Vežba 3. Formiranje spektralnih linija u ne-LTR atomima sa dva nivoa (II)

1. Problem

Kao što smo već videli u Vežbi 2, osnovna teškoća u rešavanju problema formiranja spektralnih linija je u uzajamnoj povezanosti polja zračenja i stanja atmosferskog gasa. Stanje gasa, tj. raspodela atoma po vezanim i slobodnim energetskim stanjima zavisi od intenziteta zračenja kroz radijativne prelaze, dok intenzitet zračenja u svakoj tački atmosfere zavisi, kroz proces prenosa zračenja, od stanja gasa u veoma udaljenim tačkama atmosfere. Matematički se ova povezanost opisuje istovremenim rešavanjem jednačine prenosa zračenja i jednačina statističke ravnoteže.

U specijalnom slučaju formiranja linija atomima sa samo dva energetska nivoa (pretpostavljamo da se atmosferski gas sastoji samo od elektrona i atoma jedne vrste - jednog hemijskog elementa koji ima samo dva vezana stanja), funkcija izvora se može *eksplicitno* izraziti kao linearna funkcija polja zračenja u liniji, pa se problem može rešiti bilo direktnom ili iterativnom metodom. Jedna od najpoznatijih direktnih metoda je metoda Feautrier (Feautrier, P.: Sur la resolution numerique de l'equation de transfert, 1964, *C.R. Acad. Sci. Paris*, 258, 3189; videti i u Mihalas, D.: *Stellar Atmospheres*, 2nd ed. 1978, W. H. Freeman and Co., 650 p.). U realnijem slučaju formiranja linija atomima sa više nivoa (multi-level problem), koji ovde nećemo razmatrati, nije moguće dobiti eksplicitan izraz za funkciju izvora, problem je nelinearan, pa je neophodno za rešavanje koristiti neku iterativnu proceduru.

Dakle, potrebno je rešiti jednačinu prenosa zračenja:

$$\mu \frac{dI_{x\mu}}{d\tau} = \varphi_x [I_{x\mu}(\tau) - S(\tau)] \tag{1}$$

sa funkcijom izvora u liniji:

$$S(\tau) = \varepsilon B(\tau) + (1-\varepsilon) J_\varphi(\tau) \ , \tag{2}$$

gde je J_φ tzv. integral rasejanja dat sa:

$$J_\varphi(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi_x \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} d\mu I_{x\mu}(\tau) \ . \tag{3}$$

Za rešavanje ovog sistema integro-diferencijalnih jednačina moramo zadati uslove na granicama. Pretpostavljamo da je:
(a) ulazno zračenje na gornjoj granici jednako nuli: $I^{-}_{x\mu}(\tau = 0) = 0$, a
(b) izlazno zračenje na donjoj granici jednako funkciji izvora: $I^{+}_{x\mu}(\tau_N) = S(\tau_N)$.

Najdirektnija iterativna procedura je tzv. Λ iteracija koja ovaj problem rešava na sledeći način: $S^o(\tau) \rightarrow I_{x\mu}(\tau) \rightarrow J_\varphi(\tau) \rightarrow S^n(\tau)$, tj. polazeći od poznate (zadate u prvoj iteraciji ili dobijene u prethodnoj iteraciji) vrednosti funkcije izvora $S^o(\tau)$ računa se specifični intenzitet zračenja $I_{x\mu}(\tau)$, a zatim srednji intenzitet zračenja integraljen po frekvencijama $J_\varphi(\tau)$ koji se koristi za izračunavanje nove vrednosti funkcije izvora $S^n(\tau)$. Medjutim, kao što smo već videli u Vežbi 2. konvergencija je veoma spora.

