



**MÉTHODES NUMÉRIQUES (1D, ...) POUR LE  
TRANSFERT RADIATIF HORS ETL.  
APPLICATIONS AUX PROTUBÉRANCES ET  
FILAMENTS SOLAIRES, AUX ATMOSPHÈRES  
SEMI-INFINIES**

**Martine Chane-Yook (IAS)**  
**[martine.chane-yook@universite-paris-saclay.fr](mailto:martine.chane-yook@universite-paris-saclay.fr)**

Avec la collaboration de :

**Frédéric Paletou (IRAP)**  
**[frederic.paletou@utoulouse.fr](mailto:frederic.paletou@utoulouse.fr)**

Ocobre 2025

---

## Table des matières

<b>I</b>	<b>Transfert radiatif hors ETL en 1D</b>	<b>5</b>
<b>1</b>	<b>Cas d'un atome à deux niveaux</b>	<b>7</b>
1.1	Atmosphère semi-infinie	7
1.1.1	Modélisation d'une atmosphère semi-infinie	8
1.1.2	Discretisation de l'équation de transfert radiatif et conditions aux limites	9
1.1.3	Méthode de la $\Lambda$ -itération simple	15
1.1.4	Méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration)	17
1.1.5	Accélération du schéma ALI par la méthode Ng	21
1.1.6	Descriptif du programme	24
1.1.7	Explication des sousroutines	25
	1.1.7.1 Description des variables utilisées par module	26
	1.1.7.2 Description des sousroutines par module	27
1.1.8	Exécution du programme	29
1.2	Filament solaire	29
1.2.1	Modélisation d'un filament	30
1.2.2	Atome à deux niveaux et équilibre statistique	30
1.2.3	Implémentation	36
	1.2.3.1 Construction de l'atmosphère et conditions aux limites	36
	1.2.3.2 Méthode de résolution hors ETL de l'ETR en utilisant le schéma ALI accéléré	39
1.2.4	Descriptif du programme	40
1.2.5	Explication des sousroutines	41
	1.2.5.1 Description des variables utilisées	41
	1.2.5.2 Description des sousroutines par module	44
1.2.6	Exécution du programme	47
1.3	Protubérance solaire	47
1.3.1	Modélisation d'une protubérance	48
1.3.2	Méthode ALI accélérée et conditions aux limites	48
	1.3.2.1 Conditions aux limites	48

---

1.3.2.2	Méthode de résolution hors ETL de l'ETR par la méthode ALI accélérée . . . . .	50
1.3.3	Descriptif du programme . . . . .	52
1.3.4	Explication des sousroutines . . . . .	52
1.3.4.1	Description des variables utilisées . . . . .	53
1.3.4.2	Description des sousroutines par module . . . . .	55
1.3.5	Exécution du programme . . . . .	57
1.4	Conclusion . . . . .	57
<b>2</b>	<b>Cas d'un atome multi-niveaux</b>	<b>59</b>
2.1	Formulation multi-niveaux . . . . .	59
2.2	Méthode itérative et choix de l'opérateur . . . . .	63
2.2.1	Méthode MALI . . . . .	63
2.2.2	Choix de l'opérateur lambda approché $\Lambda_{\mu\nu}^*$ . . . . .	64
2.3	Opérateur local, pas de "background continuum", pas d'absorption continue. Application au cas d'une atmosphère semi-infinie . . . . .	65
2.3.1	Équations de l'équilibre statistique . . . . .	65
2.3.2	Descriptif du programme H3CRD . . . . .	68
2.3.3	Algorithme . . . . .	69
2.3.4	Physique atomique de l'atome d'hydrogène . . . . .	69
2.3.5	Explications des sousroutines . . . . .	69
2.3.5.1	Liste des variables utilisées dans le module "param_mod" (fichier param.f90) . . . . .	72
2.3.5.2	Explications des sousroutines du module "general_mod" (fichier general.f90) . . . . .	72
2.3.5.3	Explications des sousroutines du module "mali_mod" (fichier mali.f90) . . . . .	73
2.3.6	Exécution du programme H3CRD . . . . .	76
	<b>Remerciements</b>	<b>77</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>80</b>

## **Première partie**

### **Transfert radiatif hors ETL en 1D**



## Cas d'un atome à deux niveaux

### Sommaire

<b>1.1</b>	<b>Atmosphère semi-infinie</b>	<b>7</b>
<b>1.2</b>	<b>Filament solaire</b>	<b>29</b>
<b>1.3</b>	<b>Protubérance solaire</b>	<b>47</b>
<b>1.4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>57</b>

On veut résoudre l'équation de transfert radiatif (ETR) hors ETL en 1D pour un atome à 2 niveaux dans le cas d'une atmosphère semi-infinie, d'un filament et d'une protubérance. Dans le paragraphe 1.1 (atmosphère semi-infinie), nous allons discrétiser l'équation de transfert afin de la mettre sous forme matricielle. La méthode de la  $\Lambda$ -itération simple ainsi que la méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration) sont expliquées et appliquées pour la résolution de l'équation de transfert dans le cas d'une atmosphère semi-infinie. Dans le paragraphe 1.2 (filament), nous allons appliquer la méthode ALI pour la résolution de l'équation de transfert pour un filament et pour un atome réaliste (atome d'hydrogène, raie Lyman Alpha  $L\alpha$ ). Dans le paragraphe 1.3, on applique la méthode ALI au cas d'une protubérance dans les mêmes conditions que pour le filament.

### 1.1 Atmosphère semi-infinie

L'atmosphère semi-infinie que l'on considère concerne la photosphère et la chromosphère. Elle est représentée par une couche d'épaisseur  $\tau$ , découpée en  $N_d$  sous-couches. Chaque sous-couche  $\tau_d$  ( $d = 1, \dots, N_d$ ), de l'atmosphère a une certaine épaisseur en cm. Les couches sont sphériques mais elles sont traitées comme des couches plan-parallèles. Dans le cas d'un atome à 2 niveaux (1 fondamental et 1 raie), on n'a qu'une seule raie donc une seule grille de fréquences réduites  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N_{freq}$ . On utilise la redistribution complète des fréquences (CRD). On considère un profil de Voigt pour la raie. On prend  $B = 1$  (fonction de Planck),  $\epsilon = 10^{-4}$  (coefficient d'extinction ou probabilité de destruction collisionnelle des photons). Les conditions aux limites (CL) sont les suivantes :

- CL (haut) : 0 (il n'y a pas d'intensité incidente),
- CL (bas) :  $B = 1$  dans toute la couche.

On considère 2 grilles :

- une grille de profondeurs optiques  $\tau = (\tau_d)$ ,  $d = 1, \dots, N_d$ ,
- une grille de fréquences réduites  $\left(x_i = \frac{\nu_i - \nu_0}{\Delta\nu_D}\right)$ ,  $i = 1, \dots, N_{freq}$ .  $\nu_i$  est la fréquence de la raie,  $\nu_0$  est la fréquence centrale de la raie et  $\Delta\nu_D = \frac{\lambda}{c} \left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2}$  est la largeur Doppler.  $\lambda$  est la longueur d'onde de la raie,  $c$  est la vitesse de la lumière,  $k$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température atmosphérique et  $m$  est la masse de l'atome considéré.

### 1.1.1 Modélisation d'une atmosphère semi-infinie

La figure 1.1 illustre cette modélisation d'atmosphère semi-infinie. On range  $\tau$  par valeur croissante (nombre sans dimension).

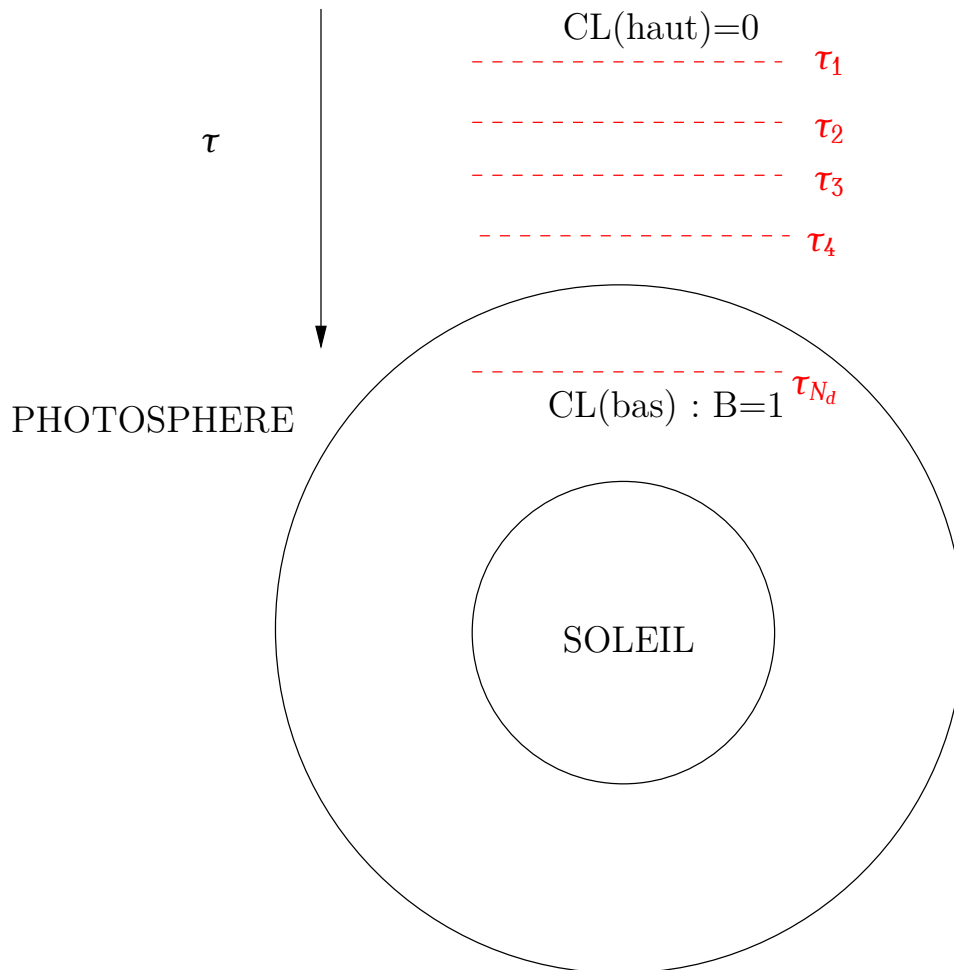


FIGURE 1.1 – Modélisation d'une atmosphère semi-infinie. La figure n'est pas à l'échelle.

Dans la suite, nous allons résoudre numériquement l'équation de transfert radiatif (ETR) pour



une atmosphère semi-infinie. Nous allons présenter 2 méthodes : la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple (la convergence de la solution est lente) et la méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration) basée sur la méthode précédente (on accélère la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple). Nous allons dans un premier temps discrétiser l'équation de transfert afin de la mettre sous forme matricielle.

### 1.1.2 Discrétisation de l'équation de transfert radiatif et conditions aux limites

L'équation de transfert radiatif s'écrit ((2.22) de [Jefferies \(1968\)](#)) :

$$\mu \frac{dI_{\mu\nu}}{d\tau_\nu} = I_{\mu\nu} - S, \quad (1.1.1)$$

où  $I_{\mu\nu} \equiv I(\mu, \nu, \tau)$  est l'intensité spécifique,  $\mu = \cos \theta$ ,  $\theta$  étant l'angle que fait le rayon lumineux avec la normale à la surface. Ici  $\mu > 0$ .  $\nu$  est la fréquence,  $\tau$  est la profondeur optique générique (au centre de la raie),  $\tau_\nu$  est la profondeur optique à une fréquence donnée  $\nu$ ,  $S$  est la fonction source. En CRD,  $S$  ne dépend que de  $\tau$ .

La fonction source pour un atome à deux niveaux s'écrit :

$$S(\tau) = (1 - \epsilon) \bar{J}(\tau) + \epsilon B(\tau), \quad (1.1.2)$$

où  $B$  est la fonction de Planck,  $\epsilon$  est le coefficient d'extinction (ou probabilité de destruction collisionnelle des photons).

$$\bar{J}(\tau) = \int_0^{+\infty} J_\nu \phi_\nu d\nu, \quad (1.1.3)$$

où  $\phi_\nu$  est le profil de la raie (profil de Voigt).

L'intensité moyenne sur les directions s'écrit :

$$J_\nu(\tau) = \frac{1}{4\pi} \oint I_{\mu\nu} d\Omega = \int_{-1}^1 I_{\mu\nu} d\mu \quad (1.1.4)$$

**Remarque 1.1.1** Les quantités  $\bar{J}$ ,  $J_\nu$ ,  $S$  et  $I_{\mu\nu}$  ont la même unité.

La relation qui lie  $\tau_\nu$  à  $\tau$  est :

$$\tau_\nu = \phi_\nu \tau \quad (1.1.5)$$

**Remarque 1.1.2** En faisant le changement de variable (1.1.5), l'ETR (1.1.1) s'écrit aussi (formule 3 de [Olson et al. \(1986\)](#)) :

$$\mu \frac{dI_{\mu\nu}}{d\tau} = \phi_\nu [I_{\mu\nu} - S] \quad (1.1.6)$$

L'équation (1.1.1) s'écrit aussi sous la forme :

$$\mu^2 \frac{d^2 u}{d\tau_\nu^2} = u - S, \quad (1.1.7)$$

où  $u = \frac{1}{2}(I_{\mu\nu} + I_{-\mu\nu})$ .

**Preuve de (1.1.7) :**

On pose :

$$u = \frac{1}{2}(I_{\mu\nu} + I_{-\mu\nu}) \quad (1.1.8)$$

et

$$v = \frac{1}{2}(I_{\mu\nu} - I_{-\mu\nu}) \quad (1.1.9)$$

D'après (1.1.1) on a :

$$\mu \frac{dI_{\mu\nu}}{d\tau_v} = I_{\mu\nu} - S,$$

et donc

$$-\mu \frac{dI_{-\mu\nu}}{d\tau_v} = I_{-\mu\nu} - S \quad (1.1.10)$$

En faisant la somme des équations (1.1.1) et (1.1.10), on obtient :

$$\mu \frac{dv}{d\tau_v} = u - S \quad (1.1.11)$$

En faisant la différence entre (1.1.1) et (1.1.10), on obtient :

$$\mu \frac{du}{d\tau_v} = v \quad (1.1.12)$$

Donc  $\frac{dv}{d\tau_v} = \mu \frac{d^2u}{d\tau_v^2}$ , alors en injectant (1.1.12) dans (1.1.11), on obtient (1.1.7). ■

**On va discrétiser l'équation (1.1.7) :**  $\mu^2 \frac{d^2u}{d\tau_v^2} = u - S$

$\forall v, \forall \mu, \forall d = 2, 3, \dots, N_{d-1}$  , on pose  $\Delta\tau_{v,d} = (\tau_{d+1} - \tau_d)$   $\phi_v := \tau_{v,d+1} - \tau_{v,d}$ .

