}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s},$$

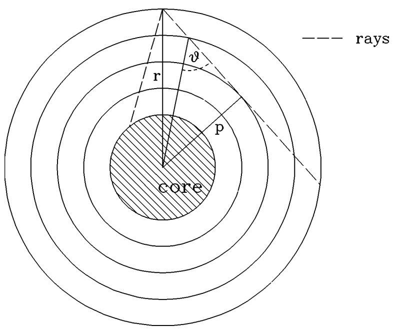
kde s měří vzdálenost podél paprsku, můžeme rovnici přenosu záření přepsat do tvaru

$$\pm\frac{\mathrm{d}I^{\pm}_{\nu\mu}(r)}{\mathrm{d}s}=-\chi_\nu(r)I^{\pm}_{\nu\mu}(r)+\eta_\nu(r)+\sigma_\nu(r)J_\nu(r), \tag{2.3}$$

kde $I^{\pm}_{\nu\mu}(r)$ označuje intenzitu ve směrech $+s$ a $-s$.

Je výhodné zavést Feautrierovy proměnné (Feautrier, 1964; následující odvození viz také Mihalas, 1985)

$$j_{\nu\mu} \;=\; \frac{1}{2}\left(I^{+}_{\nu\mu}+I^{-}_{\nu\mu}\right)$$



Obr. 2.1: *Paprsková metoda řešení rovnice přenosu záření. Čárkovaně jsou naznačeny paprsky, podél nichž se řeší rovnice přenosu záření.*

$$h_{\nu\mu} \;=\; \frac{1}{2}\left(I^{+}_{\nu\mu} - I^{-}_{\nu\mu}\right)$$

Sečtením a odečtením rovnic (2.3) dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}h_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} &= j_{\nu\mu} - S_\nu \\ \frac{\mathrm{d}j_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} &= h_{\nu\mu}\end{aligned}$$

kde $\tau_{s\nu} = -\chi_\nu ds$ je optická hloubka podél paprsku. Dále jsme zavedli vydatnost vztahem

$$S_\nu = \frac{\eta_\nu + \sigma_\nu J_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu}. \tag{2.4}$$

Vyloučíme-li z rovnic $h_{\nu\mu}$, získáme standardním postupem rovnici 2. řádu pro $j_{\nu\mu}$

$$\frac{\mathrm{d}^2 j_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}^2} = j_{\nu\mu} - S_\nu, \tag{2.5}$$

kterou doplníme o okrajové podmínky. Horní okrajová podmínka (na povrchu) je

$$\frac{\mathrm{d}j_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} = j_{\nu\mu} - I^-_{\nu\mu} \tag{2.6}$$

a dolní okrajová podmínka je

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}j_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} &= I^+_{\nu\mu} - j_{\nu\mu} && \text{pro paprsky protínající jádro (v hloubce)} \\ \frac{\mathrm{d}j_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} &= 0 && \text{pro tečné paprsky (ve středu paprsku).} \end{aligned} \tag{2.7}$$

Zde I^- je specifická intenzita záření dopadajícího na hvězdu (zpravidla $I^- = 0$) a I^+ je specifická intenzita záření vstupujícího do atmosféry z podfotosférické oblasti (bývá určeno v difúzním přiblížení - viz kap.2.1.3). Analogickým postupem můžeme získat rovnici 2. řádu pro $h_{\nu\mu}$

$$\frac{\mathrm{d}^2 h_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau^2_{s\nu}} = h_{\nu\mu} - \frac{\mathrm{d}S_\nu}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}}. \tag{2.8}$$

s horní okrajovou podmínkou (na povrchu)

$$\frac{\mathrm{d}h_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} = h_{\nu\mu} + I^-_{\nu\mu} - S_\nu \tag{2.9}$$

a dolní okrajovou podmínkou

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}h_{\nu\mu}}{\mathrm{d}\tau_{s\nu}} &= I^+_{\nu\mu} - h_{\nu\mu} - S_\nu && \text{pro paprsky protínající jádro (v hloubce)} \\ h_{\nu\mu} &= 0 && \text{pro tečné paprsky (ve středu paprsku).} \end{aligned} \tag{2.10}$$

Rovnici (2.8) budeme řešit v případě, že kromě střední intenzity budeme potřebovat znát i tok. Obě rovnice ((2.5) i (2.8) diferencujeme stejně a většinu výpočtů můžeme provést společně, takže nárůst výpočetního času je nepatrný. Příslušné diferenční vztahy jsou uvedeny v dodatku A. Můžeme zvolit z několika diferenčních schémat: obyčejné diference druhého řádu (Mihalas, 1985), splajny (Hummer *et al.*, 1973) nebo hermitovské diference (Auer, 1976). Nejpřesnější je (při téměř stejném výpočetním čase) hermitovská metoda, v některých případech je však méně stabilní než obyčejné diference. Kontrolní výpočty pro atmosféru s předem zadanou mocninnou závislostí opacity na hloubce vykazovaly na spodním okraji oscilace výsledné intenzity jak pro hermitovské diference, tak pro splajny. Oscilace zmizely při použití obyčejných diferencí druhého řádu.

2.1.2 Momentové rovnice

Integrací rovnice (2.2) přes úhly dostaneme první momentovou rovnici

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}\left(r^2 H_\nu\right)}{\mathrm{d}r} = -\chi_\nu J_\nu + \eta_\nu + \sigma_\nu J_\nu. \tag{2.11}$$

Vynásobením rovnice (2.2) μ a integrací přes úhly dostaneme druhou momentovou rovnici

$$\frac{\mathrm{d}K_\nu}{\mathrm{d}r} + \frac{3K_\nu - J_\nu}{r} = -\chi_\nu H_\nu, \tag{2.12}$$

kde $J_\nu = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} I_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu$, $H_\nu = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \mu I_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu$ a $K_\nu = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \mu^2 I_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu$. Zavedeme-li nyní proměnný Eddingtonův faktor f_ν vztahem (Auer a Mihalas, 1970a)

$$f_\nu = \frac{K_\nu}{J_\nu}$$

a funkci sféričnosti (sphericity function - Auer, 1971)[2] q_ν rovnicí (která je ekvivalentní rovnici (5) pro q_ν v Mihalas a Hummer, 1974)

$$\frac{1}{q_\nu}\frac{\mathrm{d}q_\nu}{\mathrm{d}r} = \frac{1 - f_\nu^{-1}}{r}, \tag{2.13}$$

můžeme rovnice (2.11) a (2.12) převést na jednu rovnici druhého řádu. Dosazením za K_ν a zavedením funkce sféričnosti přejde rovnice (2.12) na tvar

$$\frac{\mathrm{d}\left(r^2 f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X_\nu} = r^2 H_\nu,$$

kde $\mathrm{d}X_\nu = -q_\nu \chi_\nu \mathrm{d}r$. Derivováním této rovnice podle X_ν a kombinací s rovnicí (2.11) získáme (pro q_ν definované vztahem (2.13))

$$\frac{\mathrm{d}^2\left(r^2 f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X_\nu^2} = \frac{r^2}{q_\nu}\left(J_\nu - \frac{\eta_\nu + \sigma_\nu J_\nu}{\chi_\nu}\right), \tag{2.14}$$

[2] Názvosloví zde není zcela jednoznačné. Pro úplnost dodejme, že Leung (1975, 1976) nazývá proměnný Eddingtonův faktor f_ν anizotropním faktorem a funkci sféričnosti q_ν nazývá konfigurační funkcí a značí ji ζ_ν. Navíc metodu proměnných Eddingtonových faktorů nazývá kvazidifúzní. Pokud je však známo, je jeho pojmenování ojedinělé.

Rovnici (2.14)[3] doplníme o okrajové podmínky

$$\frac{\mathrm{d}\left(r^2 f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X_\nu} = r^2\left(g_\nu J_\nu - H_\nu^-\right) \qquad \text{na povrchu}$$
$$\frac{\mathrm{d}\left(r^2 f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X_\nu} = r^2\left(H_\nu^+ - g_\nu J_\nu\right) \qquad \text{v hloubce.} \tag{2.15}$$

Veličina g_ν zavedená v těchto rovnicích je (Auer, 1984)

$$g_\nu = \frac{\int_0^1 \mu j_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu}{J_\nu}.$$

Poznamenejme ještě, že čitatel není moment H_ν, neboť pro něj platí

$$H_\nu = \int_0^1 \mu h_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu.$$

Známe-li Eddingtonovy faktory f_ν a funkci sféričnosti q_ν, můžeme z rovnic (2.14) a (2.15) určit střední intenzitu J_ν. Pro diferenciaci momentové rovnice platí obdobné poznámky jako pro diferenciaci rovnice podél paprsku v závěru kapitoly 2.1.1.

[3]Momentovou rovnici (2.14) lze zapsat i v jiném tvaru, použijeme-li původní Auerovu (1971) definici funkce sféričnosti

$$\frac{1}{q_\nu}\frac{\mathrm{d}q_\nu}{\mathrm{d}r} = \frac{3 - f_\nu^{-1}}{r}.$$

Podobným postupem získáme momentovou rovnici ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}^2\left(f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X^2} = \frac{r^4}{q_\nu}\left(J_\nu - \frac{\eta_\nu + \sigma_\nu J_\nu}{\chi_\nu}\right),$$

kde nyní $\mathrm{d}X_\nu = -q_\nu\chi_\nu/r^2\mathrm{d}r$ s okrajovými podmínkami

$$\frac{\mathrm{d}\left(f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X_\nu} = r^2\left(g_\nu J_\nu - H_\nu^-\right) \qquad \text{na povrchu}$$
$$\frac{\mathrm{d}\left(f_\nu q_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}X_\nu} = r^2\left(H_\nu^+ - g_\nu J_\nu\right) \qquad \text{v hloubce.}$$

2.1.3 Spodní okrajová podmínka pro H_ν^+ $\left(I_{\nu\mu}^+\right)$

Při určení spodní okrajové podmínky pro H_ν^+ $\left(I_{\nu\mu}^+\right)$ vyjdeme z požadavku na celkový tok. V difúzním přiblížení víme, že platí (viz např. Mihalas, 1978, kap.2.5)

$$I_{\nu\mu} = \sum_{n=0}^{\infty} \mu^n \frac{\mathrm{d}^n B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu^n} \approx B_\nu + \mu \frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu}$$

$$H_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+3} \frac{\mathrm{d}^{2n+1} B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu^{2n+1}} \approx \frac{1}{3} \frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu}.$$

Správnou hodnotu gradientu $\mathrm{d}B_\nu/\mathrm{d}\tau_\nu$ určíme stejným postupem jako Bennett (1991). Gradient $\mathrm{d}B_\nu/\mathrm{d}\tau_\nu$ můžeme přepsat ($\mathrm{d}\tau_\nu = -\chi_\nu \mathrm{d}r$)

$$\frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu} = -\frac{1}{\chi_\nu} \frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}r} = -\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \frac{1}{\chi_\nu} \frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}T}.$$

Integrací přes ν dostaneme

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu} \mathrm{d}\nu = -\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \frac{1}{\chi_R} \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}T} = -\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \frac{4\sigma T^3}{\pi \chi_R},$$

kde

$$B = \int_0^\infty B_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{\sigma T^4}{\pi},$$

σ je Stefan-Boltzmannova konstanta a χ_R je Roselandova optická hloubka. Vzhledem k tomu, že pro celkový tok H platí

$$H = \frac{L}{(4\pi r)^2},$$

dostaneme po úpravách pro teplotní gradient

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} = -\frac{3L\chi_R}{64\pi\sigma r^2 T^3}.$$

Odtud dostaneme pro gradient $\mathrm{d}B_\nu/\mathrm{d}\tau_\nu$

$$\frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu} = \frac{3L}{64\pi\sigma r^2 T^3} \frac{\chi_R}{\chi_\nu} \frac{\mathrm{d}B_\nu}{\mathrm{d}T}. \tag{2.16}$$

Takto určený gradient nám zaručí, že pro paprsky protínající jádro bude do rovnice přenosu vstupovat tok, který odpovídá luminositě hvězdy. Podobně bude odpovídat luminositě i spodní okrajová podmínka momentové rovnice přenosu.

2.1.4 Metoda proměnných Eddingtonových faktorů

Tuto metodu zavedli v planparalelním případě Auer a Mihalas (1970a). Pro sférickou geometrii ji poprvé použili Hummer a Rybicki (1971) a Cassinelli a Hummer (1971). Užití této metody ve sférické geometrii však podstatně zjednodušil Auer (1971) zavedením faktoru sféričnosti. V modelování statických atmosfér ji poprvé použili Castor (1974) a Mihalas a Hummer (1974). Kunasz a Hummer (1974a) použili tuto metodu při výpočtech týkajících se formování spektrálních čar ve sférické geometrii. V současné době je tato metoda velmi hojně užívaná jak v planparalelní geometrii, tak i ve sférické geometrii. Lze najít její aplikace i ve dvourozměrném případě cylindrické geometrie (Spagna a Leung, 1987).

Metoda proměnných Eddingtonových faktorů umožňuje zahrnout úhlovou závislost záření iterativně a vyhnout se řešení rozsáhlého systému rovnic. Postup může být následující (viz Mihalas, 1985):

1. Zvolíme jistou počáteční aproximaci f_ν, g_ν a q_ν, například podle Auera (1984) nebo prostě planparalelní Eddintonovu aproximaci $f_\nu = 1/3$, $g_\nu = 1/2$ a $q_\nu = 1$.

2. Vyřešíme momentovou rovnici (2.14) s okrajovými podmínkami (2.15), čímž určíme střední intenzitu J_ν.

3. Spočtené J_ν použijeme pro výpočet vydatnosti podle vztahu (2.4).

4. Určíme $j_{\nu\mu}$ řešením rovnice (2.5) s okrajovými podmínkami (2.6) a (2.7).

5. Integrací $j_{\nu\mu}$ přes úhly určíme J_ν a K_ν, spočteme Eddingtonovy faktory f_ν, g_ν a funkci sféričnosti q_ν.

6. Pokračujeme krokem 2.

Tento postup opakujeme, dokud nedostaneme řešení požadované přesnosti.

V této práci využijeme metodu proměnných Eddingtonových faktorů k urychlení formálního řešení. Pro nejpřesnější určení střední intenzity záření J_ν je nutné vést co nejvíce tečných paprsků (nejlépe každým hloubkovým bodem) a paprsků protínajících jádro. Pak spočteme střední intenzitu J_ν integrací symetrické specifické intenzity $j_{\nu\mu}$ přes úhly. Při tomto postupu musíme řešit $NR \times NF$ rovnic přenosu, kde NF je počet frekvenčních bodů a $NR = ND - 2 + NC$ je celkový počet paprsků (ND je počet hloubkových bodů a NC je počet paprsků protínajících jádro). S užitím proměnných Eddingtonových faktorů můžeme počet řešených rovnic snížit podobně jako Hummer a Rybicki (1971) následujícím způsobem. Vyřešíme paprskovou rovnici přenosu pro omezený počet paprsků a v hloubkových bodech, kde existuje tečný paprsek, spočteme momenty J_ν, H_ν a K_ν a pak Eddingtonovy faktory f_ν. V ostatních hloubkových bodech určíme Eddingtonovy faktory lineární interpolací. Potom určíme funkci sféričnosti q_ν a přistoupíme k řešení momentové rovnice, která nám dá nové hodnoty J_ν a H_ν. Výpočetní nároky na čas jsou nyní $(NR' + 1) \times NF$, kde ovšem $NR' < NR$.

Popsaná metoda však není zcela konzistentní, neboť odpovídající diskrétní reprezentace nejsou totožné (Mihalas, 1985; Bennett, 1991). Proto v případech, kdy nekonzistence vedla k vážným chybám, nebyla střední intenzita J_ν určována řešením momentové rovnice, ale přímo integrací symetrické specifické intenzity $j_{\nu\mu}$ přes úhly.

2.1.5 Metoda perturbace lambda operátoru

Ve své podstatě se jedná o velmi starou metodu nazývanou v numerické matematice rozdělení operátoru (operator splitting). Její kořeny sahají až k Jacobimu (Rybicki a Hummer, 1991). Protože existuje několik dobrých přehledových prací o této metodě (poslední viz Rybicki (1991) a Hubený (1992), rozebereme pro naše účely danou problematiku a její vývoj pouze stručně a případné zájemce odkážeme na výše citované práce.

Do astrofyziky zavedl metodu rozdělení operátoru Cannon jako AQPT (angular quadrature perturbation technique - Cannon, 1973a) a FQPT (frequency quadrature perturbation technique - Cannon, 1973b). Podstata této metody je v tom, že rovnici přenosu záření Cannon řeší nejdříve pro menší počet úhlových (frekvenčních) bodů a poté s větším počtem úhlových (frekvenčních) bodů počítá opravu. Jeho myšlenky dále rozvíjeli Cannon *et al.* (1975) – RPT (redistribution perturbation technique), Cannon (1976) – XPT (x-perturbation technique pro více dimenzí), Cram a Lopert (1976) – VPT (velocity perturbation technique) a Scharmer (1981) – DQPT (depth quadrature perturbation technique). Přehled těchto prací lze nalézt v Cannon (1984).

Rybicki (1972) formuloval tzv. metodu nasycení jádra (core saturation method), která umožňuje odstranit z rovnic statistické rovnováhy opticky tlustá centra čar (tzv. preconditioning) a tím značně zjednodušit problém. Kombinací Rybickiho a Cannonovy metody získal Scharmer (1981, 1984) velmi účinnou metodu s tzv. přibližným lambda operátorem (ALO - approximate lambda operator). Tuto metodu použili Scharmer a Nordlund (1982) pro řešení dvouhladinového atomu s rychlostními poli a Scharmer a Carlsson (1985), Carlsson (1986) a Werner a Husfeld (1985) pro řešení vícehladinového atomu. Scharmerův operátor použil i Werner (1986) pro konstrukci NLTE planparalelních modelů atmosfér.

Velmi důležitá je práce Olson *et al.* (1986), kde je provedena matematická analýza přibližných lambda operátorů pro případ dvouhladinového atomu. Autoři ukázali, že nejvýhodnější přibližný lambda operátor je diagonála lambda operátoru a navrhli postup konstrukce takového operátoru. Jiný postup pro konstrukci diagonály lambda operátorů zformulovali pomocí metody krátkých charakteristik Olson a Kunasz (1987). Jejich metoda umožňuje konstruovat i tří a vícedigonální operátory. Jejich třídiagonální operátor použil Werner (1989) ke konstrukci planparalelních modelů atmosfér a používáme ho i my v naší práci. Nedávno Hauschildt (1992) formuloval konstrukci přibližného lambda operátoru pro speciálně relativistické problémy ve sférické geometrii.

Metodu rozdělení oprátorů lze použít i pro vícerozměrný případ. Metodu formulovali Klein *et al.* (1989) a dále ji rozvinul Steiner (1991).

Metodu přibližných operátorů pro řešení vícehladinového atomu přeformuloval elegantně Hauschildt (1993) jako metodu perturbace rate operátoru, kde rate operátor je tvořen rate maticí obsahující přibližné operátory Rybickiho a Hummera (1991, 1992).

Pro účely této práce stručně danou problematiku rozebereme. Celý postup uvedený v odstavci 2.1.1 můžeme formálně zapsat jako

$$J_\nu = \Lambda_\nu S_\nu, \tag{2.17}$$

kde $J_\nu = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} I_{\nu\mu}\mathrm{d}\mu$ a Λ_ν je lambda operátor. Na tento operátor pohlížíme spíš jako na postup výpočtu střední intenzity ze zadané vydatnosti a explicitně jej nesestrojujeme, i když je to pochopitelně možné. Proto je také formální zápis nezávislý na geometrii. Situace se stává složitější, když vezmeme do úvahy závislost vydatnosti na intenzitě. Pak bychom rovnici (2.17) měli přepsat jako

$$J_\nu = \Lambda_\nu \left[S_\nu \left(J_\nu\right)\right], \tag{2.18}$$

jejíž řešení není zdaleka tak snadné a pro velký počet frekvenčních a hloubkových bodů a jejich vzájemnou provázanost je numericky velmi náročné. Okamžitě se nabízí iterační postup pro určení J_ν nebo S_ν, který můžeme zapsat jako ((n) značí n-tou iteraci)

$$J_\nu^{(n+1)} = \Lambda_\nu \left[S_\nu \left(J_\nu^{(n)}\right)\right]. \tag{2.19}$$

Ačkoli lze ukázat (Busbridge, 1952), že tato jednoduchá iterační metoda (tzv. Λ-iterace) konverguje ke správnému řešení, pro praktické výpočty je takřka nepoužitelná. Důvodem je příliš pomalé šíření informace během iteračního procesu, což má za následek velmi malé vzájemné odchylky v jednotlivých následujících iteracích. Výsledkem je stabilizované "řešení" daleko od skutečného řešení (ilustrativní příklad viz Auer 1984, 1991).

Základní myšlenka metody perturbace lambda operátoru spočívá v jeho rozdělení (operator splitting)

$$\Lambda_\nu = \Lambda_\nu^* + \left(\Lambda_\nu - \Lambda_\nu^*\right), \tag{2.20}$$

kde Λ^*_ν je přibližný lambda operátor. Dosadíme-li do rovnice (2.18), můžeme použít následující iterační postup

$$\begin{aligned} J_\nu^{(n+1)} &= \Lambda^*_\nu \left[S_\nu \left(J_\nu^{(n+1)}\right)\right] + \left(\Lambda_\nu - \Lambda^*_\nu\right) \left[S_\nu \left(J_\nu^{(n)}\right)\right] \\ &= \Lambda^*_\nu \left[S_\nu \left(J_\nu^{(n+1)}\right)\right] + \Delta J_\nu^{(n)}, \end{aligned} \tag{2.21}$$

kde $\Delta J_\nu^{(n)}$ je korekční člen spočtený v předcházející iteraci.

Zde je nutné si povšimnout, že na rozdíl od lambda iterace (rovnice 2.19) působí Λ^*-operátor na vydatnost v aktuálním iteračním kroku. To způsobí, že vlastně řešíme zjednodušenou úlohu (2.18) a pro iterační postup ponecháme zbytek $(\Lambda_\nu - \Lambda^*_\nu)S_\nu$. Ačkoli je mnoho možností volby přibližného lambda operátoru Λ^*, je nutné splnit jisté podmínky, aby bylo jeho užití výhodou. Kritéria pro volbu jsou (Olson *et al.*, 1986): a) musí být dostatečně jednoduchý, aby jej bylo možno sestrojit snadno a rychle a b) musí poskytovat dostatečně rychlé a stabilní řešení problému.

Puls a Herrero (1988) provedli matematický rozbor užití přibližných lambda operátorů. Z jejich práce a z práce Olsona *et al.* (1986) vyplývá, že nejvhodnější operátor Λ^* je diagonála Λ-operátoru. Dobré metody konstrukce takových operátorů jsou proto OAB metoda (Olson *et al.*, 1986), metoda krátkých charakteristik (Olson a Kunasz, 1987) a metoda Rybickiho a Hummera (1991).

Přibližné Λ-operátory lze s výhodou užít pro konstrukce modelů atmosfér. Umožňují přejít od metody úplné linearizace k metodám, kdy už nebudeme muset linearizovat všechny veličiny, i když se nějaké linearizaci těžko vyhneme. Například Werner (1986, 1987a,b, 1988, 1989) užil přibližné Λ-operátory pro iterativní započtení rovnice přenosu záření, přičemž linearizuje rovnice hydrostatické, zářivé a statistické rovnováhy. Tím se mu podařilo snížit paměťové a časové nároky ve svém programu a zahrnout více hladin v NLTE (za předpokladu statistické rovnováhy). Pokud je autorovi známo, je předkládaná práce prvním použitím přibližných operátorů pro konstrukce modelů *sférických* atmosfér.

Konstrukce přibližného operátoru Λ^*

Přibližný operátor Λ^* konstruujeme užitím metody krátkých charakteristik Olsona a Kunasze (1987 - dále OK), kterou přeformulujeme pro sférický případ. Formální řešení rovnice přenosu podél paprsku mezi hloubkovými body $d+1$ a d můžeme pro záření směřující ven zapsat v integrálním tvaru jako

$$I^+(\tau_d,\nu) = I^+(\tau_{d+1},\nu)\exp(-\Delta\tau_d) + \Delta I_d^+$$

a mezi body $d-1$ a d pro záření směřující dovnitř jako

$$I^-(\tau_d,\nu) = I^-(\tau_{d-1},\nu)\exp(-\Delta\tau_{d-1}) + \Delta I_d^-,$$

kde $\Delta\tau_d = \tau_{d+1} - \tau_d$ a $I^\pm(\tau_{d\pm 1},\nu)$ jsou příslušné okrajové podmínky těchto krátkých paprsků (charakteristik). Přírůstek intenzity $\Delta I_d^\pm$ závisí na vydatnosti a pro lineární nebo parabolickou interpolaci jej lze vyjádřit jako

$$\Delta I_d^\pm = \alpha_d^\pm S_{d-1} + \beta_d^\pm S_d + \gamma_d^\pm S_{d+1}.$$

Pro jednotlivé koeficienty α, β a γ platí při lineární interpolaci stejné vztahy jako v OK.

$$\begin{aligned}
\alpha_d^- &= e_{0d} - e_{1d}/\Delta\tau_{d-1} \\
\beta_d^- &= e_{1d}/\Delta\tau_{d-1} \\
\gamma_d^- &= 0 \\
\alpha_d^+ &= 0 \\
\beta_d^+ &= e_{1,d+1}/\Delta\tau_d \\
\gamma_d^+ &= e_{0,d+1} - e_{1,d+1}/\Delta\tau_d,
\end{aligned} \tag{2.22}$$

kde

$$\begin{aligned}
e_{0d} &= 1 - \exp(-\Delta\tau_{d-1}) \\
e_{1d} &= \Delta\tau_{d-1} - e_{0d}.
\end{aligned}$$

Vztahy pro parabolickou interpolaci nebudeme uvádět. Lze je najít v OK. Zavedeme tzv. "normalizovanou intenzitu" $\hat{\imath}$, kterou získáme tak, že položíme $S_d = 1$ a $S_{d' \neq d} = 0$ a provedeme formální řešení pro nulové okrajové podmínky. Výsledné vztahy pro třídiagonální frekvenčně závislý operátor jsou

$$\begin{aligned}
\Lambda^*_{d-1,d}(\nu) &= \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\hat{\imath}^+_{d-1}(\nu,\mu) + \hat{\imath}^-_{d-1}(\nu,\mu)\right) \mathrm{d}\mu \\
\Lambda^*_{d,d}(\nu) &= \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\hat{\imath}^+_{d}(\nu,\mu) + \hat{\imath}^-_{d}(\nu,\mu)\right) \mathrm{d}\mu \\
\Lambda^*_{d+1,d}(\nu) &= \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\hat{\imath}^+_{d+1}(\nu,\mu) + \hat{\imath}^-_{d+1}(\nu,\mu)\right) \mathrm{d}\mu,
\end{aligned} \tag{2.23}$$

kde

$$\begin{aligned}
\hat{\imath}^-_{d-1} &= \gamma^-_{d-1} \\
\hat{\imath}^-_{d} &= \gamma^-_{d-1}\exp(-\Delta\tau_{d-1}) + \beta^-_d \\
\hat{\imath}^-_{d+1} &= [\gamma^-_{d-1}\exp(-\Delta\tau_{d-1}) + \beta^-_d]\exp(-\Delta\tau_d) + \alpha^-_{d+1} \\
\hat{\imath}^+_{d+1} &= \alpha^+_{d+1} \\
\hat{\imath}^+_{d} &= \alpha^+_{d+1}\exp(-\Delta\tau_d) + \beta^+_d \\
\hat{\imath}^+_{d-1} &= [\alpha^+_{d+1}\exp(-\Delta\tau_d) + \beta^+_d]\exp(-\Delta\tau_{d-1}) + \gamma^+_{d-1}
\end{aligned}$$

Integraci v rovnicích (2.23) provádíme přes všechny paprsky.

2.1.6 Přibližný Φ-operátor

Podobně jako výpočet střední intenzity z vydatnosti můžeme formálně zapsat vztahem (2.17), můžeme výpočet toku z vydatnosti zapsat formálně pomocí tzv Φ-operátoru (Mihalas, 1978) jako

$$H_\nu = \Phi_\nu S_\nu, \tag{2.24}$$

kde Φ_ν je Φ-operátor. Analogicky s přibližným Λ-operátorem (approximate lambda operator - ALO) zavedeme v této práci přibližný Φ-operátor (approximate phi operator - APO) vztahem

$$\Phi_\nu = \Phi^*_\nu + (\Phi_\nu - \Phi^*_\nu)\,. \tag{2.25}$$

Vyjádříme-li tok pomocí přibližného Φ-operátoru, dostaneme vztah

$$H_\nu = \Phi_\nu^* S_\nu + \left(\Phi_\nu - \Phi_\nu^*\right) S_\nu = \Phi_\nu^* S_\nu + \Delta H_\nu$$

Konstrukci přibližného Φ-operátoru lze snadno provést výše uvedenou metodou krátkých charakteristik podle Olsona a Kunasze (1987). Výsledné vztahy odpovídající vztahům (2.23) jsou

$$\begin{aligned}
\Phi^*_{d-1,d}(\nu) &= \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\hat{\imath}^+_{d-1}(\nu,\mu) - \hat{\imath}^-_{d-1}(\nu,\mu)\right)\mu \mathrm{d}\mu \\
\Phi^*_{d,d}(\nu) &= \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\hat{\imath}^+_{d}(\nu,\mu) - \hat{\imath}^-_{d}(\nu,\mu)\right)\mu \mathrm{d}\mu \\
\Phi^*_{d+1,d}(\nu) &= \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\hat{\imath}^+_{d+1}(\nu,\mu) - \hat{\imath}^-_{d+1}(\nu,\mu)\right)\mu \mathrm{d}\mu,
\end{aligned} \tag{2.26}$$

přičemž význam jednotlivých symbolů je stejný jako v rovnici (2.23). Nabízí se velmi široké použití přibližného Φ-operátoru. O použití v rovnici zářivé rovnováhy se zmíníme v kapitole 2.3.2. Jinak ho lze použít všude tam, kde v rovnicích vystupuje tok H_ν nebo F_ν (například v rovnici hydrostatické rovnováhy) se stejným efektem jako přibližný Λ-operátor. To znamená, že opět budeme řešit zjednodušenou úlohu s přibližným Φ-operátorem a iterovat rozdíl $\left(\Phi_\nu - \Phi_\nu^*\right) S_\nu$.

