

Izveštaj
o uradjenim zadacima za predmet:
"Numeričke metode u prenosu zračenja"

Ivan Milić

18. januar 2012

1 Uvod

U toku kursa "Numeričke metode u prenosu zračenja" imao sam za zadatak da isprogramiram i isprobam nekoliko najpoznatijih metoda koje se koriste (ili su se koristile) u numeričkom rešavanju problema prenosa zračenja od eskpanzije ove oblasti do danas. Ove metode su opisane u originalnoj literaturi koju navodim na kraju ovog teksta. U ovom izveštaju ću prvo ukratko navesti značaj prenosa zračenja, predstaviti osnovni problem kojim sam se bavio u ovim zadacima i na kraju pojedinačno predstaviti metode koje sam isprogramirao i testirao.

2 Prenos zračenja

Teorija prenosa zračenja igra ključnu ulogu u modeliranju zvezdanih atmosfera. Pre svega, bitno je naglasiti da je posmatrana raspodela intenziteta po talasnim dužinama (bilo u kontinuumu, bilo u pojedinačnim linijama) ubedljivo najveći izvor informacija o fizičkim uslovima koji vladaju u zvezdanoj atmosferi. Ukoliko želimo da izvedemo neke zaključke o zvezdi na osnovu posmatranog spektra, vrlo je mala verovatnoća da do istih dodjemo prostom analizom posmatranja. Najčešće je potrebno uporediti pažljivo izračunate spektre na osnovu pretpostavljenih modela zvezdanih atmosfera¹ sa posmatranim spektrom. Ovo je na neki način redukovani problem, pošto spektar računamo iz unapred zadatog modela atmosfere. Međutim, kako je zračenje bitno za energetski balans u atmosferi, prenos zračenja u kontinuumu i jakim linijama je izuzetno bitan i pri konstrukciji pomenutih modela.

Prenos zračenja kroz atmosferu zvezde opisan je jednačinom prenosa zračenja, koja u 1D, plan-paralelnoj atmosferi ima sledeći oblik:

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu, \nu)}{d\tau_\nu} = I(\tau, \mu, \nu) - S(\tau, \mu, \nu). \quad (1)$$

I je intenzitet zračenja, τ_ν optička dubina², ν frekvencija a μ kosinus ugla između pravca prostiranja zračenja i pravca radijus vektora posmatrane tačke. $S(\tau, \mu, \nu)$ je tzv. funkcija izvora, koja, sem u aproksimaciji LTR (lokalne termodinamičke ravnoteže) kada S zavisi samo od temperature, implicitno zavisi od intenziteta zračenja. U zavisnosti od toga kakav model atoma (ili molekula) uzimamo pri modeliranju, ova zavisnost može biti linearna (atom sa dva nivoa), ili nelinearna (atom sa više nivoa). Veza između funkcije izvora i intenziteta predstavljena je tzv. jednačinama statističke ravnoteže, koje opisuju zavisnost naseljenosti

¹Model atmosfere podrazumeva zavisnost raznih fizičkih parametara, kao što su npr. temperatura, pritisak i gustina, od koordinata. U okviru ovog predmeta, bavio sam se samo 1D modelima, odnosno modelima u kojima ovi parametri zavise samo od jedne koordinate

²Optička dubina predstavlja svojevrsnu zamenu za koordinatu r , i definisana je kao $\tau_\nu = -\int_0^r \chi(\nu, r) dr$ gde je $\chi(\nu, r)$ makroskopski koeficijent apsorpcije na frekvenciji ν (u jedinicama cm^{-1})

energetskih nivoa atoma koji zrače od fizičkih uslova u atmosferi i od intenziteta zračenja. Ukoliko želimo da uračunamo i uticaj zračenja na fizičke uslove u atmosferi, onda u problem ulazi i jednačina ravnoteže zračenja i potrebno je pribegnuti metodama temperaturne korekcije da bi model atmosfere zadovoljavao i ovaj dodatni uslov. Kao što se vidi iz ovog kratkog uvoda, problem modeliranja zvezdane atmosfere se sastoji od rešavanja medjusobno spregnutih jednačina prenosa zračenja, statističke ravnoteže, ravnoteže zračenja i jednačine hidrostatičke ravnoteže. Veze između fizičkih veličina u ovom problemu su u opštem slučaju nelinearne. Ovaj problem je u numeričkom smislu jako zahtevan i potrebni su brzi i tačni numerički metodi za njegovo rešavanje. U sledećem poglavlju ću opisati problem spregnutih jednačina prenosa zračenja i jednačina statističke ravnoteže za atom sa dva nivoa. Videćemo da i u ovom, najjednostavnijem problemu, može doći do numeričkih komplikacija i problema, pa se upravo ovaj problem koristi kao standardan test problem za poredjenje efikasnosti raznih numeričkih metoda.

3 Atom sa dva nivoa

Standardan test problem u prenosu zračenja je rešavanje spregnutih jednačina prenosa zračenja i jednačina statističke ravnoteže za atom sa dva nivoa. U ovom slučaju, jednačine statističke ravnoteže se svode na jednu jednačinu i veza između funkcije izvora i intenziteta je linearna:

$$S = \epsilon B_T + (1 - \epsilon)J_\varphi. \quad (2)$$

B_T je termalni deo funkcije izvora, jednak Plankovoj funkciji, a $\epsilon = C_{ul}/(A_{ul} + C_{ul})$ predstavlja verovatnoću uništenja fotona u procesima sudarne deekscitacije, gde je C_{ul} verovatnoća sudarne deekscitacije a A_{ul} verovatnoća radijativne deekscitacije. U situacijama kada je $\epsilon \ll 1$, funkcija izvora u najvećoj meri zavisi od J_φ , veličine koja predstavlja profilom otežinjen integral intenziteta po pravcima i frekvencijama, i zračenje u velikoj meri odstupa od LTR. Verovatnoća rasejanja fotona je velika, pa zračenje u jednoj tački može zavisiti od fizičkih uslova u udaljenim tačkama atmosfere. U realnim zvezdanim atmosferama veličina ϵ može dostići vrednosti manje i od npr. 10^{-8} . U ovim uslovima ("ekstremna" odstupanja od LTR), čak ni ovaj, naoko trivijalni slučaj atoma sa dva nivoa, nije lako rešiv i zahteva precizan, brz i pouzdan numerički metod.

U aproksimaciji kompletne redistribucije, integral rasejanja ima sledeći oblik:

$$J_\varphi = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 I(\mu, \nu) d\mu \varphi_\nu d\nu. \quad (3)$$

Ova aproksimacija podrazumeva da foton, apsorbovan u liniji na nekoj frekvenciji ν' , nema nikakvu korelaciju sa reemitovanim (rasejanim) fotonom, pa je verovatnoća emitovanja fotona na frekvenciji ν jednaka φ_ν gde je φ_ν apsorpcioni profil u liniji. Najčešće se kao referentni problem za numerički metod uzima i ova aproksimacija. Međutim, jos 80-ih godina proteklog veka je potvrđeno da je kod nekih linija mnogo bolja aproksimacija *parcijalne* redistribucije. U ovom slučaju, apsorbovani i emitovani foton imaju neku korelaciju koja je data matricom redistribucije $R(\nu', \nu)$. U tom slučaju, integral rasejanja (pa samim tim i funkcija izvora) je zavisna od frekvencije i ima oblik:

$$J_\varphi(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 I(\mu, \nu') d\mu \frac{R(\nu', \nu)}{\varphi_\nu} d\nu'. \quad (4)$$

Za savremen numerički metod vrlo je bitno i da se može generalisati na ovaj komplikovaniji slučaj rasejanja, tako da sam neke od opisanih metoda testirao i za slučaj parcijalne redistribucije.