On considère le schéma de discrétisation suivant :

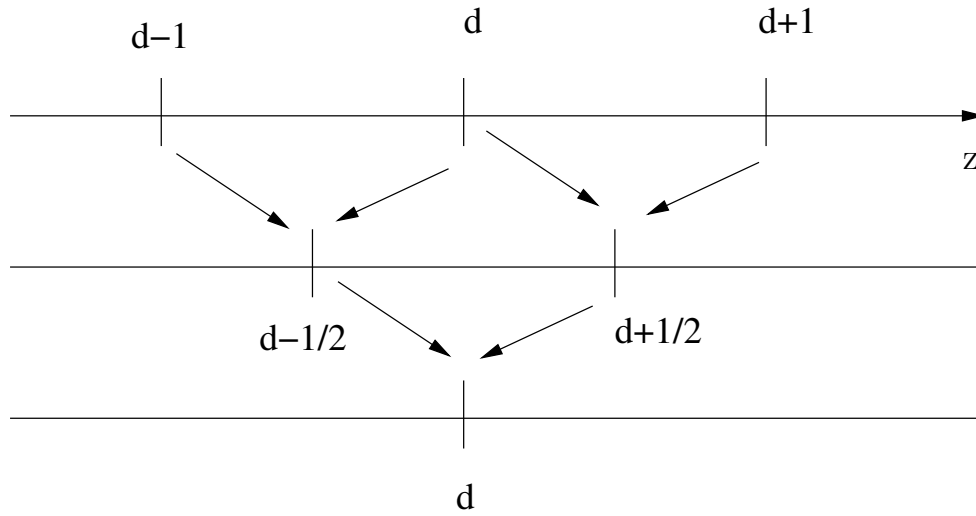


FIGURE 1.2 – Schéma de discrétisation de l'équation (1.1.7).

La dérivée de  $u$  par rapport à  $\tau_v$  au point  $d - 1/2$  s'écrit :

$$\left[ \frac{du}{d\tau_v} \right]_{d-1/2} = \frac{u_d - u_{d-1}}{(\tau_d - \tau_{d-1})\phi_v} = \frac{u_d - u_{d-1}}{\Delta\tau_{v,d-1}}$$

De même, la dérivée de  $u$  par rapport à  $\tau_v$  au point  $d + 1/2$  s'écrit :

$$\left[ \frac{du}{d\tau_v} \right]_{d+1/2} = \frac{u_{d+1} - u_d}{\Delta\tau_{v,d}}$$

Et la dérivée seconde de  $u$  par rapport à  $\tau_v$  au point  $d$  s'écrit :

$$\left[ \frac{d^2u}{d\tau_v^2} \right]_d = \frac{\left[ \frac{du}{d\tau_v} \right]_{d+1/2} - \left[ \frac{du}{d\tau_v} \right]_{d-1/2}}{(\tau_{d+1/2} - \tau_{d-1/2})\phi_v}$$

Or

$$\begin{aligned} (\tau_{d+1/2} - \tau_{d-1/2})\phi_v &= \frac{1}{2}(\tau_{d+1} - \tau_{d-1})\phi_v \\ &= \frac{1}{2}(\tau_{d+1} - \tau_d + \tau_d - \tau_{d-1})\phi_v \\ &= \frac{1}{2}(\Delta\tau_{v,d} + \Delta\tau_{v,d-1}) \end{aligned}$$

Donc

$$\left[ \frac{d^2u}{d\tau_v^2} \right]_d = 2 \frac{\frac{u_{d+1} - u_d}{\Delta\tau_{v,d}} - \frac{u_d - u_{d-1}}{\Delta\tau_{v,d-1}}}{\Delta\tau_{v,d} + \Delta\tau_{v,d-1}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2 u_{d+1}}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} - \frac{2 u_d}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} \\
&- \frac{2 u_d}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} + \frac{2 u_{d-1}}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} \\
&= \frac{2 u_{d-1}}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} + \frac{2 u_{d+1}}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} \\
&- 2 u_d \left( \frac{1}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} + \frac{1}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} \right)
\end{aligned}$$

Or,

$$\frac{1}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} + \frac{1}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} = \frac{1}{\Delta \tau_{v,d} \Delta \tau_{v,d-1}}$$

Donc,

$$\left[ \frac{d^2 u}{d \tau_v^2} \right]_d = \frac{2 u_{d-1}}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} - \frac{2 u_d}{\Delta \tau_{v,d} \Delta \tau_{v,d-1}} + \frac{2 u_{d+1}}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})}$$

La discrétisation de l'ETR (1.1.7) mène à :

$$\frac{2 \mu^2 u_{d-1}}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} - \frac{2 \mu^2 u_d}{\Delta \tau_{v,d} \Delta \tau_{v,d-1}} + \frac{2 \mu^2 u_{d+1}}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} = u_d - S_d,$$

$$\forall v, \forall \mu, \forall d = 2, \dots, N_{d-1}$$

$$\iff S_d =$$

$$\frac{-2 \mu^2 u_{d-1}}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})} + \left( 1 + \frac{2 \mu^2}{\Delta \tau_{v,d} \Delta \tau_{v,d-1}} \right) u_d - \frac{2 \mu^2 u_{d+1}}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})}$$

$$\iff -A_d \cdot u_{d-1} + B_d \cdot u_d - C_d \cdot u_{d+1} = S_d \quad \forall \mu, \forall v, \quad \forall 2 \leq d \leq N_{d-1}, d \in \mathbb{N},$$

avec

$$A_d = \frac{2 \mu^2}{\Delta \tau_{v,d-1}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})}, \quad B_d = 1 + \frac{2 \mu^2}{\Delta \tau_{v,d} \Delta \tau_{v,d-1}}, \quad C_d = \frac{2 \mu^2}{\Delta \tau_{v,d}(\Delta \tau_{v,d} + \Delta \tau_{v,d-1})},$$

et  $\Delta\tau_{v,d} = (\tau_{d+1} - \tau_d) \phi_v$ .

Ici,  $A_d > 0$ ,  $B_d > 0$  et  $C_d > 0$ . (Appendice A de [Rybicki and Hummer \(1991\)](#)) ■

**Ecrivons maintenant les conditions aux limites (CL) pour  $d = 1$  (coefficients  $B_1$  et  $C_1$ ) et  $d = N_d$  (coefficients  $A_{N_d}$  et  $B_{N_d}$ ) :**

on pose  $\Delta\tau_{v,1} = (\tau_2 - \tau_1)\phi_v$  et  $\Delta\tau_{v,N_d} = (\tau_{N_d} - \tau_{N_d-1})\phi_v$ .

On prend

$$\begin{cases} I_v^-(\mu) = I_{sup} = 0 (\equiv I_{-\mu v}), \text{ pour } \tau_v = 0, \text{ CL haut} \\ I_v^+(\mu) = I_{inf} = B = 1 (\equiv I_{\mu v}), \text{ pour } \tau_v = \tau_{v_{max}}, \text{ CL bas} \end{cases}$$

D'après (1.1.8), on a :

$$2u = I_{\mu v} + I_{-\mu v} \iff I_{\mu v} = 2u - I_{-\mu v} \quad (1.1.13)$$

D'après (1.1.9), on a :

$$I_{-\mu v} = I_{\mu v} - 2v \iff I_{-\mu v} = 2u - I_{-\mu v} - 2v \iff I_{-\mu v} = u - v \quad (1.1.14)$$

Donc pour  $\tau_v = 0$ , l'équation (1.1.14) s'écrit :

$$u(\tau_v = 0, -\mu, v) - v(\tau_v = 0, -\mu, v) = I_{sup} \quad (1.1.15)$$

Or (1.1.14)  $\iff v = u - I_{-\mu v}$ , donc (1.1.12)  $\iff \mu \frac{du}{d\tau_v} = u - I_{-\mu v}$ .

Pour  $\tau_v = 0$ , on a :

$$u(\tau_v = 0, -\mu, v) - \mu \frac{du}{d\tau_v}(\tau_v = 0, -\mu, v) = I_{sup} \quad (1.1.16)$$

On discrétise l'équation (1.1.16) :

$$\left[ \frac{du}{d\tau_v}(\tau_v = 0, -\mu, v) \right]_{d=1} = \frac{u_2 - u_1}{(\tau_2 - \tau_1)\phi_v} = \frac{u_2 - u_1}{\Delta\tau_{v,1}}.$$

Donc (1.1.16) s'écrit :

$$u_1 - \mu \frac{u_2 - u_1}{\Delta\tau_{v,1}} = I_{sup} \iff u_1 \left( 1 + \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,1}} \right) - \mu \frac{u_2}{\Delta\tau_{v,1}} = I_{sup},$$

avec

$$B_1 = 1 + \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,1}}, \quad C_1 = \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,1}} \text{ et } S_1 = I_{sup}.$$

■

Or (1.1.13)  $\iff I_{\mu\nu} = 2u - I_{-\mu\nu}$  et (1.1.14)  $\iff I_{-\mu\nu} = u - v$ , alors

$$(1.1.13) \iff I_{\mu\nu} = u + v \iff v = I_{\mu\nu} - u.$$

$$\text{Donc (1.1.12) } \iff \mu \frac{du}{d\tau_v} = I_{\mu\nu} - u \iff I_{\mu\nu} = u + \mu \frac{du}{d\tau_v}$$

Pour  $\tau_v = \tau_{v_{\max}}$ , on a donc :

$$u(\tau_v = \tau_{v_{\max}}, \mu, v) + \mu \frac{du}{d\tau_v}(\tau_v = \tau_{v_{\max}}, \mu, v) = I(\tau_v = \tau_{v_{\max}}, \mu, v) = I_{\inf}(\mu) \quad (1.1.17)$$

On discrétise l'équation (1.1.17) :

$$\left[ \frac{du}{d\tau_v}(\tau_v = \tau_{v_{\max}}, \mu, v) \right]_{d=N_d} = \frac{u_{N_d} - u_{N_d-1}}{(\tau_{N_d} - \tau_{N_d-1})\phi_v} = \frac{u_{N_d} - u_{N_d-1}}{\Delta\tau_{v,N_d-1}}$$

Donc l'équation (1.1.17) discrétisée s'écrit :

$$\begin{aligned} u_{N_d} + \mu \frac{u_{N_d} - u_{N_d-1}}{\Delta\tau_{v,N_d-1}} &= I_{\inf} \\ \iff \frac{-\mu}{\Delta\tau_{v,N_d-1}} u_{N_d-1} + \left( 1 + \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,N_d-1}} \right) u_{N_d} &= I_{\inf}, \end{aligned}$$

avec

$$B_{N_d} = 1 + \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,N_d-1}}, \quad A_{N_d} = \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,N_d-1}} \text{ et } S_{N_d} = I_{\inf}.$$

■

En résumé, résoudre l'ETR (1.1.1) ou (1.1.7) revient à résoudre le système linéaire suivant :

$$T \cdot u = S, \quad (1.1.18)$$

où  $T$  est une matrice tridiagonale de taille  $N_d \times N_d$  dont les termes sont :

$$T = \begin{pmatrix} B_1 & -C_1 & & \\ -A_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -C_{N_d-1} \\ & & -A_{N_d} & B_{N_d} \end{pmatrix} \quad (1.1.19)$$

avec

- $\forall \mu, \forall v, \forall 2 \leq d \leq N_d - 1$ , on a :

$$-A_d u_{d-1} + B_d u_d - C_d u_{d+1} = S_d,$$

$$A_d = \frac{2\mu^2}{\Delta\tau_{v,d-1}(\Delta\tau_{v,d} + \Delta\tau_{v,d-1})}, \quad B_d = 1 + \frac{2\mu^2}{\Delta\tau_{v,d} \Delta\tau_{v,d-1}},$$

$$C_d = \frac{2\mu^2}{\Delta\tau_{v,d}(\Delta\tau_{v,d} + \Delta\tau_{v,d-1})}$$

$$\bullet B_1 = 1 + \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,1}}, \quad C_1 = \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,1}}$$

$$\bullet A_{N_d} = \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,N_d-1}}, \quad B_{N_d} = 1 + \frac{\mu}{\Delta\tau_{v,N_d-1}}$$

Le second membre  $S$  s'écrit :

$$S = \begin{pmatrix} I_{sup} \\ S_2 \\ \vdots \\ S_{N_d-1} \\ I_{inf} \end{pmatrix} \quad (1.1.20)$$

Dans notre cas (atmosphère semi-infinie),  $I_{inf} = B$  et  $I_{sup} = 0$ .

Nous allons introduire dans les paragraphes suivants deux méthodes de résolution du système (1.1.18) : la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple et la méthode ALI (Accelerated Lambda iteration).

### 1.1.3 Méthode de la $\Lambda$ -itération simple

$\forall \mu, \forall \nu$ , on résout le système linéaire (1.1.18) par la méthode d'élimination de Gauss (formules A4 et A5 de l'appendice A de Rybicki and Hummer (1991)) :

on introduit les quantités suivantes :  $\forall \mu, \forall \nu$ ,

$$\begin{aligned} D_d &= (B_d - A_d D_{d-1})^{-1} C_d, \quad \forall 2 \leq d \leq N_d - 1 \\ D_1 &= B_1^{-1} C_1 \\ Z_d &= (B_d - A_d D_{d-1})^{-1} (S_d + A_d Z_{d-1}), \quad \forall 2 \leq d \leq N_d \\ Z_1 &= B_1^{-1} S_1 \end{aligned} \quad (1.1.21)$$

Et on considère le schéma d'élimination de Gauss suivant :

$$\begin{cases} u_d = D_d u_{d+1} + Z_d, & \forall 1 \leq d \leq N_d \\ u_{N_d+1} = 0 \end{cases} \quad (1.1.22)$$

**L'algorithme de la  $\Lambda$ -itération pour la résolution de l'ETR (1.1.1) ou (1.1.7) s'écrit :**

1. On initialise la fonction source  $S$  à une valeur de départ, par exemple à la fonction de Planck  $B = 1$
2. Pour chaque fréquence  $\nu$  et pour chaque direction  $\mu$  :
  - on calcule les coefficients de la matrice tridiagonale  $T$  pour chaque profondeur optique  $\tau_\nu$
  - on calcule la solution  $u$  par la méthode d'élimination de Gauss (1.1.22)
  - on calcule  $J_\nu(\tau) = \int_{-1}^1 I_{\mu\nu} d\mu = 2 \int_0^1 u d\mu = \sum_{i=1}^{N_\mu} u_i \cdot \alpha_i$ , où  $(\alpha_i)_i$  sont les poids d'intégration standards par rapport à la direction  $\mu$
  - on calcule  $\bar{J}(\tau) = \int_0^\infty J_\nu \phi_\nu d\nu = \sum_{j=1}^{N_{freq}} J_\nu(j) \cdot W(j)$ , où  $W$  est le poids d'intégration en fréquence et doit être proportionnel à  $\phi_\nu$  et normalisé
3.  $S_1 = I_{sup} (CL)$
4.  $S_{Nd} = I_{inf} (CL)$
5.  $S(\tau) = (1 - \epsilon)\bar{J}(\tau) + \epsilon B$

On itère plusieurs fois ( $N_{iter}$ ) les étapes 2 à 5 pour la convergence.