Dvosmerno implicitna Λ iteracija

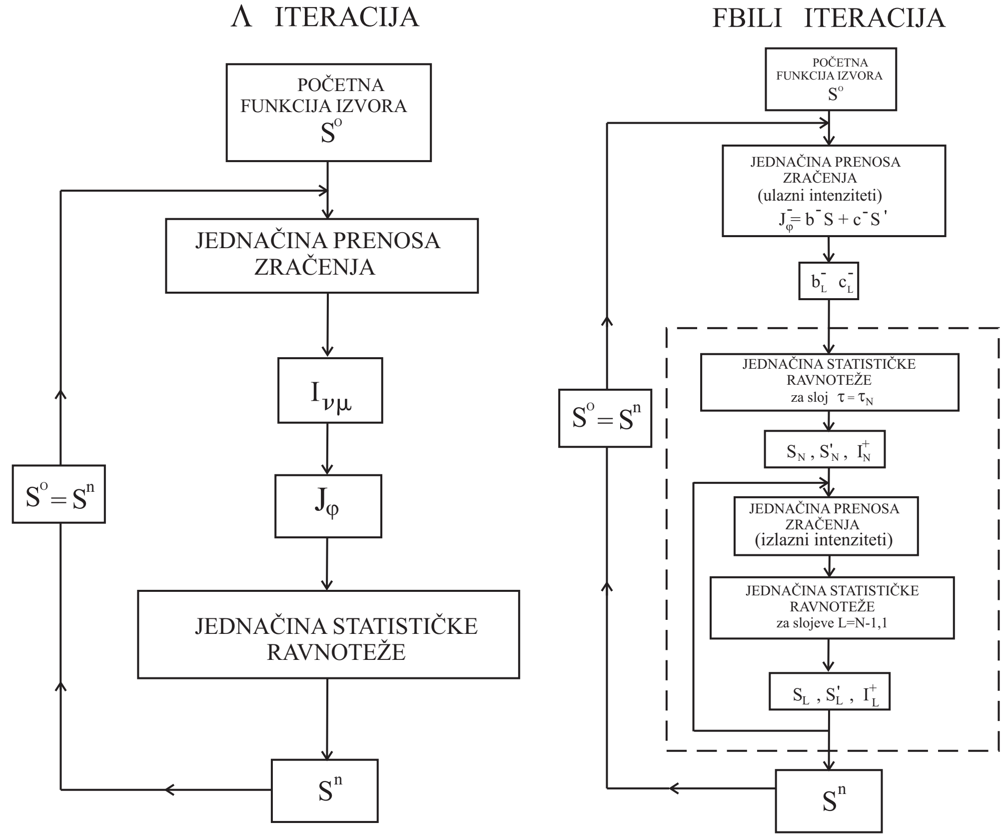
Konvergencija klasične Λ iteracije se može znatno ubrzati implicitnom reprezentacijom funkcije izvora pri računanju ulaznog i izlaznog intenziteta zračenja, kao što je predloženo FBILI (Forth-and-Back Implicit Lambda Iteration) metodom (Atanacković-Vukmanović, O., Crivellari, L., Simonneau, E.: 1997, *Astrophys. J.* 487, 735).

Dva odvojena granična uslova sugerišu da možemo posebno razmatrati ulazno zračenje $I^{-}_{x\mu}(\tau)$ polazeći od uslova na površini ($\tau = 0$) i izlazno zračenje $I^{+}_{x\mu}(\tau)$ polazeći od uslova na dnu atmosfere ($\tau = \tau_N$). Osim toga, iako ne znamo vrednosti intenziteta zračenja, njegovo ponašanje iz sloja u sloj možemo jednostavno prikazati koristeći integralni oblik jednačine prenosa zračenja. Naime, za svaku optičku dubinu τ_l možemo dobiti linearnu relaciju za specifični intenzitet zračenja $I_{x\mu}(\tau_l)$, tj. za srednji intenzitet integraljen po frekvencijama $J_\varphi(\tau_l)$ u funkciji nepoznate funkcije izvora $S(\tau_l)$:

$$J_\varphi(\tau_l) = a_l + b_l S(\tau_l) \tag{4}$$

Za to je neophodno da pretpostavimo neku funkcionalnu zavisnost $S(\tau)$ izmedju dve tačke (dubine) u modelu atmosfere. Najčešće se funkcija izvora aproksimira segmentima parabole ili kubne funkcije.