3.1 Formalno rešenje

Pod formalnim rešenjem jednačine prenosa podrazumevamo rešavanje jednačine (1) kada je funkcija izvora poznata. Osim u slučaju lokalne termodinamičke ravnoteže, kada je funkcija izvora jednaka Plankovoj,

funkcija izvora je nepoznata i zavisi od $I(\tau, \mu, \nu)$. Medjutim, kao što ćemo videti u nastavku teksta, tačnost i brzina formalnog rešenja su jako bitni pošto sve iterativne metode podrazumevaju makar jedan set formalnih rešenja³ po iteraciji. Postoji nekoliko načina da se formalno reši jednačina prenosa. Feautrier metod (nosi ime po svom tvorcu) koristi diferencijalni oblik jednačine prenosa i izveden je iz metoda kojim se direktno rešava pun problem, videti npr. [1]. Drugi metod koji sam koristio je metod tzv. "kratkih karakteristika" (*short characteristics*), koji sledi direktno iz analitičkog oblika formalnog rešenja:

$$I(\tau_\nu) = I(\tau_{\nu,0})e^{-\Delta\tau/\mu} + \int_{\tau_{\nu,0}}^{\tau_\nu} S(t_\nu)e^{-(\tau_\nu-t_\nu)/\mu} dt_\nu/\mu, \quad (5)$$

gde je $\Delta\tau = \tau_\nu - \tau_{\nu,0}$. Nakon diskretizacije, za dve uzastopne tačke na putanji zraka, d i $d+1$, na frekvenciji n u pravcu m , dobija se:

$$I_{d+1,m,n} = I_{d,m,n}e^{-\Delta\tau} + \int_{\tau_{d,n}}^{\tau_{d+1,n}} S(t)e^{-(\tau_n-t)/\mu_m} dt/\mu_m. \quad (6)$$

Ukoliko pretpostavimo neku polinomijalnu zavisnost $S(t)$ izmedju uzastopnih tačaka, integral sa desne strane se može rešiti analitički. Najčešće se koriste linearna (prvog reda) ili kvadratna (drugog reda) zavisnost. Ukoliko pretpostavimo kvadratnu zavisnost funkcije $S(t)$ izmedju tačaka sa indeksima $d-1, d, d+1$, dobijamo za intenzitet:

$$I_{d+1,m,n} = I_{d,m,n}e^{-\Delta\tau} + \Lambda_{d,d-1,m,n}S_{d-1} + \Lambda_{d,d,m,n}S_d + \Lambda_{d,d+1,m,n}S_{d+1}. \quad (7)$$

Ovaj metod je po prvi put predložen od strane Olsona i Kunasza [2]. Ovaj metod predstavlja dobar izbor za moderne iterativne metode kao što su ALI (Approximate Lambda Iteration) ili GS (Gauss-Seidel).

Ukoliko funkciju izvora smatramo poznatom, formalno rešenje se može dobiti uz poznavanje graničnih uslova za jednačinu (1). Dva najčešća slučaja kojima se bavimo u prenosu zračenja su polubeskonačna atmosfera i sloj konačne debljine. Granični uslovi za ova dva slučaja su najčešće ovakvi:

- Polubeskonačna atmosfera: U ovoj aproksimaciji, koja je dobra za zvezdane atmosfere, uzimamo dovoljno dubok sloj atmosfere za donju granicu da možemo pretpostaviti stanje (lokalne) termodinamičke ravnoteže u tom sloju (tada kažemo da je zračenje termalizovano). Donji granični uslov je tzv. "difuzna aproksimacija", u kojoj važi: $I^+(\tau = \tau_D) = S_D + \mu(\frac{dS}{d\tau})_D$. Gornji granični uslov je najčešće $I^-(\tau = 0) = 0$, osim ukoliko zvezda nije osvetljena nekim drugim izvorom zračenja spolja.
- Sloj konačne debljine: Ova aproksimacija je dobra za neke atmosferske strukture, kao što su protuberance ili filament. Optička dubina ovih struktura varira, tako da termalizacije zračenja ne mora da bude. Gornji granični uslov je $I^-(\tau = 0) = I_{ulazno}$ gde je I_{ulazno} neko dato polje zračenja koje obasjava posmatrani objekat, a donji $I^+(\tau_D) = I^-(\tau_D)$ pošto ovi objekti najčešće imaju ravansku simetriju.

4 Rešavanje zadatog problema

4.1 Lambda iteracija

Najočigledniji i najjednostavniji način da se reše spregnute jednačine (1) i (2) je sledeća iterativna šema:

- Na osnovu pretpostavljene početne vrednosti za funkciju izvora, izračunamo vrednost intenziteta nekim metodom za formalno rešavanje jednačine prenosa. Najčešće se za početnu vrednost uzima $S = B_T$. Zatim računamo i integral rasejanja. Metoda i nosi ime po ovom računu, odnosno po Švarcšildovom Lambda operatoru⁴.

³Misli se: jedno formalno rešenje u svakoj tački po dubini, u svakom pravcu i na svakoj frekvenciji, dakle ukupno $D \times M \times N$ formalnih rešenja

⁴ $J(\tau) = \Lambda_\tau[S(t)]$

- Iz intenziteta računamo novu vrednost funkcije izvora, na osnovu jednačine (2). Setimo se da je jednačina (2) u stvari jednačina statističke ravnoteže.
- Ponavljamo postupak dok relativna razlika između vrednosti funkcije izvora u dve uzastopne iteracije ne bude manja od neke zadate vrednosti.

Ovaj proces zaista konvergira ka tačnom rešenju, međutim ta konvergencija je u svakom slučaju izraženih odstupanja od LTR toliko spora da nije od praktične koristi. Za rešavanje test problema gde je $\epsilon = 10^{-6}$, sa pretpostavljenom kompletnom redistribucijom, ovom iterativnom metodu je potrebno više stotina hiljada iteracija da se dostigne tačno rešenje. Međutim spora konvergencija nije glavni problem Lambda iteracije. Problem je u tome što i kada dostignemo neku objektivno malu (npr. 10^{-3})⁵ promenu nismo sigurni da smo blizu tačnog rešenja. Ova osobina konvergencije čini Lambda iteraciju izuzetno nepogodnom za praktičan rad. Međutim ona je sa konceptualnog stanovišta važna zato što uvodi iterativnu ideju koja se može "eksploatirati" na nekoliko dosta pogodnijih načina, kao što ćemo videti u nastavku teksta. Takodje ovo je dobro mesto da uvedemo pojam Lambda operatora pošto je on osnova danas najpopularnije i najjednostavnije (mada ne obavezno i najbrže) klase metoda: ALI (approximate Lambda iteration).

Pod pojmom "Λ operator" podrazumevamo, formalno gledano, operator kojim se deluje na funkciju izvora da bi se dobio integral rasejanja. Taj operator je definisao Švarcsild [3]:

$$J(\tau) = \Lambda_\tau[S(t)] \equiv \frac{1}{2} \int_0^\infty S(t) E_1 |t - \tau| dt. \quad (8)$$

U praksi je ovaj integral relativno nezgodan za račun, zbog toga što su eksponencijalni integrali numerički skupi za računanje i imaju oštar maksimum u $t = \tau$, pa je računanje težina za kvadraturnu sumu za ovaj integral nezgodno. Neke od tih težina dao je Čandrasekar [4], ali se u praksi Λ operator nikada ovako ne računa⁶ Pod pojmom "Λ operator" se uglavnom podrazumeva *proces* dobijanja integrala rasejanja od funkcije izvora. Postavka problema, koja sledi iz jednačina (2) i (8), izgleda ovako:

$$S = \epsilon B_T + (1 - \epsilon) \Lambda[S]. \quad (9)$$

Ova jednačina u principu može da se reši i direktno, što se lako vidi ako je zapišemo u sledećem obliku:

$$(I - (1 - \epsilon) \Lambda)[S] = \epsilon B_T. \quad (10)$$

Međutim, direktno rešavanje ove jednačine zahteva inverziju kvadratne matrice dimenzije $D \times D$ (D je broj tačaka po dubini), što je operacija reda D^3 , kao i (nepotrebno) računanje celog Λ operatora.