Pour  $N_{iter} = 200$ , la méthode de la  $\Lambda$ -itération ne converge toujours pas vers la solution (on obtient le même résultat que celui de [Paletou \(2001\)](#), Figure 1) exacte qui commence à  $S(\tau = 0) = B \sqrt{\epsilon}$  (formule (65) de [Hummer and Rybicki \(1967\)](#)).

Sur la figure 1.3 suivante, on trace la fonction source  $S$  en fonction de la profondeur optique  $\tau$  pour un profil Doppler  $\left( \phi_\nu = e^{-x^2}, x = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D} \right)$ ,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ .



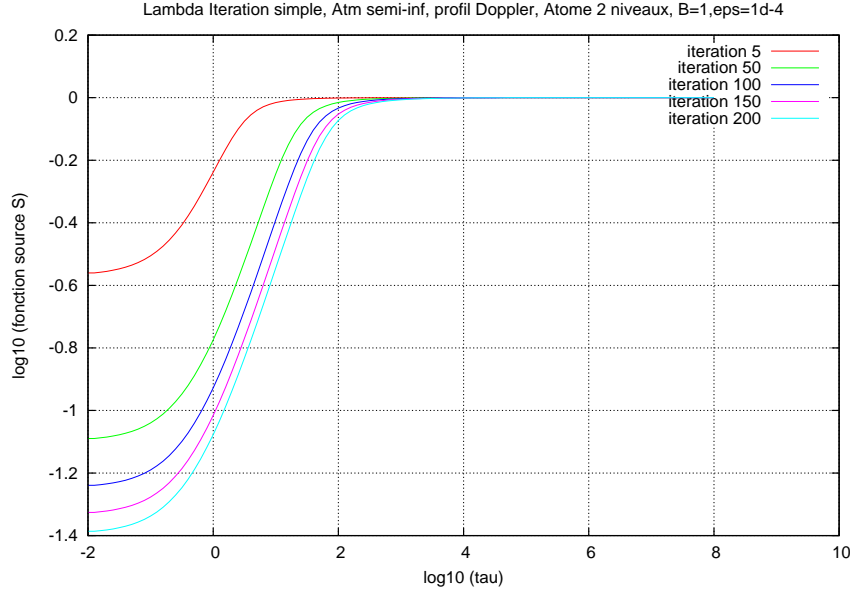


FIGURE 1.3 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode de la  $\Lambda$ -itération pour un profil Doppler (cas d'une atmosphère semi-infinie). Ici,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ . Au bout de 200 itérations, la méthode ne converge toujours pas vers la solution exacte.

Dans le paragraphe suivant, nous allons exposer la méthode ALI (Accelerated Lambda iteration) qui converge plus vite vers la solution exacte.

#### 1.1.4 Méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration)

On considère le schéma itératif suivant :

$$\begin{cases} \Lambda = \Lambda^* + (\Lambda - \Lambda^*) \\ S^{n+1} = S^n + \Delta S \end{cases} \quad (1.1.23)$$

où  $n$  est l'indice de l'itération pour la convergence ALI,  $\Lambda^*$  est la diagonale exacte de l'opérateur complet  $\Lambda$ , et  $S$  est la fonction source. Nous détaillerons la quantité  $\Delta S$  un peu plus loin.

Par définition,

$$\bar{J} = \Lambda S, \quad (1.1.24)$$

avec

$$\Lambda = \sum_v \sum_\mu \Lambda_{\mu\nu} \cdot \gamma_{\mu\nu} \quad (1.1.25)$$

L'opérateur complet  $\Lambda$  s'appelle aussi le "grand opérateur Lambda". L'opérateur  $\Lambda_{\mu\nu}$  s'appelle le "petit opérateur Lambda", est donné par (1.1.18) et est défini par (formule (1.1) de Rybicki and Hummer (1991)) :

$$I_{\mu\nu} = \Lambda_{\mu\nu} [S] \quad (1.1.26)$$

**Preuve de (1.1.25) :**

$$\begin{aligned}
 \bar{J} &= \sum_v J_v \cdot \alpha_v, \quad \alpha_v \text{ poids d'intégration en fréquence} \\
 &= \sum_v \sum_\mu I_{\mu v} \cdot \alpha_v \cdot \beta_\mu, \quad \beta_\mu \text{ poids d'intégration suivant la direction} \\
 &= \left[ \sum_v \sum_\mu \Lambda_{\mu v} \cdot \gamma_{\mu v} \right] S
 \end{aligned}$$

■

On ne calcule pas  $\Lambda$ , on va plutôt calculer  $\Lambda^* = \sum_{\mu, v} \Lambda_{\mu, v}^* \cdot \delta_{\mu, v}$ , où  $\delta_{\mu, v}$  est le poids d'intégration suivant les fréquences  $v$  et les directions  $\mu$ .  $\Lambda_{\mu, v}^*$  est une matrice diagonale contenant les éléments diagonaux de la matrice  $T^{-1}$  (et non  $T$ ) d'après (1.1.18).

**Remarque 1.1.3** Les matrices  $\Lambda_{\mu v}$ ,  $\Lambda_{\mu v}^*$ ,  $\Lambda^*$  et  $\Lambda$  ont la même dimension  $N_d \times N_d$ .

Le schéma itératif ALI est le suivant :

$$\begin{aligned}
 S_k^{n+1} &= S_k^n + \Delta S_k, \text{ avec} \\
 \Delta S_k &= \frac{(1 - \epsilon) \bar{J}_k^n + \epsilon B_k - S_k^n}{1 - (1 - \epsilon) \Lambda_{kk}^*}
 \end{aligned} \tag{1.1.27}$$

$n$  est l'indice sur les itérations (convergence ALI) et  $k$  est l'indice sur la profondeur optique.

**Preuve de (1.1.27) :**

On part de l'expression de la fonction source (1.1.2) :

$$S = (1 - \epsilon) \bar{J} + \epsilon B, \text{ où } \bar{J} = \Lambda [S].$$

On écrit le schéma itératif suivant (formule (9) de Olson et al. (1986)) :

$$\forall k = 1, \dots, N_d \quad S_k^{n+1} = (1 - \epsilon) \Lambda [S_k^n] + \epsilon B_k.$$

Or  $\Lambda = \Lambda^* + (\Lambda - \Lambda^*)$ , alors selon la formule (10) de Olson et al. (1986), on a :

$$S_k^{n+1} = (1 - \epsilon) \Lambda^* [S_k^{n+1}] + (1 - \epsilon) (\Lambda - \Lambda^*) S_k^n + \epsilon B_k \tag{1.1.28}$$

$$\begin{aligned}
(1.1.28) &\iff S_k^{n+1} - (1 - \epsilon)\Lambda^* S_k^{n+1} = (1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S_k^n + \epsilon B_k \\
&\iff [1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*]S_k^{n+1} = (1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S_k^n + \epsilon B_k \\
&\iff S_k^{n+1} = [1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*]^{-1}[(1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S_k^n + \epsilon B_k] \quad (\text{formule (11) de Olson et al. (1986)}) \\
&\iff S_k^{n+1} = \frac{(1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S_k^n + \epsilon B_k}{1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*} \\
&\iff S_k^{n+1} = \frac{(1 - \epsilon)\Lambda S_k^n - (1 - \epsilon)\Lambda^* S_k^n + \epsilon B_k}{1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*} \\
&\iff S_k^{n+1} = \frac{(-(1 - \epsilon)\Lambda^* S_k^n + S_k^n) - S_k^n + (1 - \epsilon)\Lambda S_k^n + \epsilon B_k}{1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*} \\
&\iff S_k^{n+1} = \frac{[1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*]S_k^n - S_k^n + (1 - \epsilon)\Lambda S_k^n + \epsilon B_k}{1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*} \\
&\iff S_k^{n+1} = S_k^n + \frac{(1 - \epsilon)\Lambda S_k^n + \epsilon B_k - S_k^n}{1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*} \\
&\iff S_k^{n+1} = S_k^n + \frac{(1 - \epsilon)\bar{J}_k^n + \epsilon B_k - S_k^n}{1 - (1 - \epsilon)\Lambda_{kk}^*} \quad \text{car } \bar{J} = \Lambda S \\
&\iff S_k^{n+1} = S_k^n + \Delta S_k^{ali}
\end{aligned}$$

■

**Calcul de  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  (matrice diagonale) :**

$$\Lambda_{\mu\nu}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^{-1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & T_{ii}^{-1} & & \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & T_{N_d N_d}^{-1} \end{pmatrix}$$

où  $T = \Lambda_{\mu\nu}$  définie par (1.1.19).

Soit  $\lambda = T^{-1}$ . On va chercher les éléments diagonaux  $\lambda_{ii}$  sans avoir à inverser la matrice  $T$ . D'après l'appendice B de Rybicki and Hummer (1991), on a :  $\forall 2 \leq i \leq N_d - 1$

$$\lambda_{ii} = (1 - D_i E_{i+1})^{-1} \cdot (B_i - A_i D_{i-1})^{-1}, \quad (1.1.29)$$

avec

$$\begin{cases} D_i = (B_i - A_i D_{i-1})^{-1} \cdot C_i \\ D_0 = 0 \\ E_i = (B_i - C_i E_{i+1})^{-1} \cdot A_i \\ E_{N_d+1} = 0 \end{cases} \quad (1.1.30)$$

Ici,

$$\begin{aligned} \lambda_{11} &= (1 - D_1 E_2)^{-1} \cdot (B_1 - A_1 D_0)^{-1} = B_1^{-1} \cdot (1 - D_1 E_2)^{-1} \\ \lambda_{N_d N_d} &= (1 - D_{N_d} E_{N_d+1})^{-1} \cdot (B_{N_d} - A_{N_d} D_{N_d-1})^{-1} = 1 / (B_{N_d} - A_{N_d} \cdot D_{N_d-1}) \end{aligned} \quad (1.1.31)$$

**L'algorithme par la méthode ALI pour la résolution de l'ETR (1.1.1) ou (1.1.7) est :**

1. On initialise la fonction source  $S$  à une valeur de départ, par exemple à la fonction de Planck  $B = 1$
2. Pour chaque fréquence  $\nu$  et pour chaque direction  $\mu$ , on calcule la matrice diagonale  $\Lambda_{\mu\nu}^*(\tau)$  que l'on stockera sous forme de vecteur de taille  $N_d$ . On utilise pour cela les formules (1.1.29-1.1.31) pour  $\lambda_{ii}$
3. On calcule  $\Lambda^* = \sum_{\mu, \nu} \Lambda_{\mu\nu}^* \cdot \delta_{\mu\nu}$ , où  $\delta_{\mu\nu}$  est le poids d'intégration en  $\nu$  (qui doit être proportionnel à  $\phi_\nu$  et normalisé) et en  $\mu$
4. On fait une boucle sur  $N_{iter} = 200$  itérations pour :
  - calculer  $\bar{J}$  (et  $J_\nu$ ) par la méthode d'élimination de Gauss à l'aide de la formule (1.1.22)
  - calculer  $S(\tau)$  à l'aide de la formule (1.1.27) pour chaque profondeur optique en ayant au préalable initialiser  $S_1 = I_{sup}$  et  $S_{N_d} = I_{inf}$

La méthode ALI converge au bout de 100 itérations vers la solution exacte. Sur la figure 1.4, on trace la fonction source  $S$  en fonction de la profondeur optique  $\tau$  pour un profil Doppler,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ . On a les mêmes résultats que la figure 1 de Paletou (2001).

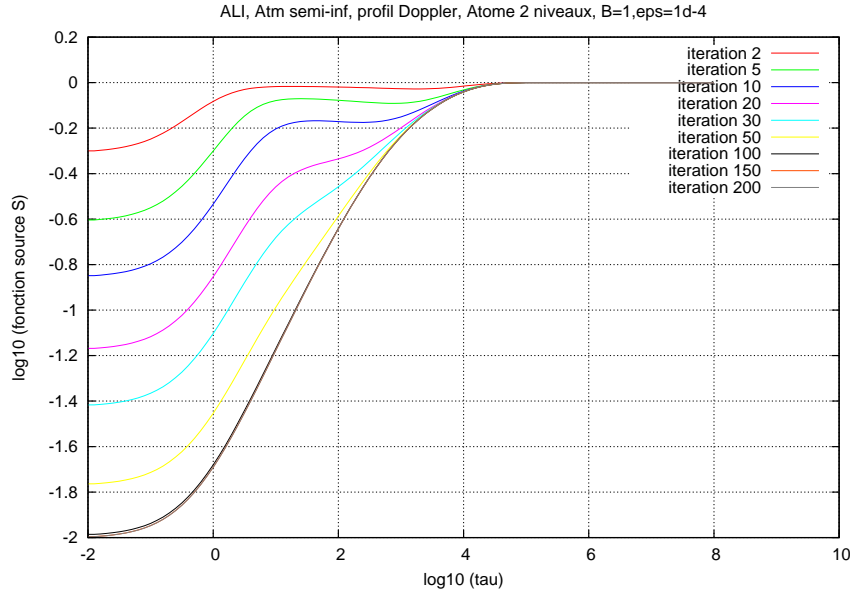


FIGURE 1.4 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI pour un profil Doppler (cas d'une atmosphère semi-infinie). Ici,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ . La convergence se fait au bout de 100 itérations.

Dans le paragraphe suivant, nous allons accélérer la méthode ALI.