Ova metoda ima jednostavnu iterativnu šemu, vrlo sličnu šemi klasične Λ iteracije s tim što se drastično povećanje brzine konvergencije postiže zahvaljujući **iterativnom izračunavanju koeficijenata a i b linearne relacije izmedju J_φ i S, a ne samih nepoznatih problema.** Dok se same nepoznate veličine J_φ i S iz iteracije u iteraciju sporo koriguju, njihov "odnos" u vidu koeficijenata njihove linearne veze vrlo brzo dostiže tačnu vrednost. Dakle, polazeći od funkcije izvora S, računaju se u formalnom rešenju ne novi intenziteti, već koeficijenti a i b koji se zatim koriste da se iz jednačina (2) i (4) izračuna nova vrednost S.



Sl.1. Šema klasične Λ iteracije i FBILI iteracije

Pri numeričkom rešavanju mi razmatramo $I^{\pm}_{x\mu}(\tau_l)$ na svakoj optičkoj dubini τ_l u NP pravaca μ_i i NF frekventnih tačaka u profilu linije x_j. Takodje, i sve druge veličine koje su funkcije dubine računaju se u N tačaka po optičkoj dubini τ_l, $l = 1, N$.

Svaka iteracija počinje formiranjem koeficijenata linearne relacije izmedju ulaznog intenziteta zračenja i funkcije izvora.

Polazimo, najpre, od gornje granice atmosfere na kojoj uzimamo da je ulazni intenzitet zračenja nula, $I^{-}_{x\mu}(\tau_1 = 0) = 0$. Koristeći integralni oblik jednačine prenosa za ulazni intenzitet zračenja u ostalim tačkama τ_l; $l = 2, N$

možemo pisati:

$$I^-_{x\mu}(\tau_l) = I^-_{x\mu}(\tau_{l-1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu} + \int_{\tau_{l-1}}^{\tau_l} S(t)e^{-(\tau_l-t)\varphi_x/\mu}\frac{\varphi_x}{\mu}dt \quad , \qquad (4)$$

gde je $\Delta\tau_l = \tau_l - \tau_{l-1}$. Funkciju izvora pod integralom aproksimiraćemo parabolom izmedju dve uzastopne tačke τ_{l-1} i τ_l. Parcijalnom integracijom dobijamo

$$I^-_{x\mu}(\tau_l) = I^-_{x\mu}(\tau_{l-1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu} + [S(\tau_l) - \frac{\mu}{\varphi_x}S'(\tau_l) + \frac{\mu^2}{\varphi_x^2}S''(\tau_l)] -$$

$$[S(\tau_{l-1}) - \frac{\mu}{\varphi_x}S'(\tau_{l-1}) + \frac{\mu^2}{\varphi_x^2}S''(\tau_{l-1})]e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu} \qquad (5)$$

S obzirom na pretpostavljenu paraboličnu aproksimaciju imamo:

$$S''(\tau_l) = S''(\tau_{l-1}) = \frac{S'(\tau_l) - S'(\tau_{l-1})}{\Delta\tau_l} \ ,$$

pa zamenom ovog izraza u jednačinu (5) dobijamo izraz za intenzitet ulaznog zračenja na dubini τ_l u funkciji intenziteta na dubini τ_{l-1} i funkcija izvora i njihovih prvih izvoda u tačkama τ_l i τ_{l-1}:

$$I^-_{x\mu}(\tau_l) = I^-_{x\mu}(\tau_{l-1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu} + a_1S(\tau_l) + a_2S(\tau_{l-1}) + a_3S'(\tau_l) + a_4S'(\tau_{l-1}) \ . \qquad (6)$$

Koeficijenti a_1 - a_4 su dati sledećim izrazima:

$$a_1 = 1$$

$$a_2 = -e^{-\Delta}$$

$$a_3 = \frac{\Delta\tau_l}{\Delta}[\frac{1-e^{-\Delta}}{\Delta} - 1]$$

$$a_4 = \frac{\Delta\tau_l}{\Delta}[e^{-\Delta} - \frac{1-e^{-\Delta}}{\Delta}] \ ,$$

gde je uvedena oznaka: $\Delta = \frac{\Delta\tau_l\varphi_x}{\mu}$.