U okviru ovog predmeta sam obradio tri metoda koji su, na neki način, unapredjena Λ iteracija, a to su: ALI, Gauss-Seidel i FBILI (Forth-and-back implicit Lambda iteration). Sada ću opisati ta tri metoda, a zatim ću opisati i jednu direktnu metodu (Feautrier), kao i još jedan, nešto drugačiji iterativan metod, metod promenljivih Edingtonovih faktora (Variable Eddington factors).

4.2 ALI

Pod skraćenicom ALI danas se najčešće podrazumeva ubrzana Λ iteracija (Accelerated Lambda Iteration). Međutim, "A" može da stoji i za "approximate", što je smisao skraćenice ALO (Approximate Lambda Operator). Zašto aproksimativna? Kao što smo videli, funkcija izvora je rešenje matrične jednačine (10). Videli smo takodje da je jedan od načina da se ova jednačina reši iterativno izračunavanje nove vrednosti funkcije izvora iz stare, sukcesivnim rešavanjem jednačina prenosa zračenja i jednačina statističke ravnoteže. Takodje smo videli da je ovaj metod spor i nepraktičan. Naravno, jednačina (10) se može rešiti i direktno,

⁵Za brže iterativne metode dovoljan uslov za prekid iterativnog postupka je relativna promena manja od 10^{-3} , međutim, Λ iteracija čak i pri tolikoj relativnoj promeni može biti još daleko od tačnog rešenja.

⁶Kasnije ćemo videti da se konkretno traži samo jedan, pogodan deo Λ operatora.

ali je za to potrebno invertovati matricu dimenzije D , što je takodje numerički zahtevan proces. Takodje bi u tom slučaju bilo potrebno eksplicitno konstruisati Λ operator, što je, kao što ćemo videti iz opisa sledećih metoda, nepotreban proces. Jednostavno, a brzo rešenje je negde između i naziva se "operator perturbation", ili primenjeno na Λ operator, "aproksimativna Λ iteracija." Ideja metoda je u tome da se Λ operator razbije na dva dela, jedan koji je jednostavan za invertovanje i "ostatak" ili "perturbaciju" koji se iterativno izračunava i time rešenje popravlja do konvergencije. Ova ideja datira još od Jakobija, a u prenosu zračenja je prvi primenio Cannon [15]. Prvi je ideju konkretizovao Scharmer(1981) [16]. Medjutim, njegova verzija aproksimativnog operatora nije bila toliko praktična pošto je u pitanju bio gornji trougaoni deo operatora. Ovakav operator jeste dobra aproksimacija potpunog Lambda operatora, ali je i dalje vremenski zahtevan za invertovanje. Optimalno rešenje su ponudili Olson, Auer i Buchler [5] koji su Λ operator aproksimirali dijagonalom punog operatora. Ovo u stvari znači da su u računanju intenziteta uzeti samo *lokalni* doprinosi funkcije izvora. Analogno ovom, dijagonalnom, operatoru ⁷ mogu se konstruisati i tridijagonalni i pentadijagonalni operatori koji su nešto vremenski zahtevniji za inverziju, ali su bolje aproksimacije punog operatora. Ipak, tokom godina korišćenja se ispostavilo da je dijagonalni operator najstabilniji i najjednostavniji za numeričko rešavanje. U okviru ovog predmeta sam isprobao ovakav, dijagonalni operator, koji za računanje dijagonalnih elemenata koristi već pomenuti metod kratkih karakteristika kao metod za formalno rešenje [2]. Postoji izvesna razlika između ovako definisanog dijagonalnog operatora i originalne formulacije iz [5]. Olson, Auer i Buchler su u njihovom radu koristili Feautrier metod za formalno rešavanje. Ovaj metod, koji koristi diferencijalni oblik jednačine prenosa (videćemo razlike između diferencijalnog i integralnog oblika dalje u tekstu, metod kratkih karakteristika koristi integralni oblik), unosi još i neke aproksimacije u dijagonalu. Da vidimo sada kako izgleda šema ALL-ja. Podsetimo se jednačine (9)

$$S = \epsilon B_T + (1 - \epsilon)\Lambda[S].$$

Podelimo sada operator Λ na dva dela, Λ^* , koji je samo dijagonala originalnog operatora, i ostatak $\delta\Lambda$, pa to zamenimo u jednačinu (9):

$$S = \epsilon B_T + (1 - \epsilon)(\Lambda^* + \delta\Lambda)[S]. \quad (11)$$

Ako sada aproksimativni deo predje na levu stranu dobijamo:

$$[I - (1 - \epsilon)\Lambda^*][S] = \epsilon B_T + (1 - \epsilon)\Lambda[S] - (1 - \epsilon)\Lambda^*[S]. \quad (12)$$

Ako zamenimo $[I - (1 - \epsilon)\Lambda^*] \equiv A$, A je takodje dijagonalna matrica, dobijamo:

$$A[S] = S^{\text{formal}} - (1 - \epsilon)\Lambda^*[S], \quad (13)$$

gde je S^{formal} funkcija izvora, dobijena iz formalnog rešenja za intenzitet i jednačine (2). Iterativni metod izgleda ovako:

1. Za svaku tačku po dubini, d (d je index za numeraciju tačaka na diskretnoj mreži optičkih dubina), izračunavamo S_d^{formal}
2. Kako su A i Λ^* dijagonalni operatori, za svaku tačku po dubini imamo sledeću jednačinu:

$$A_{dd}S_d = S_d^{\text{formal}} - (1 - \epsilon)\Lambda_{dd}^*S_d. \quad (14)$$

3. Sada u drugom članu sa desne strane takodje iskoristimo S^{staro} i na kraju dobijamo:

$$S_d^{\text{novo}} = \frac{(S^{\text{formal}} - (1 - \epsilon)\Lambda_{dd}^*S^{\text{staro}})}{A_{dd}} \quad (15)$$

4. Proveravamo razliku u odnosu na vrednost funkcije izvora iz prošle iteracije i ukoliko smo postigli željenu tačnost izlazimo iz petlje.

⁷Setimo se da je inverzna matrica dijagonalne matrice takodje dijagonalna matrica čiji su elementi recipročne vrednosti elemenata originalne matrice, tako da je inverzija operacija reda D

Vidi se da ova šema ima samo za nijansu više računa od obične Λ iteracije. Nema invertovanja matrica i aproksimativni operator se računa samo jednom. Međutim, ispostavlja se da je ovaj metod za bar dva reda veličine brži od obične Λ iteracije. Takođe, ovaj metod konvergira u svim slučajevima, tako da nije iznenađenje da je napravio pravu malu revoluciju u polju prenosa zračenja. O tome svedoče mnogi pregledni radovi, i brojne sekcije u knjigama i zbornicima koji se bave isključivo ALI-jem. (Za jedan koristan pregled videti npr. [6]). Korisne informacije o brzini konvergencije i još nekim osobinama aproksimativnog operatora su date u [2] i [5]. Ispostavlja se ipak da se, ne računajući čisto matematičke metode za ubrzanje, može dobiti i brži metod od ovoga. Treba primetiti da se, i u običnoj i u aproksimativnoj Λ iteraciji, celo formalno rešenje izračunava sa starim vrednostima funkcije izvora. Na ovom polju popravke unose GS i FBILI metode. Sada ćemo, ukratko, videti kako ALI rešava problem parcijalne redistribucije.