### 1.1.5 Accélération du schéma ALI par la méthode Ng

Le but ici est d'accélérer le schéma ALI par la méthode Ng (1974). Le principe de la méthode Ng (l'accélération Ng est une combinaison linéaire des itérés successifs de la fonction source  $S$ ) consiste à accélérer toutes les trois itérations de la convergence d'ALI.

On a vu que le schéma itératif ALI pour la fonction source  $S$  s'écrit (voir paragraphe 1.1.4) :

$$S_k^{n+1} = S_k^n + \Delta S_k \equiv F(S_k^n) \quad (1.1.32)$$

$n$  étant l'indice sur les itérations de convergence du schéma ALI,  $k$  étant l'indice de la grille des profondeurs optiques  $\tau$ .

D'après la paragraphe 5 de Olson et al. (1986), on considère le schéma à trois points suivants :

on pose le vecteur  $Y^n = S_k^n(\tau)$  sur la grille des profondeurs optiques. On fait une accélération sur le calcul de la fonction source  $S$ .

L'équation (1.1.32) s'écrit aussi sous la forme :

$$Y^{n+1} = F(Y^n)$$

D'après Olson et al. (1986), on suppose que le schéma itératif converge linéairement et on accélère la convergence en adoptant une combinaison linéaire de 3 itérés successifs :

$$Y^* = (1 - a - b)Y^{n-1} + a Y^{n-2} + b Y^{n-3} \quad (1.1.33)$$

Donc

$$\begin{aligned} F(Y^*) &= (1 - a - b)Y^n + a Y^{n-1} + b Y^{n-2} \\ &= Y^{n+1} = F(Y^n) \end{aligned} \quad (1.1.34)$$

$a$  et  $b$  sont tels que la quantité  $\sum_{i=1}^{N_d} [y_i^* - F(y_i^*)]^2 \cdot W_i$  est minimale.  $Y^* = (y_i^*)_{1 \leq i \leq N_d}$  et  $W_i$  est le vecteur poids.

Cela revient à résoudre le système d'équations linéaires suivant :

$$\begin{cases} a A_1 + b B_1 = C_1 \\ a A_2 + b B_2 = C_2 \end{cases} \quad (1.1.35)$$

Le choix du poids  $W_i$  est important. On choisit, selon [Olson et al. \(1986\)](#) :

$$W_i = [\bar{J}^n(\tau_i)]^{-1}$$

On peut prendre aussi  $W_i = 1$  mais ça converge un peu moins vite (voir figures 1.5 et 1.6). La solution du système (1.1.35) est :

$$\begin{cases} a = (C_1 B_2 - C_2 B_1) / (A_1 B_2 - A_2 B_1) \\ b = (C_2 A_1 - C_1 A_2) / (A_1 B_2 - A_2 B_1) \end{cases} \quad (1.1.36)$$

avec

$$\begin{aligned} A_1 &= \sum_{i=1}^{N_d} (y_i^n - 2y_i^{n-1} + y_i^{n-2})^2 \cdot W_i \\ B_1 &= \sum_{i=1}^{N_d} (y_i^n - y_i^{n-1} - y_i^{n-2} + y_i^{n-3}) \cdot W_i \cdot (y_i^n - 2y_i^{n-1} + y_i^{n-2}) \\ A_2 &= B_1 \\ B_2 &= \sum_{i=1}^{N_d} (y_i^n - y_i^{n-1} - y_i^{n-2} + y_i^{n-3})^2 \cdot W_i \\ C_1 &= \sum_{i=1}^{N_d} (y_i^n - 2y_i^{n-1} + y_i^{n-2}) (y_i^n - y_i^{n-1}) \cdot W_i \\ C_2 &= \sum_{i=1}^{N_d} (y_i^n - y_i^{n-1} - y_i^{n-2} + y_i^{n-3}) (y_i^n - y_i^{n-1}) \cdot W_i \end{aligned} \quad (1.1.37)$$

**L'algorithme Ng se résume en deux étapes :**

- on part d'une certaine valeur initiale de la fonction source  $S$
- le vecteur accéléré  $Y^n$  est calculé après les quatre premières itérations, puis ensuite après chaque trois itérations normales du schéma ALI.

**L'algorithme ALI accéléré s'écrit :**

- Boucle sur  $N_{iter} = 200$  (itérations)
  1. on calcule  $\bar{J}$  par l'élimination de Gauss (1.1.22)
  2. on calcule  $S$  par la formule (1.1.32)
  3. à l'aide d'un compteur, on appelle la subroutine "acceleration" après 3 itérations normales ALI
- Fin boucle

La subroutine "acceleration" prend en entrée :  $\bar{J}$ ,  $S$ ,  $iter = n$  (itération actuelle). Elle calcule le poids  $W_i = [\bar{J}]^{-1}$ , les valeurs  $A_1$ ,  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $A_2$ , puis les valeurs  $a$  et  $b$ . Et enfin, elle calcule  $S_k^{n+1}$  par la formule (1.1.34) :

$$S_k^{n+1} = (1 - a - b)S_k^n + aS_k^{n-1} + bS_k^{n-2} \equiv F(S_k^n)$$

Puis, on met ce résultat dans  $S$  (input).

La méthode ALI accélérée converge vers la solution exacte au bout de 20 itérations : la figure 1.5 représente la fonction source  $S$  en fonction de la profondeur optique  $\tau$  (en échelle logarithmique) pour un profil Doppler,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ , en utilisant le poids  $W_i = [\bar{J}]^{-1}$  pour l'accélération. Lorsqu'on prend  $W_i = 1$ , la méthode ALI accélérée converge vers la solution exacte au bout de 30 itérations (voir figure 1.6).

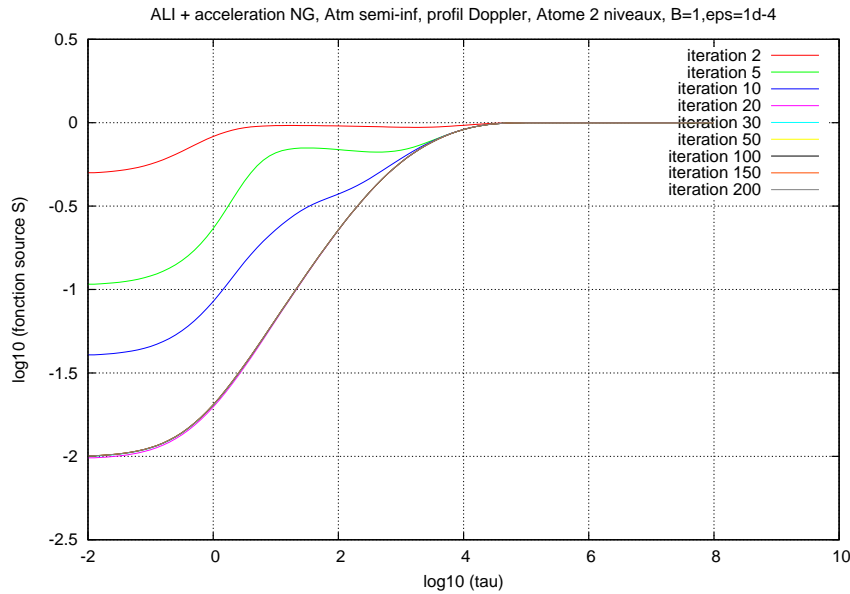


FIGURE 1.5 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI accélérée pour un profil Doppler (cas d'une atmosphère semi-infinie). Ici,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ ,  $W_i = [\bar{J}]^{-1}$ . Convergence atteinte au bout de 20 itérations.

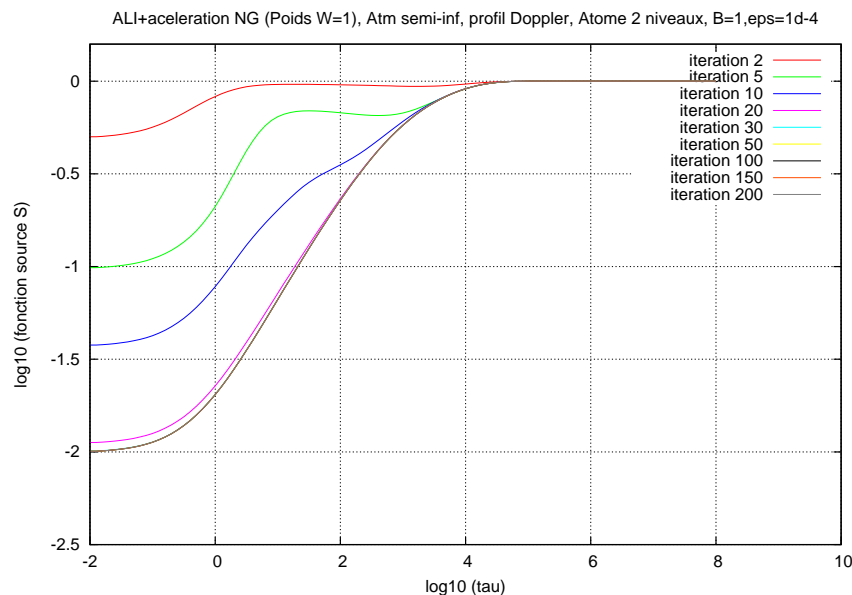


FIGURE 1.6 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI accélérée pour un profil Doppler (cas d'une atmosphère semi-infinie). Ici,  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ ,  $W_i = 1$ . Convergence atteinte au bout de 30 itérations.

### 1.1.6 Descriptif du programme

*Nature du problème physique* : transfert radiatif (1D) hors ETL dans une atmosphère semi-infinie pour un atome à 2 niveaux (un fondamental et une raie fictive), sans champ de vitesse interne

*Méthode de résolution* : méthode de Feautrier améliorée (Rybicki and Hummer, 1991) combinée à

- la méthode de la  $\Lambda$ -itération
- la méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration)
- l'accélération du schéma ALI par la méthode Ng

*Autre information* : on utilise la redistribution complète des fréquences (CRD)

*Auteurs* : M. Chane-Yook & P. Gouttebroze

*Programmes disponibles à partir de* :

<https://idoc.osups.universite-paris-saclay.fr/medoc/tools/radiative-transfer-codes/tools-for-radiative-transfer>

*Machines sur lesquelles le programme a été testé* : PC avec 4 processeurs Intel de 2.67GHz chacun

*Operating System pour lequel le programme a été testé* : Linux

*Langage de programmation* : Fortran 90/95 (avec le compilateur **gfortran**)



*Etat* : Stable

*Accessibilité* : Groupe solaire et extérieur (MEDOC)

*Nombre de lignes* : 594

*Temps de calcul* : < 1 min pour 20 itérations du cycle ALI accéléré

*Références* :

- G. B. Rybicki & D. G. Hummer, "An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I- Non-overlapping lines with background continuum", A&A, 245, 171-181, 1991
- F. Paletou, "Transfert de rayonnement : méthodes itératives", C. R. Acad. Sci. Paris, t.2, Série IV, 885-898, 2001

Dans le paragraphe suivant, on va décrire les sousroutines utilisées dans le programme.

### 1.1.7 Explication des sousroutines

Le programme principal "lambda\_it.f90" fait appel à 3 sousroutines :

- **grilles** : mise en place des grilles de fréquences, d'épaisseurs optiques, de directions et du profil de Voigt
- **methode\_lambda\_it\_simple(S,J\_bar,J\_nu)** : méthode de la  $\Lambda$ -itération simple
- **methode\_ali(S\_ali,J\_bar\_ali,J\_nu\_ali)** : méthode ALI + accélération Ng

Le programme principal "lambda\_it.f90" utilise plusieurs modules dont les fichiers sont (voir plus loin pour la liste des variables utilisées) :

- **param.f90** : contient toutes les variables globales ainsi que les constantes définies comme  $B$ ,  $\epsilon$ ,  $n_{iter}$ , ...
- **general.f90** : contient plusieurs sousroutines comme la définition des grilles, le calcul des coefficients de la matrice tridiagonale (1.1.19), le calcul des poids d'intégration, la fonction de Voigt, les formules d'élimination de Gauss (1.1.22), le calcul de  $J_\nu$  et  $\bar{J}$
- **lambda\_it\_simple.f90** : traite la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple
- **ali.f90** : contient plusieurs sousroutines comme le schéma ALI, le calcul des éléments diagonaux de la matrice diagonale  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  (1.1.29)-(1.1.31), le calcul de  $\Lambda^*$ , le calcul de la fonction source  $S$ , de  $\bar{J}$ , les formules pour l'accélération Ng

### 1.1.7.1 Description des variables utilisées par module

★ **Module param\_mod (fichier param.f90) :**

- pi : valeur de  $\pi$
- coeff\_extinction= $10^{-4}$  : valeur de  $\epsilon$
- BB=1 : valeur de la fonction Planck
- niter=200 : nombre d'itérations pour la convergence des schémas ALI accéléré et  $\Lambda$ -itération simple
- T : température électronique
- l\_sup=0, l\_inf=1 : conditions aux limites supérieure et inférieure
- a\_voigt= $10^{-3}$  : paramètre  $\alpha$  de la fonction de Voigt. Lorsque  $\alpha = 10^{-3}$ , on retrouve la fonction Doppler
- nfr=15 : dimension de la grille des fréquences réduites XFR
- nxmod=101 : dimension de la grille d'épaisseur optique xmod
- nmu=4 : dimension de la grille des directions  $\mu = \cos \theta$
- xmod : tableau de dimension nxmod représentant la profondeur optique générique  $\tau = (\tau_d)$
- xfr : tableau de dimension nfr représentant la fréquence réduite  $x_i$
- mu : tableau de dimension nmu représentant les valeurs de  $\mu = \cos \theta$  (direction)
- J\_bar\_ali, J\_bar : tableaux de dimension nxmod représentant  $\bar{J}$ , respectivement pour la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple et pour la méthode ALI
- J\_nu\_ali, J\_nu : tableaux de dimension (nfr, nxmod) représentant  $J_\nu$ , respectivement pour la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple et pour la méthode ALI
- S\_ali, S : tableaux de dimension (nxmod, niter) représentant la fonction source  $S$ , respectivement pour la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple et pour la méthode ALI
- u\_ali, u : tableaux de dimension (nxmod, nfr, nmu) représentant la solution de l'ETR, respectivement pour la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple et pour la méthode ALI
- lambda\_etoile : tableau de dimension nxmod représentant la matrice  $\Lambda^*$

- `lambda_etoile_mu_nu` : tableau de dimension  $(nxmod, nfr, nmu)$  représentant la matrice  $\Lambda_{\mu\nu}^*$
- `tau_nu` : tableau de dimension  $(nxmod, nfr)$  représentant la profondeur optique  $\tau_\nu = \phi_\nu \tau$
- `phi_nu` : tableau de dimension  $nfr$  correspondant au profil de la raie (profil de Voigt)  $\phi_\nu$  (non normalisé)
- `M` : tableau de dimension  $nfr$  représentant le poids d'intégration (intermédiaire) en fréquence
- `W` : tableau de dimension  $nfr$  représentant le poids d'intégration en fréquence, normalisé et proportionnel au profil  $\phi_\nu$

★ **Module `lambda_it_simple_mod` (fichier `lambda_it_simple.f90`) :**

- `a, b, c, d` : tableaux de dimension  $nxmod$  correspondant aux coefficients  $A$ ,  $B$ , et  $C$  de la matrice tridiagonale (1.1.19) et au coefficient  $D$  de l'élimination de Gauss (1.1.21)

★ **Module `ali_mod` (fichier `ali.f90`) :**

- `a, b, c, d, e` : tableaux de dimension  $nxmod$  correspondant aux coefficients de la matrice tridiagonale (1.1.19), au coefficient  $D$  de l'élimination de Gauss (1.1.21) et au coefficient  $E$  de la matrice diagonale  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  (1.1.30)

### 1.1.7.2 Description des sousroutines par module

#### Module `general_mod` (fichier `general.f90`)

Le module **`general_mod`** regroupe les sousroutines utilisées pour les méthodes de la  $\Lambda$ -itération simple et ALI.