2.2 Rovnice hydrostatické rovnováhy

Vyjdeme z rovnice (72) Mihalase a Hummera (1974), která platí pro sférický případ.

$$\frac{\mathrm{d}p_g}{\mathrm{d}(\frac{1}{r})} = \rho G \mathcal{M} - \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty \chi_\nu r^2 H_\nu \mathrm{d}\nu, \tag{2.27}$$

kde p_g je tlak plynu, r je radiální souřadnice, ρ je hustota plynu, G je gravitační konstanta, $\mathcal{M}$ je hmotnost hvězdy a H_ν je tok záření. Zavedeme tokovou střední opacitu ("flux mean opacity")

$$\chi_H = \frac{\int_0^\infty \chi_\nu H_\nu \mathrm{d}\nu}{\int_0^\infty H_\nu \mathrm{d}\nu} = \frac{1}{H}\int_0^\infty \chi_\nu H_\nu \mathrm{d}\nu$$

a zářivý člen v rovnici hydrostatické rovnováhy přepíšeme

$$\frac{4\pi}{c}\int_0^\infty \chi_\nu r^2 H_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{4\pi}{c} r^2 H \chi_{_H} = \frac{L\chi_{_H}}{4\pi c},$$

kde L je celková luminosita hvězdy (platí $L/(4\pi) = 4\pi r^2 H$). Dosazením do rovnice (2.27) dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}p_g}{\mathrm{d}(\frac{1}{r})} = \rho G \mathcal{M} - \frac{L\chi_{_H}}{4\pi c}. \tag{2.28}$$

Zavedení celkové luminosity L do rovnice hydrostatické rovnováhy je užitečné z výpočetního hlediska, protože výraz $\chi_{_H} L$ jsme schopni spočítat s větší přesností než výraz $\int_0^\infty \chi_\nu H_\nu \mathrm{d}\nu$.

Rovnici (2.28) doplníme o horní okrajovou podmínku. Určíme ji za stejných předpokladů a stejným postupem jako Mihalas a Hummer (1974). Předpokládejme, že:

1. Všechny vlastnosti plynu kromě tlaku p_g a hustoty ρ jsou pro $r > r_1$ konstantní, kde r_1 je největší námi uvažovaná radiální vzdálenost.

2. Tlak a hustota klesají exponenciálně (s konstantním škálovacím parametrem h) tak, že $\rho = \rho_1 \exp[-(r - r_1)/h]$ a $p = p_1 \exp[-(r - r_1)/h]$ pro $r > r_1$.

3. Plazma je úplně ionizovaná pro $r > r_1$.

4. Opacita pro $r > r_1$ je dána pouze Thomsonovým rozptylem.

Je zřejmé, že uvedené předpoklady jsou velmi omezující. Určení horní okrajové podmínky pro rovnici hydrostatické rovnováhy je kritický problém, protože nesprávná volba může značně ovlivnit chod teploty a hustoty v nejvyšších vrstvách. Lepší by pochopitelně bylo určit okrajovou podmínku na spodním okraji a integrovat rovnici hydrostatické rovnováhy směrem ven z hvězdy (tak bychom určili vlastnosti atmosféry na jejím horním okraji smysluplněji), avšak pokusy spočítat takto model atmosféry nevedly k příliš stabilním výsledkům. Nicméně uvedené předpoklady jsou pro *statickou* atmosféru postačující. Za těchto předpokladů platí pro optickou hloubku v prvním hloubkovém bodě

$$\tau_1 = \int_{r_1}^{\infty} n_e \sigma_e \mathrm{d}r = \sigma_e \sum_k \alpha_k J_k \int_{r_1}^{\infty} n_m \mathrm{d}r$$
$$\approx \frac{\sigma_e \sum_k \alpha_k J_k}{\overline{m}} \int_{r_1}^{\infty} \rho \mathrm{d}r = \frac{\sigma_e \sum_k \alpha_k J_k}{\overline{m}} \rho_1 h,$$

kde α_k je relativní abundance prvku k a J_k je index nejvyššího existujícího iontu prvku k (index elektricky neutrálního iontu je 0). Odtud

$$h = \frac{\tau_1}{\rho_1} \frac{\overline{m}}{\sigma_e \sum_k \alpha_k J_k}. \tag{2.29}$$

a podle předpokladu 2

$$\left. \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}r} \right|_1 = -\frac{p_1}{h}$$

Horní okrajová podmínka pro rovnici (2.28) je

$$r^2 \frac{p_g}{h} = \rho G \mathcal{M} - \frac{L \chi_H}{4\pi c}, \tag{2.30}$$

kde h je definováno vztahem (2.29).

2.3 Rovnice zářivé rovnováhy

Rovnice zářivé rovnováhy netvrdí v podstatě nic jiného, než že veškerá pohlcená zářivá energie se opět vyzáří. Jinými slovy, celkový tok záření zůstane zachován a jeho divergence bude nulová. Rovnici zářivé rovnováhy můžeme vyjádřit buď v integrálním nebo v diferenciálním tvaru. Abychom si vysvětlili názvosloví, napíšeme si první momentovou rovnici záření pro statickou atmosféru (Mihalas, 1978, rovnice 2.69)

$$\nabla \cdot \vec{\mathcal{F}}(\vec{r}) = 4\pi \int_0^{\infty} \left[\eta_\nu(\vec{r}) - \chi_\nu(\vec{r}) J_\nu(\vec{r})\right] \mathrm{d}\nu.$$

Pro sféricky symetrickou atmosféru můžeme tuto rovnici přepsat jako

$$\frac{1}{r^2} \frac{\mathrm{d}\left(r^2 H_\nu(r)\right)}{\mathrm{d}r} = \int_0^{\infty} \left[\eta_\nu(r) - \chi_\nu(r) J_\nu(r)\right] \mathrm{d}\nu. \tag{2.31}$$

Odtud je již zřejmé naše názvosloví. Při zářivé rovnováze je pravá i levá strana rovnice (2.31) rovna nule. Je proto jedno, kterou z rovnic použijeme při výpočtech. Užití obou tvarů není samoúčelné a poskytuje cenný nástroj při praktických výpočtech. Ukazuje se totiž (Frandsen, 1974; Hubený 1988; Hubený a Lanz, 1993), že pro velké optické hloubky je *numericky* lepší použít levou stranu rovnice (2.31) (diferenciální tvar) a ve zbytku atmosféry pravou stranu (integrální tvar).

2.3.1 Integrální tvar rovnice zářivé rovnováhy

Vyjdeme z rovnice (2.83) Mihalase (1978)

$$4\pi \int_0^\infty (\chi_\nu J_\nu - \tilde{\eta}_\nu)\,\mathrm{d}\nu = 0, \tag{2.32}$$

kde χ_ν je celková opacita, J_ν je střední intenzita záření a $\tilde{\eta}_\nu$ je celková emisivita. Celkovou opacitu χ_ν můžeme podobně jako v kapitole 2.1 zapsat jako

$$\chi_\nu = \kappa_\nu + \sigma_\nu,$$

kde κ_ν je opacita bez rozptylu a σ_ν je rozptyl. Podobně celkovou emisivitu můžeme zapsat jako

$$\tilde{\eta}_\nu = \eta_\nu + \sigma_\nu J_\nu,$$

kde η_ν je emisivita bez rozptylu a $\sigma_\nu J_\nu$ je emisivita rozptylu. Dosadíme-li do rovnice (2.32), dostaneme

$$4\pi \int_0^\infty (\kappa_\nu J_\nu - \eta_\nu)\,\mathrm{d}\nu = 4\pi \int_0^\infty \kappa_\nu\,(J_\nu - S_\nu)\,\mathrm{d}\nu = 0, \tag{2.33}$$

neboť členy odpovídající rozptylu se vyruší. V rovnici (2.33) je vydatnost $S_\nu = \eta_\nu/\chi_\nu$.

Dále vyjádříme střední intenzitu záření J_ν pomocí přibližného lambda operátoru (2.18), dosadíme do rovnice (2.33) a po vydělení 4π dostaneme

$$\int_0^\infty [\kappa_\nu\,(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu) - \eta_\nu]\,\mathrm{d}\nu = 0, \tag{2.34}$$

což můžeme přepsat jako

$$\int_0^\infty \kappa_\nu \left[(\Lambda_\nu^* - 1)\, S_\nu + \Delta J_\nu\right] \mathrm{d}\nu = 0. \tag{2.35}$$

Pro velké optické hloubky, kde platí difúzní přiblížení, nedává integrální rovnice zářivé rovnováhy dobré výsledky. Důvodem je to, že platí $J_\nu \approx S_\nu$ a rovnice (2.33) je prakticky rovna nule bez ohledu na velikost opacity. Rovnice je proto numericky nestabilní. V případě platnosti difúzního přiblížení je nutné použít diferenciální rovnici zářivé rovnováhy nebo ve vztahu pro střední intenzitu v difúzním přiblížení použít členy vyšších řádů (viz Steiner, 1990).

Rovnice (2.35) nabízí i jinou možnost překonání numerických problémů. Jelikož pro velké optické hloubky je $\Lambda^* \to \mathbf{1}$ (jednotkový operátor), je diagonála operátoru $\Lambda^* - \mathbf{1}$ zatížena značnou numerickou chybou. Je proto vhodné přeformulovat výpočet přibližného operátoru a místo operátoru Λ^* přímo počítat operátor $\delta\Lambda^* = \Lambda^* - \mathbf{1}$ (Scharmer a Carlsson, 1985). Přepíšeme-li lineární vztahy Olsona a Kunasze (1987) pro výpočet diagonály Λ^* podle Wernera (1989), máme

$$\Lambda_{dd}^* = 1 - \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\frac{1 - e^{-\Delta\tau_{d-1}}}{\Delta\tau_{d-1}} + \frac{1 - e^{-\Delta\tau_d}}{\Delta\tau_d}\right) \mathrm{d}\mu,$$

z čehož inhed plyne

$$\delta\Lambda_{dd}^* = -\frac{1}{2}\int_0^1 \left(\frac{1 - e^{-\Delta\tau_{d-1}}}{\Delta\tau_{d-1}} + \frac{1 - e^{-\Delta\tau_d}}{\Delta\tau_d}\right) \mathrm{d}\mu.$$

Vztahy pro nediagonální prvky Λ^*-matice se při přechodu k $\delta\Lambda^*$ nezmění. Naznačený výsledek lze v postupu Olsona a Kunasze (1987) získat také tak, že nahradíme v lineárních vztazích (2.22) pro $\beta^\pm$ veličinu e_1 veličinou e_0.

2.3.2 Diferenciální tvar rovnice zářivé rovnováhy

Rovnici zářivé rovnováhy můžeme také uvažovat v diferenciálním tvaru vyjadřujícím zachování celkového toku

$$H = \frac{L}{(4\pi r)^2}.$$

Celkový tok můžeme vyjádřit jako

$$H = \int_0^\infty H_\nu \mathrm{d}\nu = -\frac{1}{r^2} \int_0^\infty \frac{1}{q_\nu \chi_\nu} \frac{\mathrm{d}\left(r^2 q_\nu f_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}\nu$$

a odtud diferenciální rovnice zářivé rovnováhy

$$\int_0^\infty \frac{1}{q_\nu \chi_\nu} \frac{\mathrm{d}\left(r^2 q_\nu f_\nu J_\nu\right)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}\nu + \frac{L}{(4\pi)^2} = 0. \tag{2.36}$$

Za J_ν dosadíme z rovnice (2.18)

$$\int_0^\infty \frac{1}{q_\nu \chi_\nu} \frac{\mathrm{d}\left[r^2 q_\nu f_\nu \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right)\right]}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}\nu + \frac{L}{(4\pi)^2} = 0. \tag{2.37}$$

Jinou možnost máme, pokud užijeme námi zavedený přibližný Φ-operátor. Vyjádříme celkový tok jako

$$H = \int_0^\infty H_\nu \mathrm{d}\nu = \int_0^\infty \left(\Phi_\nu^* S_\nu + \Delta H_\nu\right) \mathrm{d}\nu$$

a získáme následující tvar rovnice zářivé rovnováhy

$$\int_0^\infty \left(\Phi_\nu^* S_\nu + \Delta H_\nu\right) \mathrm{d}\nu - \frac{L}{(4\pi r)^2} = 0.$$

Možnost užití diferenciálího tvaru rovnice zářivé rovnováhy (2.37) se nám bohužel neosvědčila a proto jsme ji pro výpočet modelů uvedených v této práci nepoužili.

2.3.3 Superpozice integrálního a diferenciálního tvaru rovnice zářivé rovnováhy

Protože integrální tvar, jak jsme se již zmínili, nedává pro velké optické hloubky, kde platí difúzní přiblížení, dobré výsledky a naopak diferenciální tvar nepracuje dobře pro malé optické hloubky, nabízí se možnost, kterou využil již Frandsen (1974), použít pro malé optické hloubky integrální tvar a pro velké optické hloubky diferenciální tvar. Tuto metodu zobecnili Hubený a Lanz (1993) a uvažují vhodnou superpozici diferenciálního a integrálního tvaru rovnice zářivé rovnováhy. Této myšlenky se přidržíme i v našem případě. Rovnici (2.34) podělíme

$\int_0^\infty \eta_\nu \mathrm{d}\nu$ a rovnici (2.37) vynásobíme $\bar{\Lambda}^*(4\pi)^2/L$ a obě rovnice sečteme

$$\frac{\int_0^\infty \kappa_\nu \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right) \mathrm{d}\nu}{\int_0^\infty \eta_\nu \mathrm{d}\nu} + \bar{\Lambda}^* \frac{(4\pi)^2}{L} \int_0^\infty \frac{1}{q_\nu \chi_\nu} \frac{\mathrm{d}\left[r^2 q_\nu f_\nu \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right)\right]}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}\nu + \left(\bar{\Lambda}^* - 1\right) = 0. \tag{2.38}$$

Koeficient $\bar{\Lambda}^*$ není nic jiného než přibližný operátor Λ_ν^* středovaný přes frekvence. Jelikož pro malé optické hloubky je malý a blíží se k 1 pro velké optické hloubky, zajistí nám plynulý hladký přechod od integrálního tvaru k diferenciálnímu. Základ uvedeného postupu je od Wernera (1993). Ten navíc doplňuje do rovnice (2.38) člen $(1 - \bar{\Lambda}^*)F_0$, kde F_0 je levá strana rovnice (2.37) z předchozí iterace. Tento člen má stabilizovat řešení rovnice zářivé rovnováhy. Superponovaná rovnice zářivé rovnováhy pak získá tvar

$$\frac{\int_0^\infty \kappa_\nu \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right) \mathrm{d}\nu}{\int_0^\infty \eta_\nu \mathrm{d}\nu} + \bar{\Lambda}^* \frac{(4\pi)^2}{L} \int_0^\infty \frac{1}{q_\nu \chi_\nu} \frac{\mathrm{d}\left[r^2 q_\nu f_\nu \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right)\right]}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}\nu + \left(1 - \bar{\Lambda}^*\right)\left(F_0 - 1\right) = 0. \tag{2.39}$$

Bohužel, Wernerův doporučený postup se v našem případě ukázal značně nestabilní, a proto jsme ho ve výpočtech nepoužili.

2.4 Rovnice pro radiální optickou hloubku

Za nezávislou proměnnou v našich výpočtech volíme Rosselandovu optickou hloubku τ_R, která je definována

$$\mathrm{d}\tau_R = -\chi_R \mathrm{d}r \tag{2.40}$$

kde

$$\chi_R = \frac{\int_0^\infty \frac{\partial B_\nu}{\partial T} \mathrm{d}\nu}{\int_0^\infty \frac{1}{\chi_\nu} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} \mathrm{d}\nu}$$

je Rosselandova střední opacita. Fieldus *et al.* (1990) zdůraznili nutnost připustit i změny radiální vzdálenosti během iterací, protože počáteční radiální struktura nebývá příliš věrohodná. Radiální vzdálenost jako závislou proměnnou uvažuje i Bennett (1991). Rovnici (2.40) zahrneme do výpočtu, abychom také mohli zahrnout změny "rozsáhlosti" atmosféry v závislosti na její vnitřní struktuře.

Jedním z klíčových problémů při konstrukci modelů atmosfér je hloubková diskretizace. V této práci jsme zvolili jako nezávisle proměnnou Rosselandovu optickou hloubku a hloubkové body jsme volili ekvidistantně v $\log \tau_R$. Kvůli lepší stabilitě a vyšší přesnosti řešení rovnice přenosu záření jsme první a poslední krok v hloubkové diskretizaci zvolili $10\times$ menší. Tato hloubková škála nám zajišťuje vhodnou diskretizaci rovnice přenosu záření pro většinu frekvencí, i když v místech, kde dochází k velkému skoku v opacitách, jako například Lymanovské kontinuum vodíku u B hvězd či základní kontinuum He II u O hvězd, může dojít k nepřesnostem a nestabilitám. V tom případě je nutné vhodným způsobem změnit hloubkovou škálu.

2.5 Rovnice statistické rovnováhy

2.5.1 Lokální termodynamická rovnováha – LTE

Vztahy v této části jsou podle Mihalase (1978), kapitoly 5.1. Podle Sahova-Boltzmanova rozdělení platí pro LTE populaci hladiny i iontu j prvku k

$$n^*_{i_j k} = N^*_{jk} \frac{g_{i_j k}}{U_{jk}(n_e, T)} e^{-\chi_{i_j k}/kT},$$

kde $g_{i_j k}$ je statistická váha hladiny i (iontu j prvku k), $\chi_{i_j k}$ je excitační energie hladiny i, $U_{jk}(n_e, T)$ je partiční funkce iontu j a N^*_{jk} je LTE hustota iontů j prvku k. Pro LTE hustotu iontů platí

$$N^*_{jk} = N_k f_{jk}(n_e, T)$$

kde $f_{jk}(n_e, T)$ je tzv. ionizační poměr iontu j prvku k a N_k je hustota atomů ($N_k = \alpha_k n_m$, α_k je abundance prvku k a n_m je hustota těžkých částic). Pro ionizační poměr platí (viz Mihalas, 1978)

$$f_{jk}(n_e,T) = \frac{P_{jk}(n_e,T)}{S_k(n_e,T)},$$

kde (J_k je celkový počet ionizačních stavů prvku k)

$$\begin{aligned} P_{jk}(n_e,T) &= \prod_{l=j}^{J_k-1} n_e \tilde{\Phi}_{lk}(n_e,T) \quad \text{pro } j < J_k \\ P_{jk}(n_e,T) &= 1 \qquad\qquad\qquad\quad \text{pro } j = J_k \end{aligned}$$

a

$$S_k(n_e,T) = \sum_{m=0}^{J_k} P_{mk}(n_e,T).$$

V těchto výrazech $\tilde{\Phi}_{lk}(n_e,T)$ je tzv. Sahův-Boltzmannův faktor, pro nějž platí

$$\tilde{\Phi}_{lk}(n_e,T) = \frac{U_{lk}(n_e,T)}{U_{l+1,k}(n_e,T)} C_I T^{-3/2} e^{\chi_{I_j k}/kT}.$$

Zde U značí stavové součty (partiční funkce) jednotlivých iontů, $\chi_{I_j k}$ je ionizační potenciál a konstanta $C_I = \frac{1}{2}\left(h^2/\left(2\pi m_e k\right)\right)^{3/2}$.

Stavové součty $U_{jk}(n_e,T)$ počítáme podle Traving *et al.* (1966) stejně jako Hubený (1988), od něhož je převzata i procedura pro výpočet.

2.5.2 Soustava rovnic statistické rovnováhy

Rovnice statistické rovnováhy napíšeme pro b-faktory, které definujeme podle Menzela (1937) jako

$$b = \frac{n_{NLTE}}{n_{LTE}} \equiv \frac{n}{n^*},$$

kde n_{LTE} je spočteno za předpokladu LTE. Zde je třeba zdůraznit odlišnou definici Mihalase (1978), jehož populace n^* je v lokální termodynamické rovnováze k populaci (již ne nutně LTE) základní hladiny nejbližšího vyššího iontu. Menzelova definice b-faktorů nám je umožňuje použít jako indikátory platnosti LTE.

Rovnice statistické rovnováhy pro b-faktory

Vyjdeme z rovnic statistické rovnováhy (Mihalas, 1978, rovnice 5-52) pro statické prostředí

$$n_i \sum_l P_{il} - \sum_l n_l P_{li} = 0, \tag{2.41}$$

kde P_{il} je celková pravděpodobnost přechodu z hladiny i do hladiny l a n_i je populace hladiny i. Platí, že

$$n_i = b_i n_i^*,$$

$$P_{il} = R_{il} + C_{il},$$

kde b_i je b-faktor hladiny i, n_i^* je odpovídající LTE populace, R_{il} je pravděpodobnost přechodu z hladiny i do hladiny l vlivem záření (zářivý rate) a C_{il} je pravděpodobnost přechodu z hladiny i do hladiny l vlivem srážek (srážkový rate). Rovnice statistické rovnováhy (2.41) můžeme pak přepsat jako

$$b_i n_i^* \sum_l \left(R_{il} + C_{il}\right) - \sum_l b_l n_l^* \left(R_{li} + C_{li}\right) = 0, \tag{2.42}$$

Pro zářivé excitační raty použijeme vztahy

$$R_{i_j l_j k} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_j k}\left(\nu\right)}{h\nu} \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right) \mathrm{d}\nu \tag{2.43}$$

pro excitace a

$$R_{i_j l_j k} = \frac{g_i}{g_j} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_j k}\left(\nu\right)}{h\nu} \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu + \frac{2h\nu^3}{c^2}\right) \mathrm{d}\nu \tag{2.44}$$

pro deexcitace. Pro zářivé ionizační raty použijeme vztahy

$$R_{i_j l_{j+1} k} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_{j+1} k}\left(\nu\right)}{h\nu} \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu\right) \mathrm{d}\nu \tag{2.45}$$

pro ionizace a

$$R'_{i_j l_{j-1} k} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_{j-1} k}\left(\nu\right)}{h\nu} \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu + \frac{2h\nu^3}{c^2}\right) e^{-h\nu/kT} \mathrm{d}\nu \tag{2.46}$$

pro rekombinace. V rovnicích (2.43) až (2.46) jsme za střední intenzitu dosadili z rovnice (2.18). Přitom víme, že platí (viz Mihalas, 1978)

$$n_{i_jk}{R'}_{i_jl_{j-1}k} = n_{i_jk}\frac{n^*_{l_{j-1}k}}{n^*_{i_jk}}R_{i_jl_{j-1}k} = b_{i_jk}n^*_{l_{j-1}k}R_{i_jl_{j-1}k}.$$

Pro výpočet srážkových ratů použijeme některý ze vztahů uvedených v knize Mihalase (1978). Stručný přehled vzorců je uveden v Dodatku D. Pro srážkové excitační i ionizační raty platí vztah

$$n^*_{i,k}C_{il,k} = n^*_{l,k}C_{li,k},$$

takže v rovnicích statistické rovnováhy vyjádříme všechny deexcitační srážkové raty pomocí excitačních a všechny rekombinační srážkové raty pomocí ionizačních. Po těchto úpravách získáme rovnice statistické rovnováhy ve tvaru

$$\begin{aligned}
b_{i_jk}\left(n^*_{i_jk}\sum_{l_j<i_j}R_{i_jl_jk} + \sum_{l_j<i_j}n^*_{l_jk}C_{l_ji_jk}\right) & \qquad \text{b-b přechody } i_j \to l_j \text{ pro } l_j < i_j \\
+b_{i_jk}n^*_{i_jk}\sum_{l_j>i_j}\left(R_{i_jl_jk} + C_{i_jl_jk}\right) & \qquad \text{b-b přechody } i_j \to l_j \text{ pro } l_j > i_j \\
+b_{i_jk}n^*_{i_jk}\sum_{l_{j+1}}\left(R_{i_jl_{j+1}k} + C_{i_jl_{j+1}k}\right) & \qquad \text{b-f přechody } i_j \to l_{j+1} \\
+b_{i_jk}\sum_{l_{j-1}}n^*_{l_{j-1}k}\left(R_{i_jl_{j-1}k} + C_{l_{j-1}i_jk}\right) & \qquad \text{f-b přechody } i_j \to l_{j-1} \\
-\sum_{l_j<i_j}b_{l_jk}n^*_{l_jk}\left(R_{l_ji_jk} + C_{l_ji_jk}\right) & \qquad \text{b-b přechody } l_j \to i_j \text{ pro } l_j < i_j \\
-\sum_{l_j>i_j}b_{l_jk}n^*_{l_jk}R_{l_ji_jk} - n^*_{i_jk}\sum_{l_j>i_j}b_{l_jk}C_{i_jl_jk} & \qquad \text{b-b přechody } l_j \to i_j \text{ pro } l_j > i_j \\
-n^*_{i_jk}\sum_{l_{j+1}}b_{l_{j+1}k}\left(R_{l_{j+1}i_jk} + C_{i_jl_{j+1}k}\right) & \qquad \text{f-b přechody } l_{j+1} \to i_j \\
-\sum_{l_{j-1}}b_{l_{j-1}k}n^*_{l_{j-1}k}\left(R_{l_{j-1}i_jk} + C_{l_{j-1}i_jk}\right) & \qquad \text{b-f přechody } l_{j-1} \to i_j \\
= 0 & \qquad (2.47)
\end{aligned}$$

Rovnice pro počet částic pro b-faktory

Pro každý prvek uzavřeme rovnice statistické rovnováhy rovnicí pro počet částic (abundance equation)

$$\sum_{j=0}^{J_k} N_{jk} = Y_k \left(N_{HI} + N_{HII}\right)$$

nebo pomocí b-faktorů

$$\sum_{j=0}^{J_k} \left[\sum_{l=1}^{L_{j_k}} b_{l_j k} n^*_{l_j k} + b_{1_{j+1} k} \tilde{N}^*_{jk}\right] = Y_k \left[\sum_{l=1}^{L_{HI}} b_{l,HI} n^*_{l,HI} + b_{1,HII} \left(\tilde{N}^*_{HI} + n^*_{1,HII}\right)\right],$$

kde $\tilde{N}^*_{jk}$ je celková populace zbylých LTE (neexplicitních) hladin.

Rovnice zachování náboje a rovnice zachování počtu částic pro b-faktory

Celý systém rovnic statistické rovnováhy uzavřeme buď rovnicí zachování náboje nebo rovnicí zachování počtu částic.

Rovnice zachování náboje vyjadřuje požadavek elektronutrality hmoty v atmosféře hvězdy.

$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{j=0}^{J_k} q_j N_{jk} = n_e,$$

kde K je celkový počet atomů a q_j je náboj iontu j. Přepíšeme rovnici zachování náboje pro b-faktory

$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{j=0}^{J_k} q_j \left[b_{l_j k} n^*_{l_j k} + b_{1_{j+1} k} \tilde{N}^*_{jk}\right] = n_e.$$

Rovnice zachování počtu částic vyjadřuje fakt neměnnosti celkového počtu atomů v atmosféře.

$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{j=0}^{J_k} N_{jk} = n_m,$$

kde K je celkový počet atomů a n_m je celkový počet těžkých částic. Přepíšeme rovnici zachování počtu částic pro b-faktory

$$\sum_{k=1}^{K}\sum_{j=0}^{J_k}\left[b_{l_jk}n^*_{l_jk}+b_{1_{j+1}k}\tilde{N}^*_{jk}\right]=\frac{n_e}{F}.$$

Výsledná soustava rovnic statistické rovnováhy

Napíšeme celou soustavu rovnic statistické rovnováhy ve zkráceném tvaru jako

$$\mathcal{A}\cdot\mathbf{b}=\mathcal{B}, \tag{2.48}$$

kde $\mathcal{A}$ je rate matice, $\mathbf{b}$ je vektor b-faktorů a $\mathcal{B}$ je vektor pravých stran.