4.3 ALI: PRD

Parcijalna redistribucija je proces u kom apsorbovani i emitovani foton pri procesu rasejanja imaju u nekoj meri korelisane frekvencije. Ovo dovodi do toga da je funkcija izvora sada zavisna od frekvencije. Da bi bilo jasnije u čemu leži problem, napišimo jednačinu (4) u diskretnom obliku i zamenimo $\frac{R(\nu',\nu)}{\varphi_\nu} = g(\nu',\nu)$, a zatim za numeraciju tačaka po frekvenciji iskoristimo indekse n i n' a za numeraciju tačaka po pravcima indeks m .

$$S_n = \epsilon B_T + (1 - \epsilon) \sum g_{n',n} I_{m,n'} w_m w_{n'}. \quad (16)$$

Prvi je rešenje za ovaj problem predložio Scharmer, [9]. Njegova ideja se zasnivala na tome da se ovaj problem reši aproksimativnim Λ operatorom na identičan način kao u slučaju kompletne redistribucije. Naime, formalno rešenje se računa tako što se parcijalna redistribucija uzima u obzir dok se kao aproksimativni operator koristi isti operator kao da je u pitanju kompletna redistribucija. Ispostavilo se da ovaj metod ne konvergira u slučaju kada je sredina optički duboka na svim frekvencijama. Optimalno rešenje su ponudili Paletou & Auer, [7]. Oni su u ovom članku predstavili dva metoda koja uspešno rešavaju problem PRD. To su FBF (frequency by frequency method) i Core-wing method. Core-Wing method se zasniva na Λ operatoru izračunatom na osnovu vrlo jednostavne aproksimacije za parcijalnu redistribuciju. Naime, parcijalna redistribucija zračenja po frekvencijama se grubo može predstaviti kao kombinacija kompletne redistribucije u jezgru linije i koherentnog rasejanja u krilima linije. Pošto je u pitanju iterativni metod, ova aproksimacija se koristi samo za konstrukciju Λ^* operatora, dok se za računanje formalnog rešenja koristi tačan oblik funkcije redistribucije. Ispostavlja se da ovaj način rešavanja iziskuje isto procesorsko vreme kao i Scharmerov metod ali uvek konvergira. FBF method se zasniva na eksplicitnom tretiranju zavisnosti funkcije izvora od frekvencije i koristi monohromatski Λ operator. To je metod koji sam koristio u rešavanju problema sa parcijalnom redistribucijom pa ću ga sada detaljnije opisati:

Pre svega definišimo delovanje monohromatskog Λ operatora:

$$J_\nu = \Lambda_\nu[S] \quad (17)$$

Ispostavlja se da se izraz za *korekciju* funkcije izvora, odnosno za razliku vrednosti u trenutnoj i prethodnoj iteraciji može napisati kao:

$$\delta S_n - (1 - \epsilon) \sum_{n'} g_{n',n} \Lambda_{n'} \delta S_{n'} = r_n \equiv (1 - \epsilon) J_n + \epsilon B - S_n \quad (18)$$

Ako ovakvu jednačinu napišemo za svaku frekvenciju n dobijamo sistem od N jednačina sa N nepoznatih, gde je N broj frekvencija, za svaku tačku po dubini. Ipak, odgovarajuće matrice koje je potrebno invertovati za rešavanje ovih sistema i dobijanje vrednosti δS_n se ne menjaju iz iteracije u iteraciju, već se menja samo desna strana (vektor r_n). Iterativna šema FBF metoda izgleda ovako:

1. Sa starim vrednostima S_n izračunavamo vrednosti integrala rasejanja J_n , na svakoj dubini.
2. Na svakoj dubini rešavamo sistem jednačina i dobijamo korekcije za funkciju izvora.

3. Korigujemo vrednosti za funkciju izvora, proveravamo uslov za konvergenciju i po potrebi ponavljamo proces ili izlazimo iz iterativne petlje.

Ovom metodu je potrebno manje iteracija za konvergenciju od Scharmerovog metoda ili Core-Wing metoda, s tim što je potrebno dodatno procesorsko vreme da se invertuje D matrica dimenzija $N \times N$.

4.4 Gauss-Seidel

Treba skrenuti paznju na jedno vrlo jednostavno i očigledno mesto gde se ALI metoda može poboljšati. Naime, vidi se da svaka iterativna šema podrazumeva da se *prvo* izračunaju vrednosti integrala rasejanja sa starom vrednošću funkcije izvora *na svim* dubinama, a onda se računa nova vrednost funkcije izvora. Pošto se ove vrednosti u praksi ne izračunavaju odjednom, nakon što se izračuna nova vrednost za funkciju izvora na nekoj dubini d , ona bi se u principu mogla iskoristiti za računanje integrala rasejanja na dubini $d - 1$ i tako bismo dobili brzu konvergenciju posto bismo na dubini $d - 1$ koristili "bolju" vrednost za integral rasejanja. U njihovom radu iz 1995, Trujillo Bueno i Fabiani Bendicho, [8], predlažu sledeću iterativnu šemu:

1. Polazeći od tačke $d = 0$, zaključno sa tačkom $d = D$, iz stare funkcije izvora, računamo *ulazne* intenzitete i odgovarajuće J_{φ}^{-}
2. U tački $d = D$ računamo izlazni intenzitet, na osnovu donjeg graničnog uslova, a zatim i novu vrednost funkcije izvora.
3. *Popravljamo* izlazni intenzitet u tački $d = D$ na osnovu novoizračunate funkcije izvora. Ovaj korak je važan zato što iz tih intenziteta računamo intenzitet u sledećoj tački.
4. U tački $d = D - 1$ računamo izlazne intenzitete sa *novom* funkcijom izvora u tački D a starim vrednostima funkcije izvora u $D - 1$ i $D - 2$. Takodje je neophodno da popravimo i *ulazni* intenzitet u tački $D - 1$ zbog promene vrednosti funkcije izvora u $D - 1$
5. Ponavljamo korake 2-4 za svaku tačku po dubini dok ne dođemo do tačke $d = 0$
6. Ponavljamo ceo postupak do konvergencije.

Ispostavlja se da ova šema na neki način emulira gornji trougaoni operator (mada nije u potpunosti ekvivalentna istom). Samim tim, ovaj metod omogućava bržu konvergenciju od lokalnog operatora. Sa druge strane, nema potrebe za invertovanjem matrica. Jedini dodatni račun u odnosu na običnu ALI metodu je korak 3, odnosno popravka intenziteta pre prelaska u sledeću tačku. Ova popravka iziskuje račun ekvivalentan jednoj četvrtini formalnog rešenja. Ova metoda je prirodan "naslednik" ALI metode i kao što smo videli dodatni programerski trud je minimalan. Zajedno sa ovom metodom, autori [8] su predstavili i metodu sukcesivne overrelaksacije (SOR). Treba istaći da je SOR u stvari način za ubrzavanje konvergencije iterativnog metoda za rešavanje problema prenosa zračenja, pa ću je kao takvu predstaviti u poslednjem poglavlju. Iz opisa se vidi da se problem parcijalne redistribucije tretira na isti način kao i u ALI iterativnoj šemi.

Videli smo da se pogodnom reorganizacijom redosleda računanja intenziteta i funkcija izvora unutar jedne iteracije može postići brža konvergencija. Medjutim, i u ovoj šemi postoje mesta za poboljšanje. Jedan način je da se u iterativnu šemu implementira ideja iteracionih faktora. Iteracioni faktori su tzv. "pseudokonstante", odnosno veličine koje se malo menjaju iz iteracije u iteraciju i time omogućuju da se brže stigne do tačnih rešenja. Jedan primer primene iteracionih faktora je VEF (Variable Eddington Factors) metoda koja je opisana u nastavku teksta. Ovu ideju se koristi i za FBILI (Forth-and-Back Implicit Lambda Iteration) metodu [10] koja ostvaruje još brži stepen konvergencije od ALI i Gauss-Seidel metoda zahvaljujući implicitnoj reprezentaciji funkcije izvora i uvodjenju ideje iteracionih faktora u šemu iteracije.