Aproksimirajući funkciju izvora polinomom drugog stepena, za funkciju i njen izvod može se pisati sledeće:

$$S(\tau_l) = S(\tau_{l-1}) + \Delta\tau_l S'(\tau_{l-1}) + \frac{\Delta\tau_l^2}{2} S''(\tau_{l-1})$$

$$S'(\tau_l) = S'(\tau_{l-1}) + \Delta\tau_l S''(\tau_{l-1}) \quad .$$

Iz gornje dve relacije $S'(\tau_{l-1})$ se može izraziti kao:

$$S'(\tau_{l-1}) = 2\frac{S(\tau_l) - S(\tau_{l-1})}{\Delta\tau_l} - S'(\tau_l) \ . \tag{7}$$

Zamenom (7) u (6) možemo eliminisati $S'(\tau_{l-1})$ pa dobijamo:

$$I^-_{x\mu}(\tau_l) = I^-_{x\mu}(\tau_{l-1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu} + p^-_l S(\tau_l) + q^-_l S(\tau_{l-1}) + r^-_l S'(\tau_l) \quad , \tag{8}$$

gde su koeficijenti

$$p^-_l = 1 - \frac{2}{\Delta^2} + e^{-\Delta}(\frac{2}{\Delta} + \frac{2}{\Delta^2})$$

$$q^-_l = \frac{2}{\Delta^2} - e^{-\Delta}(1 + \frac{2}{\Delta} + \frac{2}{\Delta^2})$$

$$r^-_l = \frac{\Delta\tau_l}{\Delta}[-1 + \frac{2}{\Delta} - e^{-\Delta}(1 + \frac{2}{\Delta})] \ .$$

Jednačinu (8) možemo prepisati kao:

$$I^-_{x\mu}(\tau_l) = a^-_{x\mu} + b^-_{x\mu}S(\tau_l) + c^-_{x\mu}S'(\tau_l) \ , \tag{9}$$

gde $a^-_{x\mu} = I^-_{x\mu}(\tau_{l-1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu} + q^-_l S^o(\tau_{l-1})$ računamo sa starom (poznatom iz prethodne iteracije) funkcijom izvora S^o. Koeficijenti $b^-_{x\mu} = p^-_l$ i $c^-_{x\mu} = r^-_l$ zavise samo od poznatih vrednosti $\Delta = \frac{\Delta\tau_l\varphi_x}{\mu}$, dok su S i S' još nepoznata funkcija izvora i njen prvi izvod po τ. Posle numeričke integracije po svim frekvencijama i pravcima dobijamo linearnu relaciju za ulazni srednji intenzitet zračenja u liniji:

$$J^-_\varphi(\tau_l) = b^-_l S(\tau_l) + c^-_l S'(\tau_l) \quad , \tag{10}$$

gde su $b^-_l = \Sigma w_x w_\mu(\frac{a^-_{x\mu}}{S^o(\tau_l)} + b^-_{x\mu})$ i $c^-_l = \Sigma w_x w_\mu c^-_{x\mu}$, a w_x i w_μ težine za integraciju po x i μ.