**Subroutine `grilles` :** cette sousroutine met en place les différentes grilles pour la modélisation d'une atmosphère semi-infinie. Plus particulièrement,

- on considère une grille d'épaisseur optique générique  $\tau$  en cm représentée par le tableau `xmod` de taille  $nxmod$
- on considère une grille de fréquences réduites  $(x_i, i=1, \dots, nfr)$  représentée par le tableau `XFR` de taille  $nfr$
- on prend comme profil de raie  $\phi_\nu$  (à chaque fréquence) le profil de Voigt, non normalisé. Le profil est représenté par le tableau `phi_nu`
- la grille de profondeur optique  $(\tau_\nu)$  à une fréquence donnée se déduit en faisant le produit de  $\tau$  avec  $\phi_\nu$  (1.1.5)

- on considère une grille de directions  $\mu = \cos \theta$  (tableau mu).  $\mu$  doit être non nul
- on calcule le poids en fréquence (pour le calcul de  $\bar{J}$ ) : étant donné que le profil  $\phi_v$  n'est pas normalisé, on va calculer le poids  $W$  normalisé et proportionnel à  $\phi_v$ . Pour cela, on calcule d'abord le poids en fréquences  $M$  par la subroutine *trapez*, que l'on multiplie par  $\phi_v$  et que l'on normalise pour obtenir  $W$ .

**Subroutine trapez :** cette subroutine calcule les poids d'intégration.

**Subroutine coeff\_mat\_tridiagonale :**  $a, b, c$  sont respectivement les coefficients  $A_d, B_d, C_d$ ,  $1 \leq d \leq N_d = nxmod$  de la matrice tridiagonale  $T$  (1.1.19).

**Function VOIGT, Function W4 :** C'est la fonction de VOIGT décrite dans Humlicek (1982) et Hui (1978).

**Subroutine elimination\_gauss :** il s'agit d'implémenter les formules pour l'élimination de Gauss. Le vecteur EE de cette subroutine désigne le second membre (1.1.20) du système linéaire (1.1.18). Les quantités  $d$  et  $z$  représentent  $D_d$  et  $Z_d$  (1.1.21). Les variables  $a, b$  et  $c$  sont les coefficients de la matrice tridiagonale  $T$  (1.1.19).  $u$  est la solution de l'ETR (1.1.7) donnée par la formule (1.1.22).

**Subroutine calcul\_J\_nu :** il s'agit ici de calculer  $J_v$  (1.1.4) par la formule suivante (voir l'algorithme de la  $\Lambda$ -itération simple à la section 1.1.3) :

$$J_v(\tau, \nu) = \int_{-1}^1 I_{\mu\nu} d\mu = 2 \int_0^1 u d\mu = \sum_{i=1}^{N_\mu} u_i \cdot \alpha_i, \text{ où } (\alpha_i)_i \text{ sont les poids d'intégration. On prend } (\alpha_i)_i = 1/nmu.$$

**Subroutine calcul\_J\_bar :** on calcule  $\bar{J}$  par la formule (voir l'algorithme de la  $\Lambda$ -itération simple à la section 1.1.3) :

$$\bar{J}(\tau) = \int_0^\infty J_v \phi_v dv = \sum_{j=1}^{N_{freq}} J_v(j) \cdot W(j), \text{ où } W \text{ est le poids d'intégration en fréquence et doit être proportionnel à } \phi_v \text{ et normalisé. } W \text{ est calculé dans la subroutine grilles.}$$

### Module lambda\_it\_simple\_mod (fichier lambda\_it\_simple.f90)

Ce module contient la subroutine *methode\_lambda\_it\_simple* qui reprend l'algorithme de la  $\Lambda$ -itération simple expliqué à la section 1.1.3. Comme nous avons pris des conditions aux limites d'ordre 1, il a fallu faire les 2 initialisations suivantes :

- la fonction source  $S$  au premier point de la grille des  $\tau_v$  est égale à celle au deuxième point de la grille
- la fonction source  $S$  au dernier point de la grille des  $\tau_v$  est égale à celle au point précédent.

**Module ali\_mod (fichier ali.f90)**

Ce module regroupe les sousroutines nécessaires pour la résolution de l'ETR par la méthode ALI.

**Subroutine methode\_ali :** cette subroutine reprend l'algorithme ALI décrit dans la section 1.1.4 ainsi que l'accélération du schéma ALI décrite dans 1.1.5.

**Subroutine elements\_diag\_lambda\_etoile\_mu\_nu :** on calcule ici la matrice diagonale  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  donnée par les formules (1.1.29)-(1.1.31).

**Subroutine operateur\_lambda\_etoile :** on calcule l'opérateur  $\Lambda^*$  donné par la formule :

$$\Lambda^* = \sum_{\mu, \nu} \Lambda_{\mu\nu}^* \cdot \delta_{\mu\nu}, \text{ où } \delta_{\mu\nu} \text{ est le poids d'intégration en } \nu \text{ (qui doit être proportionnel à } \phi_\nu$$

et normalisé) et en  $\mu$ . On prend pour le poids d'intégration en  $\mu$  :  $1/n\mu$ . On prend comme poids d'intégration en fréquence  $W$  calculé dans la subroutine *grilles*.

**Subroutine calcul\_S\_ali :** on calcule la fonction source  $S$  de manière itérative, donnée par la formule (1.1.27). Comme pour le schéma de la  $\Lambda$ -itération simple, nous avons pris des conditions aux limites d'ordre 1, donc nous avons fait les mêmes initialisations, à savoir :

- la fonction source  $S$  au premier point de la grille des  $\tau_\nu$  est égale à celle au deuxième point de la grille
- la fonction source  $S$  au dernier point de la grille des  $\tau_\nu$  est égale à celle au point précédent.

**Subroutine calcul\_J\_bar\_ali :** on calcule  $\bar{J}$  ici par le même procédé que la subroutine *methode\_lambda\_it\_simple*.

**Subroutine acceleration\_ali :** on implémente l'algorithme de l'accélération du schéma ALI (section 1.1.5), en particulier les coefficients  $A_1, B_1, A_2, B_2, C_1, C_2$  donnés par (1.1.37). Les quantités  $a\_acc$  et  $b\_acc$  représentent les coefficients  $a$  et  $b$  des formules (1.1.36).

### 1.1.8 Exécution du programme

- make clean
- make
- ./lambda\_it

Les fichiers résultats (fort.112, fort.113, fort.92) sont lus par le logiciel **gnuplot** dont les commandes se trouvent dans les sousroutines *methode\_ali* et *methode\_lambda\_it\_simple*.

## 1.2 Filament solaire

On va résoudre l'équation de transfert radiatif (ETR) hors ETL par la méthode ALI accélérée pour un filament solaire, en 1D et en CRD (redistribution complète des fréquences) avec

profil de Voigt. Pour cela, on va considérer une couche réaliste et finie (couche horizontale, pas de symétrie ici) et un atome réaliste à 2 niveaux (l'atome d'hydrogène et la raie Lyman Alpha  $L\alpha$ ).

Ce qui change par rapport au cas d'une atmosphère semi-infinie : les coefficients  $a$  du profil de Voigt,  $\epsilon$  et  $B$  ne sont plus des constantes ici, il va falloir les calculer. De plus, il faudra introduire les équations de populations.

### 1.2.1 Modélisation d'un filament

Dans la modélisation (voir figure 1.7), le filament est représenté par une couche parallèle horizontale, de profondeur optique  $\tau$ , située au-dessus de la surface du soleil.

Dans le cas d'un filament, la probabilité de destruction collisionnelle  $\epsilon$  (ou coefficient d'extinction) est calculée à partir des taux de transition par collision électronique ( $C_{12}$ ,  $C_{21}$ ) et des coefficients d'Einstein ( $A_{21}$ ,  $B_{12}$ ,  $B_{21}$ ,  $A_{12} = 0$ ).

On utilise l'altitude du filament pour calculer les facteurs de dilution, qui serviront à calculer les intensités incidentes à partir des intensités solaires (input) et donc à calculer la CL (condition aux limites) inférieure  $I_{inf}$  (ici  $I_{sup} = 0$ ).

### 1.2.2 Atome à deux niveaux et équilibre statistique

La figure 1.8 représente les types de transitions considérées (transitions Bound-Free et Bound-Bound). Les Bound-Free sont les transitions qui vont d'un état (lié)  $i$  vers le continu et qui produisent un électron libre d'énergie  $\epsilon$ . Cela commence à la limite infinie des états excités ( $\epsilon = 0$ ). Les Bound-Bound sont les transitions qui vont d'un niveau  $i$  vers un niveau  $j$ .

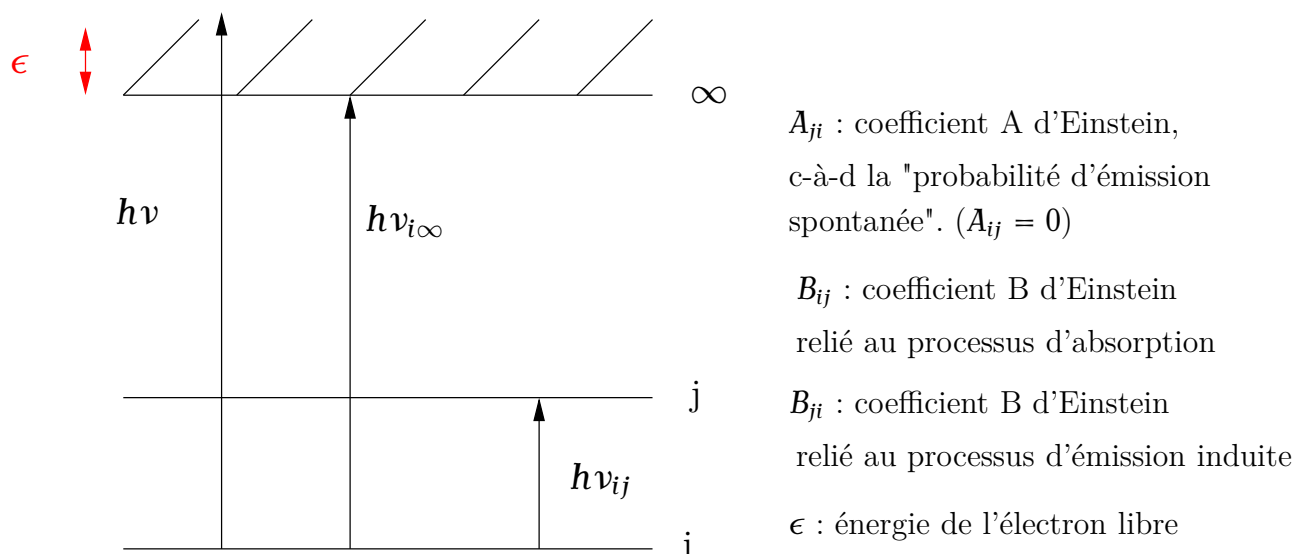


FIGURE 1.8 – Types de transitions considérées.

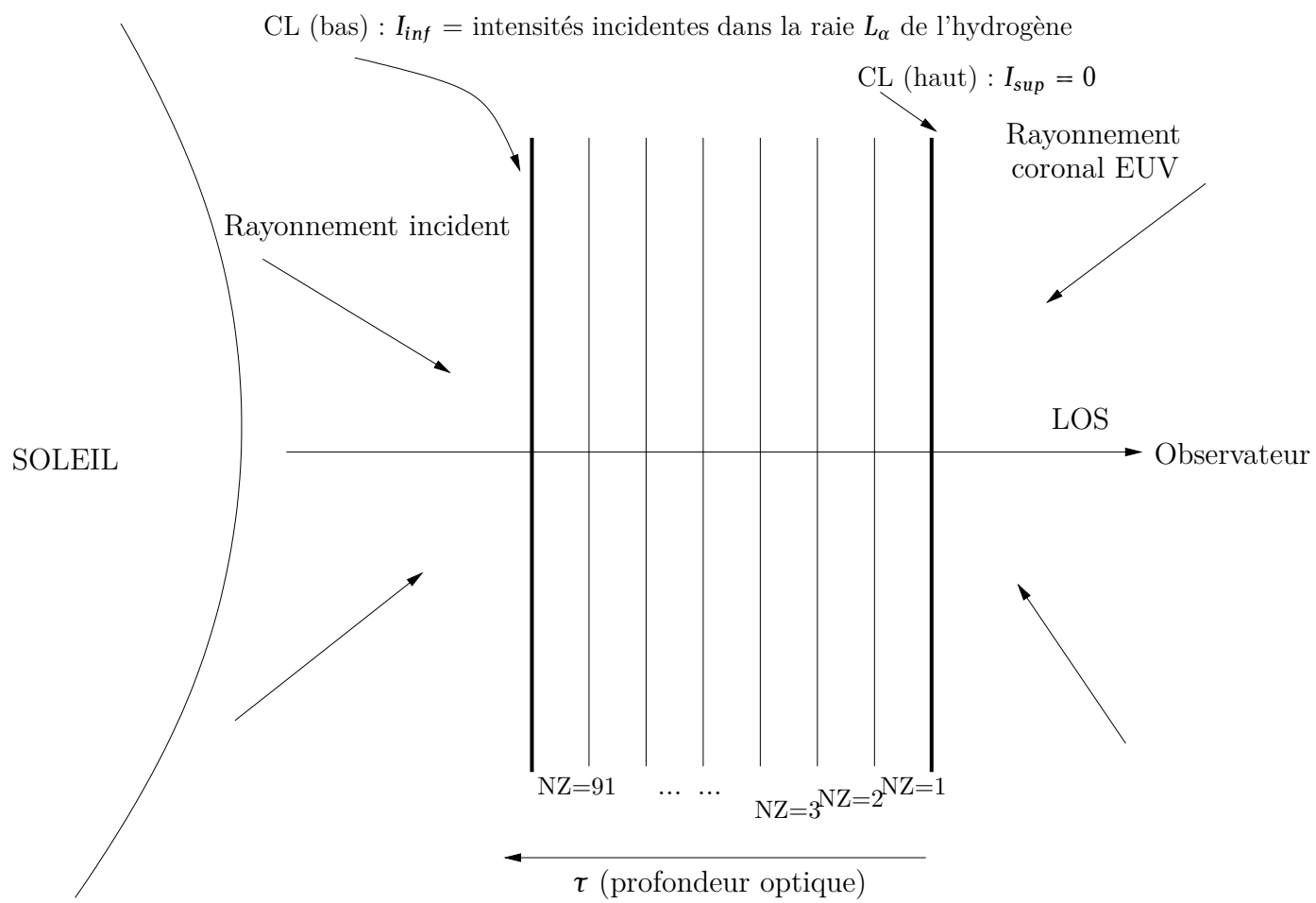


FIGURE 1.7 – Modélisation d'un filament solaire. La figure n'est pas à l'échelle.