4.5 FBILI

U opisu metode Gauss-Seidel smo videli da ukoliko nove vrednosti funkcije izvora iskoristimo da izračunamo integral rasejanja čim postanu dostupne, možemo bitno da povećamo nivo konvergencije. FBILI metoda koristi, i unapređuje, taj pristup. Medjutim, glavna razlika, koja vodi velikom ubrzanju, koju donosi FBILI metoda je to što se iterativno računaju koeficijenti a i b linearne relacije izmedju funkcije izvora i integrala rasejanja :

$$J_{\varphi,d} = a_d + b_d S_d. \quad (19)$$

Iterativnim izračunavanjem ovih koeficijenata, i za ulazni i za izlazni intenzitet, postizemo jako brzu konvergenciju. Pošto je ovo metoda koju sam koristio i u praktičnim problemima, tj. na modelu Sunčeve atmosfere, predstavicu računanje koeficijenata u jednačini (19) kao i iterativnu šemu nešto detaljnije.

Ulazni intenzitet na dubini d , u pravcu m , na frekvenciji n se uz pomoć sličnog formalizma koji se koristi za izvodjenje koeficijenata u metodu kratkih karakteristika može napisati kao (jednačina za izlazni intenzitet je analogna):

$$I_{d,m,n}^- = I_{d-1,m,n}^- e^{-\Delta} + a_{d,m,n}^- S_{d-1} + b_{d,m,n}^- S_d + c_{d,m,n}^- S_d', \quad (20)$$

gde je Δ priraštaj monohromatske optičke dubine duž posmatranog zraka. Vidi se da prvi član, kao i koeficijenti a i c opisuju nelokalne doprinose dok koeficijent b opisuje lokalni doprinos. Iako koristi kvadratnu (ili čak kubnu) reprezentaciju zavisnosti funkcije izvora od optičke dubine, FBILI izražava intenzitet u jednoj tački preko relevantnih veličina u samo dve tačke duž zraka. Ovo je takodje jedan od razloga za bržu konvergenciju. Polazeći od $d = 0$, sa trenutnim vrednostima funkcije izvora, možemo izračunati koeficijente a^- i b^- relacije:

$$J_d^- = b_d^- S_d + a_d^-. \quad (21)$$

Koeficijenti a^- i b^- se dobijaju preuredjivanjem i integracijom po frekvencijama i pravcima koeficijenata iz jednačine (20). Kada stignemo do tačke $d = D$, iz difuzne aproksimacije slede koeficijenti za *izlazni* integral rasejanja u toj tački, odnosno:

$$J_D^+ = b_D^+ S_D + a_D^+. \quad (22)$$

Sada možemo izvesti i koeficijente jednačine (19) u tački $d = D$ i zameniti taj izraz u jednačinu statističke ravnoteže:

$$S_D = \epsilon B_t + (1 - \epsilon)(a_D + b_D S_D). \quad (23)$$

Sada je nepoznato samo S_D koje se lako dobija. Koristeći novu vrednost funkcije izvora računamo vrednost izvoda u tački D i izlazni intenzitet.. Zatim računamo redom koeficijente jednačine (22) a zatim i vrednosti funkcije izvora za svaku sledeću tačku sve do $d = 0$. Proces se ponavlja do konvergencije. Kao što je već istaknuto konvergencija je dosta brza a količina računa po iteraciji se ne razlikuje od ALI metode koja koristi dijagonalni ALO operator. Gore pomenuti iteracioni faktor se može videti ako eksplicitno analiziramo koeficijent a . Naime, u njemu se pojavljuje i odnos $\frac{I}{S}$. Ispostavlja se da je ovaj iteracioni faktor izuzetno važan. Verzija programa sa ovim iteracionim faktorom, za problem parcijalne redistribucije, konvergira u tri puta manje iteracija nego verzija bez iteracionog faktora. Sada ćemo videti kako se pomoću FBILI metode rešava problem parcijalne redistribucije.

Rešenje problema je slično FBF metodi,[7]. Izračunavamo monohromatske koeficijente relacije:

$$J_{d,n} = a_{d,n} + b_{d,n} S_{d,n}. \quad (24)$$

Ako sada ovu relaciju zamenimo u izraz za funkciju izvora za PRD (16), dobijamo:

$$S_{d,n} = \epsilon B_T + (1 - \epsilon) \sum_{n'} g(n', n) (a_{d,n} + b_{d,n} S_{d,n}) \quad (25)$$

Opet je u pitanju sistem N jednačina sa N nepoznatih koji se mora rešiti u svakoj tački dubine. Kao i u slučaju ALI metode, i ovde je matrice potrebno invertovati samo jednom. Poredjenja radi, ovaj metod

konvergira u 9 iteracija dok je FBF metodu za ALI potrebno više od 20 iteracija a Core-Wing metodu više od 40 iteracija.

Poredjenje izmedju dijagonalne ALI, G-S i FBILI metoda demonstrira kako tri u suštini vrlo slične metode mogu imati dramatično različite brzine konvergencije u zavisnosti od toga na koji način izračunavamo funkciju izvora. Takodje bitno je pomenuti da brzina konvergencije ovih metoda zavisi od toga koji način odaberemo za formalno rešavanje. Sve tri opisane metode koriste metod kratkih karakteristika. Medjutim, danas postoji još nekoliko načina da se reši formalni problem. Tu su već pomenuti Feautrier metod, kao i metod diskontinualnih elemenata. Ukoliko želimo da poredimo brzine različitih iterativnih metoda, bitno je da se postaramo da sve koriste isti metod za formalno rešenje. Medjutim, ukoliko rešavamo neki novi problem⁸ analitičko rešenje, naravno, nije poznato i dobro je proveriti dobijene rezultate korišćenjem više različitih metoda. Referentni metod za testiranje koja se do sada dosta puta dokazala kao robustan i pouzdan metod je direktan Feautrier metod koji ću sada predstaviti.

4.6 Feautrier metod

Kao što smo videli, jednačina prenosa zračenja se može predstaviti u integralnom obliku, taj oblik koriste sve do sada opisane iterativne metode. Medjutim, možemo je predstaviti i u diferencijalnom obliku (1). Feautrier metoda uvodi sledeće smene da bi rešila spregnute jednačine prenosa i statističke ravnoteže:

$$u_{\mu,\nu} = \frac{1}{2}(I_{\mu,\nu}^+ + I_{\mu,\nu}^-) \quad (26)$$

$$v_{\mu,\nu} = \frac{1}{2}(I_{\mu,\nu}^+ - I_{\mu,\nu}^-). \quad (27)$$

Ove smene su nakon originalnog Feautrier-ovog rada iz 1964 postale toliko korišćene da se sada u literaturi sreću pod imenom "Feautrier promenljive". Ako napišemo odvojeno jednačine prenosa zračenja za ulazni i izlazni intenzitet, i zatim ih saberemo odnosno oduzmemo, dobijamo (zanemarujući indeksiranje):

$$\mu \frac{dv}{d\tau} = u - S \quad (28)$$

$$\mu \frac{du}{d\tau} = v. \quad (29)$$

Zamenom (29) u (28), dobijamo jednačinu drugog reda (tzv. Šusterov oblik jednačine prenosa):

$$\mu^2 \frac{d^2u}{d\tau^2} = u - S. \quad (30)$$

Ako sada tu jednačinu napišemo u diskretnom obliku, dobijamo:

$$\mu^2 \frac{(du/d\tau)_{d+1/2} - (du/d\tau)_{d-1/2}}{\frac{1}{2}(\Delta\tau_{d-1/2} + \Delta\tau_{d+1/2})} = u - S, \quad (31)$$

gde je:

$$(du/d\tau)_{d-1/2} = (u_d - u_{d-1})/(\tau_d - \tau_{d-1}) \quad (32)$$

i slično:

$$(du/d\tau)_{d+1/2} = (u_{d+1} - u_d)/(\tau_{d+1} - \tau_d). \quad (33)$$

⁸Uglavnom je referentni problem za testiranje metoda sledeći: Izotermalna polubeskonačna atmosfera, kompletna redistribucija, Doplerov profil, neprozračnost u kontinuumu jednaka nuli, $\epsilon = 10^{-4}$. Za ovaj problem poznato je analitičko rešenje i lako je proveriti da li metoda konvergira ka tačnoj vrednosti i koliko brzo. Medjutim, za realan problem (model zvezdane atmosfere) svi ovi parametri zavise od dubine i ne postoji način da proverimo tačnost rešenja. U tome slučaju je dobro proveriti rešenje korišćenjem više različitih metoda.