Jednotlivé prvky matice $\mathcal{A}$ a vektoru $\mathcal{B}$ Prvky matice $\mathcal{A}$ z rovnice statistické rovnováhy:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{i_ji_jk}=&\left(n^*_{i_jk}\sum_{l_j<i_j}R_{i_jl_jk}+\sum_{l_j<i_j}n^*_{l_jk}C_{l_ji_jk}\right)+n^*_{i_jk}\sum_{l_j>i_j}\left(R_{i_jl_jk}+C_{i_jl_jk}\right)\\&+n^*_{i_jk}\sum_{l_{j+1}}\left(R_{i_jl_{j+1}k}+C_{i_jl_{j+1}k}\right)+\sum_{l_{j-1}}n^*_{l_{j-1}k}\left(R_{i_jl_{j-1}k}+C_{l_{j-1}i_jk}\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{i_jl_jk}&=-n^*_{l_jk}\left(R_{l_ji_jk}+C_{l_ji_jk}\right) && \text{pro } l_j<i_j\\&=-n^*_{l_jk}R_{l_ji_jk}-n^*_{i_jk}C_{i_jl_jk} && \text{pro } l_j>i_j\\&=-n^*_{i_jk}\left(R_{l_{j+1}i_jk}+C_{i_jl_{j+1}k}\right) && \text{pro rekombinace } l_{j+1}\to i_j\\&=-n^*_{l_{j-1}k}\left(R_{l_{j-1}i_jk}+C_{l_{j-1}i_jk}\right) && \text{pro ionizace } l_{j-1}\to i_j,\end{aligned}$$

z rovnice počtu částic pro prvek k:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{J_kl_jk}&=n^*_{l_jk}+\tilde{N}^*_{j-1,k} && \text{pro } l=1\wedge j\geq 1\\&=n^*_{l_jk} && \text{pro ostatní } l \text{ a } j\\&=-Y_k\left(n^*_{1_{HII}}+\tilde{N}^*_{HI}\right) && \text{pro HI}\\&=-Y_kn^*_{l_{HI}} && \text{pro HII}\\&=0 && \text{pro zbytek,}\end{aligned}$$

z rovnice zachování náboje:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{J_H l_j k} &= q_j n^*_{l_j k} + (q_j - 1)\,\tilde{N}^*_{j-1,k} && \text{pro } l = 1 \wedge j \geq 1\\ &= q_j n^*_{l_j k} && \text{pro ostatní } l \text{ a } j,\end{aligned}$$

z rovnice zachování počtu částic:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{J_H l_j k} &= n^*_{l_j k} + \tilde{N}^*_{j-1,k} && \text{pro } l = 1 \wedge j \geq 1\\ &= n^*_{l_j k} && \text{pro ostatní } l \text{ a } j.\end{aligned}$$

Prvky vektoru $\mathcal{B}$ z rovnice statistické rovnováhy:

$$\mathcal{B}_{i_j k} = 0,$$

z rovnice počtu částic pro prvek k:

$$\mathcal{B}_{J_k} = -\sum_{j=0 (j \notin \mathcal{E})}^{J_k} \tilde{N}^*_{jk},$$

kde $\mathcal{E}$ je množina všech explicitních iontů, z rovnice zachování náboje:

$$\mathcal{B}_{J_k} = n_e - \sum_{k=1}^{K} \sum_{j=0 (j \notin \mathcal{E})}^{J_k} q_j \tilde{N}^*_{jk},$$

z rovnice zachování počtu částic:

$$\mathcal{B}_{J_k} = \frac{n_e}{F} - \sum_{k=1}^{K} \sum_{j=0 (j \notin \mathcal{E})}^{J_k} \tilde{N}^*_{jk}.$$

Výpočet B-faktorů

Po určení všech b-faktorů pro hladiny určíme i B-faktory pro ionty

$$B_{jk} = \frac{N_{jk}}{N^*_{jk}} = \frac{\sum_{l=1}^{L_j} b_{i_j k} n^*_{i_j k} + b_{1_{j+1} k} \tilde{N}^*_{jk}}{N^*_{jk}}.$$

2.6 Výpočet opacity, emisivity a vydatnosti

Opacita v závislosti na frekvenci je popsána vztahem (Mihalas, 1978 – vztah 7.1)

$$\chi_\nu = \sum_i \sum_{l>i} \left(b_{i_j k} n^*_{i_j k} - \frac{g_{i_j k}}{g_{l_j k}} b_{l_j k} n^*_{l_j k} \right) \alpha_{i_j l_j k}(\nu)$$

$$
\begin{aligned}
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} n^*_{i_j k} \left(b_{i_j k} - b_{l_{j+1} k} e^{-h\nu/kT}\right) \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) \\
&+ \sum_{l_{j+1}} n_e b_{l_{j+1} k} n^*_{l_{j+1} k} \alpha_{l_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right) \\
&+ n_e \sigma_e. \qquad (2.49)
\end{aligned}
$$

Zde první člen odpovídá vázaně-vázaným ("bound-bound") přechodům, druhý vázaně-volným ("bound-free"), třetí volně-volným ("free-free") a čtvrtý Thompsonovu rozptylu na volných elektronech. Podobně emisivita je popsána Mihalasovým vztahem (7.2)

$$
\begin{aligned}
\eta_\nu &= \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\sum_i \sum_{l>i} b_{l_j k} n^*_{l_j k} \frac{g_{i_j k}}{g_{l_j k}} \alpha_{i_j l_j k}(\nu) \right. \\
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} b_{l_{j+1} k} n^*_{i_j k} \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) e^{-h\nu/kT} \\
&+ \left. \sum_{l_{j+1}} n_e b_{l_{j+1} k} n^*_{l_{j+1} k} \alpha_{l_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) e^{-h\nu/kT} \right]. \qquad (2.50)
\end{aligned}
$$

První člen odpovídá vázaně-vázaným ("bound-bound") přechodům, druhý vázaně-volným ("bound-free") a třetí volně-volným ("free-free").

Kapitola 3

Metody výpočtu modelu atmosféry

V předcházející kapitole jsme uvedli přehled vzorců a rovnic platných ve statické sféricky symetrické atmosféře. Tyto rovnice nám určují strukturu atmosféry včetně vystupujícího záření. Z matematického hlediska tvoří systém nelineárních integrodiferenciálních rovnic, jejichž řešení lze provést pouze numericky. Proto věnují astronomové, kteří se zabývají výpočty modelů hvězdných atmosfér, tolik úsilí vytvoření spolehlivé numerické metody, která by byla schopna v rozumném čase získat teoretický model, který by co nejvíce odpovídal skutečnosti. V této kapitole předkládáme dvě metody pro výpočet modelů statických sféricky symetrických atmosfér. První metoda vychází z osvědčené Newtonovy-Raphsonovy metody (viz např. Ralston a Rabinowitz, 1978), kterou bývá v astrofyzice zvykem nazývat linearizací. Počet linearizovaných veličin se daří snížit díky zavedení přibližných Λ-operátorů do řešení rovnice přenosu záření a tím se otevírají možnosti pro zahrnutí více energetických hladin a více prvků v NLTE a celkové urychlení výpočtu. Druhá metoda využívá klasickou metodu numerické matematiky - metodu prediktor-korektor. Mezi rovnicemi popisujícími strukturu atmosféry jsou dvě (rovnice hydrostatické rovnováhy a rovnice pro optickou hloubku) prvního řádu.

Nabízí se možnost obě rovnice integrovat s vysokou přesností metodou prediktor-korektor. Nemalou výhodou obou metod je to, že je lze spojit a použít současně, čímž využijeme předností obou z nich.

3.1 Linearizace

Linearizace (Newtonova-Raphsonova metoda) nalezla široké uplatnění při výpočtech modelů hvězdných atmosfér. I v případech, kdy základem metody řešení NLTE problému je například užití přibližných lambda operátorů, bývá numerický přístup založen i na Newtonově-Raphsonově metodě. Klasickým příkladem užití Newtonovy-Raphsonovy metody je metoda úplné linearizace, kdy jsou linearizovány všechny základní rovnice určující strukturu atmosféry (n_e, T, N, J_ν a n_i). Statické sféricky symetrické atmosféry řešili metodou úplné linearizace Mihalas a Hummer (1974), Kunasz *et al.* (1975), Gruschinske a Kudritzki (1979) a Bennett (1991). V našem případě užití přibližných lambda operátorů umožňuje odstranit z linearizace pole záření a zahrnout je nepřímo pomocí rovnice (2.18).

Rovnice statistické rovnováhy jsou standardně linearizovány explicitně a v linearizaci se přímo určují populace hladin. Auer (1973) i Anderson (1987) započítávají rovnice statistické rovnováhy do linearizace implicitně a při linearizaci se populace hladin neurčují. Nové populace po linearizaci se určí vyřešením rovnic statistické rovnováhy.

Napíšeme-li celý systém rovnic symbolicky jako

$$F(n_e, T, n_i) = 0,$$

dostaneme po jeho linearizaci

$$F(n_e, T, n_i) + \frac{\partial F}{\partial n_e}\delta n_e + \frac{\partial F}{\partial T}\delta T + \frac{\partial F}{\partial n_i}\delta n_i = 0. \tag{3.1}$$

Populace n_i můžeme vyjádřit (pomocí rovnic statistické rovnováhy) formálně jako funkci n_e a T.

$$n_i = n_i(n_e, T).$$

Dále platí, že

$$\delta n_i = \frac{\partial n_i}{\partial n_e}\delta n_e + \frac{\partial n_i}{\partial T}\delta T, \tag{3.2}$$

což dosadíme do (3.1). Tímto způsobem vyloučíme populace z explicitní linearizace. Přesto však rovnice statistické rovnováhy do linearizace vstupují, a to právě přes vztah (3.2). Navíc je celkový počet částic vyjádřen pomocí hustoty elektronů a teploty, takže se celkový počet explicitně linearizovaných veličin sníží na dvě (n_e a T).

Starší linearizační programy (Mihalas a Hummer, 1974; Kunasz *et al.*, 1975; Gruschinske a Kudritzki, 1979) ponechávaly radiální vzdálenost během řešení neměnnou. Jak ukázali Fieldus *et al.* (1990) i Bennett (1991), je ve sféricky symetrické statické atmosféře nutné řešit i radiální strukturu. Proto je v předkládané metodě zavedena další linearizovaná veličina - radiální vzdálenost r.

Hloubkovou závislost veličin vyjádříme pomocí ND hloubkových bodů. Těchto ND bodů zvolíme ekvidistantně ve škále $\log \tau_R$, případně můžeme (kvůli přesnosti řešení rovnice přenosu) zvolit první a poslední krok v optické hloubce menší. Stav atmosféry v každém hloubkovém bodě $d, d = 1, \ldots, ND$ můžeme popsat (sloupcovým) vektorem ψ_d

$$\psi_d = \begin{bmatrix} n_e \\ T \\ r \end{bmatrix}_d ,$$

Linearizované rovnice lze symbolicky přepsat do tvaru

$$\mathbf{A}_d \delta\psi_{d-1} + \mathbf{B}_d \delta\psi_d + \mathbf{C}_d \delta\psi_{d+1} = \mathbf{L}_d,$$

přičemž $\mathbf{A}_1 = \mathbf{C}_{ND} = 0$. Tuto soustavu řešíme standardní Gaussovou eliminační metodou stejně jako rovnici přenosu záření v dodatku A.

V následujících částech probereme linearizaci jednotlivých základních rovnic.

3.1.1 Linearizace rovnice hydrostatické rovnováhy

Vyjdeme z rovnice (2.28). Vyjádříme tlak p_g (za předpokladu ideálnosti plynu) a hustotu ρ:

$$p_g = NkT = (n_e + n_m)kT$$

$$\rho = n_m\overline{m} + n_e m_e$$

kde n_m je hustota těžkých částic (tzv. "massive particle density") a $\overline{m}$ je střední hmotnost těchto částic. Dosazením do rovnice (2.28) dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}[(n_e + n_m)kT]}{\mathrm{d}(\frac{1}{r})} = (n_m\overline{m} + n_e m_e)G\mathcal{M} - \frac{L\chi_H}{4\pi c}. \tag{3.3}$$

V dalším můžeme diferencovat a linearizovat přímo rovnici (3.3). Jelikož existuje jednoduchý vztah mezi n_e a n_m, můžeme n_m v rovnici (3.3) nahradit n_e. Napíšeme rovnici zachování náboje

$$n_e = \sum_k \sum_{j=0}^{J_k} j N_{jk},$$

kde N_{jk} je počet částic iontu j prvku k. Tuto rovnici můžeme přepsat jako

$$n_e = \sum_k N_k \sum_{j=0}^{J_k} j f_{jk} = n_m \sum_k \alpha_k \sum_{j=0}^{J_k} j f_{jk},$$

kde N_k je počet částic prvku k, J_k je celkový počet iontů prvku k, α_k je abundance prvku k a f_{jk} je ionizační poměr pro iont j prvku k. Zavedeme označení

$$F = \sum_k \alpha_k \sum_{j=0}^{J_k} j f_{jk},$$

$$\xi = 1 + \frac{1}{F}. \tag{3.4}$$

Mezi hustotou elektronů a hustotou těžkých částic platí vztah

$$n_e = n_m F. \tag{3.5}$$

Rovnici hydrostatické rovnováhy (3.3) přepíšeme za použití vztahů (3.4) a (3.5)

$$\frac{\mathrm{d}(n_e \xi kT)}{\mathrm{d}(\frac{1}{r})} = n_e \left(\frac{\overline{m}}{F} + m_e \right) G\mathcal{M} - \frac{L\chi_{_H}}{4\pi c}. \tag{3.6}$$

Rovnici (3.6) diferencujeme

$$\begin{aligned} &(n_e)_{d-1}\xi_{d-1}kT_{d-1} - (n_e)_d\xi_d kT_d - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right) \\ &\quad\times \left[\left((n_e)_{d-1}\left(\frac{1}{F_{d-1}} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right) + (n_e)_d\left(\frac{1}{F_d} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right)\right)\overline{m}G\mathcal{M} \right. \\ &\quad \left. - \left(\chi_{_{H_{d-1}}} + \chi_{_{H_d}}\right)\frac{L}{4\pi c}\right] = 0. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Rovnici (3.7) linearizujeme:

$$\begin{aligned} &\left(\mathbf{A}^{HE}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{HE}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_d + \left(\mathbf{A}^{HE}_{T}\right)_d \delta T_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{HE}_{T}\right)_d \delta T_d \\ + \;\; &\left(\mathbf{A}^{HE}_{r}\right)_d \delta r_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{HE}_{r}\right)_d \delta r_d = \left(\mathbf{L}^{HE}\right)_d. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Příslušné koeficienty jsou uvedeny v Dodatku B.

Podobně přepíšeme horní okrajovou podmínku (2.30)

$$r_1^2\frac{(n_e)_1\xi_1 kT_1}{h} - (n_e)_1\left(\frac{1}{F_1} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right)\overline{m}G\mathcal{M} + \frac{L\chi_{H_1}}{4\pi c} = 0. \tag{3.9}$$

Nyní budeme linearizovat rovnici (3.9). Nejprve si napíšeme výraz pro $\delta\left(\frac{1}{h}\right)$,

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{1}{h}\right) &= \frac{1}{h}\left[\left(\frac{1}{(n_e)_1} - \frac{1}{1+\frac{m_e}{\overline{m}}F_1}\frac{1}{F_1}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_1\right)\delta(n_e)_1\right. \\ &- \left.\frac{1}{1+\frac{m_e}{\overline{m}}F_1}\frac{1}{F_1}\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_1 \delta T_1\right] \end{aligned} \tag{3.10}$$

Linearizovaná horní okrajová podmínka (3.9) bude

$$\left(\mathbf{B}^{HE}_{n_e}\right)_1 \delta(n_e)_1 + \left(\mathbf{B}^{HE}_{T}\right)_1 \delta T_1 + \left(\mathbf{B}^{HE}_{r}\right)_1 \delta r_1 = \left(\mathbf{L}^{HE}\right)_1. \tag{3.11}$$

Příslušné koeficienty jsou opět uvedeny v Dodatku B. Pokud budeme linearizovat proměnné n_e, T a r, použijeme k výpočtu vztahy (3.8) a (3.11).

3.1.2 Linearizace rovnice zářivé rovnováhy

Rovnici zářivé rovnováhy přepíšeme do tvaru

$$\begin{aligned}
& \left(\mathbf{A}^{RE}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{RE}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_d + \left(\mathbf{C}^{RE}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_{d+1} \\
+ \quad & \left(\mathbf{A}^{RE}_{T}\right)_d \delta T_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{RE}_{T}\right)_d \delta T_d + \left(\mathbf{C}^{RE}_{T}\right)_d \delta T_{d+1} \\
+ \quad & \left(\mathbf{A}^{RE}_{r}\right)_d \delta r_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{RE}_{r}\right)_d \delta r_d + \left(\mathbf{C}^{RE}_{r}\right)_d \delta r_{d+1} = \left(\mathbf{L}^{RE}\right)_d . \qquad (3.12)
\end{aligned}$$

Konkrétní výrazy pro koeficienty $\mathbf{A}^{RE}, \mathbf{B}^{RE} a\ \mathbf{C}^{RE}$ jsou uvedeny v Dodatku B.

Integrální tvar rovnice zářivé rovnováhy

Rovnici (2.34) diferencujeme za předpokladu třídiagonálního operátoru Λ^*

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{NF} w_i \Big[\kappa_{d,i} \left(\Lambda^*_{d,d-1,i} S_{d-1,i} + \Lambda^*_{d,d,i} S_{d,i} + \Lambda^*_{d,d+1,i} S_{d+1,i} + \Delta J_{d,i} \right) & \\
-\eta_{d,i} \Big] = 0, & \qquad (3.13)
\end{aligned}$$

kde NF je celkový počet frekvenčních bodů. Kdybychom použili jen diagonální operátor, získali bychom rovnici

$$\sum_{i=1}^{NF} w_i \left[\kappa_{d,i} \left(\Lambda^*_{d,d,i} S_{d,i} + \Delta J_{d,i} \right) - \eta_{d,i} \right] = 0.$$

Dále budeme předpokládat třídiagonální operátor Λ^* protože přechod k diagonálnímu operátoru je zřejmý. Rovnici (3.13) přepíšeme do tvaru, který má lepší numerické vlastnosti (viz Bennett, 1991)

$$\frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \left(\Lambda^*_{d,d-1,i} S_{d-1,i} + \Lambda^*_{d,d,i} S_{d,i} + \Lambda^*_{d,d+1,i} S_{d+1,i} + \Delta J_{d,i} \right)}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}} - 1 = 0, \qquad (3.14)$$

a rovnici (3.14) linearizujeme. Linearizovanou rovnici (3.12) použijeme v nezměněné formě, pokud budeme linearizovat proměnné n_e, T a r, pouze pro $d = 1$ a $d = ND$ (ND je počet hloubkových bodů) vypustíme členy, jejichž hloubkové indexy jsou buď menší jak 1 nebo větší jak ND. Pokud budeme chtít linearizovat například pouze teplotu, položíme v rovnici (3.12) $\delta n_e = \delta r = 0$.

Diferenciální tvar rovnice zářivé rovnováhy

Pro úplnost uveďme i vztahy pro linerizaci diferenciálního tvaru rovnice zářivé rovnováhy. Rovnici (2.37) diferencujeme

$$\sum_{i=1}^{NF} w_i \frac{1}{2}\left(\frac{1}{q_{d-1,i}\chi_{d-1,i}} + \frac{1}{q_{di}\chi_{di}}\right) \frac{r_d^2 f_{di} q_{di} \tilde{\mathcal{J}}_{di} - r_{d-1}^2 f_{d-1,i} q_{d-1,i} \tilde{\mathcal{J}}_{d-1,i}}{r_d - r_{d-1}} + \frac{L}{(4\pi)^2} = 0, \tag{3.15}$$

kde

$$\tilde{\mathcal{J}}_{d,i} = \Lambda^*_{d,d-1,i} S_{d-1,i} + \Lambda^*_{d,d,i} S_{d,i} + \Lambda^*_{d,d+1,i} S_{d+1,i} + \Delta J_{d,i}. \tag{3.16}$$

Zavedeme označení

$$\overline{X}_{di} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{q_{d-1,i}\chi_{d-1,i}} + \frac{1}{q_{di}\chi_{di}}\right)$$

$$\Delta r_d = r_d - r_{d-1}$$

$$Y_{di} = r_d^2 f_{di} q_{di} \tilde{\mathcal{J}}_{di} - r_{d-1}^2 f_{d-1,i} q_{d-1,i} \tilde{\mathcal{J}}_{d-1,i}$$

a rovnici (3.15) přepíšeme

$$\sum_{i=1}^{NF} w_i \overline{X}_{di} \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} + \frac{L}{(4\pi)^2} = 0. \tag{3.17}$$

3.1.3 Rovnice pro radiální optickou hloubku.

Diferenciací rovnice (2.40) dostaneme

$$\tau_{R_d} - \tau_{R_{d-1}} = -\frac{1}{2}\left(\chi_{R_{d-1}} + \chi_{R_d}\right)(r_d - r_{d-1}) \tag{3.18}$$

s okrajovou podmínkou pro $d\,(\tau_R = 2/3)$

$$R = r_d. \tag{3.19}$$

Linearizované rovnice (3.18) a (3.19) můžeme opět zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{A}^{OD}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{OD}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_d + \left(\mathbf{C}^{OD}_{n_e}\right)_d \delta(n_e)_{d+1} \\ + & \left(\mathbf{A}^{OD}_{T}\right)_d \delta T_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{OD}_{T}\right)_d \delta T_d + \left(\mathbf{C}^{OD}_{T}\right)_d \delta T_{d+1} \\ + & \left(\mathbf{A}^{OD}_{r}\right)_d \delta r_{d-1} + \left(\mathbf{B}^{OD}_{r}\right)_d \delta r_d + \left(\mathbf{C}^{OD}_{r}\right)_d \delta r_{d+1} = \left(\mathbf{L}^{OD}\right)_d . \end{aligned} \tag{3.20}$$

Vztahy pro koeficienty jsou uvedeny v Dodatku B.

3.2 Integrace metodou prediktor-korektor

Integrace metodou prediktor-korektor se v modelování atmosfér používá v různých modifikacích, avšak většinou jen jako doplněk k jiným metodám. Například Hubený (1988) používá v programu TLUSTY metodu prediktor-korektor při výpočtu šedé planparalelní atmosféry. Ve sférické geometrii ji použili například Castor (1974) a Mihalas a Hummer (1974). Samotná metoda prediktor-korektor si nedokáže poradit s nelokálním charakterem záření ve hvězdných atmosférách. Vždy je nutné řešit i rovnici přenosu záření, což je při použití Feautrierových proměnných diferenciální rovnice 2.řádu s okrajovými podmínkami.

Na rozdíl od metody úplné linearizace, zahrnuje metoda přibližných lambda operátorů nelokálnost záření až do výpočtu korekčního členu a při samotném řešení zjednodušené úlohy se nelokálnost záření neuplatňuje. Tím nám dovoluje počítat model atmosféry po jednotlivých hloubkách, samozřejmě za předpokladu diagonálního operátoru Λ^*. Nicméně i v případě třídiagonálního operátoru je metoda použitelná. Pouze příspěvek z hloubkového bodu $d+1$ (předpokládáme, že integrujeme směrem dovnitř hvězdy) je třeba nějakým způsobem aproximovat. Vhodnou aproximací se ukázalo být použití řešení známého z předchozí iterace. Metodou prediktor-korektor integrujeme rovnici hydrostatické rovnováhy a rovnici pro optickou hloubku, z čehož získáme pro každý hloubkový bod tlak plynu p_g a radiální vzdálenost r. Z těchto veličin pomocí rovnice zářivé rovnováhy a stavové robnice plynu spočteme (linearizací) elektronovou hustotu n_e a teplotu T. Předkládaná metoda může sloužit jako alternativa k metodě úplné linearizace *při užití přibližných lambda operátorů*.

3.2.1 Základní rovnice

Jako nezávislou proměnnou pro atmosféru použijeme Rosselandovu optickou hloubku. Rosselandova optická hloubka je definována rovnicí (2.40) jako

$$\mathrm{d}\tau_R = -\chi_R \mathrm{d}r, \tag{3.21}$$

kde χ_R je Rosselandova střední opacita (rovnice (2.4)). Rovnici (3.21) přepíšeme do tvaru

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\ln\tau_R} = -\frac{\tau_R}{\chi_R}. \tag{3.22}$$

Rovnici hydrostatické rovnováhy

$$\frac{\mathrm{d}p_g}{\mathrm{d}\left(\frac{1}{r}\right)} = \rho G\mathcal{M} - \frac{L\chi_H}{4\pi c} \tag{3.23}$$

přepíšeme s použitím rovnice (3.22) do tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\ln p_g}{\mathrm{d}\ln\tau_R} = \frac{\tau_R}{\chi_R r^2 p_g}\left(\rho G\mathcal{M} - \frac{L\chi_H}{4\pi c}\right) \tag{3.24}$$

Rovnice (3.22) a (3.24) budeme pro neznámé $\ln p_g$ a r integrovat směrem dovnitř hvězdy. K integraci použijeme metodu prediktor-korektor. V každém hloubkovém bodě spočteme v každém kroku z tlaku p_g Newtonovou-Raphsonovou metodou elektronovou hustotu n_e a teplotu T užitím stavové rovnice a rovnice zářivé rovnováhy.

Zavedeme označení

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} r \\ \ln p_g \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} -\frac{\tau_R}{\chi_R} \\ \frac{\tau_R}{\chi_R r^2 p_g}\left(\rho G\mathcal{M} - \frac{L\chi_H}{4\pi c}\right) \end{bmatrix}.$$

Použijeme-li metodu prediktor-korektor 2. řádu Adams-Bashfort-Moultonova typu (Atkinson *et al.*, 1989), můžeme psát pro prediktor

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + h\mathbf{f}_{d-1} \tag{3.25}$$

a pro korektor

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{2} h \left(\mathbf{f}_d + \mathbf{f}_{d-1} \right), \tag{3.26}$$

kde $h = \ln \tau_{R_d} - \ln \tau_{R_{d-1}}$. Požadujeme-li aproximaci vyšších řádů, použijeme následující dvojice vztahů pro prediktor a korektor (Babuška *et al.*, 1964)

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{2} h \left(3\mathbf{f}_{d-1} - \mathbf{f}_{d-2} \right) \tag{3.27}$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{12} h \left(5\mathbf{f}_d + 8\mathbf{f}_{d-1} - \mathbf{f}_{d-2} \right), \tag{3.28}$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{12} h \left(23\mathbf{f}_{d-1} - 16\mathbf{f}_{d-2} + 5\mathbf{f}_{d-3} \right) \tag{3.29}$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{24} h \left(9\mathbf{f}_d + 19\mathbf{f}_{d-1} - 5\mathbf{f}_{d-2} + \mathbf{f}_{d-3} \right), \tag{3.30}$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{24} h \left(55\mathbf{f}_{d-1} - 59\mathbf{f}_{d-2} + 37\mathbf{f}_{d-3} - 9\mathbf{f}_{d-4} \right) \tag{3.31}$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_{d-1} + \frac{1}{720} h \left(251\mathbf{f}_d + 646\mathbf{f}_{d-1} - 264\mathbf{f}_{d-2} + 106\mathbf{f}_{d-3} - 19\mathbf{f}_{d-4} \right). \tag{3.32}$$

Uvedené rovnice musíme samozřejmě doplnit o okrajovou podmínku pro $\mathbf{y}_1$.

3.2.2 Okrajová podmínka

Určení hodnoty p_1

Okrajovou podmínku v bodě $d = 1$ pro tlak p_g určíme podobně jako Mihalas a Hummer (1974) ve tvaru

$$r_1^2 \frac{(p_g)_1}{h} = \rho_1 G \mathcal{M} - \frac{L \chi_{H_1}}{4 \pi c} \tag{3.33}$$

Do rovnice (3.33) dosadíme $p_g = n_e \xi k T$ (ξ je zavedena rovnicí (3.4)) a řešíme ji spolu s rovnicí zářivé rovnováhy

$$\int_0^\infty \left[\kappa_\nu \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu \right) - \eta_\nu \right] \mathrm{d}\nu = 0. \tag{3.34}$$

Newtonovou-Raphsonovou metodou pro neznámé n_e a T.

Linearizací rovnic (3.33) a (3.34) dostaneme soustavu

$$\left(\mathbf{B}_{n_e}^{HE}\right)_1 \delta(n_e)_1 + \left(\mathbf{B}_T^{HE}\right)_1 \delta T_1 + \left(\mathbf{B}_r^{HE}\right)_1 \delta r_1 = \left(\mathbf{L}^{HE}\right)_1 \tag{3.35}$$

$$\left(\mathbf{B}_{n_e}^{RE}\right)_1 \delta(n_e)_1 + \left(\mathbf{B}_T^{RE}\right)_1 \delta T_1 + \left(\mathbf{B}_r^{RE}\right)_1 \delta r_1 = \left(\mathbf{L}^{RE}\right)_1, \tag{3.36}$$

kde vztahy pro koeficienty najdeme v Dodatku B. Z těchto rovnic určíme hodnoty elektronové hustoty n_e a teploty T a z nich podle stavové rovnice tlak p_1.

Určení hodnoty r_1

Hodnotu r_1 určíme jako násobek poloměru hvězdy

$$r_1 = \iota R_*,$$

kde konstantu ι určíme z předchozí iterace. Přitom pokládáme $R_* = r(\tau_R = 2/3)$.

3.2.3 Řešení rovnic metodou prediktor-korektor

Určení tlaku a radiální vzdálenosti

V každém hloubkovém bodě určíme metodou prediktor-korektor tlak plynu p_g a radiální vzdálenost r. Použijeme vztahy (3.25) a (3.26), případně vztahy (3.27) a (3.28), (3.29) a (3.30) nebo (3.31) a (3.32). Chyba metody prediktor-korektor je podle Babušky *et al.*(1964)

$$\mathbf{y}(\mathbf{f}_d) - \mathbf{y}_d^c \simeq C_p \left(\mathbf{y}_d^p - \mathbf{y}_d^c\right),$$

kde $C_p = \frac{1}{12}, \frac{1}{24}, \frac{19}{720}$a $\frac{3}{160}$ pro Adams-Bashfort-Moultonovu metodu 2., 3., 4. a 5. stupně, $\mathbf{y}^p$ značí hodnotu prediktoru a $\mathbf{y}^c$ hodnotu korektoru.

Určení elektronové hustoty a teploty

Po každém kroku určíme elektronovou hustotu n_e a teplotu T Newtonovou-Raphsonovou metodou ze stavové rovnice

$$p_g = NkT = n_e \xi kT \tag{3.37}$$

a z rovnice zářivé rovnováhy (3.34) . Linearizací rovnice (3.37) dostaneme

$$\begin{aligned} & \delta(n_e)_d \left[kT_d \left(\xi_d - \frac{(n_e)_d}{F_d^2} \left. \frac{\partial F}{\partial n_e} \right|_d \right) \right] \\ + \quad & \delta T_d \left[k(n_e)_d \left(\xi_d - \frac{T_d}{F_d^2} \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_d \right) \right] \\ = \quad & (p_g)_d - (n_e)_d \xi_d k T_d \end{aligned} \tag{3.38}$$

a řešíme spolu s rovnicí (3.36).

3.3 Složená metoda

Metody *linerarizace* a *hloubkové integrace* rozebrané v předcházejících odstavcích jsou na sobě nezávislé a mohou být používány odděleně. Je však pochopitelně možné použít obě metody současně, či přesněji řečeno, v jedné iteraci jednu po druhé. Vzhledem k tomu, že obě metody jsou v principu schopny určit tytéž veličiny, totiž n_e, T a r, nabízí se nám možnost každou z metod použít pro určení té veličiny, kde je to numericky výhodnější.

Při pokusech počítat model atmosféry pouze metodou prediktor-korektor se ukázalo, že určení teploty a elektronové hustoty ze stavové rovnice a rovnice zářivé rovnováhy je úloha značně nestabilní a v řadě případů se nepodařilo dosáhnout uspokojivého řešení. Naopak, v linearizaci je značně nestabilní rovnice pro optickou hloubku. Proto jsme pro řešení modelu atmosféry často volili následující kombinaci obou výše uvedených metod.

1. Linearizací určíme teplotní strukturu řešením rovnice zářivé rovnováhy.

2. Metodou prediktor-korektor určíme integrací rovnice hydrostatické rovnováhy a optické hloubky dovnitř hvězdy hustotu a radiální strukturu.