Considérons le niveau  $j$ . On introduit les équations de populations (ou équations de l'équilibre statistique) pour ce niveau qui donnent l'équilibre entre les processus de peuplement et de dépeuplement du niveau  $j$  à partir des autres niveaux  $i$  :

$$\sum_{j \neq i}^n N_i P_{ij} = N_j \sum_{j \neq i}^n P_{ji} \quad (1.2.1)$$

$N_i$  (respectivement  $N_j$ ) est la (densité de) population du niveau  $i$  (respectivement du niveau  $j$ ).

Le taux de transition du niveau  $j$  (dépeuplement de  $j$ ) s'écrit :

$$P_{ji} = A_{ji} + B_{ji} \bar{J}_{ij} + C_{ji} \quad (1.2.2)$$

où  $C_{ji}$  est le taux de désexcitation par collisions et est proportionnel à la densité électronique.  $A_{ji}$  et  $B_{ji}$  sont les coefficients d'Einstein.

Le taux de transition du niveau  $i$  (peuplement de  $j$ ) s'écrit :

$$P_{ij} = B_{ij} \bar{J}_{ij} + C_{ij}$$

où  $C_{ij}$  est le taux d'excitation par collisions. Ici,  $A_{ij} = 0$ .

Le terme de droite dans les équations de population (1.2.1) représente tous les processus qui vont dépeupler le niveau  $j$  et le terme de gauche correspond à tous les niveaux qui vont peupler le niveau  $j$ . Pour fermer le système d'équations de population, il suffit d'utiliser l'équation de conservation de l'élément (c'est-à-dire l'atome considéré : l'hydrogène) :

$$\sum_{j=1}^n N_j = N_T \quad (1.2.3)$$

où  $N_T$  est la population totale de l'élément.

Dans le cas d'un atome à deux niveaux ( $n = 2$ ), les équations de populations se réduisent à :

$$\begin{aligned} N_1 P_{12} &= N_2 P_{21} \\ \iff N_1 (B_{12} \bar{J} + C_{12}) &= N_2 (A_{21} + B_{21} \bar{J} + C_{21}) \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

où

$$P_{12} = B_{12} \bar{J} + C_{12}$$

et

$$P_{21} = A_{21} + B_{21} \bar{J} + C_{21}$$

Ici  $\bar{J}_{12} = \bar{J}$  car on n'a qu'une seule raie ( $L\alpha$ ).

Dans la suite, nous allons établir les formules nécessaires pour l'implémentation du code filament ( $\epsilon$ ,  $B_{12}$ ,  $B_{21}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{21}$ , ...).



- Coefficient d'absorption intégré sur la fréquence (ou coefficient total d'absorption) :

$$\bar{\kappa} = \frac{h\nu_0}{4\pi} N_1 B_{12}, \quad (1.2.5)$$

$\nu_0$  étant la fréquence centrale de la raie  $L\alpha$ . Cette formule (1.2.5) n'est valable que lorsque le profil est normalisé, c-à-d  $\int \phi_\nu d\nu = 1$ ,  $\nu$  étant la fréquence.

- Emission spontanée :

$$\bar{e}_S = \frac{h\nu_0}{4\pi} N_2 A_{21} \quad (1.2.6)$$

- Emission induite :

$$\bar{e}_I = \frac{h\nu_0}{4\pi} N_2 B_{21} \bar{J} \quad (1.2.7)$$

- Relation entre les coefficients d'Einstein :

D'après [Jefferies \(1968\)](#), on a :

$$B_{21} = \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \quad (1.2.8)$$

La relation entre les coefficients d'Einstein est :

$$\begin{aligned} g_1 B_{12} &= g_2 B_{21} \\ \iff \frac{g_1}{g_2} B_{12} &= \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \\ \iff B_{12} &= \frac{g_2}{g_1} \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

D'après (1.2.5), le coefficient total d'absorption s'écrit :

$$\bar{\kappa} = \frac{h\nu_0}{4\pi} N_1 \frac{g_2}{g_1} \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \quad (1.2.10)$$

L'émission induite s'écrit aussi :

$$\bar{e}_I = \frac{h\nu_0}{4\pi} N_2 \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \bar{J} \quad (1.2.11)$$

- Fonction source globale : on traite l'émission induite comme une absorption négative.

Deux cas :

- Cas 1 : cas simple où  $\bar{e}_S \propto N_2$ ,  $\bar{\kappa} \propto N_1$  et  $\bar{e}_I \propto N_2$

$$S = \frac{\bar{e}_S}{\bar{\kappa} - \bar{e}_I/\bar{J}} \quad (1.2.12)$$

- Cas 2 : plus embêtant pour l'équilibre statistique

$$S = \frac{\bar{e}_S + \bar{e}_I}{\bar{\kappa}}$$

On considère le cas 1. D'après (1.2.6), (1.2.10) et (1.2.11), on a :

$$S = \frac{N_2}{\frac{c^2}{2h\nu_0^3} \left( N_1 \frac{g_2}{g_1} - N_2 \right)} = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{1}{\frac{N_1}{N_2} \frac{g_2}{g_1} - 1} \quad (1.2.13)$$

- Relation entre  $C_{12}$  (taux d'excitation par collisions) et  $C_{21}$  (taux de désexcitation par collisions) :

$$\begin{aligned} C_{12} &= \left( \frac{N_2}{N_1} \right)_{ETL} \times C_{21} \\ C_{12} &= \frac{g_2}{g_1} \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) C_{21}, \quad \text{d'après la loi de Saha,} \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

$T$  étant la température électronique.

On élimine  $B_{12}$ ,  $B_{21}$  et  $C_{12}$  dans l'équation de populations (1.2.4) :

$$\begin{aligned} (1.2.4) &\iff N_1 \left[ \frac{g_2}{g_1} \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \bar{J} + \frac{g_2}{g_1} \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) C_{21} \right] \\ &= N_2 \left[ A_{21} + \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \bar{J} + C_{21} \right] \\ &\iff \frac{N_1}{N_2} \frac{g_2}{g_1} - 1 = \frac{A_{21} + C_{21} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) \right]}{\frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \bar{J} + C_{21} \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right)} \end{aligned}$$

Donc la fonction source s'écrit :

$$(1.2.13) \iff S = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \times \frac{C_{21} \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) + \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \bar{J}}{C_{21} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) \right] + A_{21}} \quad (1.2.15)$$

On pose :

$$\epsilon_1 = \frac{C_{21}}{A_{21}} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) \right] \quad (1.2.16)$$

Alors

$$(1.2.16) \iff C_{21} \exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) = \frac{\epsilon_1 A_{21}}{\exp \left( -\frac{h\nu_0}{kT} \right) - 1} \quad (1.2.17)$$

Donc d'après (1.2.16) et (1.2.17), on a :

$$\begin{aligned}
 (1.2.15) \iff S &= \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \times \frac{\frac{\epsilon_1 A_{21}}{\exp\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right) - 1} + \frac{c^2}{2h\nu_0^3} A_{21} \bar{J}}{A_{21}\epsilon_1 + A_{21}} \\
 \iff S &= \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{\epsilon_1}{1 + \epsilon_1} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right) - 1} + \frac{\bar{J}}{1 + \epsilon_1}
 \end{aligned}$$

- Fonction de Planck  $B$  :

Dans l'expression précédente de la fonction source  $S$ , on pose :

$$B = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right) - 1} \quad (1.2.18)$$

La fonction source s'écrit donc :  $S = \frac{\epsilon_1 B + \bar{J}}{1 + \epsilon_1}$ .

- Probabilité de destruction collisionnelle  $\epsilon$  :

On pose :

$$\epsilon = \frac{\epsilon_1}{1 + \epsilon_1} \quad (1.2.19)$$

Donc on retrouve bien la formule (1.1.2) de la fonction source  $S = \epsilon B + (1 - \epsilon) \bar{J}$ , sous l'hypothèse que  $\int \phi_\nu d\nu = 1$ .

**Remarque 1.2.1** En pratique, on va calculer  $\epsilon$  et  $B$ . Puis on utilise le schéma ALI accéléré pour calculer  $S$ . Enfin, on calcule les populations des niveaux  $N_1$  et  $N_2$ .

- Calcul de  $N_2$  : on part de (1.2.13)

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{1}{\frac{N_1}{N_2} \frac{g_2}{g_1} - 1} \\
 \iff \frac{N_1}{N_2} &= \frac{g_1}{g_2} \left( 1 + \frac{2h\nu_0^3}{c^2 S} \right)
 \end{aligned}$$

On résout le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1}{g_2} \left( 1 + \frac{2h\nu_0^3}{c^2 S} \right) := t \\ N_1 = N_H - N_2 \end{array} \right. \quad (1.2.20)$$

Donc la première équation du système (1.2.20) donne :

$$N_2 = \frac{N_H}{1 + t} \quad (1.2.21)$$

## 1.2.3 Implémentation

### 1.2.3.1 Construction de l'atmosphère et conditions aux limites

1. Valeurs initiales :  $T = 8000 \text{ K}$  (température électronique), épaisseur=altitude=10000  $km$ ,  $\nu_0 = \frac{c}{1215 \times 10^{-8}} \text{ s}^{-1}$  ou  $Hz$  (fréquence centrale de la raie  $L\alpha$  de l'hydrogène).
2. Grille de positions en  $cm$  : on découpe le filament en plusieurs mailles (ou sous-couches),  $NZ = 91$ . Soit  $Z$  l'altitude ou la position de la maille en  $cm$ .
3. Afin de simplifier les choses et de se focaliser sur la méthode numérique, on va faire tourner le code **PROM7** pour le modèle d'atmosphère suivant (filament) :

$$T = 8000 \text{ K}, p = 0.1 \text{ dyn.cm}^{-2}, V_T = 5 \text{ km/s}, \text{ épaisseur=altitude} = 10000 \text{ km},$$

afin d'obtenir la densité des électrons ( $N_e$ ) et la densité de l'hydrogène ( $N_H$ ) qui seront utilisées pour le calcul de  $\epsilon$ ,  $B$ ,  $\bar{\kappa}$ , ...

4.  $N_H = N_1 + N_2$ ,  $N_2 \ll N_1$ 
  - $N_1$  sert au calcul du coefficient d'absorption  $\bar{\kappa}$  (1.2.10). Pour simplifier, on suppose que  $N_1 = N_H$  mais en réalité,  $N_e$  et  $N_1$  se calculent à partir de la pression.
  - $N_2$  sert au calcul du coefficient  $a$  de la fonction de VOIGT.
5. Poids statistiques des niveaux 1 et 2 de l'hydrogène :  $g_1 = 2$ ,  $g_2 = 8$ .
6. Calcul de  $A_{21}$  par la formule analytique de Johnson (1972) implémentée dans le code de la manière suivante :  $A_{21} = AEMS(1, 2)$ , où  $AEMS$  est une fonction.
7. Calcul de  $B_{21}$  et  $B_{12}$  à partir de  $A_{21}$  grâce aux formules (1.2.8) et (1.2.9).
8. Calcul de  $C_{12}$  et  $C_{21}$  :  $C_{12}$  se calcule à partir de  $N_e$  et de la formule de Johnson (1972), représentée dans le code par la fonction  $CECH$ . Son expression est donnée par :

$$C_{12} = N_e \text{ CECH}(1, 2, T) \exp\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right)$$

$C_{21}$  se déduit de  $C_{12}$  par la formule (1.2.14).

9. Calcul de  $\bar{\kappa}$  à l'aide de la formule (1.2.10), avec  $N_1 = N_H$ .
10. Largeur Doppler :  $\Delta\nu_D = \frac{v_0}{c} \sqrt{V_T^2 + \frac{2kT}{m_H}}$ , avec  $m_H$  masse de l'hydrogène.
11. Calcul du coefficient d'extinction  $\epsilon$  grâce aux formules (1.2.16) et (1.2.19).
12. Grille de profondeurs optiques  $\tau$  : se calcule à partir de la grille de positions  $Z$  et de  $\bar{\kappa}$ .  $\tau$  est donné par la formule suivante :

$$\tau = \int_0^Z \bar{\kappa}(z') dz' \iff \tau(Z) = \tau(Z-1) + \bar{\kappa}(Z) [Z(i) - Z(i-1)],$$

où  $i$  est l'indice dans la grille  $Z$  de positions.

13. Grille de fréquences réduites :  $x = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D} = \frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_D}$ ,  
où  $\Delta\nu = \nu - \nu_0$  est la fréquence relative, et  $\nu = \nu_0 + x \Delta\nu_D$  est la fréquence absolue.  
Soit  $xfr$  cette grille de fréquences réduites, de dimension  $nfr$ .