Još ćemo definisati:

$$\Delta\tau_d \equiv \frac{1}{2}(\Delta\tau_{d-1/2} + \Delta\tau_{d+1/2}). \quad (34)$$

Sada jednačina prenosa zračenja drugog reda za Feautrier promenljivu u , napisana u diskretnom obliku (sa indeksima koji obeležavaju zavisnost od pravca i frekvencije) izgleda ovako:

$$\frac{\mu_m^2}{\Delta\tau_{d-1/2}\Delta\tau_d}u_{m,n,d-1} - \frac{\mu_m^2}{\Delta\tau_d}\left(\frac{1}{\Delta\tau_{d-1/2}} + \frac{1}{\Delta\tau_{d+1/2}}\right)u_{m,n,d} + \frac{\mu_m^2}{\Delta\tau_{d+1/2}\Delta\tau_d}u_{m,n,d+1} = \varphi_n(u_{m,n,d} - S_d). \quad (35)$$

Potrebno je još da pogledamo kako izgledaju granični uslovi. Iz definicije veličina u i v vidi se da je na gornjoj granici:

$$\mu \frac{du}{d\tau} = u. \quad (36)$$

Diskretizacijom ove jednačine se može dobiti jednačina na gornjoj granici. Ipak, bolju preciznost ćemo dobiti ako nakon diskretizacije razvijemo $u_{m,n,2}$ u Tejlorov red oko vrednosti $u_{m,n,1}$, dobijamo preciznost drugog reda:

$$\mu_m \frac{u_{m,n,2} - u_{m,n,1}}{\Delta\tau_{3/2}} = u_{m,n,1} + \frac{\Delta\tau_{3/2}(u_{m,n,1} - S_1)}{2\mu_m}. \quad (37)$$

Donji granični uslov izgleda ovako:

$$\mu_m \frac{u_{m,n,D} - u_{m,n,D-1}}{\Delta\tau_{D-1/2}} = I_{D,m,n}^+ - u_{m,n,D}, \quad (38)$$

gde $I_{D,m,n}^+$ sledi iz difuzne aproksimacije.

Pre nego što nastavimo dalje sa opisom Feautrier metode, dobro je da malo prodiskutujemo ovakav način rešavanja. Pre svega, vidimo da Feautrier metoda koristi jednačinu prenosa zračenja u diferencijalnom obliku. Zatim, takodje vidimo da smo tu jednačinu koja je u svom izvornom obliku diferencijalna jednačina prvog reda napisali kao diferencijalnu jednačinu drugog reda. Zatim ćemo se priseliti da nepoznata funkcija izvora, u stvari sadrži integral rasejanja, odnosno sumu intenziteta po pravcima i po frekvencijama pa je jednažina prenosa zračenja u stvari integro-diferencijalna jednačina! Diferencijalne jednačine uopšte nisu neuobičajena stvar u astrofizici. Medjutim dok se rešavanje diferencijalnih jednačina u npr. nebeskoj mehanici svodi na nalaženje, korišćenje i optimizovanje integratora koji rešava tu diferencijalnu jednačinu pošto su početni uslovi poznati, ovde se susrećemo sa drugačijim problemom. Naime, mi imamo *samo* ulazni intenzitet na gornjoj granici i *samo izlazni* intenzitet na donjoj granici, tako da ni na jednoj ni na drugoj granici nemamo potrebne granične uslove da bismo izvršili integraciju i "u hodu" nalazili vrednosti $S(\tau)$. U principu, problem bi bilo moguće rešiti tako što bismo uzeli neke probne vrednosti za npr izlazni intenzitet na gornjoj granici pa ih varirali dok nakon integracije ne dobijemo dobar izlazni intenzitet na donjoj granici. Medjutim ovaj metod je izuzetno nestabilan i neupotrebljiv. Sada ćemo videti kako je Feautrier, koristeći diskretizovan oblik jednačine prenosa zračenja u diferencijalnom obliku rešio problem na vrlo efikasan način.

Ukoliko napišemo jednačinu (35) i odgovarajuće jednačine na gornjoj i donjoj granici, vidimo da za D tačaka po dubini, M pravaca i N frekvencija imamo $(D \times M \times N)$ jednačina i isto toliko nepoznatih. Pošto vreme za inverziju kvadratne matrice raste sa dimenzijom matrice na treći stepen, očigledno je da je vrlo neefikasno rešavati ovaj problem direktno. Medjutim, iz strukture problema sledi jako elegantno rešenje. Obeležimo prvo sa \vec{u}_d vektor koji ima $M \times N$ elemenata $u_{m,n,d}$. Zatim uočimo da je:

$$S_d = \epsilon B_t + (1 - \epsilon) \sum_m \sum_n u_{m,n,d} \varphi_n w_n w_m \quad (39)$$

Sada skup jednačina (35) za jednu dubinu d možemo napisati u matričnom obliku kao:

$$-\hat{A}_d \vec{u}_{d-1} + \hat{B}_d \vec{u}_d - \hat{C}_d \vec{u}_{d+1} = \vec{L}_d \quad (40)$$

gde su \hat{A} , \hat{B} i \hat{C} poznate matrice koje zavise od skale optičke dubine i diskretizovanih vrednosti za μ , a \vec{L} je poznat vektor koji potiče od termalnog dela. Važno je istaći da su matrice \hat{A} i \hat{C} dijagonalne, dok matrica \hat{B} nije. Ako sada D jednačina (40) predstavimo kao jednu veliku matricu, vidimo da je ta matrica tridijagonalna, i u principu ovakav sistem jednačina se može rešiti forward-substitution back-elimination šemom, tako što na dubini d računamo koeficijente linearne relacije:

$$\vec{u}_d = \hat{D}_d \vec{u}_{d+1} + \vec{\psi}_d \quad (41)$$

i nastavljamo tako do dna, gde, sa donjim graničnim uslovom, možemo naći u_D a zatim, vraćajući se nazad do vrha, naći ostale vrednosti za u na osnovu jednačine (41).

Ovaj metod je stabilan, ali mu problem u praktičnoj primeni predstavlja to što je vreme računa srazmerno sa $M^3 N^3$, zbog inverzije matrice \hat{B} , pa je ipak relativno spor u odnosu na moderne iterativne metode. Bez obzira na to, Feautrier metod je korišćen dosta dugo, i našao je svoju primenu u mnogim kodovima za modeliranje zvezdanih atmosfera. Takodje, ovaj metod bez ikakvih modifikacija može da se koristi za rešavanje problema parcijalne redistribucije pošto nije osetljiv na način na koji smo funkciju izvora napisali preko srednjeg intenziteta (dokle god je zavisnost linearna, naravno.)

Lako se vidi da je, ako funkciju izvora smatramo poznatom, i matrica \hat{B} dijagonalna, pa se inverzija iste svodi na deljenje. Sistem se onda može rešiti na isti način, ali dosta brže i tako dobijamo još jedan način za formalno rešenje. Feautrier formalno rešenje su koristili npr. Olson, Auer i Buchler, [5], da po prvi put demonstriraju primenu dijagonalnog aproksimativnog Λ operatora.