Uvedená metoda dává pro některé modely uspokojivé výsledky, které blíže rozebereme v kapitole 5.

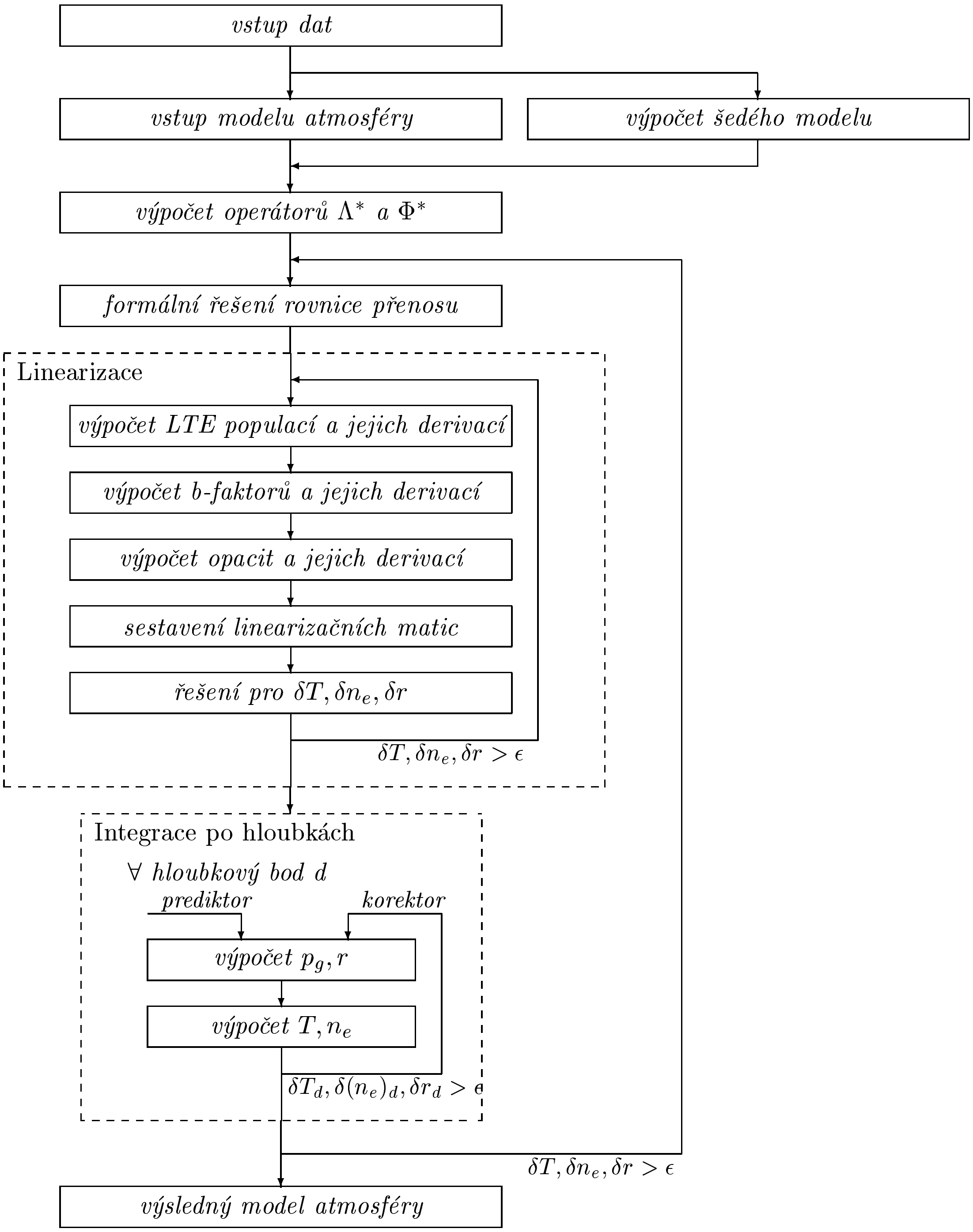
Kapitola 4

Detaily výpočetní procedury

Metoda popsaná v předcházejících kapitolách je zpracována do výpočetního programu ATA. Program je napsán v jazyku FORTRAN 77. I když byl vyvíjen pod operačním systémem Unix, je v podstatě nezávislý na operačním systému a přechod na jiný počítač vyžaduje minimum úprav.

Schéma programu (a i metody) je na obrázku 4.1. Schéma programu odpovídá v podstatě složené metodě z kapitoly 3.3. Bloky kroků v čárkovaných rámečcích (*linearizace* a *integrace po hloubkách*) jsou v zásadě volitelné. Pro oba kroky platí, že počítat model atmosféry v daném kroku můžeme pro 0 až 3 veličiny. Maximální volba, kterou nám program dovoluje, je určit nové hodnoty n_e, T a r linearizací a v dalším kroku z takto určených hodnot určit opět nové hodnoty n_e, T a r integrací po hloubkách (metodou prediktor-korektor). Minimální volba je určovat pouze v jednom kroku jednu veličinu (například určovat teplotu při pevné struktuře atmosféry) a druhý krok vynechat. Program nám umožňuje počítat i tzv. semiempirické modely, kdy předpokládáme zadanou teplotní strukturu a zbylé veličiny určíme buď linearizací nebo integrací po hloubkách. V každém případě zůstává nedotčeno *formální řešení*, které nám podstatným způsobem ovlivňuje výsledný model atmosféry.

Program byl tvořen jako "stavebnice", což znamená, že jednotlivé jeho části



Obr. 4.1: Schéma výpočtu modelu atmosféry programem ATA.

jsou částečně nezávislé a mohou být použitelné i jinde nebo mohou být nahrazeny jinými. Týká se to zejména procedur pro výpočet opacit, LTE ionizační rovnováhy, výpočtu přibližných operátorů, a řešení rovnice přenosu záření.

V této kapitole si postupně probereme jednotlivé části programu ATA.

4.1 Úvodní výpočty

4.1.1 Vstup atomárních dat

Vstup atomárních dat řídí procedura INPATO. Program byl psán se snahou, aby jeho použití nebylo pro potenciálního uživatele příliš nesnadné. Tomu je přizpůsoben vstup atomárních dat. Pro úspěšné modelování hvězdných atmosfér je totiž nutné věnovat zvýšenou pozornost atomárním datům, která mohou značně ovlivnit strukturu spočtené atmosféry. Proto je nutná snadná manipulace se vstupními atomárními daty. Vstupu dat pomocí procedury INPATO je patrný z příkladu na obr.4.2.

Uvedený vstup atomárních dat znamená, že uvažujeme atmosféru složenou z vodíku, helia, uhlíku, dusíku a kyslíku. Uhlík, dusík a kyslík vstupují pouze do LTE ionizační rovnováhy. Helium uvažujeme i jako zdroj opacit, avšak pouze ionizace He I z prvních dvou hladin a ionizace He II ze základní hladiny. Vodík uvažujeme jako šestihladinový atom (pětihladinový atom s kontinuem) s přechody mezi všemi hladinami. Zde je nutné podotknout, že číslování hladin ve vstupu je pro každý prvek nezávislé (a nemusí ani být postupné) a vyjmutí jedné hladiny ze vstupu nemá za následek pracné přečíslovávání části zbylých hladin.

```
'A' 1/                                Hydrogen
'I' 2.1781783D-11 1/                  H I
'L' 1 1/
'L' 2 2/
'L' 3 3/
'L' 4 4/
'L' 5 5/
'I' 0. 2/                             H II
'L' 15 1 0. 1/
'T' 1 1 15 0. 0 1 0/
'T' 1 2 15 0. 0 1 0/
'T' 1 3 15 0. 0 1 0/
'T' 1 4 15 0. 0 1 0/
'T' 1 5 15 0. 0 1 0/
'T' 1 1 2 4.162D-1 9 0 0/
'T' 1 1 3 7.910D-2 7 0 0/
'T' 1 1 4 2.899D-2 5 0 0/
'T' 1 1 5 1.394D-2 3 0 0/
'T' 1 2 3 0.6407 9 0 0/
'T' 1 2 4 0.1193 5 0 0/
'T' 1 2 5 4.467D-2 3 0 0/
'T' 1 3 4 0.8421 5 0 0/
'T' 1 3 5 0.1506 3 0 0/
'T' 1 4 5 1.038 3 0 0/
'A' 2/                                Helium
'I' 3.9393095D-11 1/                  He I
'L' 1 1 3.9393095D-11 1 '1 sing S'/
'L' 2 2 7.6371443D-12 1 '2 trip S'/
'I' 8.7184880D-11 2/                  He II
'L' 15 1/
'I' 0. 3/                             He III
'L' 26 1 0. 1 'He III'/
'T' 1 1 15 0. 0 0 0/
'T' 1 2 15 0. 0 0 0/
'T' 1 15 26/
'A' 6/                                Carbon
'I' 1.8040682D-11 1/                  C I
'I' 3.9066248D-11 2/                  C II
'I' 7.6724168D-11 3/                  C III
'I' 1.0332857D-10 4/                  C IV
'I' 0. 5/                             C V
'A' 7/                                Nitrogen
'I' 2.3286259D-11 1/                  N I
'I' 4.7426485D-11 2/                  N II
'I' 0. 3/                             N III
'A' 8/                                Oxygen
'I' 2.1818651D-11 1/                  O I
'I' 5.6264176D-11 2/                  O II
'I' 0. 3/                             O III
'K'
```

Obr. 4.2: Příklad vstupu atomárních dat (`'A'`-prvek, `'I'`-iont, `'L'`-hladina, `'T'`-přechod, `'K'`-konec).

4.1.2 Výpočet kvadraturních vah pro integraci přes frekvence

Program sám zvolí frekvenční body v čarách procedurou LINSET tak, že pokryje ekvidistantně předem zadaným *počtem* frekvenčních bodů interval

$$(\nu_0 - 4.55\Delta\nu_D; \nu_0 + 4.55\Delta\nu_D)\,.$$

Tato velikost intervalu je použita i v programu TLUSTY (Hubený, 1988). Procedura CONSET umístí na každou ionizační hranu jeden frekvenční bod a přidá uživatelem zadaný počet dalších frekvenčních bodů v kontinuu. Dále jsou procedurou FREWEI počítány kvadraturní váhy w_i pro integraci přes frekvence lichoběžníkovou metodou tak, aby platilo pro každou funkci f

$$\int_0^\infty f_\nu d\nu = \sum_{i=1}^{NF} w_i f_i.$$

Stejným způsobem jsou počítány kvadraturní váhy pro integrace pouze přes frekvenční body kontinua procedurou CONWEI. Kvadraturní váhy pro integraci pouze přes profil čáry počítá procedura LINSET. Zahrneme do nich i funkci profilu ϕ_ν. Pro libovolnou funkci f_ν platí

$$\int_0^\infty f_\nu \phi_\nu d\nu = \sum_{i=1}^{NF} w_i f_i. \tag{4.1}$$

Jelikož platí

$$\int_0^\infty \phi_\nu d\nu = 1,$$

požadujeme i po pravé straně rovnice (4.1) aby platilo

$$\sum_{i=1}^{NF} w_i = 1.$$

Pokud tomu tak není, renormalizujeme kvadraturní váhy tak, aby integrál profilu přes frekvence byl roven 1.

4.1.3 Počáteční model atmosféry

Vstup počátečního modelu řídí procedura INPATO. Výchozí model atmosféry může buď vstupovat ve formátu výstupu z programu ATA nebo ve speciálních formátech pro modely Kurucze (1979) nebo Mihalase (1972). Jako další možnost můžeme výchozí model spočítat a vzít za něj model šedé statické sféricky symetrické atmosféry.

4.1.4 Výpočet modelu šedé sféricky symetrické statické atmosféry

Výpočet modelu šedé atmosféry provádí procedura GRAY. Budeme řešit šedý model atmosféry pro zadanou luminositu L, hmotnost hvězdy $\mathcal{M}$ a poloměr hvězdy R. Za poloměr hvězdy zvolíme bod, v němž je Rosselandova optická hloubka rovna 2/3.

Při řešení se přidržíme postupu Mihalase a Hummera (1974). Pro teplotu platí rovnice

$$T^4 = \frac{3}{4}\left(\frac{L}{4\pi R^2\sigma}\right)\left[\int_0^R \frac{R^2}{r^2}\mathrm{d}\tau_R + C\right], \tag{4.2}$$

kde σ je Stefan-Boltzmannova konstanta, τ_R je Rosselandova optická hloubka (2.40),

$$C = \frac{1}{3}\mu_0 + \sqrt{\frac{1}{3}}\left(1-\mu_0\right),$$

a $\mu_0 = \sqrt{1-\left(r_{2/3}/R\right)^2}$. Dále použijeme rovnici hydrostatické rovnováhy ve tvaru (3.6)

$$\frac{\mathrm{d}(n_e\xi kT)}{\mathrm{d}(\frac{1}{r})} = n_e\left(\frac{\overline{m}}{F} + m_e\right)G\mathcal{M} - \frac{L\chi_{_H}}{4\pi c}. \tag{4.3}$$

Rovnice (4.2), (2.40) a (4.3) diferencujeme

$$T_d^4 = \frac{3}{4}\left(\frac{L}{4\pi R^2\sigma}\right)\left[C + \frac{1}{2}\sum_{i=2}^{d}\left(\frac{R^2}{r_{i-1}^2} + \frac{R^2}{r_i^2}\right)\Delta\tau_i\right] \tag{4.4}$$

$$r_d - r_{d-1} + \frac{2\Delta\tau_d}{\chi_{R_d} + \chi_{R_{d-1}}} = 0 \tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}(n_e)_d\xi_d kT_d - (n_e)_{d-1}\xi_{d-1}kT_{d-1} &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_d} - \frac{1}{r_{d-1}}\right) \times \\ \left\{\left[(n_e)_d\left(\frac{\overline{m}}{F_d} + m_e\right) + (n_e)_{d-1}\left(\frac{\overline{m}}{F_{d-1}} + m_e\right)\right] G\mathcal{M}\right. \\ \left. - \frac{L}{4\pi c}\left(\chi_{H_{d-1}} + \chi_{H_d}\right)\right\},\end{aligned} \tag{4.6}$$

kde $\Delta\tau_d = \tau_{R_d} - \tau_{R_{d-1}}$ a linearizujeme pro hloubkový bod d

$$\begin{aligned}\delta r_d - \frac{2\Delta\tau_d}{\left(\chi_{R_d} + \chi_{R_{d-1}}\right)^2} \left.\frac{\partial\chi_R}{\partial n_e}\right|_d \delta(n_e)_d - \frac{2\Delta\tau_d}{\left(\chi_{R_d} + \chi_{R_{d-1}}\right)^2} \left.\frac{\partial\chi_R}{\partial T}\right|_d \delta T_d \\ = r_{d-1} - r_d - \frac{2\Delta\tau_d}{\chi_{R_d} + \chi_{R_{d-1}}}\end{aligned} \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned}\frac{3}{4}\left(\frac{L}{4\pi R^2\sigma}\right)\frac{R^2}{r_d^3}\delta r_d + 4T_d^3\delta T_d \\ = \frac{3}{4}\left(\frac{L}{4\pi R^2\sigma}\right)\left[C + \frac{1}{2}\sum_{i=2}^{d}\left(\frac{R^2}{r_{i-1}^2} + \frac{R^2}{r_i^2}\right)\Delta\tau_i\right] - T_d^4\end{aligned} \tag{4.8}$$

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2r_d^2}\left\{\left[(n_e)_d\left(\frac{\overline{m}}{F_d} + m_e\right) + (n_e)_{d-1}\left(\frac{\overline{m}}{F_{d-1}} + m_e\right)\right] G\mathcal{M}\right. \\ &\qquad\left. - \frac{L}{4\pi c}\left(\chi_{H_{d-1}} + \chi_{H_d}\right)\right\}\delta r_d \\ + &\left\{kT_d\left(\xi - \frac{(n_e)_d}{F_d^2}\frac{\partial F_d}{\partial n_e}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_d} - \frac{1}{r_{d-1}}\right) \times \right. \\ &\left[\left(m_e + \left(\frac{1}{F_d} - \frac{(n_e)_d}{F_d^2}\frac{\partial F_d}{\partial n_e}\right)\overline{m}\right) G\mathcal{M}\right. \\ &\qquad\left.\left. - \frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial\chi_H}{\partial n_e}\right|_d\right]\right\}\delta(n_e)_d \\ + &\left\{k(n_e)_d\left(\xi - \frac{T_d}{F_d^2}\frac{\partial F_d}{\partial T}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_d} - \frac{1}{r_{d-1}}\right)\left[-\frac{(n_e)_d}{F_d^2}\frac{\partial F_d}{\partial T}\overline{m}G\mathcal{M}\right.\right. \\ &\qquad\left.\left. - \frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial\chi_H}{\partial T}\right|_d\right]\right\}\delta T_d \\ = &\ (n_e)_d\xi_d kT_d - (n_e)_{d-1}\xi_{d-1}kT_{d-1} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_d} - \frac{1}{r_{d-1}}\right) \times\end{aligned}$$

$$\left\{\left[(n_e)_d\left(\frac{\overline{m}}{F_d}+m_e\right)+(n_e)_{d-1}\left(\frac{\overline{m}}{F_{d-1}}+m_e\right)\right]G\mathcal{M}\right.$$
$$\left.-\frac{L}{4\pi c}\left(\chi_{H_{d-1}}+\chi_{H_d}\right)\right\}, \tag{4.9}$$

Pro první hloubkový bod máme okrajovou podmínku

$$r_1 = R. \tag{4.10}$$

Teplotu spočteme ze vztahu

$$T_1^4 = \frac{3}{4}\left(\frac{L}{4\pi R^2\sigma}\right)C \tag{4.11}$$

a pro určení elektronové hustoty užijeme linarizovanou rovnici (3.33)

$$\delta(n_e)_1\left\{-kT_1\left[2\xi_1-\frac{(n_e)_1}{F_1}\left(\frac{1}{F_1}+\frac{\xi_1}{1+\frac{m_e}{\overline{m}}F_1}\right)\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_1\right]\right.$$
$$\left.+\frac{h}{r_1^2}\left[\frac{1}{F_1}\left(1-\frac{(n_e)_1}{F_1}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_1\right)+\frac{m_e}{\overline{m}}\right]\overline{m}G\mathcal{M}-\frac{h}{r_1^2}\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial\chi_H}{\partial n_e}\right|_1\right\}=$$
$$(n_e)_1\xi_1 kT_1-\frac{h}{r_1^2}(n_e)_1\left(\frac{1}{F_1}+\frac{m_e}{\overline{m}}\right)\overline{m}G\mathcal{M}-\frac{h}{r_1^2}\frac{L\chi_{H_1}}{4\pi c}. \tag{4.12}$$

Pomocí rovnice (4.12) určíme elektronovou hustotu v prvním hloubkovém bodě. Pro získání konvergujícího řešení stačí obyčejně několik málo iterací. Pro další hloubkové body použijeme soustavu rovnic (4.7) - (4.9), v nichž nahradíme tokovou střední opacitu χ_H Rosselandovou střední opacitou χ_R. Až určíme r, n_e i T pro všechny hloubkové body, vyřešíme rovnici přenosu záření v zadaných frekvenčních bodech, spočteme tokovou střední opacitu χ_H, určíme novou hodnotu r_1 a celý postup opakujeme již se správnou hodnotou tokové střední opacity. Po několika iteracích získáme model šedé sféricky symetrické atmosféry.

4.1.5 Volba paprsků pro řešení rovnice přenosu

Procedura RAYSET spočte pro každý paprsek vzdálenost od středu symetrie, v každém hloubkovém bodě každého paprsku spočte směrový kosinus μ a integrační kvadraturní váhu pro lichoběžníkovou integraci přes úhly. Paprsky si volí uživatel sám, avšak může zvolit jen paprsky, které jsou tečné k zadaným hloubkovým bodům nebo které protínají jádro. Volba paprsků se promítne nejvíce v rovnici přenosu záření, kterou řešíme podél každého zvoleného paprsku a pak určujeme střední intenzitu. Můžeme zvolit tečný paprsek v každém hloubkovém bodě a pak jen zintegrovat specifickou intenzitu přes úhly a získat tím střední intenzitu. Jiná možnost je zvolit málo tečných paprsků a chybějící hodnoty intenzity doplnit pomocí lineární interpolace Eddingtonových faktorů a následným řešením momentové rovnice přenosu záření.

4.1.6 Sestrojení přibližného operátoru

Výpočet přibližného operátoru řídí procedura LAMAPR. V současné verzi nabízí program tři možnosti pro výpočet přibližného operátoru Λ^*. Nejdůležitější z nich je možnost diskutovaná v kapitole 2.1.5, tj. přibližný operátor Olsona a Kunasze (1987). Druhá možnost je použití tzv. "core-saturation" operátoru Rybickiho (1972), který jsme však používali jen pro srovnání a jak jsme očekávali, nedává v řadě případů uspokojivé výsledky. Třetí možností, která je ponechána opět z důvodu srovnání, je nepočítat operátor Λ^* vůbec a položit jej roven nule. V praxi to znamená, že používáme klasickou Λ-iteraci.

4.2 Detaily výpočtu opacity a emisivity

4.2.1 Ionizace a rekombinace

Ionizace zahrnujeme do celkové opacity ve tvaru (z rovnice 2.49)

$$\chi_\nu^{bf} = \sum_i \sum_{l_{j+1}} n_{i_j k}^* \left(b_{i_j k} - b_{l_{j+1} k} e^{-h\nu/kT}\right) \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu)$$

Pro ionizační účinný průřez použijeme vztah (Mihalas, 1978)

$$\alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) = \mathcal{K} \frac{z_j^4}{n_{i_j}^5 \nu^3} g_{II}\left(n_{i_j}, \nu/z_j^2\right), \tag{4.13}$$

kde konstanta $\mathcal{K} = 2.819 \cdot 10^{29}$, n_{i_j} je hlavní kvantové číslo hladiny i_j, z_j je efektivní náboj iontu j a g_{II} označuje příslušný Gauntův faktor.

4.2.2 Excitace a deexcitace

Excitace a deexcitace (vázně-vázané přechody) zahrnujeme do celkové opacity jako

$$\chi_\nu^{bb} = \sum_i \sum_{l>i} \left(b_{i_j k} n^*_{i_j k} - \frac{g_{i_j k}}{g_{l_j k}} b_{l_j k} n^*_{l_j k} \right) \alpha_{i_j l_j k}(\nu).$$

Pro účinný průřez platí

$$\alpha_{i_j l_j k}(\nu) = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{il} \phi(\nu),$$

kde f_{il} je síla oscilátoru a $\phi(\nu)$ je absorpční profil. Hodnoty f_{il} pro vodík a helium bereme pro naše účely z tabulek Wiese *et al.* (1966). Pro testovací výpočty uvažujeme dopplerovský profil

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2},$$

kde

$$x = \frac{\nu - \nu_{il}}{\Delta \nu_D}$$

a

$$\Delta \nu_D = \frac{\nu_{il}}{c} \sqrt{\frac{2kT}{M}}$$

je dopplerovská pološířka.

4.2.3 Volně-volné přechody

Opacita způsobená volně volnými přechody je dána vztahem

$$\chi_\nu^{ff} = \sum_{l_{j+1}} n_e b_{l_{j+1} k} n^*_{l_{j+1} k} \alpha_{l_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right).$$

Pro účinný průřez platí

$$\alpha_{l_{j+1}l_{j+1}k}(\nu,T) = \frac{4e^6}{3ch}\sqrt{\frac{2\pi}{3km_e^3}} z_{j+1}^2 \nu^{-3} T^{-1/2} g_{III}(\nu/z_{j+1}^2, T).$$

Abychom do celkové opacity zahrnuli i ionizace z vyšších neexplicitních hladin, uvažujeme podobně jako Hubený (1988) modifikovaný volně-volný účinný průřez ve tvaru

$$\begin{aligned}\alpha_{l_{j+1}l_{j+1}k}(\nu,T) &= \frac{4e^6}{3ch}\sqrt{\frac{2\pi}{3km_e^3}} z_{j+1}^2 \nu^{-3} T^{-1/2} \left[g_{III}(\nu/z_{j+1}^2, T) \right. \\ &+ \left. e^{h\nu_{min}/kT} - 1 \right], \end{aligned} \tag{4.14}$$

kde $\nu_{\min} = \min\left[\nu, \frac{z_{j+1}^2 E_H}{{n'}_{i_j}^2}\right]$ a ${n'}_{i_j}$ je hlavní kvantové číslo nejnižší neexplicitní hladiny a E_H je ionizační energie vodíku. Neexplicitní hladinou rozumíme hladinu, která není explicitně zahrnuta ve vstupu dat.

4.2.4 Rozptyl na volných elektronech

V horkých hvězdách je silným zdrojem opacity rozptyl fotonů na volných elektronech (Thomsonův rozptyl). V našem případě ho uvažujeme ve tvaru

$$\sigma_\nu = n_e \sigma_e,$$

tj. izotropní a nezávislý na frekvenci. Zejména předpoklad izotropie nemusí být splněn a opuštění tohoto předpokladu bude předmětem další práce. Opuštění předpokladu izotropie je složitější, než se na první pohled zdá, protože citelně ovlivní (a zkomplikuje) rovnici přenosu záření.

4.3 Formální řešení rovnice přenosu záření

Formální řešení rovnice přenosu záření v programu zajišťují procedury RTERF, VEFF a RTEMF. Procedura RTERF řeší rovnici přenosu podél všech zvolených paprsků pro neznámé $j_{\nu\mu}$ a $h_{\nu\mu}$. Řešení probíhá postupně po jednotlivých paprscích pro danou frekvenci. Nejprve se pro daný paprsek spočte škála optických hloubek podél paprsku. Přesněji řečeno, spočte se $\Delta\tau_{\nu s}$ podle vztahu (Auer, 1984; Ralston a Rabinowitz, 1978)

$$\Delta\tau_d = \frac{z_d - z_{d+1}}{2}\left[\chi_d + \chi_{d+1} + \frac{z_d - z_{d+1}}{6}\left(\left.\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}z}\right|_{d+1} - \left.\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}z}\right|_{d}\right)\right], \tag{4.15}$$

který je přesnější než standardní vztah

$$\Delta\tau_d = \frac{z_d - z_{d+1}}{2}\left[\chi_d + \chi_{d+1}\right].$$

V těchto vztazích měří z vzdálenost podél paprsku. Poté se spočte vydatnost podle vztahu (2.4)

$$S_\nu = \frac{\eta_\nu + \sigma_\nu J_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu},$$

v němž předpokládáme, že střední intenzitu záření J_ν známe z předchozí iterace. Dále ještě spočteme derivace vydatnosti $dS_\nu/d\tau_\nu$, u paprsků protínajících jádro použijeme pro derivaci vydatnosti v posledním hloubkovém bodě vztah (2.16). V horní okrajové podmínce bereme $I_\nu^- = 0$, tj. nedopadá žádné záření.

Pro diferenciaci rovnice přenosu máme tři možnosti. Můžeme použít obyčejné diference 2.řádu (například Mihalas, 1985), splajny (Hummer *et al.*, 1973) nebo Hermitovské diference (Auer, 1976). Konkrétní vztahy pro tyto možnosti jsou popsány v Dodatku A. Rovnici přenosu řešíme standardním způsobem Gaussovou eliminační metodou (A.18) a následnou zpětnou substitucí (A.17).

Následující procedura VEFF provede pro každou hloubku integraci $j_{\nu\mu}$ a $h_{\nu\mu}$ přes úhly a spočte příslušné momenty J_ν, H_ν, K_ν a integrál $\int_0^1 \mu j_{\nu\mu} d\mu$. Z nich pak určí Eddingtonovy faktory f_ν, g_ν a G_ν a sférickou funkci q_ν. Příslušné vztahy pro výpočet jsou uvedeny v Dodatku A.3.

Formální řešení rovnice přenosu uzavírá procedura RTEMF, která řeší momentovou rovnici přenosu záření při zadaném f_ν a q_ν pro neznámou $r^2 J_\nu$. Při řešení bere v úvahu rozptylový člen na pravé straně. Spodní okrajová podmínka používá derivaci vydatnosti podle optické hloubky ze vztahu (2.16), horní okrajová podmínka $H_\nu^- = 0$. Nejprve spočte ΔX_d modifikovaným vztahem (4.15)

$$\Delta X_d = \frac{r_d - r_{d+1}}{2}\left[\chi_d q_d + \chi_{d+1} q_{d+1} + \frac{r_d - r_{d+1}}{6}\left(\left.\frac{\mathrm{d}\chi q}{\mathrm{d}r}\right|_{d+1} - \left.\frac{\mathrm{d}\chi q}{\mathrm{d}r}\right|_{d}\right)\right].$$

Potom řeší momentovou rovnici přenosu podobně jako se řeší rovnice přenosu podél paprsku, tj. Gaussovou eliminací. Příslušné vztahy jsou rozepsány v Dodatku A.

Pro celé formální řešení jsou hodnoty opacity κ_ν a emisivity η_ν neměnné a jsou spočteny vždy před formálním řešením rovnice přenosu záření.

Jako poslední krok formálního řešení spočte procedura DELRAD chybový člen

$$\begin{aligned}\Delta J_\nu &= \Lambda_\nu S_\nu - \Lambda^*_\nu S_\nu = J^{FS}_\nu - \Lambda^*_\nu S_\nu,\\ \Delta H_\nu &= \Phi_\nu S_\nu - \Phi^*_\nu S_\nu = H^{FS}_\nu - \Phi^*_\nu S_\nu,\end{aligned}$$

kde J^{FS}_ν a H^{FS}_ν je výsledek procedury RTEMF, případně VEFF.

4.4 Výpočty při linearizaci

Řídící procedura linearizace je procedura SPALIN. Volá postupně procedury SETOPA (výpočet středních opacit a derivací opacit a emisivit podle r), SLRE (výpočet linearizačních koeficientů z rovnice zářivé rovnováhy - viz Dodatek B.2), SLHE (výpočet linearizačních koeficientů z rovnice hydrostatické rovnováhy - viz Dodatek B.1) a SLTAU (výpočet linearizačních koeficientů z rovnice pro Rosselandovu optickou hloubku - viz Dodatek B.3). Sestavené rovnice řeší Gaussovou eliminační metodou procedura GAU3. Výsledné opravy δn_e, δT a δr používá pro výpočet nových hodnot n_e, T a r procedura SPRES.