14. Profil de VOIGT : on utilise les fréquences réduites définies par le tableau  $xfr$ . Le profil de VOIGT  $\phi_\nu$  est représentée dans le code par la fonction VOIGT (Humlicek, 1982; Hui, 1978) :

$$\phi_\nu = VOIGT(a, xfr),$$

où  $a$  est le coefficient de VOIGT, défini juste après.  $\phi_\nu$  est le profil non normalisé dont :

- l'intégrale par rapport aux fréquences réduites vaut  $\sqrt{\pi}$ ,
- l'intégrale par rapport aux fréquences relatives vaut  $\sqrt{\pi} \Delta\nu_D$ .

15. Calcul du coefficient  $a$  de VOIGT :

$$a = DFRCO + DFRNA,$$

où  $DFRCO$  est l'élargissement collisionnel, obtenu par la sous-routine *ELCOH1* de **PROM7** mais adapté à la raie  $L\alpha$ .  $DFRNA$  est l'élargissement naturel, défini pour la raie  $L\alpha$  par  $\frac{A_{21}}{4\pi}$ .

16. Profil non normalisé par rapport aux fréquences réduites :

$$\phi_x = VOIGT(a, xfr)$$

17. Profil normalisé par rapport à la fréquence relative ( $\Delta\nu = \nu - \nu_0$ ) :

$\phi_{\nu\_normalisé} = \frac{\phi_x}{aire \times \Delta\nu_D}$ , avec  $aire = \int \phi_x dx = \sqrt{\pi}$ ,  $x$  étant la fréquence réduite

18. Profondeur optique à une fréquence  $\nu$  donnée :  $\tau_\nu$  est définie par

$$\tau_\nu = \int_0^\tau \phi_{\nu\_normalisé}(\tau') d\tau'$$

$$\iff \tau_\nu(z) = \tau_\nu(z-1) + \frac{1}{2} [\phi_{\nu\_normalisé}(z-1) + \phi_{\nu\_normalisé}(z)] \times [\tau(z) - \tau(z-1)]$$

19. Poids d'intégration  $W$  en fréquences relatives :

- la subroutine *TRAPEZ* du code calcule les poids d'intégration  $M$  appliqués à  $xfr$  (fréquence réduite).
- on multiplie  $M$  par le profil normalisé  $\phi_{\nu\_normalisé}$  et on fait la *somme*.
- $W = \frac{M \cdot \phi_{\nu\_normalisé}}{somme}$  : poids normalisé et proportionnel au profil normalisé.

**Remarque 1.2.2** *Ce poids d'intégration  $W$  sera utilisé dans le calcul de*  
 $\bar{J} = \int J_\nu d\nu.$

**Remarque 1.2.3** ★ *La fréquence réduite  $x$  n'est utilisée que lorsqu'on appelle la fonction VOIGT.*

★ *Le reste du temps, on travaille en fréquence relative :  $\Delta\nu = \nu - \nu_0 = x\Delta\nu_D$ .*

★ *On travaille avec le profil normalisé par rapport à la fréquence relative :  $\phi_{\nu\_normalisé}$ .*

20. Calcul du facteur de dilution *FADIR* pour la raie  $L\alpha$  de l'hydrogène :

*FADIR* est obtenu par la subroutine *INTALT* de **PROM7** adaptée à  $L\alpha$ . Il n'y a pas de "Limb-darkening" dans la raie  $L\alpha$ .

21. Calcul de la fonction de Planck  $B$  par la formule (1.2.18).

22. Calcul de la CL (condition aux limites) inférieure  $I_{inf}$  par la subroutine *SOLINH* de **PROM7** adaptée à la raie  $L\alpha$ .

★ On lit le fichier (input) des intensités incidentes solaires "intinc.dat" de  $L\alpha$  (*NFINT* = 20 valeurs) :

fréquence en Å (1ère colonne), intensité en  $erg/cm^2/s/sr/\text{\AA}$  (2nde colonne).

★ On multiplie les fréquences lues par le coefficient  $\frac{10^{-8} \nu_0^2}{c}$  pour les avoir en *Hz*.

★ On multiplie les intensités solaires par  $10^{-8}$  pour les avoir en  $erg/cm^2/s/sr/Hz$ .

★ Ces intensités solaires sont ensuite interpolées aux fréquences relatives ( $xfr \Delta\nu_D$ ).

★ On les multiplie enfin par  $2 \times FADIR$  pour obtenir  $I_{inf}$ .

**Remarque 1.2.4**  $C_{12}$ ,  $C_{21}$ ,  $B_{12}$ ,  $B_{21}$ ,  $A_{21}$  ne changent pas au cours du processus de transfert radiatif. Ils sont fixés par le modèle d'atmosphère. La fonction de Planck  $B$  est associée à la raie  $L\alpha$ , est calculée une fois pour toute au début.

### 1.2.3.2 Méthode de résolution hors ETL de l'ETR en utilisant le schéma ALI accéléré

L'algorithme par la méthode ALI accélérée pour la résolution de l'ETR (1.1.1) ou (1.1.7) est :

1. On calcule la fonction source  $S$  par la méthode ALI accélérée décrite dans les sections 1.1.4 et 1.1.5, à partir de  $\tau$ ,  $B$  et  $\epsilon$ .
2. Une fois que  $S$  a convergé, on calcule les populations des niveaux  $N_1$  et  $N_2$ .

**Remarque 1.2.5** On peut calculer  $N_1$  et  $N_2$  à chaque itération de convergence comme pour  $S$  afin de préparer le code au cas d'un atome multi-niveaux (MALI). Pour le schéma MALI, on ne calcule plus  $S$  mais on va itérer sur les populations des niveaux. On va faire tout converger en même temps.

Les figures 1.9 et 1.10 représentent la fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, pour un profil Doppler, respectivement sans accélération (convergence au bout de 100 itérations) et avec accélération Ng (convergence au bout de 50 itérations).

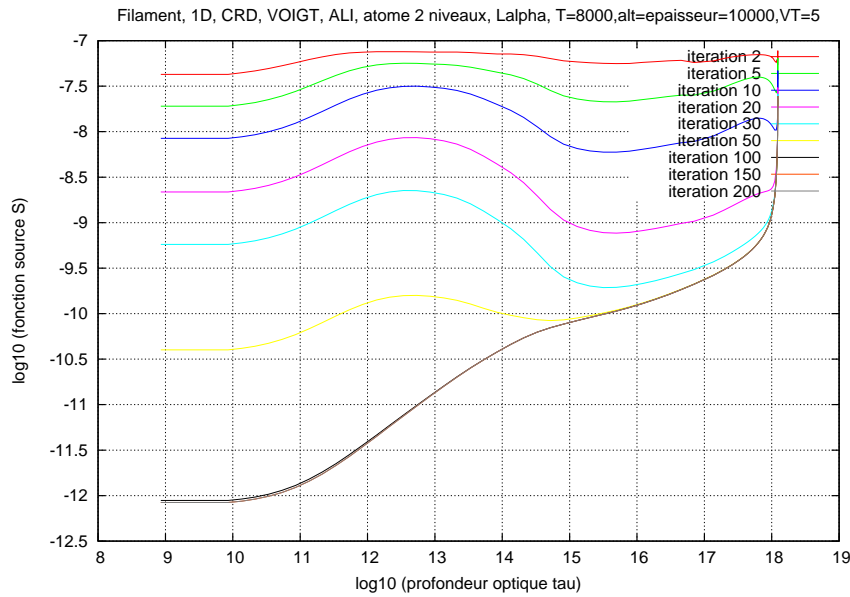


FIGURE 1.9 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI pour un profil Doppler (cas d'un filament). La convergence est atteinte au bout de 100 itérations.

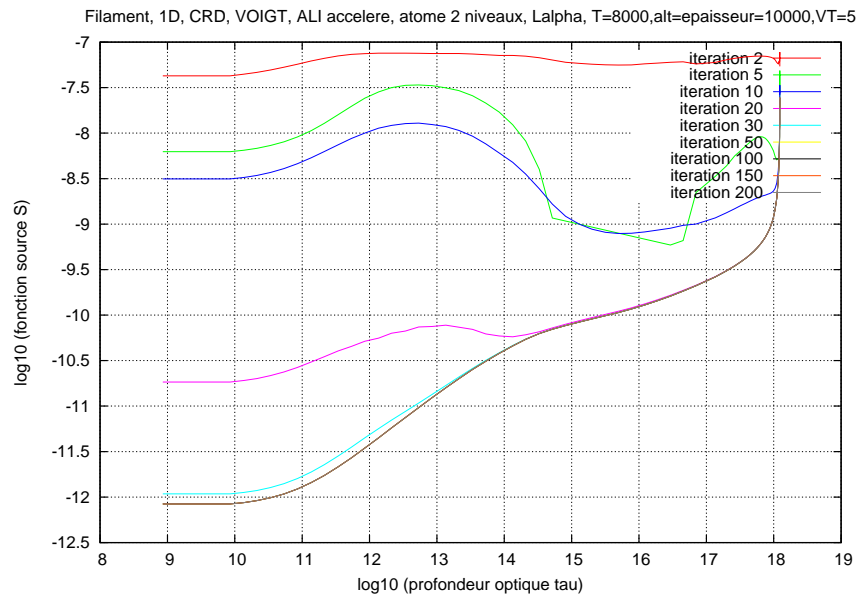


FIGURE 1.10 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI accélérée pour un profil Doppler (cas d'un filament). La convergence est atteinte au bout de 50 itérations.

## 1.2.4 Descriptif du programme

*Nature du problème physique* : transfert radiatif (1D) hors ETL dans un filament pour l'atome d'hydrogène à 2 niveaux (un fondamental et la raie  $L\alpha$ ), sans champ de vitesse interne

*Méthode de résolution* : méthode de Feautrier améliorée (Rybicki and Hummer, 1991) combinée à

- la méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration)
- l'accélération du schéma ALI par la méthode Ng

*Autre information* : on utilise la redistribution complète des fréquences (CRD). Les densités d'électron et d'hydrogène sont obtenues à partir du code **PROM7**

*Auteurs* : M. Chane-Yook & P. Gouttebroze

*Programmes disponibles à partir de* :

<https://idoc.osups.universite-paris-saclay.fr/medoc/tools/radiative-transfer-codes/tools-for-radiative-transf>

*Machines sur lesquelles le programme a été testé* : PC avec 4 processeurs Intel de 2.67GHz chacun

*Operating System pour lequel le programme a été testé* : Linux

*Langage de programmation* : Fortran 90/95 (avec le compilateur **gfortran**)



*Etat* : Stable

*Accessibilité* : Groupe solaire et extérieur (MEDOC)

*Nombre de lignes* : 1005

*Temps de calcul* : < 1 min pour 50 itérations du cycle ALI accéléré

*Références* :

- G. B. Rybicki & D. G. Hummer, "An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I- Non-overlapping lines with background continuum", A&A, 245, 171-181, 1991
- F. Paletou, "Transfert de rayonnement : méthodes itératives", C. R. Acad. Sci. Paris, t.2, Série IV, 885-898, 2001

Dans le paragraphe suivant, on va décrire les sousroutines utilisées dans le programme.

## 1.2.5 Explication des sousroutines

La structure du programme est la même que celle pour une atmosphère semi-infinie mais avec des ajouts de sousroutines.

Contrairement à une atmosphère semi-infinie, dans le cas d'un filament, les paramètres constants deviennent des tableaux.

### 1.2.5.1 Description des variables utilisées

Nous allons décrire en détail les variables utilisées principalement dans le module **param\_mod** (fichier param.f90) :

- $RS=6.96 \times 10^{10}$  : rayon solaire en cm
- $h=6.6262 \times 10^{-27}$  : constante de Planck en  $\text{cm}^2 \text{ g/s}$
- $ryd=2.17875 \times 10^{-11}$  : constante de Rydberg en erg
- $bolt=1.38064852 \times 10^{-6}$  : constante de Boltzmann en  $\text{cm}^2 \text{ g/s}^2/\text{K}$
- $cl=2.997925 \times 10^{10}$  : vitesse de la lumière en cm/s
- $m\_H=uma=1.660 \times 10^{-24}$  : unité de masse atomique de l'hydrogène
- $nfr=20$  : dimension de la grille des fréquences réduites XFR
- $n\_grille=46$  : dimension du tableau grille (voir plus loin)

- $NZ=nxmod=91$  : dimension du tableau  $xmod$  (voir plus loin).  $NZ=2 \times n\_grille-1$
- $nmu=4$  : dimension de la grille des directions  $\mu = \cos \theta$
- $coeff\_extinction$  : tableau de dimension  $NZ$  correspondant à  $\epsilon$
- $niter=200$  : nombre d'itérations pour la convergence du schéma ALI accéléré
- $T\_in=8000$  : température en  $K$  (modèle)
- $EPST\_in=10000$  : épaisseur en  $km$  du filament (modèle)
- $VT\_in=5 \times 10^5$  : vitesse de microturbulence en  $cm/s$  (modèle)
- $altitude\_in=10000$  : altitude du filament en  $km$  (modèle)
- $NFINT=20$  : dimension du tableau  $FRFI$  et  $FINT$  pour la lecture des intensités incidentes solaires (input)
- $I\_sup=0$  : condition aux limites supérieure
- $a\_voigt$  : tableau de dimension  $NZ$  correspondant au paramètre  $\alpha$  de la fonction de Voigt. Lorsque  $\alpha = 10^{-3}$ , on retrouve la fonction Doppler
- $grille$  : tableau de dimension  $n\_grille$  servant à calculer la grille de position
- $position, VT$  : tableaux de dimension  $NZ$  représentant respectivement la grille de position et la vitesse de microturbulence
- $xmod$  : tableau de dimension  $nxmod$  représentant la profondeur optique générique  $\tau = (\tau_d)$
- $xfr$  : tableau de dimension  $nfr$  représentant la fréquence réduite  $x_i$
- $mu$  : tableau de dimension  $nmu$  représentant les valeurs de  $\mu = \cos \theta$  (direction)
- $I\_inf$  : tableau de dimension  $nfr$  représentant les intensités incidentes interpolées aux fréquences réduites
- $J\_bar\_ali$  : tableau de dimension  $nxmod$  représentant  $\bar{J}$
- $J\_nu\_ali$  : tableau de dimension  $(nfr, nxmod)$  représentant  $J_\nu$
- $S\_ali$  : tableau de dimension  $(nxmod, niter)$  représentant la fonction source  $S$