4.7 VEF metod

Feautrier metod je u principu pouzdan i robustan ali je previše zahtevan pošto treba invertovati matrice relativno velikih dimenzija. Kod invertovanja matrica treba uvek imati u vidu da povećavanje dimenzija matrice samo za faktor 2 dovodi do povećanja vremena računa za faktor 8, što se i te kako primećuje u praktičnom radu. Iterativne metode koje sam opisao na početku imaju dobru osobinu da vreme računa linearno raste sa brojem frekvencija i uglova. VEF (Variable Eddington Factors) je iterativna metoda koja je po svojoj ideji negde između Feautrier metode i iterativnih metoda. Prisetimo se, pre svega, Eddingtonove ideje za rešenje spregnutih jednačina prenosa zračenja i jednačine kojom je data vrednost funkcije izvora⁹. Napišimo još jednom jednačinu prenosa zračenja, u Šusterovom obliku:

$$\mu^2 \frac{d^2 u}{d\tau^2} = u - S. \quad (42)$$

Integraljenjem po pravcima dobija se nulti momenat jednačine prenosa:

$$\frac{d^2 K}{d\tau^2} = J - S. \quad (43)$$

U svakoj novoj jednačini momenata pojavljuje se nova veličina, pa je nemoguće zatvoriti ovaj sistem. Edington je pretpostavio $J = 3K$ svuda u atmosferi i tako dobio aproksimativno rešenje sistema (sve vreme treba imati u vidu da je funkcija izvora implicitno poznata, pošto zavisi od nepoznate J i poznate Plankove funkcije). VEF metoda, uvodi tzv. "iteracioni faktor", $f_{n,d}$ koji na svakoj dubini i na svakoj frekvenciji ima vrednost:

$$f_{n,d} \equiv \frac{K_{n,d}}{J_{n,d}}. \quad (44)$$

Iterativna šema koja koristi Edingtonove faktore izgleda ovako:

1. Iz početne vrednosti funkcije izvora izračunavamo nekim formalnim rešenjem jednačine prenosa zračenja (u mom slučaju Feautrier), specifični intenzitet zračenja (odnosno Feautrier promenljivu u).

⁹U našem slučaju to je jednačina (2)

2. Za svaki dubinu i frekvenciju računamo srednji intezitet J i K-integral a zatim i vrednost Edingtonovog faktora $f_{n,d}$.
3. Zamenjujemo $K_{n,d} = f_{n,d}J_{n,d}$ u jednačinu (43) i dobijamo

$$\frac{d^2(fJ)}{d\tau^2} = J - S. \quad (45)$$

Ova jednačina se diskretizuje i rešava po J Feautrier metodom odakle se dobijaju nove vrednosti za funkciju izvora.

Kada bi Edingtonovi faktori bili tačni, ovo bi bilo tačno rešenje. Pošto nisu, ponavljamo korake 1-3 do konvergencije. Ovoj metodi treba relativno malo iteracija do konvergencije a razlog leži u tome što Edingtonovi faktori, kao odnosi sličnih fizičkih veličina, vrlo brzo postaju tačni, tj. mnogo manje se menjaju iz iteracije u iteraciju nego vrednosti J i K . Postoji čitava familija metoda koja se zasniva na iteracionim faktorima i na odabiru prave veličine koju ćemo iterativno popravljati da bismo ostvarili što brže rešenje. Prodiskutujemo samo ukratko razliku u brzini izmedju Feautrier i VEF metoda. Vreme potrebno za formalno rešenje je zanemarljivo u odnosu na rešavanje jednačine (35) odnosno (40) Feautrier metodom. U jednačini (35) eksplicitno tretiramo ugaonu zavisnost, pa, za neki uobičajen broj pravaca koji iznosi $M=3$, imamo 27 puta duže vreme izvršavanja. To znači da dobijamo na vremenu ukoliko nam VEF metodom treba manje od 27 iteracija, što u praksi jeste slučaj. (Obratiti pažnju na to da u VEF metodi u matrice \hat{A} , \hat{B} i \hat{C} ulaze i Edingtonovi faktori, koji nisu konstantni, pa se matrice moraju invertovati u svakoj iteraciji, medjutim te matrice su dimenzija $N \times N$ za razliku od matrica u Feautrier metodi gde su matrice dimenzija $(N \times M) \times (N \times M)$).

5 Atom sa više nivoa

Model atoma sa dva nivoa ima osobinu koja u mnogome olakšava rešavanje: funkcija izvora u liniji linearno zavisi od polja zračenja. Takodje, jednom izračunatu skalu optičkih dubina (koja zavisi od naseljenosti donjeg nivoa), nije potrebno preračunavati iz iteracije u iteraciju pošto je naseljenost gornjeg nivoa (u optičkom delu spektra, koji nas uglavnom zanima), zanemarljivo mala u odnosu na donji nivo. Medjutim, ako uključimo samo još jedan nivo (a u praksi nam je često potrebno da uključimo stotine nivoa), situacija se znatno komplikuje. Da bismo videli u čemu je problem napišimo eksplicitno jednačine statističke ravnoteže za prvi i drugi nivo:

$$\frac{dn_1}{dt} = n_2(A_{21} + B_{21}J_{21}) + n_3(A_{31} + B_{31}J_{31}) - n_1(B_{12}J_{12} + B_{13}J_{13}) + C_{21} + C_{31} - C_{12} - C_{13} = 0 \quad (46)$$

$$\frac{dn_2}{dt} = n_1B_{12}J_{12} + n_3(A_{32} + B_{32}J_{32}) - n_2(B_{23}J_{23} + B_{21}J_{21}) + C_{32} + C_{12} - C_{21} - C_{23} = 0. \quad (47)$$

Ovde je $J_{lu} = J_{ul}$. Takodje važi $n_1 + n_2 + n_3 = N = \text{const}$. Funkcija izvora za polje zračenja izmedju nivoa u i l ($u > l$) ima oblik:

$$S_{ul} = \frac{2h\nu^3/c^2}{\frac{g_u}{g_l} \frac{n_l}{n_u} - 1}. \quad (48)$$

Zamenom jednačina statističke ravnoteže u izraz za funkciju izvora dobija se nelinearna zavisnost funkcije izvora od srednjeg intenziteta. Problem bi se mogao rešavati Λ iteracijom ali bi rešenje bilo podjednako sporo i neefikasno. Moderne iterativne metode kao što su ALI i FBILI rešavaju problem lokalnim aproksimativnim operatorom kojim zavisnost postaje ponovo linearna (odnosno, aproksimira se kao linearna), pa se rešenje iterativno popravja. Medjutim, sada ću opisati jednu drugu metodu za rešavanje multilevel problema, koja je jedno vreme bila state-of-art u rešavanju problema koji uključuju atom sa više nivoa. U pitanju je tzv. "Equivalent two level atom method." (ETLA, za detalje pogledati npr. [11]).