Před každou linearizací je však z hodnot n_e, T a r třeba určit nové opacity a jejich derivace. Nejprve vyřeší pro dané n_e a T LTE ionizační rovnováhu procedura IONFRS. Pak procedura LTEPOP spočte LTE populace všech explicitních hladin a jejich derivace. Důležitou část linearizace tvoří výpočet b-faktorů a jejich derivací. Provádí jej procedura ESE, přičemž potřebné raty a jejich derivace dodají procedury RADRAT a COLRAT. Známe-li populace a b-faktory včetně jejich derivací, spočteme snadno opacity a emisivity i jejich derivace. To provádí procedura OPAC.

4.4.1 Řešení rovnic statistické rovnováhy

Procedura ESE ze známých ratů sestaví rate matici $\mathcal{A}$, pravou stranu $\mathcal{B}$ a jejich derivace $\partial\mathcal{A}/\partial n_e$, $\partial\mathcal{A}/\partial T$, $\partial\mathcal{B}/\partial n_e$ a $\partial\mathcal{B}/\partial T$. Pak vyřeší rovnici (2.48) pro b-faktory a se známými b-faktory rovici (C.1) pro $\partial b/\partial n_e$ a $\partial b/\partial T$. Tyto výsledky předá proceduře OPAC.

4.4.2 Výpočet ratů a jejich derivací

Ionizační a excitační zářivé raty počítá procedura RADRAT. Integrace přes frekvence probíhá pomocí kvadraturních vah, které byly pro čáry spočteny v proceduře LINSET a pro kontinua v proceduře CONWEI. Procedura RADRAT nabízí tři možnosti zahrnutí zářivých ratů.

1. Detailní zářivá rovnováha, tj. počet přechodů v čáře nahoru se rovná počtu přechodů v čáře dolů. V tomto případě není nutné zářivé raty počítat.

2. Standardní zahrnutí zářivých ratů.

3. Záměrné dočasné zmenšení zářivých ratů. Tuto možnost je vhodné využít u špatně konvergujících NLTE modelů a postupně během iterování zářivé raty vrátit na původní hodnotu. Zamezí se tím totiž nadměrným opravám původních veličin (které jinak zcela zničí řešení) v počátečních iteracích. Tuto metodu popsali podrobně Hummer a Voels (1988) a nazvali ji "collisional-radiative switching".

Procedura COLRAT počítá pouze srážkové raty z nižších hladin do vyšších, raty opačným směrem jsou dány jednoduchým vztahem $n_i^* C_{ij} = n_j^* C_{ji}$. Procedura však zahrnuje i excitační raty do vyšších neexplicitních hladin do tzv. modifikovaného ionizačního ratu (Hubený, 1988). Procedury počítající srážkové raty pro vodík (COLH) a pro helium (COLHE) jsou modifikacemi stejnojmenných procedur z programu TLUSTY (Hubený, 1988). Konkrétní vztahy jsou uvedeny v Dodatku D.

4.4.3 Výpočet derivací opacity a emisivity

Pro výpočty linearizační (Newtonovou-Raphsonovou) metodou potřebujeme znát kromě opacity a emisivity i jejich derivace vzhledem k linearizovaným veličinám. Výpočet těchto derivací je snadný, i když poněkud zdlouhavý. Provádí jej procedura OPAC. Příslušné vztahy pro derivace $\partial\chi_\nu/\partial n_e$, $\partial\chi_\nu/\partial T$, $\partial\eta_\nu/\partial n_e$ a $\partial\eta_\nu/\partial T$ jsou uvedeny v dodatku C.

4.5 Integrace metodou prediktor-korektor

Integrace rovnic hydrostatické rovnováhy a rovnice pro otpickou hloubku je prováděna procedurou DEPINT. Procedura umožňuje zvolit směr integrace buď seshora dolů (s rostoucím τ_R) nebo zezdola nahoru (s klesajícím τ_R). Integrace je prováděna metodou prediktor-korektor Adams-Bashfort-Moultonova typu (Atkinson *et al.*, 1989). Je možno zvolit diferenční formule 2. až 5. řádu. Příslušné formule jsou uvedeny v kapitole 3, rovnice (3.25) až (3.32). Chyba metody prediktor korektor je (Atkinson *et al.*, 1989)

$$\mathbf{y}_d - \mathbf{y}_d^c = C_p \left(\mathbf{y}_d^p - \mathbf{y}_d^c\right),$$

kde $C_p = \frac{1}{12}, \frac{1}{24}, \frac{19}{720}, \frac{3}{160}$ pro diferenční formule 2., 3., 4., 5. řádu.

Procedura DEPINT umožňuje kromě již zmíněné hloubkové nezávislé proměnné Rosselandovy optické hloubky τ_R použít zobecněnou hmotnostní hloubku (generalized column mass-depth) $\mathrm{d}m = \rho\mathrm{d}(1/r)$ (Mihalas a Hummer, 1974). Použití této nezávislé proměnné dává stejné výsledky, dokonce v některých případech bylo řešení stabilnější.

Pravé strany příslušných rovnic (3.22) a (3.24) počítá procedura FVEC. Ze známé hodnoty p_g spočítá procedura DIELTE Newtonovou-Raphsonovou metodou n_e a T (nebo jen jednu z veličin, pokud je druhá daná).

Určení počátečních hodnot na horním okraji při integraci seshora dolů je popsáno v kapitole 3.2.2. Při integraci zezdola nahoru se jednoduše vezmou hodnoty pro ND z předchozí iterace. Při integraci zezdola nahoru hodnoty p_1 a r_1 (a tedy i $(n_e)_1$ a T_1) vyjdou z řešení modelu atmosféry a není nutné zavádět další předpoklady o opacitních zdrojích na horním okraji. Je však nutné dodat, že ačkoli integrace zezdola nahoru se jeví pro konstrukci modelu atmosféry přirozenější, je značně nestabilní a nepodařilo se ji úspěšně použít. Nicméně se jedná o perspektivní postup, který si zaslouží pečlivý rozbor, jenž bude předmětem další práce.

4.6 Urychlení konvergence

Metoda používající přibližné Λ^* operátory konverguje pouze *lineárně*, protože vyžívá informaci jen z poslední iterace. Účinnou metodu pro urychlení, využívající navíc informaci ze dvou předposledních iterací, navrhl Ng (1974) a v teorii přenosu záření ji poprvé použili Buchler a Auer (1985). V programu provádí urychlení procedura NGACC. Využívá Auerovo (1987) zobecnění Ngho metody pro M předposledních iterací. Je-li $\mathbf{x}^{(n)}$ ($\mathbf{x}$ je vektor o dimenzi ND) řešení po n-té iteraci, použijeme pro urychlené řešení $\mathbf{x}^{(\mathrm{acc})}$vztah

$$\mathbf{x}^{(\mathrm{acc})} = \left(1 - \sum_{m=1}^{M} \alpha_m\right) \mathbf{x}^{(n)} + \sum_{m=1}^{M} \alpha_m \mathbf{x}^{(n-m)}.$$

Koeficienty α_m se získají minimalizací výrazu

$$\sum_{d=1}^{ND} w_d \left(x_d^{(n)} - x_d^{(\mathrm{acc})}\right),$$

která přejde v řešení rovnice

$$\mathbf{A}\alpha = \mathbf{b},$$

kde

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_{ij} &= \sum_{d=1}^{ND} w_d \left(\Delta x_d^{(n)} - \Delta x_d^{(n-i)}\right)\left(\Delta x_d^{(n)} - \Delta x_d^{(n-j)}\right) \\
\mathbf{b}_i &= \sum_{d=1}^{ND} w_d \Delta x_d^{(n)} \left(\Delta x_d^{(n)} - \Delta x_d^{(n-i)}\right)
\end{aligned}
$$

pro $i, j = 1, \ldots, M$ a $\Delta \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}$. Existují i jiné možnosti urychlování, např. metodou Orthomin (Vinsome, 1976), kterou použili v přenosu záření poprvé Klein *et al.* (1989) nebo užitím Broydenova algoritmu při případné linearizaci rovnic statistické rovnováhy (Koesterke *et al.*, 1992). Tyto možnosti nejsou však v současné verzi implementovány.

4.7 Výstup z programu

Výstup výsledného modelu zajišťuje procedura OUTMOD. Výstup toku na povrchu hvězdy je prováděn procedurou OUTFL.

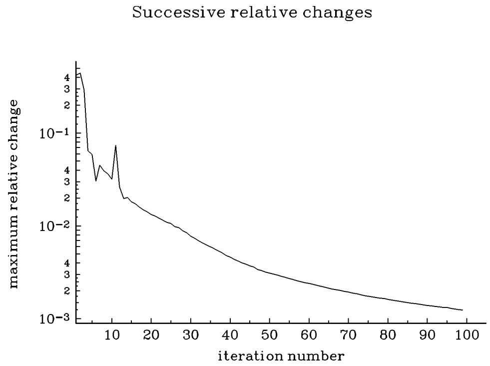
Kapitola 5

Výsledky výpočtů a diskuse

5.1 Konvergence metody

Konvergenční vlastnosti byly testovány pro výpočty dvou modelů. Jedná se o model GK3 a model B (popis modelu viz dále). Bylo uvažováno 14 hladin H I + 1 hladina H II, 2 hladiny He I + 14 hladin He II + 1 hladina He III a čáry jsou předpokládány v detailní zářivé rovnováze. U modelu B bylo místo dvou hladin He I uvažováno 14 hladin He I. Závislost maximálních odchylek (ve většině případů to jsou odchylky v určení n_e) na iteracích je uvedena na obrázcích 5.1 a 5.2. Použili jsme třídiagonální operátor Olsona a Kunasze (1987 - dále OK). Z výsledků je zřejmé, že úspěšnost metody přibližných lambda operátorů v modelování atmosfér je silně závislá na spektrálním typu hvězdy, kterou chceme modelovat. Z obrázku 5.2 , kde je uvedena závislost relativních odchylek na iteraci, je vidět, že metoda ALO je při modelování B-hvězd poměrně úspěšná. Odchylky klesají s číslem iterace srovnatelně s testy ALO, které prováděli OK. Situace je horší v případě O-hvězd (obr. 5.1), kdy odchylky klesají podstatně pomaleji. Přesto konvergenční vlastnosti zhruba odpovídají konvergenci ALI metody v pracích Pulse a Herrera (1988) a Pauldracha a Herrera (1988).

Zavedeme-li parametr $\epsilon_\nu = \kappa_\nu/(\kappa_\nu+\sigma_\nu)$, můžeme vyjádřit celkovou vydatnost

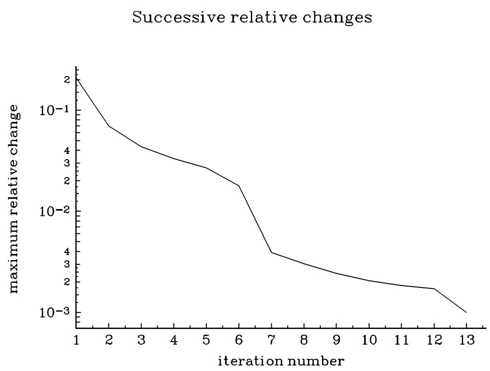


Obr. 5.1: *Konvergence metody pro model atmosféry GK3 ($L = 9.9 \cdot 10^5 L_\odot$, $R = 11.7 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 50\mathcal{M}_\odot$. Uvažováno je 14 hladin H* I *+ 1 hladina H* II*, 2 hladiny He* I *+ 14 hladin He* II *+ 1 hladina He* III *a čáry jsou v detailní zářivé rovnováze.*

ve tvaru

$$S_\nu = (1 - \epsilon_\nu) J_\nu + \epsilon_\nu \frac{\eta_\nu}{\kappa_\nu}.$$

Pak můžeme snadno popsat vlastnosti operátorů Λ^*. Jak vyplývá z práce Olsona *et al.* (1986 - dále OAB) a i Pulse a Herrera (1988), čím menší je hodnota ϵ_ν a tedy čím je vyšší podíl rozptylu na opacitách, tím jsou vlastní čísla amplifikační matice **A**, která je úměrná rozdílu matic $\Lambda - \Lambda^*$, vyšší. Rozhodující kritérium pro rychlost konvergence je největší vlastní číslo $\lambda_{\max}$ matice **A**. Pokud je dostatečně malé (typicky kolem 0.7), je konvergence ALI metody téměř blesková. Naopak, pokud platí $\lambda_{\max} \to 1$, je konvergence nejen lambda iterace, ale i ALI metody velmi pomalá až neznatelná. Pokud je $\lambda_{\max} > 1$, dojde nevyhnutelně k divergenci, i když se může po několika prvních iteracích zdát, že metoda konverguje. Právě



Obr. 5.2: *Konvergence metody pro model atmosféry B-hvězdy* $L = 2.9 \cdot 10^5 L_\odot$, $R = 80 R_\odot$ *a* $\mathcal{M} = 10.4 \mathcal{M}_\odot$. *Uvažováno je 14 hladin H* I *+ 1 hladina H* II*, 14 hladin He* I *+ 14 hladin He* II *+ 1 hladina He* III *a čáry jsou v detailní zářivé rovnováze.*

požadavek na největší vlastní číslo amplifikační matice nám určuje, jaký přibližný operátor Λ^* zvolit. Jak jsme již uvedli, je amplifikační matice úměrná rozdílu matic $\Lambda - \Lambda^*$. Při při použití Λ^*-operátorů je nutné hledat takové operátory, které nám sníží vlastní čísla amplifikační matice. Podle Gerschgorinovy věty aplikované na amplifikační matici $\mathbf{A}$ jsou vlastní čísla této matice shora omezená vztahem (viz OAB)

$$\lambda_{\max} \leq \max_i \left(\sum_j |A_{ij}| \right).$$

Úloha určení matice Λ^* tak, aby $\lambda_{\max}$ bylo minimální je značně nesnadná. Z výše zmíněné Gerschgorinovy věty vyplývá, že poměrně vhodnou volbou matice Λ^* je diagonála matice Λ. Tato volba *zajišťuje* nižší vlastní čísla amplifikační matice než v případě Λ iterace.

V některých frekvenčních bodech námi uvažovaného modelu GK3 dosahuje parametr ϵ_ν hodnot až 10^{-8}, což má za následek velkou hodnotu vlastních čísel ($\lambda_{\max} \to 1$) matice $\mathbf{A}$ a tedy i pomalou konvergenci. Výsledek je v souladu s analýzou konvergence přibližných operátorů, kterou provedli Puls a Herrero (1988). Skutečně, konvergenční vlastnosti operátoru OAB znázorněné na Fig.3 Pulse a Herrera (1988) jsou podobné předkládaným vlastnostem třídiagonálního operátoru OK. Malé rozdíly, které můžeme najít jsou způsobeny jednak tím, že se nejedná o identické operátory, které navíc jsou sestrojeny každý pro jinou geometrii. My jsme sestrojovali operátor pro sférickou geometrii, kdežto zmíněný operátor Pulse a Herrera byl konstruován pro rovinnou geometrii. Porovnáme-li naše výsledky s výsledky Pauldracha a Herrera (1988) pro planparalelní atmosféru s $T_{\mathrm{eff}} = 40000K$, $\log g = 4.0$ (jejich Fig.5), zjistíme, že konvergenční vlastosti jsou podobné.

Obecně lze říci, že s klesjícím ϵ_ν se zhoršují konvergenční vlastnosti operátorů Λ^*. Přesto jsou však stále lepší než pro klasickou Λ-iteraci (viz např. Auer, 1991). Jak ukázali OAB, je důvod pomalé konvergence Λ-iterace to, že vlastní čísla amplifikační matice získané z Λ matice jsou téměř rovny 1. Zde vyvstává otázka, zda je vůbec účinné používat metodu přibližných operátorů pro modelování atmosfér s tak silným rozptylem. Zdá se, že východiskem z této situace by mohla být tzv. hybridní metoda. Přenos záření v některých frekvenčních bodech (například v těch, které mají nejnižší parametr ϵ_ν) se bude řešit linearizací a ve zbylých frekvenčních bodech použijeme metodu přibližných lambda operátorů. Tím bychom sice značně zvýšili počet explicitně linearizovaných veličin, avšak snížili bychom počet potřebných iteračních kroků. Tento postup zhruba odpovídá hybridní ALI-CL metodě vzniklé modifikací programu TLUSTY (Hubený a Lanz, 1993).

Musíme si však ještě uvědomit, že úloha, kterou řešíme, je jiná než ta, kterou řešili OAB. Ti předpokládali *zadaný* model atmosféry a pro něj analyzovali řešení NLTE přenosu záření pro dvouhladinový atom. Podstatné zde je, že teplotní struktura zůstala *neměnná* a jediné, co zbývalo určit, byla vydatnost konzistentně s polem záření. Pokud ovšem řešíme model atmosféry a chceme *určit* teplotní strukturu, je úloha jiná. Podstatný rozdíl si ukážeme, když napíšeme rovnici (1) z OAB

$$S(\tau) = (1-\epsilon)\overline{J}(\tau) + \epsilon B$$

Pro úlohu, kterou řeší OAB se mění pouze S a $\overline{J}$. To ale není pravda v případě modelování atmosfér, neboť se musí měnit i B v závislosti na změnách teploty. Pak ovšem nelze výsledky OAB beze zbytku přijmout a bylo by nutné je zobecnit pro případ měnící se teploty (konstrukce modelu atmosféry).

Přímo se vnucuje použití originálního Scharmerova (1981) operátoru, který je konstruován na základě promyšlené fyzikální úvahy a skutečně velmi dobře popisuje záření v dané hloubce v závislosti na oblasti, z níž záření pochází. Mohlo by se tedy zdát, že by mohl být pro řešení modelu atmosféry lepší, než lokální diagonální operátory. Zajímavou úlohou, která by předcházejícím úvahám dala konkrétnější podobu, by mohla být analýza amplifikační matice vzniklé pomocí Scharmerova operátoru. To však již přesahuje problém modelování statických sféricky symetrických atmosfér.

5.2 Konkrétní výsledky pro modely

Výpočty modelů atmosfér v této práci byly prováděny s cílem porovnat výsledky s některými modely spočtenými jinými autory. Modelů statických sféricky symetrických atmosfér bylo však publikováno velmi málo, takže výběr modelů pro srovnání byl značně omezen. Přesto existuje několik vynikajících prací využívajících metodu úplné linearizace (Mihalas a Hummer, 1974; Kunasz *et al.*, 1975; Gruschinske a Kudritzki, 1979).

Všechny modely byly počítány ve standardně používaném sledu GRAY $\rightarrow$ LTE $\rightarrow$ NLTE-C $\rightarrow$ NLTE-L (viz např. Mihalas a Hummer, 1974). V tomto označení znamená GRAY model šedé atmosféry, LTE model atmosféry za předpokladu lokální termodynamické rovnováhy, NLTE-C znamená NLTE model atmosféry, při jehož výpočtu uvažujeme v rovnicích statistické rovnováhy zářivé přechody pouze v kontinuu (odtud označení C) a všechny čárové přechody jsou v detailní zářivé rovnováze a konečně NLTE-L znamená NLTE model se započtením zářivých ratů i v čarách. Je otázkou, zda je nutné uvedený standardní sled používat. Z našich zkušeností můžeme říci, že v některých případech je možné například výpočet LTE modelu přeskočit a počítat přímo NLTE-C model ze šedého modelu. Modely NLTE-L bylo vesměs nutné počítat z modelů NLTE-C. Uvedený standardní sled je zcela jistě třeba zachovat v případech silných NLTE efektů, kdy b-faktory dosahují hodnot 10^2 až 10^3.

5.2.1 Modely O hvězd s nižší svítivostí

Pro případ O hvězd s nižší svítivostí jsme vzali stejné parametry jako Gruschinske a Kudritzki (1979). Pro přehlednost je uvádíme v následující tabulce

označení modelu	$\mathcal{M}[\mathcal{M}_\odot]$	$R[R_\odot]$	$L[L_\odot]$
GK1	0.5	1.17	$5.0 \cdot 10^3$
GK2	1.0	1.65	$9.9 \cdot 10^3$
GK3	50.0	11.7	$5.0 \cdot 10^5$

Předpokládali jsme, že se atmosféry skládají z vodíku, helia, uhlíku, dusíku a kyslíku se slunečními abundancemi. Vodík jsme uvažovali jako čtrnáctihladinový atom s kontinuem. Do rovnic statistické rovnováhy vstupovaly všechny vázaně-volné přechody a vázaně-vázané přechody mezi prvními sedmi hladinami. Fotoionizační příčné průřezy jsou užity podle vztahu (4.13), pravděpodobnosti přechodů mezi hladinami podle Wiese *et al.* (1966). Volně volné přechody byly uvažovány podle vztahu 4.14, tj. se zahrnutím ionizací z vyšších neexplicitních hladin (tzv. "modified free-free cross-section"). Helium jsme uvažovali jako dvouhladinový atom He I, čtrnáctihladinový atom He II a kontinuum He III. Explicitně jsme uvažovali pouze vázaně-volné přechody. Uhlík, dusík a kyslík jsme zahrnuli pouze v LTE do rovnic zachování náboje a celkového počtu částic, jejich opacity jsme neuvažovali. Rozptyl na volných elektronech (Thomsonův rozptyl) považujeme izotropní a zahrnujeme jej do opacit a řešení rovnice přenosu záření.

V teplotní struktuře výsledných modelů GK1, GK2 a GK3 je vidět nápadné "hrbolky", zejména u modelu GK1. Je to zřejmě důsledek nedokonalých vlastností přibližných Λ^* operátorů pro případ O hvězd, kde je velký podíl rozptylu na celkové opacitě. Výsledek na obr.5.6 (model GK2) je řádově lepší. Skutečně, při výpočtu modelu GK2 bylo počítáno až do maximálního relativního rozdílu veličin v následujících iterací 10^{-4}, kdežto ostatní modely pouze do 10^{-3}. Z toho je vidět, že při použití Λ^* operátorů je nutné klást vyšší požadavky na relativní rozdíl mezi následujícími iteracemi, zejména pokud je ϵ malé. Rozhodně stojí za zmínku, že v případě B hvězd, kde je vliv rozptylu na volných elektronech menší k těmto problémům nedochází.

Porovnání sférických modelů s planparalelními není příliš jednoznačné, protože ke konstrukci sférického modelu potřebujeme znát tři základní parametry: luminositu L, poloměr R a hmotnost $\mathcal{M}$. Zvolíme-li poloměr R pevně, získáme jednoznačné hodnoty T_{eff} a g

$$
\begin{aligned}
\sigma_R {T_{\text{eff}}}^4 &= \frac{L}{4\pi R^2} \\
g &= \frac{G\mathcal{M}}{R^2},
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

které považujeme za základní parametry u planparalelních modelů atmosfér. U rozsáhlých atmosfér je otázkou dohody, kterou vzdálenost od středu označíme za poloměr hvězdy. My jsme zvolili $R = r(\tau_R = 2/3)$, jsou však možné i jiné volby, například $R = r(\tau_R = 1)$ nebo $R = r(\tau_R = \tau_{\rm min})$. Pro volbu $R = r(\tau_R = 2/3)$ hovoří kromě toho, že je často používaná i fakt, že zhruba v této oblasti se formuje většina spektrálních čar a tudíž z ní spočtené $T_{\rm eff}$ a $\log g$ budou nejlépe odpovídat případu planparalelní atmosféry. Pro srovnání a ilustraci uvádíme na obr.5.4 model planparalelní atmosféry s $T_{\rm eff}$ a $\log g$ získanými ze vztahů (5.1). Planparalelní model byl spočten pro stejné chemické složení jako sférický programem TLUSTY (Hubený, 1988). Vidíme nápadné rozdíly zejména ve vnějších vrstvách atmosféry, kde je planparalelní model zřetelně teplejší. Tento výsledek je v souladu s výsledky Kunasze *et al.* (1975).

Obr.5.5 porovnává LTE a NLTE model atmosféry GK1. Pro $\tau_R > 10^{-1.5}$ se modely v zásadě shodují, pro $\tau_R < 10^{-1.5}$ dává NLTE model vyšší teploty. Rozdíly oproti LTE jsou způsobeny řadou mechanismů. Vzrůst teploty je způsoben ohřevem převážně v Lymanovském kontinuu, je však částečně snížen díky působení Lymanovských čar a He II kontinuí (Mihalas a Auer, 1970a). Celkově lze říci, že spočtené modely kvalitativně souhlasí s výsledky Gruschinske a Kudritzkeho (1979) s výhradami ke konvergenci naší metody, které jsme uvedli výše. Přesnější porovnání není možné, protože škály obou modelů se liší. V této práci používáme výhradně τ_R, kdežto Gruschinske a Kuritzki (1979) používají škálu $\tau_{\rm sph}$, kde $\mathrm{d}\tau_{\rm sph} = -\overline{\chi}\mathrm{d}r$ a $\overline{\chi} = \int_0^\infty q_\nu \chi_\nu \, (H_\nu/H) \,\mathrm{d}\nu$ je toková střední opacita zobecněná pro sférickou geometrii.

Vystupující záření z námi spočteného modelu GK2 je na obr.5.8. Na obrázku je patrný skok v Lymanovském kontinuu He II (227 Å). Skoky vodíkových kontinuí jsou s výjimkou Lymanovského takřka neznatelné. Je to způsobeno tím, že vodík je při teplotách, které jsou v O hvězdách, téměř úplně ionizován a hlavním zdrojem opacity je proto rozptyl na volných elektronech. Silným zdrojem opacity je i He II, avšak převážně v ultrafialovém oboru.

Obrázek 5.9 ukazuje závislost b-faktorů na hloubce v modelu GK2. Za zmínku stojí vyšší hodnoty b-faktorů než mají Gruschinske a Kudritzki (1979). Pravděpodobným důvodem je rozdíl v modelech vodíkových atomů. Gruschinske a Kudritzki (1979) uvažovali 6 explicitních přechodů mezi nejnižšími hladinami, kdežto náš model uvažuje přechody mezi všemi hladinami až do $n = 8$.

Za povšimnutí stojí profily čar L_α, H_α, P_α a B_α vodíku pro model GK2 (obr.5.10). Je nutné zdůraznit přítomnost emise v čarách P_α a B_α. Tyto emise byly získány za předpokladu *statické sféricky symetrické* atmosféry. Jejich příčinou je teplotní struktura a NLTE efekty.

Centrální emise v čarách, podobné emisi v P_α, ale ve viditelném oboru (H_α, Mg II 4481 Å), jsou nyní díky citlivější technice pozorovány u řady Be hvězd (ω Car, ν Pup, ϵ Cap, ..., viz Baade, 1989). Výsledky výpočtů naznačují, že vysvětlení existence těchto emisí by bylo možné hledat pomocí detailní NLTE analýzy čar prvků, u nichž se tyto emise vyskytují. Je přirozenější a smysluplnější snažit se najít soulad teorie s pozorováním lepším započtením existujících fyzikálních procesů (NLTE), než se pokoušet za předpokladu LTE (který zjevně není splněn) a bez řádného řešení rovnice přenosu záření opatřit hvězdám studené nebo horké polární čepičky (viz Jeffery, 1991).

Na druhou stranu je zřejmé, že hvězdná atmosféra rozhodně není sféricky symetrická a že pokud budeme chtít hvězdy a jejich atmosféry opravdu pochopit, budeme muset nehomogenity v atmosféře uvažovat. Mělo by se to ale dít pouze na základě podrobných fyzikálně podložených výpočtů a úvah. Je to však postup časově značně náročnější.

5.2.2 Model $L = 1.25 \times 10^6 L_\odot$, $R = 24 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 60 \mathcal{M}_\odot$

Pro tento model testovali Mihalas a Hummer (1974 - dále MH) svůj program pro výpočet modelů statických sféricky symetrických atmosfér metodou úplné linearizace. Z tohoto prostého důvodu jsme naše první testy a ladění programu prováděli pro parametry uvedené v záhlaví. Uvažovali jsme šestihladinový model atomu vodíku (5 hladin + kontinuum) a čtyřhladinový atom ionizovaného helia. Pro fotoionizační příčné průřezy, volně-volné opacity a rozptyl na volných elektronech platí to, co bylo napsáno pro modely GK.

Z modelů MH je vhodný ke srovnání pouze model s parametrem $\gamma = 1.0$, protože my jsme zářivý činitel γ vůbec nepoužívali. Mihalas a Hummer ho zavedli proto, aby aproximovali příspěvek k tlaku záření od slabých čar. V principu je samozřejmě možné takovýto parametr zavést, avšak na metodu samotnou nemá žádný vliv. Navíc je to volný parametr, což pro konstrukci konzistentních modelů není příliš povzbuzující. Proto jsme ho podobně jako Gruschinske a Kudritzki (1979) neuvažovali.

Porovnáním průběhu teploty vidíme, že naše NLTE modely dávají teplejší atmosféru pro $\tau_R > 1$. Je samozřejmě otázka, který z modelů je spočten lépe (neříkáme který je blíže skutečnosti, protože již statičnost atmosféry způsobuje, že jsme od skutečnosti dosti daleko). Proti našemu modelu hovoří dost pomalá konvergence, neboť není zcela jisté, zda řešení na obrázku 5.11 je úplně dokonvergované. Mihalas a Hummer měli, jak sami uvádějí, při výpočtech linearizační metodou problémy při určení odchylek δJ_ν pro ionizační hranu He II. Hlavní příčinou rozdílů i potíží je nepochybně podmínka zářivé rovnováhy. V oblastech, kde platí $J_\nu \approx S_\nu$, vyžaduje velmi "opatrné zacházení", abychom předešli nestabilitám. Některé z přístupů k překonání problémů jsme uvedli v této práci v kapitolách 2 a 3. Správné zahrnutí rovnice zářivé rovnováhy (případně obecnější rovnice energetické rovnováhy) je velmi důležitá úloha, která zasluhuje pečlivý rozbor a rozsáhlé numerické testy.

Za povšimnutí stojí průběh hustoty N. Pro oba modely se téměř shoduje, avšak pro $\log \tau_R < -5$ vychází MH hustota vyšší. Rozdíl je způsoben tím, že v této práci jsme při určení horní okrajové podmínky rovnice zářivé rovnováhy linearizovali i škálovací parametr h (rovnice 3.10), kdežto MH ho považovali za pevný. Přesněji řečeno, MH určili z předpokladů pro určení horní okrajové podmínky tlak p_1 a ten nadále považovali za pevný. To nám dovolilo získat smysluplné hodnoty N i pro vnější vrstvy. Uvedené skutečnosti podtrhují nutnost pečlivého výběru horní okrajové podmínky rovnice hydrostatické rovnováhy. Kvalitativně se však oba modely v zásadě shodují.