Ovaj prvi deo svake iteracije, tzv. *forward elimination*, razlikuje se od klasične Λ iteracije po tome što ne koristi staru funkciju izvora $S^o(\tau)$ za izračunavanje J_φ^-, već za izračunavanje, u svakoj tački $\tau_l(l=2,N)$, koeficijenata b_l^- i c_l^- linearne relacije (10). Podsetimo se da zbog uslova na gornjoj granici $I_{x\mu}^-(\tau_1=0)=0$ mora biti $b_1^-=0$ i $c_1^-=0$. Koeficijente b_l^- i c_l^- ćemo kasnije, u drugom (backward substitution) delu iteracije, koristiti da dobijemo novu vrednost funkcije izvora $S(\tau_l)$.

Drugi deo iteracije je potpuno analogan prvom delu.

Polazimo od donjeg graničnog uslova: $I_{x\mu}^+(\tau_N)=S(\tau_N)$ i $S'(\tau_N)=0$. Onda imamo:

$$J_\varphi^+(\tau_N)=\Sigma w_x w_\mu I_{x\mu}^+(\tau_N)=S(\tau_N)$$

Pretpostavljajući linearnu relaciju oblika

$$J_\varphi^+(\tau_N)=a_N^+ + b_N^+ S(\tau_N)$$

vidimo da su koeficijenti $a_N^+=0$ i $b_N^+=1$. U izrazu za ukupni srednji intenzitet zračenja

$$J_\varphi(\tau_N)=a_N+b_N S(\tau_N) \tag{11}$$

koeficijenti su onda dati sa:

$$a_N=(a_N^+ + a_N^-)/2=0$$

$$b_N=(b_N^+ + b_N^-)/2=(1+b_N^-)/2 \quad .$$

Zamenjujući izraz (11) u jednačinu statističke ravnoteže (2) na dubini τ_N dobijamo novu vrednost funkcije izvora $S(\tau_N)$. Sa $S(\tau_N)$, $I^+(\tau_N)=S(\tau_N)$ i $S'(\tau_N)=0$ ulazimo u jednačinu prenosa za intenzitet izlaznog zračenja u sledećoj višoj tački atmosfere τ_{N-1}.

Za izlazno zračenje primenjujemo sličan postupak kao za ulazno. Polazimo od integralnog oblika jednačine prenosa:

$$I_{x\mu}^+(\tau_l)=I_{x\mu}^+(\tau_{l+1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu}+\int_{\tau_l}^{\tau_{l+1}} S(t)e^{-(t-\tau_l)\varphi_x/\mu}\frac{\varphi_x}{\mu}dt \quad , \tag{12}$$

gde je $\Delta\tau_l=\tau_{l+1}-\tau_l$. Primenjujući parcijalnu integraciju dobijamo

$$I_{x\mu}^+(\tau_l)=I_{x\mu}^+(\tau_{l+1})e^{-\Delta\tau_l\varphi_x/\mu}+[S(\tau_l)+\frac{\mu}{\varphi_x}S'(\tau_l)+\frac{\mu^2}{\varphi_x^2}S''(\tau_l)]-$$

$$[S(\tau_{l+1}) + \frac{\mu}{\varphi_x} S'(\tau_{l+1}) + \frac{\mu^2}{\varphi_x^2} S''(\tau_{l+1})] e^{-\Delta\tau_l \varphi_x/\mu} \tag{13}$$

a zatim zamenjujući izraz za $S''(\tau_l)$ i $S''(\tau_{l+1})$ u jednačinu (13) imamo:

$$I^+_{x\mu}(\tau_l) = I^+_{x\mu}(\tau_{l+1}) e^{-\Delta\tau_l \varphi_x/\mu} + a_1 S(\tau_l) + a_2 S(\tau_{l+1}) - a_3 S'(\tau_l) - a_4 S'(\tau_{l+1}) \ , \tag{14}$$

sa istim koeficijentima a_1 - a_4. Koristeći

$$S'(\tau_l) = 2\frac{S(\tau_{l+1}) - S(\tau_l)}{\Delta\tau_l} - S'(\tau_{l+1}) \tag{15}$$

u (14) pišemo izraz za intenzitet izlaznog zračenja u obliku:

$$I^+_{x\mu}(\tau_l) = I^+_{x\mu}(\tau_{l+1}) e^{-\Delta\tau_l \varphi_x/\mu} + p^+_l S(\tau_l) + q^+_l S(\tau_{l+1}) + r^+_l S'(\tau_{l+1}) \ ,$$

gde su koeficijenti dati sa

$$p^+_l = 1 - \frac{2}{\Delta}[1 + \frac{e^{-\Delta} - 1}{\Delta}]$$

$$q^+_l = -e^{-\Delta} + \frac{2}{\Delta}[1 + \frac{e^{-\Delta} - 1}{\Delta}]$$

$$r^+_l = \frac{\Delta\tau_l}{\Delta}[-e^{-\Delta} - 1 - \frac{2}{\Delta}(e^{-\Delta} - 1)] \ .$$

Gornju jednačinu možemo prepisati kao

$$I^+_{x\mu}(\tau_l) = a^+_{x\mu} + b^+_{x\mu} S(\tau_l) \ , \tag{16}$$

gde se $a^+_{x\mu} = I^+_{x\mu}(\tau_{l+1}) e^{-\Delta\tau_l \varphi_x/\mu} + q^+_l S(\tau_{l+1}) + r^+_l S'(\tau_{l+1})$ računa sa novim (popravljenim) vrednostima $I^+_{x\mu}(\tau_{l+1})$, $S(\tau_{l+1})$ i $S'(\tau_{l+1})$ dobijenim u tački τ_{l+1}, a $b^+_{x\mu} = p^+_l$. Integracijom po svim frekvencijama i pravcima dobija se:

$$J^+_\varphi(\tau_l) = a^+_l + b^+_l S(\tau_l) \tag{17}$$

gde su $a^+_l = \Sigma w_x w_\mu a^+_{x\mu}$ i $b^+_l = \Sigma w_x w_\mu b^+_{x\mu}$.

Da bismo konačno dobili koeficijente linearne relacije

$$J_\varphi(\tau_l) = a_l + b_l S(\tau_l) \tag{18}$$

gde je $a_l = (a_l^- + a_l^+)/2$ i $b_l = (b_l^- + b_l^+)/2$, potrebno je da znamo a_l^- i b_l^-. Ove koeficijente ćemo dobiti tako što ćemo u (10) eliminisati $S'(\tau_l)$ pomoću izraza (15). Tako imamo:

$$J_\varphi^-(\tau_l) = a_l^- + b_l^- S(\tau_l) \tag{19}$$

gde su

$$a_l^- = c_l^- [\frac{2S(\tau_{l+1})}{\Delta\tau_l} - S'(\tau_{l+1})]$$

i

$$b_l^- = b_l^- - \frac{2c_l^-}{\Delta\tau_l} \quad .$$

Koeficijent a_l^- se računa sa popravljenom funkcijom izvora $S(\tau_{l+1})$ i njenim prvim izvodom. Najzad, zamenom relacije (18) u jednačinu statističke ravnoteže (2) dobija se nova funkcija izvora $S(\tau_l)$. Njen izvod na dubini τ_l, $S'(\tau_l)$, dobija se primenom relacije (15), a intenzitet izlaznog zračenja $I_{x\mu}^+(\tau_l) = a_{x\mu}^+ + b_{x\mu}^+ S(\tau_l)$ računa se iz (16). Sa tako izračunatim novim vrednostima za $I_{x\mu}^+(\tau_l)$, $S(\tau_l)$ i $S'(\tau_l)$ ide se u sledeći viši sloj τ_{l-1}. Formiranje koeficijenata a_l i b_l i rešavanje jednačine statističke ravnoteže za novu funkciju izvora vrši se u toku *backward* procedure iz sloja u sloj do površine. Upravo iterativno izračunavanje ovih koeficijenata, a ne samih srednjih intenziteta obezbedjuje izuzetno brzu konvergenciju ka tačnom rešenju.