5.1 Equivalent two-level atom metod

ETLA metod se oslanja na činjenicu da je moguće tačno rešiti problem za dva nivoa, pa se onda svaki prelaz može tretirati odvojeno a naseljenosti nivoa iterativno popravljati dok ne postignemo samokonzistentno rešenje. Ovde ću navesti samo skicu rešenja dok je temeljno izvodjenje sa svim neophodnim formulama dato u originalnom članku Avrett-a i Loeser-a iz 1987. Za svaki prelaz pojedinačno se može definisati:

$$\rho_{ul} = 1 - \frac{J_{ul}}{S_{ul}}. \quad (49)$$

U LTR ova vrednost je uvek 0, dok u ne-LTR očekujemo značajna odstupanja. Pogodnim transformacijama koje slede iz jednačina statističke ravnoteže sledi:

$$\rho = \varepsilon \left(\frac{\mathcal{B}}{S} - 1 \right). \quad (50)$$

Ovde je:

$$\varepsilon = \varepsilon^a - \beta \varepsilon^b, \quad (51)$$

i:

$$\mathcal{B} = B(\varepsilon^b/\varepsilon)(1 - \beta), \quad (52)$$

gde je $\beta = e^{-h\nu/kT}$ a ε_{ul} za prelaz $u \rightarrow l$ zavisi od *koeficijenata* ρ za sve ostale prelaze (!), Ajnštajnovih koeficijenata i koeficijenata sudarne deekscitacije. Iterativni metod se zasniva na promenljivoj ρ :

1. Sa početnim vrednostima ρ (pretpostavimo npr LTR, pa je $\rho = 0$), računamo vrednosti ε i \mathcal{B} iz kojih se može dobiti:

$$S = (J + \varepsilon \mathcal{B}) / (1 + \varepsilon) \quad (53)$$

za svaki prelaz pojedinačno.

2. Rešavamo jednačinu (53) koristeći formalizam za atom sa dva nivoa
3. Tražimo nove vrednosti za koeficijente ρ za svaku dubinu i za svaki prelaz i sa njima ulazimo u novu iteraciju.

Konvergenција se ostvaruje za manje od 10 iteracija. Sem toga što sadrži lako primenljiv "recept" za primenu ETLA metoda u praksi, ovaj rad Avretta i Loesera iz 1987 je takodje bitan zato što sadrži test problem za atom vodonika sa tri nivoa bez kontinuuma kao i eksplicitno navedeno rešenje datog problema, odnosno zavisnost $S(\tau)$ za sva tri prelaza, i to za dva slučaja: kada su koeficijenti sudarne deekscitacije konstantni, i kada zavise od dubine (što više odgovara uslovima u stvarnoj zvezdanoj atmosferi). ETLA metod sada ipak pripada prošlosti, pošto je brzina modernih iterativnih metoda ipak nenadmašna. Sada ćemo videti kako se konvergenција iterativnih metoda može dodatno, matematički, ubrzati.

6 Ubrzavanje konvergencije

Koji god metod da koristimo, dodatno ubrzavanje i skraćivanje vremena rada koda koji sintetiše spektar je izuzetno poželjno. Videli smo nekoliko primera ubrzavanja čije osnove leže u fizičkim razmatranjima. Na primer: Korišćenje lokalnog operatora povećava brzinu Λ iteracije za nekoliko redova veličine, uvodjenje iteracionog faktora u FBILI metod dovodi do utrostručavanja brzine. Medjutim, moguće je *dodatno* ubrzati sve ove metode, čisto matematičkim postupkom. Ovde ću ukratko opisati metod Ng ubrzavanja i SOR (succesive overrelaxation metod). U literaturi se može naći i metod konjugovanih vektora koji je opisao Auer, [12].

6.1 Ng ubrzavanje

Ovaj metod se može sresti i pod imenom "rezidualna minimizacija" ([12]), i detaljno je, sem u originalnom radu Ng-a [13], opisan i u radu Auera [14]. Metod se, u suštini zasniva na interpolaciji rešenja iz prethodnih iteracija (koje su izvršene bez ubrzavanja), u nadi da će interpolirano rešenje biti bliže tačnom rešenju. Naravno, trik je u optimalnom obliku te interpolacije odnosno u optimalnom izražavanju vrednosti funkcije izvora u i -toj iteraciji preko vrednosti u nekoliko prethodnih iteracija. Pretpostavimo da smo izvršili m iteracija i da smo sačuvali vrednosti funkcije izvora za svaku iteraciju: S_1, S_2, \dots, S_m . Vrednost odstupanja $r_i = S_{i+1} - S_i$ je u stvari kriterijum koji nam govori koliko smo blizu rešenja. Ukoliko je S_{m+1} tačno rešenje onda je $r_{m+1} = 0$. Da bismo "prišli" što bliže tačnom rešenju, mi želimo da minimizujemo odstupanje r , odnosno želimo neko tačno rešenje S . Napišimo sada:

$$S = \left(1 - \sum_{j=1}^{m-1} a_j\right) S_m + \sum_{j=1}^{m-1} a_j S_j. \quad (54)$$

Vrednosti koeficijenata a dobijamo tako što minimizujemo odstupanje:

$$r = \left(1 - \sum_{j=1}^{m-1} a_j\right) r_m + \sum_{j=1}^{m-1} a_j r_j \quad (55)$$

metodom najmanjih kvadrata gde veću težinu imaju tačke u kojima je rezidual manji. Na primeru koji je dao sam Auer [12], se vidi da ovaj metod ubrzava dijagonalni ALI iterativni metod nekoliko puta, što je svakako značajno u praktičnoj primeni. Danas se Ng ubrzavanje po pravilu sreće u svim MALI (Multilevel Accelerated Lambda Iteration) kodovima.

6.2 SOR metod

U svom radu iz 1995, Trujillo Bueno i Fabiani Bendicho [8] su predstavili SOR (Successive overrelaxation) metod kao novi metod za rešavanje problema prenosa zračenja. Nije u pitanju novi metod, već način da se Gauss-Seidel (ili u krajnjem slučaju i neki drugi iterativni metod) dodatno ubrza. Ideja je da korekciju za funkciju izvora pomnožimo nekim faktorom ω , $1 < \omega < 2$, čime predviđamo buduće korekcije i idemo dalje, ka tačnom rešenju. Naravno, problem je naći optimalnu vrednost parametra ω , pošto premala vrednost ne ubrzava konvergenciju dovoljno, a prevelika može da "preskoči" optimalno rešenje. U originalnom radu je predložen sledeći izraz za optimalnu vrednost parametra omega:

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \delta}}, \quad (56)$$

gde je δ spektralni radijus iteracije, koji se u principu može dobiti analizom aproksimativnog operatora koji koristimo u iteraciji. Po rečima autora, u praksi se pokazuje da je vrednost $\omega \approx 1.5$ optimalna i da vodi do ubrzanja koje nekoliko puta nadmašuje dijagonalni ALO sa Ng ubrzanjem.

Literatura

- [1] Mihalas D. 1978, Stellar Atmospheres, 2nd edition, San Francisco: Freeman and co.
- [2] Olson, G.L. & Kunasz, P.B. 1987, JQSRT, 38, 325
- [3] Menzel, D.H. & Milne, E.A. 1966, Selected Papers on transfer of radiation, New York: Dover
- [4] Chandrasekhar S. 1960, Radiative Transfer, New York: Dover

- [5] Olson, G.L., Auer, L.H. & Buchler, J.R. 1985, JQSRT, 35, 431
- [6] Hubeny, I. 2003, ASP conference series ed. by Hubeny, I., Mihalas, D., Werner, K. , 288
- [7] Paletou, F. & Auer, L.H. 1995, A&A, 297, 771
- [8] Trujillo Bueno, J. & Fabiani Bendicho, P. 1995, ApJ, 455, 646
- [9] Scharmer, G.B. 1983, A&A, 117, 83
- [10] Atanacković-Vukmanović O., Simonneau, E. & Crivellari V. 1997, ApJ, 487, 735
- [11] Avrett, E.H. & Loeser, R. 1987, in Numerical Radiative Transfer, ed. by. Kalkofen, W., Cambridge University Press
- [12] Auer, L.H. 1991, in Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models, ed. by L.Crivellari et al., Kluwer Academic Publishers
- [13] Ng, K.C. 1974, J. Chem. Phys., 61, 2680
- [14] Auer, L.H. 1987, in Numerical Radiative Transfer, ed. by. Kalkofen, W., Cambridge University Press
- [15] Cannon, C.J. 1973, JQSRT, 13, 627
- [16] Scharmer, G. 1981, ApJ, 249, 720