Na obr. 5.13 jsou uvedeny b-faktory pro tři nejspodnější hladiny vodíku. Pro srovnání jsou uvedeny i b-fatory první a druhé hladiny H I podle MH. I když jsou patrné rozdíly v hodnotách b-faktorů mezi náším modelem a MH, řádově se výsledky shodují, Hodnoty b-faktorů jsou velmi citlivé na velikost gradientu zářivého tlaku. Porovnáme-li b-faktory na Fig.1 až 3 Kunasze *et al.* (1975) pro modely spočtené s rozdílným parametrem zářivého tlaku γ, vidíme, že rozdíly jsou značné a dokonce větší než rozdíl mezi námi a MH. Ve výpočtu gradientu zářivého tlaku my používáme přímo tokovou střední opacitu χ_{H}, kdežto MH berou místo ní Rosselandovu střední opacitu χ_{R} vynásobenou parametrem γ, který definují jako

$$\gamma = \int_0^\infty \frac{\chi_\nu H_\nu}{\chi_R H^\circ} \mathrm{d}\nu,$$

kde H° je okamžitá hodnota integrovaného toku. Je zřejmé, že platí $\gamma\chi_R = \chi_H$. Až potud jsou naše výrazy stejné. Pokud však položíme $\gamma = 1$, je jasné, že dostáváme rozdílné výrazy, protože obecně $\chi_R \neq \chi_H$, což může vysvětlit získané rozdíly ve výsledcích pro b-faktory.

5.2.3 Modely B hvězd

Pro modelování B-hvězd jsme uvažovali poněkud odlišné složení explicitních prvků. Opět pochopitelně uvažujeme vodík stejně jako u O hvězd (14 hladin + kontinuum), avšak z důvodu stability řešení uvažujeme všechny čáry v detailní zářivé rovnováze. He I uvažujeme jako čtrnáctihladinový atom, přičemž oddělujeme singletní a tripletní stavy. Jako samostatné hladiny uvažujeme hladiny s hlavním kvantovým číslem 1 a 2, hladiny s hlavním kvantovým číslem 3 až 5 středujeme odděleně pro singletní a tripletní stavy a hladiny s hlavním kvantovým číslem 6 až 8 středujeme pro singlety i triplety dohromady.

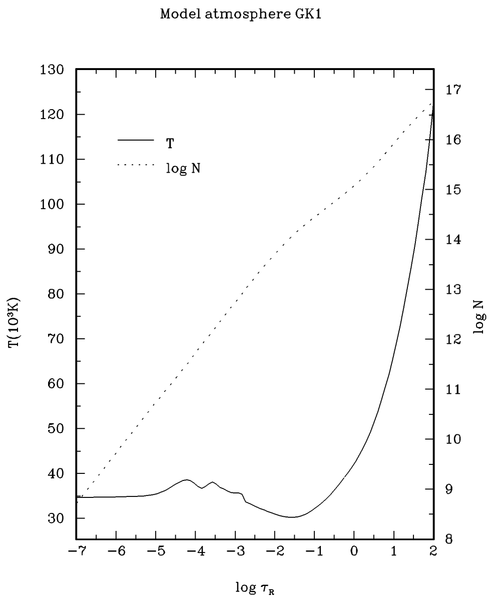
Podrobnosti jsou zřejmé z následující tabulky

```
’L’   1  1  3.9393095D-11    1  ’1 sing S’
’L’   2  2  7.6371443D-12    3  ’2 trip S’
’L’   3  2  6.3615396D-12    1  ’2 sing S’
’L’   4  2  5.8035865D-12    9  ’2 trip P’
’L’   5  2  5.3967912D-12    3  ’2 sing P’
’L’   6  3  2.5226737D-12   27  ’<3 trip>’
’L’   7  3  2.4437071D-12    9  ’<3 sing>’
’L’   8  4  1.3847278D-12   48  ’<4 trip>’
’L’   9  4  1.3663545D-12   16  ’<4 sing>’
’L’  10  5  8.7141216D-13   75  ’<5 trip>’
’L’  11  5  8.7141216D-13   25  ’<5 sing>’
’L’  12  6  6.0514733D-13  144    ’<n=6>’
’L’  13  7  4.4459804D-13  196    ’<n=7>’
’L’  14  8  3.4039537D-13  240    ’<n=8>’
```

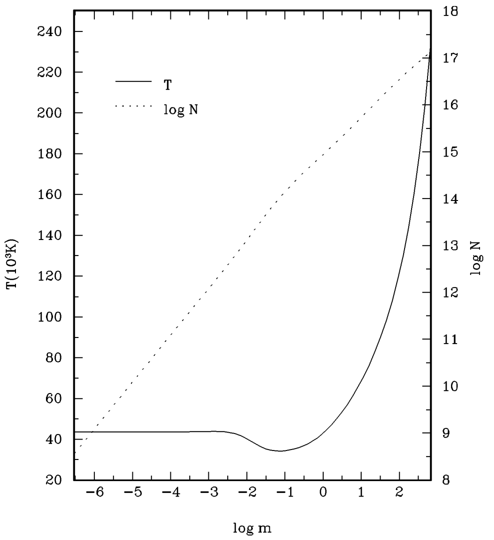
Navíc uvažujeme ještě první dvě hladiny He II s kontinuem. Uhlík, dusík a kyslík jsme zahrnuli stejně jako v modelech O hvězd, tj. pouze do rovnic zachování náboje a celkového počtu částic a jejich opacity jsme neuvažovali. Thomsonův rozptyl opět uvažujeme izotropní a zahrnujeme jej do opacit a řešení rovnice přenosu záření.

Vzhledem k tomu, že při pokusech o výpočet včetně detailního přenosu záření v čarách se nepodařilo najít konvergující řešení, jsou všechny modely spočteny za předpokladu detailní zářivé rovnováhy v čarách. Tento předpoklad znamená, že v rovnicích statistické rovnováhy vystupují v čarových přechodech pouze srážkové raty. Tento předpoklad je jistě splněn pro optické hloubky $\tau_R > 1$, pro Lymanovské čáry platí detailní zářivá rovnováha asi až do $\tau_R \approx 10^{-2}$. V těchto hloubkách můžeme považovat výsledný model atmosféry za věrohodný.

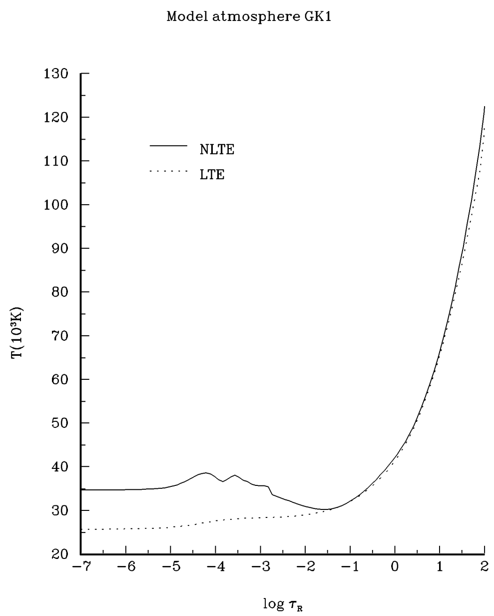
Porovnání teplotní struktury pro atmosféru s $L = 2.9 \cdot 10^5 L_\odot$, $R = 80 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 10.4 \mathcal{M}_\odot$ za různých aproximací je na obrázky 5.14.



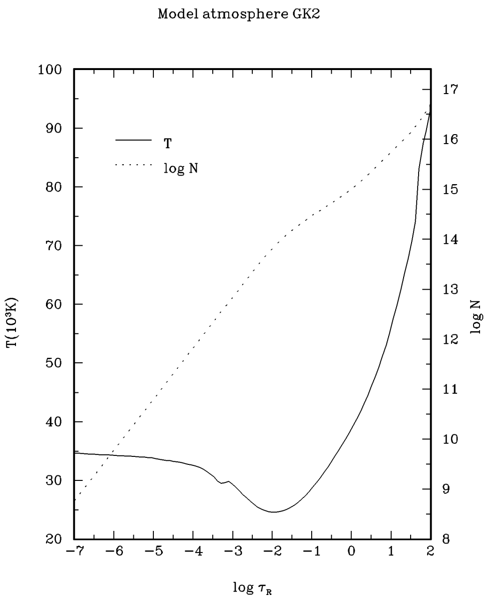
Obr. 5.3: NLTE model atmosféry pro $L = 5.0{\cdot}10^3 L_\odot$, $R = 1.17 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 0.5\mathcal{M}_\odot$.



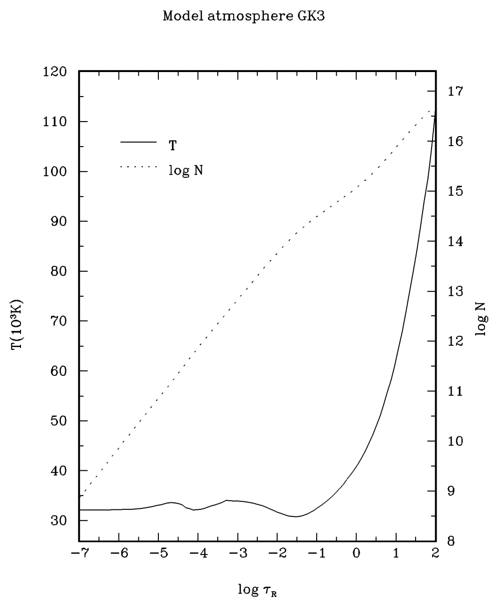
Obr. 5.4: Planparalelní NLTE model atmosféry spočtený programem TLUSTY (Hubený, 1988) pro $T_{\rm eff} = 44857K$ a $\log g = 4.00$, odpovídající modelu GK1.



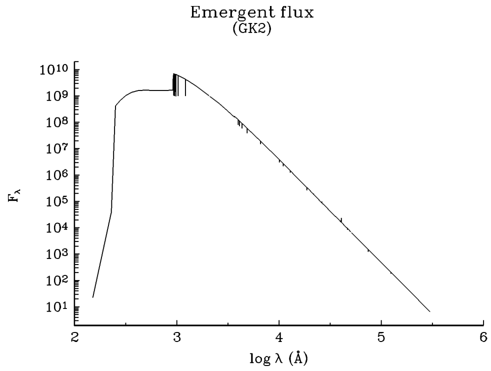
Obr. 5.5: Porovnání LTE a NLTE modelu atmosféry GK1 ($L = 5.0 \cdot 10^3 L_\odot$, $R = 1.17 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 0.5 \mathcal{M}_\odot$).



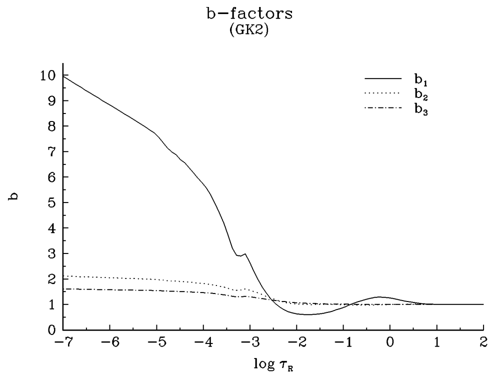
Obr. 5.6: NLTE model atmosféry pro $L = 9.9 \cdot 10^3 L_\odot$, $R = 1.65 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 1\mathcal{M}_\odot$.



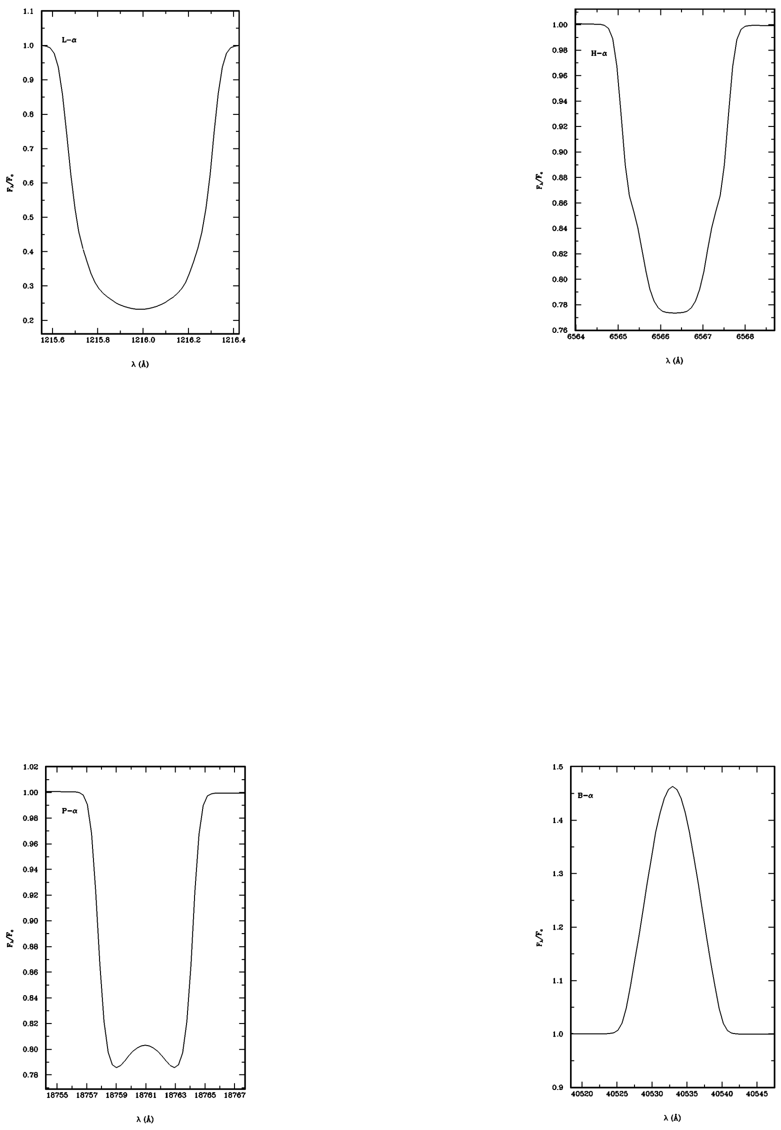
Obr. 5.7: NLTE model atmosféry pro $L = 5.0{\cdot}10^5 L_\odot$, $R = 11.7 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 50\mathcal{M}_\odot$.



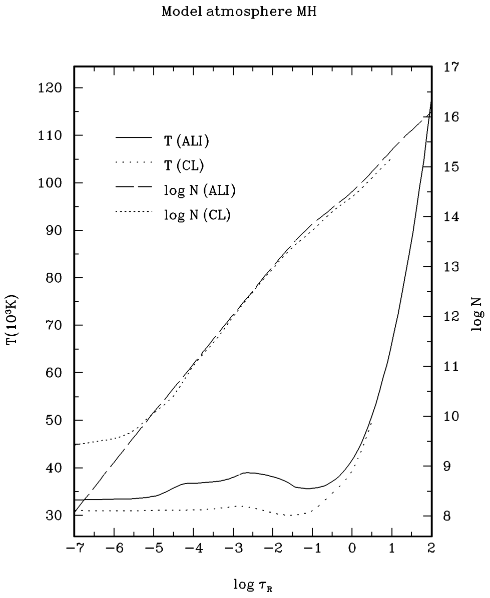
Obr. 5.8: Vystupující záření pro model atmosféry GK2 ($L = 9.9 \cdot 10^3 L_\odot$, $R = 1.17 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 1\mathcal{M}_\odot$.)



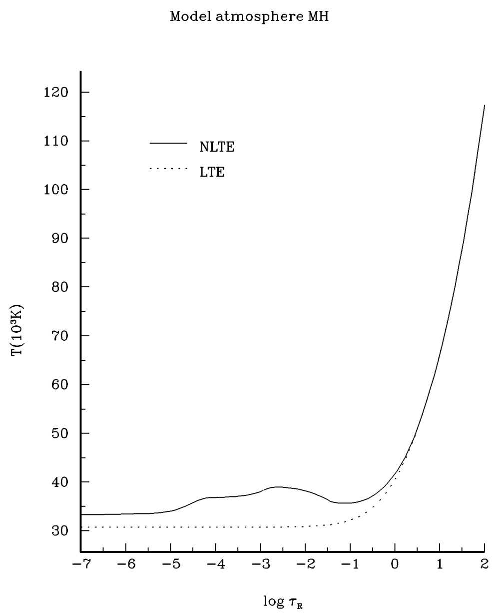
Obr. 5.9: b-faktory pro model atmosféry GK2 ($L = 9.9 \cdot 10^3 L_\odot$, $R = 1.17 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 1\mathcal{M}_\odot$.



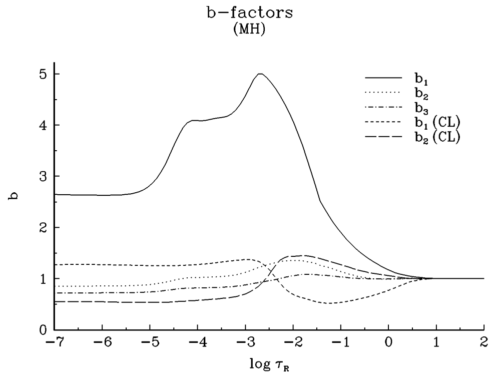
Obr. 5.10: Profily čar L_α, H_α, P_α a B_α pro model atmosféry GK2 ($L = 9.9\cdot10^3 L_\odot$, $R = 1.17 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 1\mathcal{M}_\odot$.



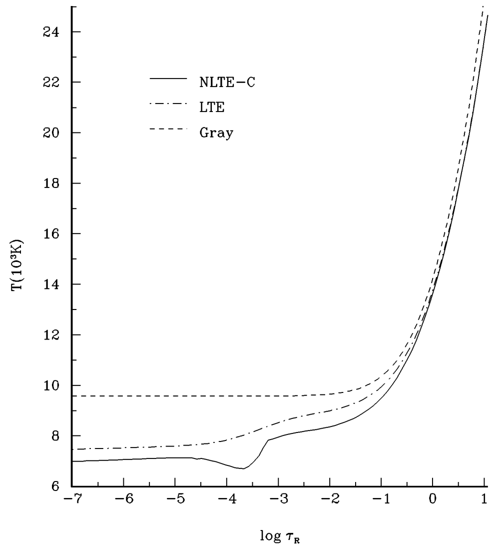
Obr. 5.11: NLTE model atmosféry pro $L = 1.25 \cdot 10^6 L_\odot$, $R = 24 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 60 \mathcal{M}_\odot$. Křivky označené ALI jsou spočtené naším programem, křívky označené CL jsou převzaty od Mihalase a Hummera (1974).



Obr. 5.12: Porovnání LTE a NLTE modelu atmosféry MH ($L = 1.25 \cdot 10^6 L_\odot$, $R = 24 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 60\mathcal{M}_\odot$).



Obr. 5.13: b-faktory pro model atmosféry MH ($L = 1.25 \cdot 10^6 L_\odot$, $R = 24 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 60 \mathcal{M}_\odot$). b-faktory označené CL spočítali Mihalas a Hummer (1974).



Obr. 5.14: Porovnání LTE, NLTE-C a šedého modelu atmosféry pro $L = 2.9 \cdot 10^5 L_\odot$, $R = 80 R_\odot$ a $\mathcal{M} = 10.4 \mathcal{M}_\odot$.

Kapitola 6

Závěr

Cesta ke konzistentnímu modelu hvězdné atmosféry, který by co nejlépe odpovídal skutečnosti, je svízelná. I řešení tak základního problému jako je modelování statické sféricky symetrické atmosféry v hydrostatické a zářivé rovnováze skýtá celou řadu úskalí.

Hlavním cílem práce bylo vyvinout metodu pro výpočet statických sféricky symetrických atmosfér v hydrostatické a zářivé rovnováze s použitím přibližných Λ^*-operátorů. Dalším cílem bylo vytvoření výpočetního programu, kde by byla metoda zpracována a ověření jeho funkčnosti (a tím i metody) na výpočtu testovacích modelů atmosfér. Oba výše zmíněné cíle se podařilo splnit. Z výsledků práce vyplývají následující závěry.

- Metoda přibližných Λ^*-operátorů je *vhodná* i pro modelování sférických atmosfér. Její hlavní předností jsou poměrně nízké paměťové nároky a snadná implementace. Je proto žádoucí a smysluplné tuto metodu dále rozvíjet a vylepšovat. Ve sférickém případě však dává pomalejší konvergenci než v planparalelním, jak je patrné z výsledků kapitoly 5.1. Werner (1986) udává pro své planparalelní modely rychlejší konvergenci, než jsme získali v našem případě. Zvýšenou pozornost je třeba věnovat konstrukci operátoru Λ^*. Ačkoli je pro řešení NLTE formování čar ukázáno, že nejvhodnější volbou operátoru Λ^* je diagonála Λ-operátoru, pro výpočet modelu atmosféry to dosud ukázáno není, takže i když diagonální operátory používáme, stále musíme vést v patrnosti možnost použít operátor Scharmera (1981). Proto by bylo dobré v budoucnu provést analýzu vlastních čísel amplifikační matice vzniklé ze Scharmerova operátoru.

- Linearizace rovnice zářivé rovnováhy je v řadě případů nestabilní. K velkým nestabilitám docházelo ve velkých optických hloubkách, kde integrální tvar rovnice zářivé rovnováhy neposkytoval dostatečnou přesnost. Werner (1993) doporučil použít k překonání nestabilit ve velkých hloubkách místo Λ^*-iterace obyčejnou Λ-iteraci. Pro oblast, kde platí difúzní přiblížení, jsme položili $\Lambda^* = 0$. Oblast platnosti difúzního přiblížení jsme určili tak, že jsme testovali, zda $J_\nu - B_\nu < \delta$, kde δ bývalo nejčastěji 10^{-3}. Tímto vylepšením jsme získali požadovanou stabilitu. Další možností je užití přibližných Φ^*-operátorů v diferenciálním tvaru rovnice zářivé rovnováhy, které však není v současné verzi programu implementováno. Pro svou důležitost v modelování atmosfér by bylo velmi užitečné podrobit rovnici zářivé rovnováhy podrobné numerické analýze a provést kritické porovnání různých metod jejího započtení.

- Sporným problémem zůstává zahrnutí rovnic statistické rovnováhy do linearizace pomocí b-faktorů implicitně. Cena za to, že jsme získali málo explicitních rovnic k linearizaci, může být větší nestabilita a ztráta informace, pokud jsou členy s $\partial B/\partial x$ malé ve srovnání s ostatními. Původní záměr, kvůli kterému jsme zavedli linearizaci b-faktorů pomocí jejich derivací, bylo využití Andersonova (1985) blokování záření jako dalšího prostředku k urychlení výpočtu. Zavedení blokovaných veličin tak, aby rovnice pro blokované veličiny byly formálně stejné jako rovnice pro neblokované veličiny, se ukázalo velmi obtížné a vedlo ke čtyřem různým blokovaným opacitám, z nichž dvě byly úhlově závislé. Kvůli uvedeným těžkostem jsme nakonec od blokování ustoupili.

- Důležitým krokem v metodě je formální řešení. V naší práci je počítáno s vysokou přesností paprskovou metodou. Standardně se chápe jako určení pole záření ze zadané opacity a emisivity. Ukazuje se, že takto pojaté formální řešení nemusí být v některých případech zárukou konvergentnosti celé úlohy. Potíž je v tom, že takto určené pole záření není plně konzistentní s opacitou a emisivitou, z níž bylo spočtené. Míra této nekonzistentnosti ovlivňuje konvergenci celé úlohy. Obecně lze říci, že pokud jsou NLTE efekty malé (b-faktory < 10), tato nekonzistence nevadí. Pokud však jsou NLTE efekty velké, může tato nekonzistence způsobit destabilizaci celého řešení. Cena za konzistentní určení pole záření je prodloužení výpočtu. Je totiž nutné provést následující cyklus

$$\begin{tikzcd} n_i \arrow[r] & S_\nu \arrow[r, "\mathrm{RTE}"] & J_\nu \arrow[rr] \arrow[dl, "\mathrm{ESE}"] & & \Delta J_\nu \arrow[r] & {} \\ & n_i \arrow[u] & & & & \end{tikzcd}$$

tj vyřešit formálně rovnici přenosu a poté určit nové populace pomocí rovnic statistické rovnováhy. Jiná možnost je s použitím operátorů Λ^*.

$$\begin{tikzcd} n_i \arrow[r] & S_\nu \arrow[r, "\mathrm{RTE}"] & J_\nu \arrow[r] & \Delta J_\nu \arrow[rr] \arrow[d, "\mathrm{lin.\ ESE}"] & & {} \\ & n_i \arrow[u] & & \delta n_i \arrow[ll] & & \end{tikzcd}$$

tj po formálním řešení rovnoce přenosu záření určíme korekční člen ΔJ_ν a pak linearizujeme rovnice statistické rovnováhy, v nichž jsme vyjádřili střední intenzitu pomocí vztahu (2.21). Poté určíme nové populace a celý iterační postup můžeme opakovat. Oba uvedené výpočty mají za následek prodloužení výpočtu. Nicméně, vzhledem k nestabilitám při výpočtech některých NLTE modelů, v nichž čáry nejsou v detailní rovnováze, budou v následující verzi programu ATA implementovány.

- Dosud málo požívaná je metoda integrace tlaku a radiální vzdálenosti. metodou prediktor korektor. Rovnici hydrostatické rovnováhy pro LTE sférickou atmosféru takto integroval Castor (1974). Z výsledků práce se zdá, že tato metoda může v některých případech plně nahradit standardní linearizaci, zejména při výpočtech semiempirických modelů. Opět se nabízí použít ve výrazu pro tlak záření přibližné Φ^* operátory, což však není v současné verzi implementováno.

Program byl vytvářen tak, aby zahrnutí libovolného množství prvků a hladin v NLTE nebylo problémem. Naše výpočty modelů sférických atmosfér prokázaly použitelnost přibližných lambda operátorů i pro tento sférický případ. V tomto smyslu jsou naše modely krokem kupředu. Některé speciální věci však zůstávají nedořešeny. V současné verzi je například možné uvažovat pouze dopplerovský profil spektrálních čar. Pochopitelně by bylo třeba zahrnout i starkovské rozšíření čar alespoň pro vodík. Dále se vůbec neuvažuje vliv parciální redistribuce, která je zejména pro čáru L_α i v modelování atmosfér důležitá (Hubený, 1980). Další vylepšení (a to důležité) spočívá v zahrnutí tzv. "occupation probabilities" formalismu (Hummer a Mihalas, 1988), který umožňuje přesnější určení snížení ionizačního potenciálu. V neposlední řadě je třeba zahrnou "NLTE line blanketing" podobně jako Hubený a Lanz (1993), případně i tzv. "wind blanketing" (Abbott a Hummer, 1985).

Kromě výše uvedených doplňků stávajícího statického modelu předpokládáme logické pokračování opuštěním předpokladu statičnosti a započtením rychlostních polí pomocí metod zářivé hydrodynamiky. Pro tento případ, který je již blíže reálným atmosférám, by měly statické atmosféry sloužit jako pevný základ dalšího výzkumu.

Dodatek A

Diferenciace rovnice přenosu záření ve sférické geometrii

A.1 Rovnice přenosu podél paprsku

Řešíme rovnici

$$j" = j - S \tag{A.1}$$

s okrajovými podmínkami

$$j' = j - I^-$$
$$j' = I^+ - j$$

a rovnici

$$h" = h - S' \tag{A.2}$$

s okrajovými podmínkami

$$h' = h + I^- - S$$
$$h' = I^+ - h - S$$

Diferenciované rovnice (A.1) a (A.2)

$$
\begin{aligned}
&(a_d + A_d)j_{d-1} + (b_d + B_d)j_d + (c_d + C_d)j_{d+1} = A_d S_{d-1} + B_d S_d + C_d S_{d+1}\\
&(a_d + A_d)h_{d-1} + (b_d + B_d)h_d + (c_d + C_d)h_{d+1}\\
&\qquad\qquad = A_d S'_{d-1} + B_d S'_d + C_d S'_{d+1}
\end{aligned}
$$

kde

$$
\begin{aligned}
a_d &= -\frac{1}{\frac{1}{2}\left(\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}} + \Delta\tau_{d+\frac{1}{2}}\right)\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}}} && \text{(A.3)}\\
c_d &= -\frac{1}{\frac{1}{2}\left(\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}} + \Delta\tau_{d+\frac{1}{2}}\right)\Delta\tau_{d+\frac{1}{2}}} && \text{(A.4)}\\
b_d &= -a_d - c_d. && \text{(A.5)}
\end{aligned}
$$

Dále je pro obyčejné diference 2.řádu

$$A_d = 0 \qquad\qquad C_d = 0, \tag{A.6}$$

pro splajny

$$A_d = -a_d\frac{\Delta\tau^2_{d-\frac{1}{2}}}{6} \qquad\qquad C_d = -c_d\frac{\Delta\tau^2_{d+\frac{1}{2}}}{6} \tag{A.7}$$

a pro Hermitovské diference

$$A_d = \frac{1}{6}\left(1 + \frac{1}{2}a_d\Delta\tau^2_{d+\frac{1}{2}}\right) \qquad\qquad C_d = \frac{1}{6}\left(1 + \frac{1}{2}c_d\Delta\tau^2_{d-\frac{1}{2}}\right). \tag{A.8}$$

Dále platí

$$B_d = 1 - A_d - C_d. \tag{A.9}$$

Diferenciovaná horní okrajová podmínka

$$
\begin{aligned}
(b_1 + 1 + B_1)j_1 + (c_1 + C_1)j_2 &= I^- + B_1 S_1 + C_1 S_2,\\
(b_1 + 1 + B_1)h_1 + (c_1 + C_1)h_2 &= -I^- + S_1 + B_1 S'_1 + C_1 S'_2,
\end{aligned}
$$

kde

$$b_1 = \frac{1}{\Delta\tau_{\frac{1}{2}}} \qquad\qquad c_1 = -b_1. \tag{A.10}$$

Dále je pro obyčejné diference 2.řádu

$$B_1 = 0 \qquad\qquad C_1 = 0, \tag{A.11}$$

pro splajny a pro Hermitovské diference

$$B_1 = \frac{\Delta\tau_{\frac{1}{2}}}{3} \qquad\qquad C_1 = \frac{B_1}{2}. \tag{A.12}$$

Diferenciovaná spodní okrajová podmínka

$$\begin{aligned}
(a_{ND} + A_{ND})j_{ND-1} + (b_{ND} + 1 + B_{ND})j_{ND} \\
= I^+ + A_{ND}S_{ND-1} + B_{ND}S_{ND}, \\
(a_{ND} + A_{ND})h_{ND-1} + (b_{ND} + 1 + B_{ND})h_{ND} \\
= I^+ + A_{ND}S'_{ND-1} + B_{ND}S'_{ND} - S_{ND},
\end{aligned}$$

kde

$$b_{ND} = \frac{1}{\Delta\tau_{ND-\frac{1}{2}}} \qquad\qquad a_{ND} = -b_{ND}. \tag{A.13}$$

Dále je pro obyčejné diference 2.řádu

$$B_{ND} = 0 \qquad\qquad A_{ND} = 0, \tag{A.14}$$

pro splajny a pro Hermitovské diference

$$B_{ND} = \frac{\Delta\tau_{ND-\frac{1}{2}}}{3} \qquad\qquad C_{ND} = \frac{B_{ND}}{2}. \tag{A.15}$$

V polonekonečné atmosféře můžeme zvolit spodní okrajovou podmínku ve tvaru (difúzní přiblížení)

$$j_{ND} = S_{ND} + \frac{d^2S}{d\tau^2}\Big|_{ND}$$
$$h_{ND} = \frac{dS}{d\tau}\Big|_{ND}$$

s nulovými koeficienty a_{ND}, b_{ND}, c_{ND}, A_{ND}, B_{ND} a C_{ND}, což odpovídá volbě

$$I^+ = S_{ND} + \frac{dS}{d\tau}\Big|_{ND} + \frac{d^2S}{d\tau^2}\Big|_{ND}.$$

Uvedené koeficienty u j a h tvoří třídiagonální systém

$$\begin{aligned}
&\mathcal{B}_1 j_1 + \mathcal{C}_1 j_2 = \mathcal{L}_1 \\
&\mathcal{A}_d j_{d-1} + \mathcal{B}_d j_d + \mathcal{C}_d j_{d+1} = \mathcal{L}_d \qquad\qquad d = 2 \dots ND-1 \\
&\mathcal{A}_{ND} j_{ND-1} + \mathcal{B}_{ND} j_{ND} = \mathcal{L}_{ND},
\end{aligned} \tag{A.16}$$

kde

$$\mathcal{B}_1 = b_1 + 1 + B_1 \qquad \mathcal{C}_1 = c_1 + C_1$$

$$\mathcal{A}_d = a_d + A_d \qquad \mathcal{B}_d = b_d + B_d \qquad \mathcal{C}_d = c_d + C_d \qquad d = 2 \dots ND-1$$

$$\mathcal{A}_{ND} = a_{ND} + A_{ND} \qquad \mathcal{B}_{ND} = b_{ND} + 1 + B_{ND} \text{ pro paprsky protínající jádro}$$

$$\mathcal{B}_{ND} = b_{ND} + B_{ND} \qquad \text{pro tečné paprsky}$$

a pravá strana pro j

$$\begin{aligned}
&\mathcal{L}_1 = I^- + B_1 S_1 + C_1 S_2 \\
&\mathcal{L}_d = A_d S_{d-1} + B_d S_d + C_d S_{d+1} \qquad d = 2 \dots ND-1 \\
&\mathcal{L}_{ND} = I^+ + A_{ND} S_{ND-1} + B_{ND} S_{ND}
\end{aligned}$$

nebo pro h

$$\begin{aligned}
&\mathcal{L}_1 = -I^- + S_1 + B_1 S'_1 + C_1 S'_2, \\
&\mathcal{L}_d = A_d S'_{d-1} + B_d S'_d + C_d S'_{d+1} \qquad d = 2 \dots ND-1 \\
&\mathcal{L}_{ND} = I^+ + A_{ND} S'_{ND-1} + B_{ND} S'_{ND} - S_{ND}.
\end{aligned}$$

Pro tečné paprsky je $I^+ = 0$ a navíc pro h uvažujeme okrajovou podmínku v jednodušším tvaru

$$h_{ND} = 0.$$

Řešením tohoto systému je

$$\begin{aligned}
&j_{ND} = \nu_{ND} \\
&j_d = \nu_d + \mathcal{D}_d j_{d+1} \qquad\qquad d = ND-1 \dots 1,
\end{aligned} \tag{A.17}$$

kde

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{D}_1 = -\mathcal{B}_1^{-1}\mathcal{C}_1 \\
&\mathcal{D}_d = -\left(\mathcal{B}_1 + \mathcal{A}_d\mathcal{D}_{d-1}\right)^{-1}\mathcal{C}_d \qquad\qquad d = 2\dots ND \\
&\nu_1 = \mathcal{B}_1^{-1}\mathcal{L}_1 \\
&\nu_d = \left(\mathcal{B}_1 + \mathcal{A}_d\mathcal{D}_{d-1}\right)^{-1}\left(\mathcal{L} - \mathcal{A}_d\nu_{d-1}\right) \qquad\qquad d = 2\dots ND
\end{aligned}
\tag{A.18}
$$

A.2 Momentová rovnice přenosu

Řešíme rovnici

$$
(fq\mathcal{J})\text{"} = \frac{1}{q}\left(\tilde{r}\mathcal{J} - \mathcal{S}\right) \tag{A.19}
$$

s okrajovými podmínkami

$$
\begin{aligned}
(fq\mathcal{J})' &= g\mathcal{J} - \mathcal{H}^- \\
(fq\mathcal{J})' &= \mathcal{H}^+ - g\mathcal{J},
\end{aligned}
$$

kde $\mathcal{J} = r^2 J$, $\mathcal{S} = r^2 S$ a $\tilde{r} = 1/(1 + \sigma/\chi)$.

Diferenciovaná rovnice (A.19)

$$
\begin{aligned}
&\left(a_d f_{d-1} q_{d-1} + \frac{A_d}{q_{d-1}}\tilde{r}_{d-1}\right)\mathcal{J}_{d-1} + \left(b_d f_d q_d + \frac{B_d}{q_d}\tilde{r}_d\right)\mathcal{J}_d + \\
&\left(c_d f_{d+1} q_{d+1} + \frac{C_d}{q_{d+1}}\tilde{r}_{d+1}\right)\mathcal{J}_{d+1} = \frac{A_d}{q_{d-1}}\mathcal{S}_{d-1} + \frac{B_d}{q_d}\mathcal{S}_d + \frac{C_d}{q_{d+1}}\mathcal{S}_{d+1}
\end{aligned}
$$

Diferenciovaná horní okrajová podmínka

$$
\left(b_1 f_1 q_1 + g_1 + \frac{B_1}{q_1}\tilde{r}_1\right)\mathcal{J}_1 + \left(c_1 f_2 q_2 + \frac{C_1}{q_2}\tilde{r}_2\right)\mathcal{J}_2 = \mathcal{H}^- + \frac{B_1}{q_1}\mathcal{S}_1 + \frac{C_1}{q_2}\mathcal{S}_2
$$

Diferenciovaná spodní okrajová podmínka

$$
\begin{aligned}
&\left(a_{ND} f_{ND-1} q_{ND-1} + \frac{A_{ND}}{q_{ND-1}}\tilde{r}_{ND-1}\right)\mathcal{J}_{ND-1} + \\
&\left(b_{ND} f_{ND} q_{ND} + g_{ND} + \frac{B_{ND}}{q_{ND}}\tilde{r}_{ND}\right)\mathcal{J}_{ND} = \mathcal{H}^+ + \frac{A_{ND}}{q_{ND-1}}\mathcal{S}_{ND-1} + \frac{B_{ND}}{q_{ND}}\mathcal{S}_{ND}
\end{aligned}
$$

Pro koeficienty a_d, b_d, c_d, A_d, B_d a C_d, $d = 1 \dots ND$ platí opět vztahy (A.3) – (A.9), (A.10) – (A.12) a (A.13) – (A.15). $\mathcal{H}^{\pm}$ v okrajových podmínkách je

$$\mathcal{H}^{\pm} = \int_0^1 \mu I^{\pm} \mathrm{d}\mu,$$

což v případě $\mathcal{H}^+$ pro polonekonečnou atmosféru (difúzní přiblížení) je

$$\mathcal{H}^+ = \frac{1}{2}\mathcal{S} + \frac{1}{3}\mathcal{S}' + \frac{1}{4}\mathcal{S}".$$

Uvedené koeficienty opět tvoří třídiagonální systém (A.16), kde nyní ($d = 2 \dots ND - 1$)

$$\mathcal{B}_1 = b_1 f_1 q_1 + g_1 + \frac{B_1}{q_1}\tilde{r}_1 \qquad \mathcal{C}_1 = c_1 f_2 q_2 + \frac{C_1}{q_2}\tilde{r}_2$$

$$\mathcal{A}_d = a_d f_{d-1} q_{d-1} + \frac{A_d}{q_{d-1}}\tilde{r}_{d-1} \qquad \mathcal{B}_d = b_d f_d q_d + \frac{B_d}{q_d}\tilde{r}_d$$

$$\mathcal{C}_d = c_d f_{d+1} q_{d+1} + \frac{C_d}{q_{d+1}}\tilde{r}_{d+1}$$

$$\mathcal{A}_{ND} = a_{ND} f_{ND-1} q_{ND-1} + \frac{A_{ND}}{q_{ND-1}}\tilde{r}_{ND-1}$$
$$\mathcal{B}_{ND} = b_{ND} f_{ND} q_{ND} + g_{ND} + \frac{B_{ND}}{q_{ND}}\tilde{r}_{ND}$$

s pravou stranou

$$\mathcal{L}_1 = \mathcal{H}^- + \frac{B_1}{q_1}S_1 + \frac{C_1}{q_2}S_2$$
$$\mathcal{L}_d = \frac{A_d}{q_{d-1}}S_{d-1} + \frac{B_d}{q_d}S_d + \frac{C_d}{q_{d+1}}S_{d+1} \qquad d = 2 \dots ND - 1$$
$$\mathcal{L}_{ND} = \mathcal{H}^+ + \frac{A_{ND}}{q_{ND-1}}S_{ND-1} + \frac{B_{ND}}{q_{ND}}S_{ND}$$

Systém řešíme podobně jako pro rovnici podél paprsku.

A.3 Výpočet Eddingotnových faktorů a funkce sféričnosti

Řešením (A.1) a (A.2) získáme $j_{\nu\mu}$ a $h_{\nu\mu}$. Integrací určíme $J_\nu = \int_0^1 j_{\nu\mu} \mathrm{d}\mu$, $H_\nu = \int_0^1 \mu h_{\nu\mu} \mathrm{d}\mu$, $K_\nu = \int_0^1 \mu^2 j_{\nu\mu} \mathrm{d}\mu$ a $\int_0^1 \mu j_{\nu\mu} \mathrm{d}\mu$ pro určení g_ν. Pro integraci použijeme vztahy (Auer, 1984)

$$J = \frac{1}{2} \sum_m \Delta\mu_m \left(j_{m+1} + j_m\right),$$

$$H = \frac{1}{6} \sum_m \Delta\mu_m \left[\left(h_{m+1} + h_m\right) \tilde{\mu}_m + h_m \mu_m + h_{m+1} \mu_{m+1}\right],$$

$$K = \frac{1}{12} \sum_m \Delta\mu_m \left[\left(j_{m+1} + j_m\right) \tilde{\mu}_m^2 + 2\left(j_m \mu_m^2 + j_{m+1} \mu_{m+1}^2\right)\right],$$

$$\int_0^1 \mu j_{\nu\mu} \mathrm{d}\mu = \frac{1}{6} \sum_m \Delta\mu_m \left[\left(j_{m+1} + j_m\right) \tilde{\mu}_m + j_m \mu_m + j_{m+1} \mu_{m+1}\right]$$

kde $\Delta\mu = \mu_{m+1} + \mu_m$ a $\tilde{\mu}_m = \mu_{m+1} + \mu_m$.

Určíme proměnné Eddingtonovy faktory

$$f_\nu = \frac{K_\nu}{J_\nu} \qquad G_\nu = \frac{H_\nu}{J_\nu} \qquad g_\nu = \frac{\int_0^1 \mu j_{\nu\mu} \mathrm{d}\mu}{J_\nu}$$

a spočteme funkci sféričnosti

$$\frac{1}{q_\nu} \frac{dq_\nu}{dr} = \frac{1 - f_\nu^{-1}}{r}$$

následujícím postupem (Auer, 1984). Označíme

$$s_d = \frac{1 - f_d^{-1}}{r_d}$$

a spočteme

$$x = \frac{\left(s_d + s_{d+1}\right)\left(r_{d+1} - r_d\right)}{4}$$

$$q_{d+1} = \frac{1 + x}{1 - x} q_d,$$

přičemž položíme $q_1 = 1$.

Takto získané hodnoty f_ν a q_ν dosadíme do rovnice (A.19) a řešíme.

Dodatek B

Koeficienty linearizovaných rovnic

B.1 Rovnice hydrostatické rovnováhy

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{A}_{n_e}^{HE}\right)_d &= kT_{d-1}\left(\xi_{d-1} - \frac{(n_e)_{d-1}}{F_{d-1}^2}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_{d-1}\right) \\
&- \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\left[\frac{1}{F_{d-1}}\left(1 - \frac{(n_e)_{d-1}}{F_{d-1}}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_{d-1}\right) + \frac{m_e}{\overline{m}}\right]\overline{m}G\mathcal{M} \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial n_e}\right|_{d-1} \\
\left(\mathbf{B}_{n_e}^{HE}\right)_d &= -kT_d\left(\xi_d - \frac{(n_e)_d}{F_d^2}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_d\right) \\
&- \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\left[\frac{1}{F_d}\left(1 - \frac{(n_e)_d}{F_d}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_d\right) + \frac{m_e}{\overline{m}}\right]\overline{m}G\mathcal{M} \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial n_e}\right|_d \\
\left(\mathbf{A}_T^{HE}\right)_d &= k(n_e)_{d-1}\left(\xi_{d-1} - \frac{T_{d-1}}{F_{d-1}^2}\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_{d-1}\right) \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{(n_e)_{d-1}}{F_{d-1}^2}\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_{d-1}\overline{m}G\mathcal{M} \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial T}\right|_{d-1}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{B}_T^{HE}\right)_d &= -k(n_e)_d\left(\xi_d - \frac{T_d}{F_d^2}\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_d\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{(n_e)_d}{F_d^2}\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_d \overline{m}G\mathcal{M} \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial T}\right|_d
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{A}_r^{HE}\right)_d &= \frac{1}{2}\frac{1}{r_{d-1}^2}\left[\left((n_e)_{d-1}\left(\frac{1}{F_{d-1}} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right) + (n_e)_d\left(\frac{1}{F_d} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right)\right)\overline{m}G\mathcal{M}\right. \\
&- \left.\left(\chi_{H_{d-1}} + \chi_{H_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial r}\right|_{d-1}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{B}_r^{HE}\right)_d &= -\frac{1}{2}\frac{1}{r_d^2}\left[\left((n_e)_{d-1}\left(\frac{1}{F_{d-1}} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right) + (n_e)_d\left(\frac{1}{F_d} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right)\right)\overline{m}G\mathcal{M}\right. \\
&- \left.\left(\chi_{H_{d-1}} + \chi_{H_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial r}\right|_d
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{L}^{HE}\right)_d &= -(n_e)_{d-1}\xi_{d-1}kT_{d-1} + (n_e)_d\xi_d kT_d + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r_{d-1}} - \frac{1}{r_d}\right)\times \\
&\left[\left((n_e)_{d-1}\left(\frac{1}{F_{d-1}} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right) + (n_e)_d\left(\frac{1}{F_d} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right)\right)\overline{m}G\mathcal{M}\right. \\
&- \left.\left(\chi_{H_{d-1}} + \chi_{H_d}\right)\frac{L}{4\pi c}\right].
\end{aligned}
$$

B.1.1 Horní okrajová podmínka

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{B}_{n_e}^{HE}\right)_1 &= -kT_1\left[2\xi_1 - \frac{(n_e)_1}{F_1}\left(\frac{1}{F_1} + \frac{\xi_1}{1 + \frac{m_e}{\overline{m}}F_1}\right)\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_1\right] \\
&+ \frac{h}{r_1^2}\left[\frac{1}{F_1}\left(1 - \frac{(n_e)_1}{F_1}\left.\frac{\partial F}{\partial n_e}\right|_1\right) + \frac{m_e}{\overline{m}}\right]\overline{m}G\mathcal{M} - \frac{h}{r_1^2}\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial n_e}\right|_1
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{B}_T^{HE}\right)_1 &= -k(n_e)_1\left[\xi_1 - \frac{T_1}{F_1}\left(\frac{1}{F_1} + \frac{\xi_1}{1 + \frac{m_e}{\overline{m}}F_1}\right)\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_1\right) \\
&- \frac{h}{r_1^2}\frac{(n_e)_1}{F_1^2}\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_1 \overline{m}G\mathcal{M} - \frac{h}{r_1^2}\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial T}\right|_1
\end{aligned}
$$

$$
\left(\mathbf{B}_r^{HE}\right)_1 = -2\frac{(n_e)_1\xi_1 kT_1}{r_1} - \frac{h}{r_1^2}\frac{L}{4\pi c}\left.\frac{\partial \chi_H}{\partial r}\right|_1
$$

$$
\left(\mathbf{L}^{HE}\right)_1 = (n_e)_1\xi_1 kT_1 - \frac{h}{r_1^2}(n_e)_1\left(\frac{1}{F_1} + \frac{m_e}{\overline{m}}\right)\overline{m}G\mathcal{M} - \frac{h}{r_1^2}\frac{L\chi_{H_1}}{4\pi c}.
$$

B.2 Rovnice zářivé rovnováhy

B.2.1 Integrální rovnice

$$\left(\mathbf{A}_{n_e}^{RE}\right)_d = \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d-1,i} \frac{\partial S_i}{\partial n_e}\Big|_{d-1}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}}$$

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{B}_{n_e}^{RE}\right)_d &= \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d,i} \frac{\partial S_i}{\partial n_e}\Big|_d + \frac{\partial \kappa_i}{\partial n_e}\Big|_d \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}\right)}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}} \\ &- \frac{\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}\right)\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \frac{\partial \eta_i}{\partial n_e}\Big|_d\right)}{\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}\right)^2}\end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{C}_{n_e}^{RE}\right)_d = \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d+1,i} \frac{\partial S_i}{\partial n_e}\Big|_{d+1}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}}$$

$$\left(\mathbf{A}_{T}^{RE}\right)_d = \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d-1,i} \frac{\partial S_i}{\partial T}\Big|_{d-1}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}}$$

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{B}_{T}^{RE}\right)_d &= \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d,i} \frac{\partial S_i}{\partial T}\Big|_d + \frac{\partial \kappa_i}{\partial T}\Big|_d \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}\right)}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}} \\ &- \frac{\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}\right)\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \frac{\partial \eta_i}{\partial T}\Big|_d\right)}{\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}\right)^2}\end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{C}_{T}^{RE}\right)_d = \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d+1,i} \frac{\partial S_i}{\partial T}\Big|_{d+1}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}}$$

$$\left(\mathbf{A}_{r}^{RE}\right)_d = \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d-1,i} \frac{\partial S_i}{\partial r}\Big|_{d-1}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}}$$

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{B}_{r}^{RE}\right)_d &= \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d,i} \frac{\partial S_i}{\partial r}\Big|_d + \frac{\partial \kappa_i}{\partial r}\Big|_d \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}\right)}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}} \\ &- \frac{\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}\right)\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \frac{\partial \eta_i}{\partial r}\Big|_d\right)}{\left(\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}\right)^2}\end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{C}_r^{RE}\right)_d = \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \Lambda^*_{d,d+1,i} \frac{\partial S_i}{\partial r}\Big|_{d+1}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}}$$

$$\left(\mathbf{L}^{RE}\right)_d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{NF} w_i \kappa_{d,i} \tilde{\mathcal{J}}_{d,i}}{\sum_{i=1}^{NF} w_i \eta_{d,i}},$$

kde $\tilde{\mathcal{J}}_{d,i}$ je definováno vztahem (3.16).

B.2.2 Diferenciální rovnice

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{A}_{n_e}^{RE}\right)_d &= \sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\frac{1}{2} \frac{1}{q_{d-1,i}\chi^2_{d-1,i}} \left.\frac{\partial \overline{X}_i}{\partial n_e}\right|_{d-1} \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} \right.\\ &+ \left. r^2_{d-1} f_{d-1,i} q_{d-1,i} \Lambda^*_{d-1,d-1,i} \left.\frac{\partial S_i}{\partial n_e}\right|_{d-1} \frac{\overline{X}_{di}}{\Delta r_d} \right)\end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{B}_{n_e}^{RE}\right)_d = \sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\frac{1}{2} \frac{1}{q_{di}\chi^2_{di}} \left.\frac{\partial \overline{X}_i}{\partial n_e}\right|_d \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} - r^2_d f_{di} q_{di} \Lambda^*_{ddi} \left.\frac{\partial S_i}{\partial n_e}\right|_d \frac{\overline{X}_{di}}{\Delta r_d} \right)$$

$$\left(\mathbf{C}_{n_e}^{RE}\right)_d = 0$$

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{A}_{T}^{RE}\right)_d &= \sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\frac{1}{2} \frac{1}{q_{d-1,i}\chi^2_{d-1,i}} \left.\frac{\partial \overline{X}_i}{\partial T}\right|_{d-1} \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} \right.\\ &+ \left. r^2_{d-1} f_{d-1,i} q_{d-1,i} \Lambda^*_{d-1,d-1,i} \left.\frac{\partial S_i}{\partial T}\right|_{d-1} \frac{\overline{X}_{di}}{\Delta r_d} \right)\end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{B}_{T}^{RE}\right)_d = \sum_{i=1}^{NF} w_i \left(\frac{1}{2} \frac{1}{q_{di}\chi^2_{di}} \left.\frac{\partial \overline{X}_i}{\partial T}\right|_d \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} - r^2_d f_{di} q_{di} \Lambda^*_{ddi} \left.\frac{\partial S_i}{\partial T}\right|_d \frac{\overline{X}_{di}}{\Delta r_d} \right)$$

$$\left(\mathbf{C}_{T}^{RE}\right)_d = 0$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{A}_r^{RE}\right)_d &= \sum_{i=1}^{NF} w_i \left[\frac{1}{2} \frac{1}{q_{d-1,i}\chi^2_{d-1,i}} \left.\frac{\partial \overline{X}_i}{\partial r}\right|_{d-1} \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} - \frac{\overline{X}_{di} Y_{di}}{\Delta r_d^2} \right. \\
&+ \left(r^2_{d-1} f_{d-1,i} q_{d-1,i} \Lambda^*_{d-1,d-1,i} \left.\frac{\partial S_i}{\partial r}\right|_{d-1} \right. \\
&\qquad \left. \left. + 2 r_{d-1} f_{d-1,i} q_{d-1,i} \mathcal{J}_{d-1,i} \right) \frac{\overline{X}_{di}}{\Delta r_d} \right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{B}_r^{RE}\right)_d &= \sum_{i=1}^{NF} w_i \left[\frac{1}{2} \frac{1}{q_{di}\chi^2_{di}} \left.\frac{\partial \overline{X}_i}{\partial r}\right|_{d} \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} + \frac{\overline{X}_{di} Y_{di}}{\Delta r_d^2} \right. \\
&- \left. \left(r^2_{d} f_{di} q_{di} \Lambda^*_{ddi} \left.\frac{\partial S_i}{\partial r}\right|_{d} + 2 r_d f_{di} q_{di} \mathcal{J}_{di} \right) \frac{\overline{X}_{di}}{\Delta r_d} \right]
\end{aligned}
$$

$$\left(\mathbf{C}_r^{RE}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{L}^{RE}\right)_d = \sum_{i=1}^{NF} w_i \overline{X}_{di} \frac{Y_{di}}{\Delta r_d} + \frac{L}{(4\pi)^2}.$$

B.3 Rovnice pro radiální optickou hloubku

Linearizací rovnice (3.18) dostaneme pro $d > d\,(\tau_R = 2/3)$

$$\left(\mathbf{A}_{n_e}^{OD}\right)_d = \frac{1}{2} \left.\frac{\partial \chi_R}{\partial n_e}\right|_{d-1} (r_d - r_{d-1})$$

$$\left(\mathbf{B}_{n_e}^{OD}\right)_d = \frac{1}{2} \left.\frac{\partial \chi_R}{\partial n_e}\right|_{d} (r_d - r_{d-1})$$

$$\left(\mathbf{C}_{n_e}^{OD}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{A}_{T}^{OD}\right)_d = \frac{1}{2} \left.\frac{\partial \chi_R}{\partial T}\right|_{d-1} (r_d - r_{d-1})$$

$$\left(\mathbf{B}_{T}^{OD}\right)_d = \frac{1}{2} \left.\frac{\partial \chi_R}{\partial T}\right|_{d} (r_d - r_{d-1})$$

$$\left(\mathbf{C}_T^{OD}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{A}_r^{OD}\right)_d = \delta r_{d-1}\frac{1}{2}\left[\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial r}\right|_{d-1}(r_d - r_{d-1}) - \left(\chi_{R_{d-1}} + \chi_{R_d}\right)\right]$$

$$\left(\mathbf{B}_r^{OD}\right)_d = \delta r_d\frac{1}{2}\left[\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial r}\right|_{d}(r_d - r_{d-1}) + \left(\chi_{R_{d-1}} + \chi_{R_d}\right)\right]$$

$$\left(\mathbf{C}_r^{OD}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{L}^{OD}\right)_d = -\left(\tau_{R_d} - \tau_{R_{d-1}}\right) - \frac{1}{2}\left(\chi_{R_{d-1}} + \chi_{R_d}\right)(r_d - r_{d-1})$$

Podobně pro pro $d < d\,(\tau_R = 2/3)$ dostaneme

$$\left(\mathbf{A}_{n_e}^{OD}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{B}_{n_e}^{OD}\right)_d = \frac{1}{2}\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial n_e}\right|_{d}(r_{d+1} - r_d)$$

$$\left(\mathbf{C}_{n_e}^{OD}\right)_d = \frac{1}{2}\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial n_e}\right|_{d+1}(r_{d+1} - r_d)$$

$$\left(\mathbf{A}_T^{OD}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{B}_T^{OD}\right)_d = \frac{1}{2}\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial T}\right|_{d}(r_{d+1} - r_d)$$

$$\left(\mathbf{C}_T^{OD}\right)_d = \frac{1}{2}\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial T}\right|_{d+1}(r_{d+1} - r_d)$$

$$\left(\mathbf{A}_r^{OD}\right)_d = 0$$

$$\left(\mathbf{B}_r^{OD}\right)_d = \frac{1}{2}\left[\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial r}\right|_{d}(r_{d+1} - r_d) - \left(\chi_{R_d} + \chi_{R_{d+1}}\right)\right]$$

$$\left(\mathbf{C}_r^{OD}\right)_d = \frac{1}{2}\left[\left.\frac{\partial \chi_R}{\partial r}\right|_{d+1}(r_{d+1} - r_d) + \left(\chi_{R_d} + \chi_{R_{d+1}}\right)\right]$$

$$\left(\mathbf{L}^{OD}\right)_d = -\left(\tau_{R_{d+1}} - \tau_{R_d}\right) - \frac{1}{2}\left(\chi_{R_d} + \chi_{R_{d+1}}\right)(r_{d+1} - r_d)$$

Pro $d\,(\tau_R = 2/3)$ dostaneme nenulové pouze koeficienty

$$\left(\mathbf{B}_r^{OD}\right)_d = 1$$

$$\left(\mathbf{L}^{OD}\right)_d = R - r_d$$

Dodatek C

Výpočet derivací opacity a emisivity

C.1 Derivace LTE populací.

Nejprve si uvedeme výrazy pro derivace ionizačních poměrů f_{jk}:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_{jk}(n_e,T)}{\partial n_e} &= f_{jk}(n_e,T)\left[\frac{1}{n_e}\left(\sum_{m=0}^{J_k} m f_{mk}(n_e,T) - j\right)\right. \\
&\quad + \sum_{l=j}^{J_k-1} \frac{\partial \ln \tilde{\Phi}_{mk}(n_e,T)}{\partial n_e} \\
&\quad \left. - \sum_{m=0}^{J_k-1} f_{mk}(n_e,T) \sum_{l=m}^{J_k-1} \frac{\partial \ln \tilde{\Phi}_{lk}(n_e,T)}{\partial n_e}\right] \\
\frac{\partial f_{jk}(n_e,T)}{\partial T} &= f_{jk}(n_e,T)\left[\sum_{m=j}^{J_k-1} \frac{\partial \ln \tilde{\Phi}_{mk}(n_e,T)}{\partial T} - \sum_{m=0}^{J_k-1} f_{mk}(n_e,T)\right. \\
&\quad \left. \times \sum_{l=m}^{J_k-1} \frac{\partial \ln \tilde{\Phi}_{lk}(n_e,T)}{\partial T}\right]
\end{aligned}$$

kde

$$\sum_{m=j}^{J_k-1} \frac{\partial \ln \tilde{\Phi}_{mk}(n_e,T)}{\partial n_e} = \frac{\partial}{\partial n_e}\left[\ln \frac{U_{jk}(n_e,T)}{U_{J_k,k}(n_e,T)}\right]$$

$$\sum_{m=j}^{J_k-1}\frac{\partial\ln\tilde{\Phi}_{mk}(n_e,T)}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial T}\left[\ln\frac{U_{jk}(n_e,T)}{U_{J_k,k}(n_e,T)}\right]-\frac{1}{T}\left[\frac{3}{2}(J_k-j)+\frac{\sum_{m=j}^{J_k-1}\chi_{I_mk}}{kT}\right]$$

Pro derivace hustoty atomů N_k dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_k}{\partial n_e} &= N_k\left(\frac{1}{n_e}-\frac{1}{F}\frac{\partial F}{\partial n_e}\right)\\ \frac{\partial N_k}{\partial T} &= -N_k\frac{1}{F}\frac{\partial F}{\partial T},\end{aligned}$$

Pro derivace LTE hustoty iontů N^*_{jk} snadno dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial N^*_{jk}}{\partial n_e} &= \frac{\partial N_k}{\partial n_e}f_{jk}(n_e,T)+N_k\frac{\partial f_{jk}(n_e,T)}{\partial n_e}\\ \frac{\partial N^*_{jk}}{\partial T} &= \frac{\partial N_k}{\partial T}f_{jk}(n_e,T)+N_k\frac{\partial f_{jk}(n_e,T)}{\partial T}\end{aligned}$$

Pro derivace LTE populací nyní snadno dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial n^*_{i_jk}}{\partial n_e} &= \frac{\partial N^*_{jk}}{\partial n_e}\frac{g_{i_jk}}{U_{jk}(n_e,T)}e^{-\chi_{i_jk}/kT}-n^*_{i_jk}\frac{\partial\ln U_{jk}(n_e,T)}{\partial T},\\ \frac{\partial n^*_{i_jk}}{\partial T} &= \frac{\partial N^*_{jk}}{\partial T}\frac{g_{i_jk}}{U_{jk}(n_e,T)}e^{-\chi_{i_jk}/kT}+n^*_{i_jk}\left(\frac{\chi_{i_jk}}{kT^2}-\frac{\partial\ln U_{jk}(n_e,T)}{\partial T}\right)\end{aligned}$$

C.2 Derivace b-faktorů

Pro výpočty linearizační (Newton-Raphsonovou) metodou potřebujeme znát i derivace b-faktorů podle nezávisle proměnných. Derivací rovnice (2.48) podle $x(x = n_e, T)$ dostaneme

$$\mathcal{A}\cdot\frac{\partial\mathbf{b}}{\partial x}=\frac{\partial\mathcal{B}}{\partial x}-\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial x}\cdot\mathbf{b}. \tag{C.1}$$

Matice $\mathcal{A}$ je stejná jako pro výpočet b-faktorů. Musíme však spočítat pravou stranu, tj. derivace matice $\mathcal{A}$ a vektoru $\mathcal{B}$ podle x.

C.2.1 Derivace matice $\mathcal{A}$ a vektoru $\mathcal{B}$

Pro derivace zářivých excitačních ratů použijeme vztahy

$$\frac{\partial R_{i_jl_jk}}{\partial n_e}=4\pi\int_0^\infty\frac{\alpha_{i_jl_jk}(\nu)}{h\nu}\Lambda^*_\nu\frac{\partial S_\nu}{\partial n_e}\mathrm{d}\nu$$

$$\frac{\partial R_{i_j l_j k}}{\partial T} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_j k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial T} \mathrm{d}\nu$$

pro excitace a

$$\frac{\partial R_{i_j l_j k}}{\partial n_e} = \frac{g_i}{g_j} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_j k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial n_e} \mathrm{d}\nu$$

$$\frac{\partial R_{i_j l_j k}}{\partial T} = \frac{g_i}{g_j} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_j k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial T} \mathrm{d}\nu$$

pro deexcitace. Pro derivace zářivých ionizační ratů použijeme vztahy

$$\frac{\partial R_{i_j l_{j+1} k}}{\partial n_e} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_{j+1} k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial n_e} \mathrm{d}\nu$$

$$\frac{\partial R_{i_j l_{j+1} k}}{\partial T} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_{j+1} k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial T} \mathrm{d}\nu$$

pro ionizace a

$$\frac{\partial R_{i_j l_{j-1} k}}{\partial n_e} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_{j-1} k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial n_e} e^{-h\nu/kT} \mathrm{d}\nu$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial R_{i_j l_{j-1} k}}{\partial T} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{i_j l_{j-1} k}\left(\nu\right)}{h\nu} \Lambda_\nu^* \frac{\partial S_\nu}{\partial T} e^{-h\nu/kT} \mathrm{d}\nu \\ + \frac{4\pi}{kT^2} \int_0^\infty \alpha_{i_j l_j k}\left(\nu\right) \left(\Lambda_\nu^* S_\nu + \Delta J_\nu + \frac{2h\nu^3}{c^2}\right) e^{-h\nu/kT} \mathrm{d}\nu\end{gathered}$$

pro rekombinace.

C.3 Derivace opacity a emisivity

Pro derivace opacity a emisivity podle n_e a T platí

$$\begin{aligned}\frac{\partial \chi_\nu}{\partial n_e} &= \sum_i \sum_{l>i} \left[b_{i_j k} \frac{\partial n^*_{i_j k}}{\partial n_e} + \frac{\partial b_{i_j k}}{\partial n_e} n^*_{i_j k} - \frac{g_{i_j k}}{g_{l_j k}} \left(b_{l_j k} \frac{\partial n^*_{l_j k}}{\partial n_e} + \frac{\partial b_{l_j k}}{\partial n_e} n^*_{l_j k} \right) \right] \\ & \quad \times \alpha_{i_j l_j k}(\nu) \\ & + \sum_i \sum_{l_{j+1}} \frac{\partial n^*_{i_j k}}{\partial n_e} \left(b_{i_j k} - b_{l_{j+1} k} e^{-h\nu/kT} \right) \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} n^*_{i_jk} \left(\frac{\partial b_{i_jk}}{\partial n_e} - \frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial n_e} e^{-h\nu/kT} \right) \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) \\
&+ \sum_{l_{j+1}} \left(b_{l_{j+1}k} n^*_{l_{j+1}k} + n_e \frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial n_e} n^*_{l_{j+1}k} + n_e b_{l_{j+1}k} \frac{\partial n^*_{l_{j+1}k}}{\partial n_e} \right) \\
&\quad \times \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right) + \sigma_e, \qquad \text{(C.2)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \chi_\nu}{\partial T} &= \sum_i \sum_{l>i} \left[b_{i_jk} \frac{\partial n^*_{i_jk}}{\partial T} + \frac{\partial b_{i_jk}}{\partial T} n^*_{i_jk} - \frac{g_{i_jk}}{g_{l_jk}} \left(b_{l_jk} \frac{\partial n^*_{l_jk}}{\partial T} + \frac{\partial b_{l_jk}}{\partial T} n^*_{l_jk} \right) \right] \\
&\quad \times \alpha_{i_j l_j k}(\nu) \\
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} \frac{\partial n^*_{i_jk}}{\partial T} \left(b_{i_jk} - b_{l_{j+1}k} e^{-h\nu/kT} \right) \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) \\
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} n^*_{i_jk} \left[\frac{\partial b_{i_jk}}{\partial T} - \left(b_{l_{j+1}k} \frac{h\nu}{kT^2} + \frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial T} \right) e^{-h\nu/kT} \right] \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) \\
&+ \sum_{l_{j+1}} n_e \left(\frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial T} n^*_{l_{j+1}k} + b_{l_{j+1}k} \frac{\partial n^*_{l_{j+1}k}}{\partial T} \right) \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) \\
&\quad \times \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right) \\
&+ \sum_{l_{j+1}} n_e b_{l_{j+1}k} n^*_{l_{j+1}k} \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right) \frac{\partial \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T)}{\partial T} \\
&+ \sum_{l_{j+1}} n_e b_{l_{j+1}k} n^*_{l_{j+1}k} \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) \frac{h\nu}{kT^2} e^{-h\nu/kT}, \qquad \text{(C.3)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \eta_\nu}{\partial n_e} &= \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\sum_i \sum_{l>i} \left(b_{l_jk} \frac{\partial n^*_{l_jk}}{\partial n_e} + \frac{\partial b_{l_jk}}{\partial n_e} n^*_{l_jk} \right) \frac{g_{i_jk}}{g_{l_jk}} \alpha_{i_j l_j k}(\nu) \right. \\
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} \left(b_{l_{j+1}k} \frac{\partial n^*_{i_jk}}{\partial n_e} + \frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial n_e} n^*_{i_jk} \right) \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) e^{-h\nu/kT} \\
&+ \sum_{l_{j+1}} \left(b_{l_{j+1}k} n^*_{l_{j+1}k} + n_e \frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial n_e} n^*_{l_{j+1}k} + n_e b_{l_{j+1}k} \frac{\partial n^*_{l_{j+1}k}}{\partial n_e} \right) \\
&\quad \left. \times \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) e^{-h\nu/kT} \right], \qquad \text{(C.4)}
\end{aligned}
$$

$$
\frac{\partial \eta_\nu}{\partial T} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\sum_i \sum_{l>i} \left(b_{l_jk} \frac{\partial n^*_{l_jk}}{\partial T} + \frac{\partial b_{l_jk}}{\partial T} n^*_{l_jk} \right) \frac{g_{i_jk}}{g_{l_jk}} \alpha_{i_j l_j k}(\nu) \right.
$$

$$
\begin{aligned}
&+ \sum_i \sum_{l_{j+1}} \left(b_{l_{j+1}k} \frac{\partial n^*_{i_j k}}{\partial T} + \frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial T} n^*_{i_j k} + b_{l_{j+1}k} n^*_{i_j k} \frac{h\nu}{kT^2} \right) \\
&\quad \times \alpha_{i_j l_{j+1} k}(\nu) e^{-h\nu/kT} \\
&+ \sum_{l_{j+1}} n_e \left(\frac{\partial b_{l_{j+1}k}}{\partial T} n^*_{l_{j+1}k} + b_{l_{j+1}k} \frac{\partial n^*_{l_{j+1}k}}{\partial T} \right) \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) e^{-h\nu/kT}, \\
&+ \sum_{l_{j+1}} n_e b_{l_{j+1}k} n^*_{l_{j+1}k} \left(\frac{\partial \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T)}{\partial T} + \alpha_{i_{j+1} l_{j+1} k}(\nu, T) \frac{h\nu}{kT^2} \right) \\
&\quad \times e^{-h\nu/kT} \Big] \qquad \text{(C.5)}
\end{aligned}
$$

Dodatek D

Výpočet srážkových ratů

Současná verze programu pracuje s nepatrně upravenými procedurami Hubeného (1988), kde je také uveden úplný výčet možností.

D.1 Srážkové raty pro vodík

Srážkové excitační i ionizační raty pro vodík jsou v zásadě převzaty z programu Mihalase *et al.* (1975). Excitace vodíku je počítána podle tzv. standardní formule

$$q_{il} = 5.465 \cdot 10^{-11} T^{-1/2} 4 \left(\frac{E_{il}}{E_H} \right)^2 f_{il} u_0 \left[E_1(u_0) + 0.148 u_0 E_5(u_0) \right], \qquad \text{(D.1)}$$

kde E_H je ionizační energie vodíku, E_{il} je excitační energie z hladiny i do hladiny l, f_{il} je síla oscilátoru, $u_0 = h\nu_0/kT$, E_1 a E_5 jsou příslušné exponenciální integrály.

Ionizační raty se počítají podle vztahu

$$q_{il} = C_0 \sqrt{T} e^{-u_0} \gamma_{il}, \qquad \text{(D.2)}$$

kde

$$\begin{aligned}
\gamma_{1l} &= 0.3 \log T - 0.435 \\
\gamma_{2l} &= \left(\frac{5.444416 \cdot 10^7}{T} - 2.8185937 \cdot 10^4 \right) \frac{1}{T} + 19.987261 \\
&\quad -5.896298 \cdot 10^{-5} T
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{3l} &= 1.3935312 \cdot 10^3 - 1.6805859 \cdot 10^2 \log T - \frac{2.539 \cdot 10^3}{\log T} \\
\gamma_{4l} &= 2.0684609 \cdot 10^3 - 3.341582 \cdot 10^2 \log T - \frac{7.6440625 \cdot 10^3}{\log T^2} \\
\gamma_{5l} &= 3.2174844 \cdot 10^3 - 5.5882422 \cdot 10^2 \log T - \frac{6.86325 \cdot 10^3}{\log T^2} \\
\gamma_{6l} &= 5.759125 \cdot 10^3 + (81.75 \log T - 1.5163 \cdot 10^3) \log T \\
\gamma_{7l} &= 1.461475 \cdot 10^4 + (393.4 \log T - 4.8284 \cdot 10^3) \log T \\
\gamma_{il} &= n_{i_j}^3 \qquad\qquad \text{pro } i \geq 8
\end{aligned}
$$

a

$$C_0 = \pi a_0^2 \sqrt{\frac{8k}{\pi m_e}} = 5.465 \cdot 10^{-11}.$$

D.2 Srážkové raty pro ostatní prvky

Excitační raty se počítají podle Van Regermorterova vztahu (Mihalas, 1978, rovnice 5.75)

$$q_{il} = C_0 T^{-3/2} 14.5 \left(\frac{E_H}{k}\right)^2 f_{il} \frac{e^{-u_0}}{u_0} \max\left[\overline{g}, \frac{\sqrt{3}}{2\pi} e^{u0} E_1(u_0)\right], \tag{D.3}$$

kde $\overline{g}$ je buď 0.25 nebo může vstupovat jako parametr. Ionizační raty se počítají podle Seatonovy formule (Mihalas, 1978, rovnice 5.79)

$$q_{ik} = 1.55 \cdot 10^{13} T^{-1/2} \overline{g}_i \alpha(\nu_0) \frac{e^{-u_0}}{u_0}, \tag{D.4}$$

kde $\overline{g}_i$ nabývá hodnot 0.1 pro neutrální částice, 0.2 pro jednou ionizované a 0.3 pro vícekrát ionizované, $\alpha(\nu_0)$ je ionizační účinný průřez na ionizační hraně a $u_0 = h\nu_0/kT$.

Literatura

Abbott D.C., Hummer D.G.: 1985, *Astrophys. J.* **294**, 286

Anderson L.S.: 1985, *Astrophys. J.* **298**, 848

Anderson L.S.: 1987, in *Numerical Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.163

Atkinson L.V., Harley P.J., Hudson J.D.: 1989, *Numerical Methods With FORTRAN 77, A Practical Introduction*, Adison-Wesley Publ. Comp., Wokingham

Auer L.H.: 1971, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **11**, 573

Auer L.H.: 1973, *Astrophys. J.* **180**, 469

Auer L.H.: 1976, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **16**, 931

Auer L.H.: 1984, in *Methods in Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.237

Auer L.H.: 1987, in *Numerical Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.101

Auer L.H.: 1991 in *Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models*, L.Crivellari, I.Hubený and D.G.Hummer eds., Kluwer Academic Publishers, p.9

Auer L.H., Mihalas D.: 1969a, *Astrophys. J.* **156**, 157

Auer L.H., Mihalas D.: 1969b, *Astrophys. J.* **156**, 681

Auer L.H., Mihalas D.: 1969c, *Astrophys. J.* **158**, 641

Auer L.H., Mihalas D.: 1970a, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **149**, 65

Auer L.H., Mihalas D.: 1970b, *Astrophys. J.* **160**, 233

Auer L.H., Mihalas D.: 1972, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **24**, 193

Baade D.: 1989, *Astron. Astrophys.* **222**, 200

Babuška I, Práger M., Vitásek E.: 1964, *Numerické řešení diferenciálních rovnic*, SNTL Praha

Bennett P.D.: 1991, Ph. D. Thesis, Univ. of British Columbia

Bernes C., Sandqvist A.: 1977, *Astrophys. J.* **217**, 71

Buchler J.R., Auer L.H.: 1985, in *Proceedings of the 2nd International Conference and Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter*, J. Davis *et al.* ed., World Scientific, Singapore, p.48

Busbridge I.W.: 1960, *The Mathematics of Radiative Transfer*, Cambridge University Press

Cannon C.J.: 1973a, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **13**, 627

Cannon C.J.: 1973b, *Astrophys. J.* **185**, 621

Cannon C.J.: 1976, *Astron. Astrophys.* **52**, 337

Cannon C.J.: 1984, in *Methods in Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.157

Cannon C.J., Lopert P.B., Magnan C.: 1975, *Astron. Astrophys.* **42**, 347

Carlson B.G.: 1963, *Methods in Computational Physics* **1**, 1

Carlsson M.: 1986, *Uppsala Observatory Report* **33**,

Cassinelli J.P.: 1971, *Astrophys. J.* **165**, 265

Cassinelli J.P., Hummer D.G.: 1971, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **153**, 9

Castor J.I.: 1970, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **149**, 111

Castor J.I.: 1972, *Astrophys. J.* **178**, 779

Castor J.I.: 1974, *Astrophys. J.* **189**, 273

Castor J.I., Abbott D.C., Klein R.I.: 1975, *Astrophys. J.* **195**, 157

Chandrasekhar S.: 1934, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **94**, 444

Chandrasekhar S.: 1950, *Radiative Transfer*, Clarendon Press, Oxford

Chapman R.D.: 1966, *Astrophys. J.* **143**, 61

Cram L.E.: 1977, *Astron. Astrophys.* **56**, 401

Cram L.E., Lopert P.B.: 1976, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **16**, 347

Feautrier P.: 1964, *C. R. Acad. Sci. Paris* **258**, 3189

Fieldus M.S., Lester J.B., Rogers C.: 1990, *Astron. Astrophys.* **230**, 371

Flannery B.P., Roberge W., Rybicki G.B.: 1980, *Astrophys. J.* **236**, 598

Frandsen S.: 1974, *Astron. Astrophys.* **37**, 139

Gabler R., Gabler A., Kudritzki R.P., Puls J., Pauldrach A.: 1989, *Astron. Astrophys.* **226**, 162

Gabler R., Kudritzki R.P., Mendez R.H.: 1991, *Astron. Astrophys.* **245**, 587

Gabler R., Gabler A., Kudritzki R.P., Mendez R.H.: 1992, *Astron. Astrophys.* **265**, 656

Gruschinske J., Kudritzki R.P.: 1979, *Astron. Astrophys.* **77**, 341

Hamann W.-R.: 1981, *Astron. Astrophys.* **93**, 353

Hamann W.-R.: 1985, *Astron. Astrophys.* **148**, 364

Hamann W.-R.: 1986, *Astron. Astrophys.* **160**, 348

Hamann W.-R.: 1987, in *Numerical Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.35

Hamann W.-R., Wessolowski U.: 1990, *Astron. Astrophys.* **227**, 171

Hamann W.-R., Koesterke L., Wessolowski U.: 1991 in *Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models*, L.Crivellari, I.Hubený and D.G.Hummer eds., Kluwer Academic Publishers, p.69

Hauschildt P.H.: 1992, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **47**, 433

Hauschildt P.H.: 1993, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* , in press

Heinzel P., Gouttebroze P., Vial J.-C.: 1987, *Astron. Astrophys.* **183**, 351

Hempe K., Schönberg K.: 1986, *Astron. Astrophys.* **160**, 141

Hillier D.J.: 1990, *Astron. Astrophys.* **231**, 111

Höflich P.: 1988, *Astron. Astrophys.* **191**, 348

Höflich P., Wehrse R.: 1987, *Astron. Astrophys.* **185**, 107

Höflich P., Wehrse R., Shaviv G.: 1987, *Astron. Astrophys.* **163**, 105

Hubený I.: 1976, kandidátská disertační práce, AsÚ ČSAV Ondřejov

Hubený I.: 1981, *Astron. Astrophys.* **86**, 225

Hubený I.: 1980, *Astron. Astrophys.* **98**, 96

Hubený I.: 1988, *Comput. Phys. Commun.* **52**, 103

Hubený I.: 1992 in *Atmospheres of Early Type Stars*, U.Heber and S.Jeffery eds., Lecture Notes in Physics, Springer Berlin, p.387

Hubený I., Lanz T.: 1993, *Astrophys. J.* , to be submitted

Hubený I., Leitherer C.: 1989, 1989, in *Physics of Luminous Blue Variables*, K.Davidson et al. eds., Kluwer Acad. Publ., p.283

Hummer D.G., Mihalas D.: 1988, *Astrophys. J.* **331**, 794

Hummer D.G., Rybicki G.B.: 1971, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **152**, 1

Hummer D.G., Rybicki G.B.: 1985, *Astrophys. J.* **293**, 258

Hummer D.G., Voels S.A.: 1988, *Astron. Astrophys.* **192**, 279

Hummer D.G., Kunasz C.V., Kunasz P.B.: 1973, *Comput. Phys. Commun.* **6**, 38

Hundt E., Kodaira K., Schmid-Burgk J., Scholz M.: 1975, *Astron. Astrophys.* **41**, 37

Jeffery C.S.: 1991, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **249**, 327

Kalkofen W.: 1985, in *Progress in Stellar Spectral Line Formation Theory*, eds. J.E.Bechkmann and L.Crivellari, D.Reidel Publ. Comp., p.153

Klein R.I., Castor J.I., Greenbaum A., Taylor D., Dykema P.G.: 1989, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **41**, 199

Koesterke L., Hamann W.-R., Kosmol P.: 1992, *Astron. Astrophys.* **255**, 490

Kosirev N.A.: 1934, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **94**, 430

Krook M.: 1955, *Astrophys. J.* **122**, 488

Kudritzki R.P.: 1973, *Astron. Astrophys.* **28**, 103

Kudritzki R.P.: 1976, *Astron. Astrophys.* **52**, 11

Kudritzki R.P., Pauldrach A., Puls J.: 1987, *Astron. Astrophys.* **173**, 293

Kunasz P.B., Hummer D.G.: 1974a, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **166**, 19

Kunasz P.B., Hummer D.G.: 1974b, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **166**, 57

Kunasz P.B., Hummer D.G., Mihalas D.: 1975, *Astrophys. J.* **202**, 92

Kurucz R.L.: 1979, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **40**, 1

Leung C.M.: 1975, *Astrophys. J.* **199**, 340

Leung C.M.: 1976, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **16**, 559

Lucy L.B.: 1971, *Astrophys. J.* **163**, 95

Lucy L.B.: 1986, in *Radiation Hydrodynamics in Stars and Compact Objects*, eds. D.Mihalas and K.-H.A.Winkler, Springer Verlag Berlin, p.75

Lucy L.B., Solomon P.M.: 1970, *Astrophys. J.* **159**, 879

Martin P.G., Rogers C., Rybicki G.B.: 1984, *Astrophys. J.* **289**, 317

McCrea W.H.: 1928, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **88**, 729

McCrea W.H., Mitra K.K.: 1936, *Z. Astrophys.* **11**, 359

Menzel D.H.: 1937, *Astrophys. J.* **85**, 330

Mihalas D.: 1972, *NCAR-TN/STR-76*, NCAR Boulder

Mihalas D.: 1978, *Stellar Atmospheres, 2nd ed.*, W.H.Freeman & Comp.

Mihalas D.: 1979, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **189**, 671

Mihalas D.: 1980a, *Astrophys. J.* **237**, 574

Mihalas D.: 1980b, *Astrophys. J.* **238**, 1034

Mihalas D.: 1980c, *Astrophys. J.* **238**, 1042

Mihalas D.: 1981, *Astrophys. J.* **250**, 373

Mihalas D.: 1985, *J. Comput. Phys.* **57**, 1

Mihalas D., Auer L.H.: 1970a, *Astrophys. J.* **160**, 1161

Mihalas D., Auer L.H.: 1970b, *Astrophys. J.* **161**, 1129

Mihalas D., Hummer D.G.: 1974, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **28**, 343

Mihalas D., Klein R.I.: 1982, *J. Comput. Phys.* **46**, 97

Mihalas D., Kunasz P.B.: 1978, *Astrophys. J.* **219**, 635

Mihalas D., Kunasz P.B.: 1986, *J. Comput. Phys.* **64**, 1

Mihalas D., Heasley J.N., Auer L.H.: 1975, *NCAR-TN/STR-104*, NCAR Boulder

Mihalas D., Kunasz P.B., Hummer D.G.: 1975, *Astrophys. J.* **202**, 465

Mihalas D., Kunasz P.B., Hummer D.G.: 1976a, *Astrophys. J.* **203**, 647

Mihalas D., Kunasz P.B., Hummer D.G.: 1976b, *Astrophys. J.* **206**, 515

Mihalas D., Kunasz P.B., Hummer D.G.: 1976c, *Astrophys. J.* **210**, 419

Ng K.C.: 1974, *J. Chem. Phys.* **61**, 2680

Nobili L., Turolla R., Zampieri L.: 1991, *Astrophys. J.* **383**, 250

Nobili L., Turolla R., Zampieri L.: 1993, *Astrophys. J.* **404**, 686

Olson G.L., Kunasz P.B.: 1987, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **38**, 325

Olson G.L., Auer L.H., Buchler J.R.: 1986, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **35**, 431

Pauldrach A.: 1987, *Astron. Astrophys.* **183**, 295

Pauldrach A., Herrero A.: 1988, *Astron. Astrophys.* **199**, 262

Pauldrach A., Puls J., Kudritzki R.P.: 1986, *Astron. Astrophys.* **164**, 86

Peraiah A.: 1987, in *Numerical Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.305

Puls J.: 1987, *Astron. Astrophys.* **184**, 227

Puls J.: 1991, *Astron. Astrophys.* **248**, 581

Puls J., Herrero A.: 1988, *Astron. Astrophys.* **204**, 219

Puls J., Hummer D.G.: 1988, *Astron. Astrophys.* **191**, 87

Ralston A., Rabinowitz P.: 1978 *A First Course in Numerical Analysis*, 2nd ed., McGraw Hill Book Comp., New York

Rogers C.: 1981, Ph. D. Thesis, University of Toronto

Rosenzweig P., Anderson L.S.: 1988, *Bull. Am. Astron. Soc.* **20**, 698

Rybicki G.B.: 1970, in *Spectrum Formation in Stars With Steady State Extended Atmospheres*, NBS-SP-322, U.S. Dept. Commerce, Washington, p.87

Rybicki G.B.: 1972, in *Line Formation in the Presence of Magnetic Fields*, R.G.Athay, L.L.House and G.Newkirk eds., Boulder, HAO, p.145

Rybicki G.B.: 1991 in *Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models*, L.Crivellari, I.Hubený and D.G.Hummer eds., Kluwer Academic Publishers, p.1

Rybicki G.B., Hummer D.G.: 1978, *Astrophys. J.* **219**, 654

Rybicki G.B., Hummer D.G.: 1991, *Astron. Astrophys.* **245**, 171

Rybicki G.B., Hummer D.G.: 1992, *Astron. Astrophys.* **262**, 209

Scharmer G.B.: 1981, *Astrophys. J.* **249**, 720

Scharmer G.B.: 1984, in *Methods in Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.173

Scharmer G.B., Carlsson M.: 1985, *J. Comput. Phys.* **59**, 56

Scharmer G.B., Nordlund A.: 1982, *Stockholmm Observatory Report* **19**,

Schmid-Burgk J.: 1975, *Astron. Astrophys.* **40**, 249

Schmid-Burgk J., Scholz M.: 1984, in *Methods in Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.381

Schmidt M., Wehrse R.: 1987, in *Numerical Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge Univ. Press, p.341

Schönberg K., Hempe K.: 1986, *Astron. Astrophys.* **163**, 151

Scudder J.D.: 1992a, in *Solar Wind 7*, R.Schwenn and E.Marsch eds., Pergamon Press, p.103

Scudder J.D.: 1992b, *Astrophys. J.* **398**, 319

Sellmaier F., Puls J., Kudritzki R.P., Gabler A., Gabler R., Voels S.A.: 1993, *Astron. Astrophys.* **273**, 533

Sen H.K.: 1949, *Astrophys. J.* **110**, 276

Spagna G.F., Leung C.M.: 1987, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer,* **37**, 565

Steiner O.: 1990, *Astron. Astrophys.* **231**, 278

Steiner O.: 1991, *Astron. Astrophys.* **242**, 290

Taylor P.A.: 1927, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **87**, 605

Thorne K.S., Flammang R.A., Zytkow A.N.: 1981, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **194**, 475

Traving G., Baschek B., Holweger H.: 1966, Abh. Hamburger Sternwarte VIII, No.1

Vinsome P.K.W.: 1976, in *Proceedings of the Fourth Symposium on Reservoir Simulation*, Society of Petroleum Engineers, Boulder, p.149

Werner K.: 1986, *Astron. Astrophys.* **161**, 177

Werner K.: 1987a, in *Numerical Radiative Transfer*, W.Kalkofen ed., Cambridge

Univ. Press, p.67

Werner K.: 1987b, Ph. D. Thesis, Universität Kiel

Werner K.: 1988, *Astron. Astrophys.* **204**, 159

Werner K.: 1989, *Astron. Astrophys.* **226**, 265

Werner K.: 1993, private communication

Werner K., Heber U.: 1991 in *Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models*, L.Crivellari, I.Hubený and D.G.Hummer eds., Kluwer Academic Publishers, p.

Wiese W.L., Smith M.W., Glennon B.M.: 1966, *Atomic Transition Probabilities, Vol.I., Hydrogen Through Neon*, NSRDS-NBS 4, Washington D.C.

Seznam obrázků

Obsah

Poděkování

Rád bych poděkoval všem, kteří mi pomohli ke zdárnému dokončení této práce. Především bych rád poděkoval svému školiteli RNDr. Petru Heinzelovi, CSc. za příkladné vedení, za stálý zájem o průběžné výsledky práce a za důkladné a kritické přečtení rukopisu. Dále bych chtěl poděkovat RNDr. Ivanu Hubenému, CSc. za uvedení do problematiky přenosu záření a modelování hvězdných atmosfér, za přísun těžko dostupné literatury a hlavně za cenné připomínky k předkládané metodě i k textu práce. Děkuji i RNDr. Petru Hadravovi, CSc. za kritické přečtení rukopisu a za cenné diskuse o studované problematice. Poděkování patří i Dr. Klausu Wernerovi (Kiel) za užitečnou korespondenční diskusi o užití přibližných lambda operátorů v rovnici zářivé rovnováhy a za zasílání výsledků své práce během doby, kdy jsem se nemohl zabývat astrofyzikou profesionálně. RNDr. Petru Škodovi děkuji za pomoc při technickém zpracování textu pomocí programu LaTeX. Chtěl bych poděkovat i vedoucímu stelárního oddělení RNDr. Pavlu Koubskému, CSc. za znovupřijetí do stelárního oddělení v loňském roce.

Největší dík však patří mé ženě Atě za trpělivost a pochopení během celé doby, kdy jsem s většími či menšími těžkostmi vytvářel tuto práci.