- $N\_1, N\_2$  : tableaux de dimension  $(nxmod, niter)$  représentant respectivement les populations des niveaux 1 (fondamental) et 2 (raie  $L\alpha$ )
- $u\_ali$  : tableau de dimension  $(nxmod, nfr, nmu)$  représentant la solution de l'ETR pour la méthode ALI
- $lambda\_etoile$  : tableau de dimension  $nxmod$  représentant la matrice  $\Lambda^*$
- $lambda\_etoile\_mu\_nu$  : tableau de dimension  $(nxmod, nfr, nmu)$  représentant la matrice  $\Lambda_{\mu\nu}^*$
- $tau\_nu$  : tableau de dimension  $(nxmod, nfr)$  représentant la profondeur optique à la fréquence  $\nu$  :  $\tau_\nu = \phi_\nu \tau$
- $phi\_nu$  : tableau de dimension  $(nfr, NZ)$  correspondant au profil de la raie (profil de Voigt)  $\phi_\nu$  (profil non normalisé)
- $phi\_nu\_normalise$  : tableau de dimension  $(nfr, NZ)$  correspondant au profil normalisé par rapport aux fréquences relatives
- $M$  : tableau de dimension  $nfr$  représentant le poids d'intégration intermédiaire en fréquence
- $W$  : tableau de dimension  $nfr$  représentant le poids d'intégration en fréquence, normalisé et proportionnel au profil  $phi\_nu\_normalise$
- $Ne, NH$  : tableaux de dimension  $nxmod$  représentant respectivement la densité des électrons et celle de l'hydrogène
- $A21, B12, B21$  : coefficients d'Einstein
- $C12, C21$  : tableaux de dimension  $nxmod$  représentant respectivement le taux d'excitation par collisions et le taux de désexcitation par collisions
- $lambda\_0 = 1215$  : longueur d'onde centrale de la raie  $L\alpha$  en  $\text{\AA}$
- $gg1=1, gg2=8$  : représentent respectivement les poids statistiques des niveaux 1 et 2 de l'hydrogène
- $kappa\_bar$  : tableau de dimension  $NZ$  représentant le coefficient total d'absorption  $\bar{\kappa}$
- $T$  : tableau de dimension  $NZ$  représentant la température en K
- $delta\_nu\_D$  : tableau de dimension  $NZ$  représentant la largeur Doppler

- DFRNA : désigne l'élargissement naturel de la raie  $L\alpha$
- DFRCO : tableau de dimension NZ représentant l'élargissement collisionnel de la raie  $L\alpha$
- $\text{nu\_0} = c/(\lambda_0 \times 10^{-8})$  : fréquence centrale de la raie  $L\alpha$  en  $s^{-1}$  ou Hz
- $\text{coeff\_Lalpha} = 10^{-8}$  : coefficient multiplicatif dans le fichier input des intensités incidentes solaires pour la raie  $L\alpha$
- FADIR : facteur de dilution pour la raie  $L\alpha$
- FRFI, FINT : tableaux de dimension NFINT représentant respectivement les fréquences (1ère colonne) et les intensités incidentes (2nde colonne) du fichier input "intensity\_incidente\_L\_alpha"
- $\text{EXPHN} = 2.65$ ,  $\text{EXPS} = 2/3$ ,  $\text{PIA02} = \pi/2$ ,  $\text{XMEL} = 9.10956 \times 10^{-28}$ ,  $\text{CSE} = 8 \times \text{bolt}/\pi/\text{XMEL}$  : constantes

### 1.2.5.2 Description des sousroutines par module

#### Module **general\_mod** (fichier **general.f90**)

Le module **general\_mod** regroupe les sousroutines utiles pour la méthode ALI. Voici les modifications et/ou ajout de sousroutines, les autres sousroutines restent inchangées par rapport à celles pour l'atmosphère semi-infinie.

**Subroutine grilles :** cette sousroutine met en place les différentes grilles pour la modélisation d'un filament. Plus particulièrement,

1. on lit les densités électronique ( $N_e$ ) et de l'hydrogène ( $N_H$ ) obtenues par le programme **PROM7**
2. on entre les paramètres du modèle (température, vitesse de microturbulence)
3. on considère une grille générale de taille  $n_{\text{grille}} = 46$  qui servira de base pour calculer la grille de position
4. on considère une grille de position calculée à partir de la grille précédente et de l'épaisseur du filament
5. on calcule les paramètres atomiques :  $A_{21}$ ,  $B_{21}$ ,  $B_{12}$ ,  $C_{21}$ ,  $C_{12}$
6. on calcule  $\epsilon$
7. on calcule la largeur Doppler  $\Delta\nu_D$  et le coefficient total d'absorption  $\bar{\kappa}$
8. on considère une grille de profondeur optique générique  $\tau$  en cm représentée par le tableau  $x_{\text{mod}}$  de taille  $n_{\text{xmod}}$

9. on considère une grille de fréquences réduites ( $x_i$ ,  $i=1,\dots,nfr$ ) représentée par le tableau xfr de taille nfr
10. on calcule l'élargissement naturel DFRNA de la raie  $L\alpha$ , puis l'élargissement collisionnel DFRCO, qui serviront au calcul du coefficient  $a$  ( $a\_voigt$  dans le code) de VOIGT
11. on prend comme profil de raie  $\phi_\nu$  (à chaque fréquence) le profil de Voigt, non normalisé, par rapport aux fréquences réduites. Le profil est représenté par le tableau phi\_nu
12. on calcule  $\int \phi_\nu d\nu$  (aire par la méthode des trapèzes) afin de calculer le profil de raie normalisé par rapport à la fréquence relative (tableau phi\_nu\_normalise dans le code)
13. on considère la grille de profondeur optique à une fréquence  $\nu$  donnée :  $\tau_\nu$
14. on considère une grille de directions  $\mu = \cos \theta$  (tableau mu). Il faut que  $\mu$  soit différent de 0
15. calcul du poids en fréquences relatives  $M$  à l'aide de la subroutine TRAPEZ (pour le calcul de  $\bar{J}$ ) : étant donné que le profil  $\phi_\nu$  n'est pas normalisé, on va calculer le poids  $W$  normalisé et proportionnel à phi\_nu\_normalise.
16. on calcule le facteur de dilution FADIR
17. on calcule la condition aux limites inférieure  $I\_inf$  à partir des intensités incidentes (subroutine SOLINH)

**Subroutine elimination\_gauss** : il s'agit d'implémenter les formules pour l'élimination de Gauss. Dans cette subroutine, il faut faire attention à l'initialisation du second membre du système linéaire (1.1.18) : la première composante est initialisée à  $I_{sup} = 0$ , la dernière composante est initialisée à  $I_{inf}$  (intensité incidente calculée par la subroutine SOLINH) à une fréquence donnée, et les autres composantes sont initialisées par la fonction source.

**Subroutine INTERL** : il s'agit d'une subroutine d'interpolation linéaire.

**Subroutine calcul\_coefficient\_extinction** : il s'agit de calculer  $\epsilon$  par la formule (1.2.19).

**Subroutine integration\_trapezes** : cette subroutine sert à calculer l'aire par la méthode des trapèzes.

**Subroutine SOLINH** : cette subroutine lit le fichier (input) des intensités incidentes "intensite\_incidente\_L\_alpha". Les 2 colonnes (il y a NFINT=20 valeurs pour la fréquence et pour l'intensité) sont multipliées par des facteurs afin d'avoir des Hz et des erg/cm<sup>2</sup>/s/sr/Hz comme unités pour la fréquence et l'intensité. Puis on fait une interpolation par rapport à la fréquence relative  $\Delta\nu = x \Delta\nu_D$  pour les intensités ( $I\_inf$ ), qui seront multipliées par 2 fois le facteur de dilution.

**Function BENU** : il s'agit de la fonction de Planck donnée par la formule (1.2.18).

**Subroutine INTALT** : cette subroutine calcule le facteur de dilution pour la raie  $L\alpha$ .

**Function EXPINT :** cette fonction est utilisée dans le calcul des taux d'excitation collisionnelle.

**Subroutine ELCOH1 :** cette subroutine calcule l'élargissement collisionnel DFRCO pour la raie  $L\alpha$  de l'hydrogène.

**Function AEMS :**  $AJI$  est obtenue par la fonction AEMS (dans **PROM7**) qui est calculée à partir des "facteurs de Gaunt" (Table 1 de **Johnson (1972)**).

**Function CECH :** il s'agit de calculer les taux d'excitation collisionnelle (coefficients) appelés  $S_e$  dans les formules ci-dessous.

Soient  $n$  et  $n'$  deux niveaux ( $n < n'$ ). Le taux d'excitation (coefficient) est donné par la formule suivante (**Johnson (1972)**) :

$$S_e(n, n') = (8kT/\pi m)^{1/2} \frac{2n^2}{x} \pi a_0^2 y^2 \left( A_{nn'} \left[ \left( \frac{1}{y} + \frac{1}{2} \right) E_1(y) - \left( \frac{1}{z} + \frac{1}{2} \right) E_1(z) \right] \right) \\ + (8kT/\pi m)^{1/2} \frac{2n^2}{x} \pi a_0^2 y^2 \left( \left[ B_{nn'} - A_{nn'} \ln \frac{2n^2}{x} \right] \left[ \frac{1}{y} E_2(y) - \frac{1}{z} E_2(z) \right] \right) \quad (1.2.22)$$

$E_i(z) = \int_1^\infty e^{-zt} t^{-i} dt$  s'appelle dans la littérature l'Intégrale Exponentielle d'ordre  $i$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ).

$m$  est la masse de l'électron,  $a_0 = 0.5292 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$  est le rayon de Bohr.

Dans ce qui suit,  $E_n$  est l'énergie du niveau  $n$  de l'hydrogène et on a :

$$y = (E_{n'} - E_n)/kT,$$

$$z = r_{nn'} + y,$$

$$x = 1 - (n/n')^2,$$

$$B_{nn'} = \frac{4n^4}{n'^3} x^{-2} \left( 1 + \frac{4}{3}x^{-1} + b_n x^{-2} \right),$$

$$b_n = n^{-1}(4 - 18.63n^{-1} + 36.24n^{-2} - 28.09n^{-3}), \quad n \geq 2,$$

$$A_{nn'} = 2n^2 x^{-1} f_{nn'},$$

$$f_{nn'} = \frac{32}{3\sqrt{3}} \frac{n}{\pi n'^3} x^{-3} g(n, x),$$

$$g(n, x) = g_0(n) + g_1(n) x^{-1} + g_2(n) x^{-2},$$

$$r_{nn'} = r_n x,$$

$$r_n = 1.94n^{-1.57}$$

avec  $g_0, g_1, g_2$  : facteurs de Gaunt pour les transitions Bound-Free et sont donnés par la Table 1.1 (Table 1 de **Johnson (1972)**) :

	$n = 1$	$n = 2$	$n \geq 3$
$g_0(n)$	1.11330	1.0785	$0.9935 + 0.2328n^{-1} - 0.1296n^{-2}$
$g_1(n)$	-0.4059	-0.2319	$-n^{-1}(0.6282 - 0.5598n^{-1} + 0.5299n^{-2})$
$g_2(n)$	0.07014	0.02947	$n^{-2}(0.3887 - 1.181n^{-1} + 1.470n^{-2})$

TABLE 1.1 – Facteurs de Gaunt.

**Module ali\_mod (fichier ali.f90)**

Ce module regroupe les sousroutines nécessaires pour la résolution de l'ETR par la méthode ALI accélérée.

**Subroutine methode\_ali :** le schéma ALI accéléré reste inchangé par rapport au cas d'une atmosphère semi-infinie sauf :

- au début, on initialise la fonction source à la fonction de Planck définie par la fonction BENU
- dans la boucle sur les itérations de convergence, on calcule les populations des niveaux (subroutine calcul\_population) après le calcul de la fonction source.

**Subroutine calcul\_S\_ali :** dans le cas du filament, le coefficient d'extinction  $\epsilon$  n'est plus un paramètre fixe mais c'est un vecteur. De même pour la fonction de Planck.

**Subroutine calcul\_population :** cette subroutine a été rajoutée pour calculer les populations des niveaux 1 ( $N_1$ ) et 2 ( $N_2$ ) grâce aux formules (1.2.20) et (1.2.21).

**1.2.6 Exécution du programme**

- make clean
- make
- ./lambda\_it

Les fichiers résultats (fort.110, fort.101, fort.102, fort.113, fort.120) sont lus par le logiciel **gnuplot** dont les commandes se trouvent dans la subroutine *methode\_ali*.

**1.3 Protubérance solaire**

On va résoudre l'équation de transfert radiatif (ETR) hors ETL par la méthode ALI accélérée pour une protubérance solaire, en 1D et en CRD (redistribution complète des fréquences) avec profil de Voigt. Pour cela, on va considérer une couche réaliste et finie, verticale. Plus précisément une demi-couche car c'est symétrique (rayonnement). On considère de plus, un atome réaliste à 2 niveaux (l'atome d'hydrogène et la raie  $L\alpha$ ).

Les seules différences avec le cas du filament sont :

- demi-couche au lieu d'une couche entière
- les conditions aux limites à réécrire (matrice tridiagonale).



FIGURE 1.11 – Protubérance solaire éruptive observée par SDO/AIA, à 304Å et 171Å, le 30/08/2012.

### 1.3.1 Modélisation d'une protubérance

La figure 1.11 représente l'image d'une protubérance en éruption prise le 30/08/2012 par SDO/AIA aux longueurs d'onde 304Å et 171Å.

Dans la modélisation (voir figure 1.12), la protubérance est représentée par une couche plan-parallèle verticale, d'épaisseur  $e$ , située au-dessus de la surface du soleil à la hauteur  $h$ . Il s'agit ici d'une représentation 1D. Chaque face de ce modèle symétrique est illuminée par le rayonnement incident provenant de la photosphère, de la chromosphère et de la couronne solaire. Ce champ de rayonnement est très important puisqu'il détermine les conditions aux limites pour la résolution de l'ETR (1.1.1) ou (1.1.7). A l'intérieur de la protubérance, on définit comme condition initiale 3 paramètres physiques constants : la température électronique  $T$ , la pression  $P$  et la vitesse de microturbulence  $V_T$ . En raison de la symétrie du problème, les calculs sont effectués sur une demi-couche seulement.

Les formules concernant l'atome à deux niveaux et l'équilibre statistique sont les mêmes que pour un filament. L'implémentation et la mise en place de l'atmosphère ont la même structure que pour le filament. Il n'y a que les conditions aux limites qui diffèrent avec celles du filament.

### 1.3.2 Méthode ALI accélérée et conditions aux limites

#### 1.3.2.1 Conditions aux limites

Dans le cas d'une protubérance, au lieu de  $I_{inf}$ , nous avons deux conditions aux limites :



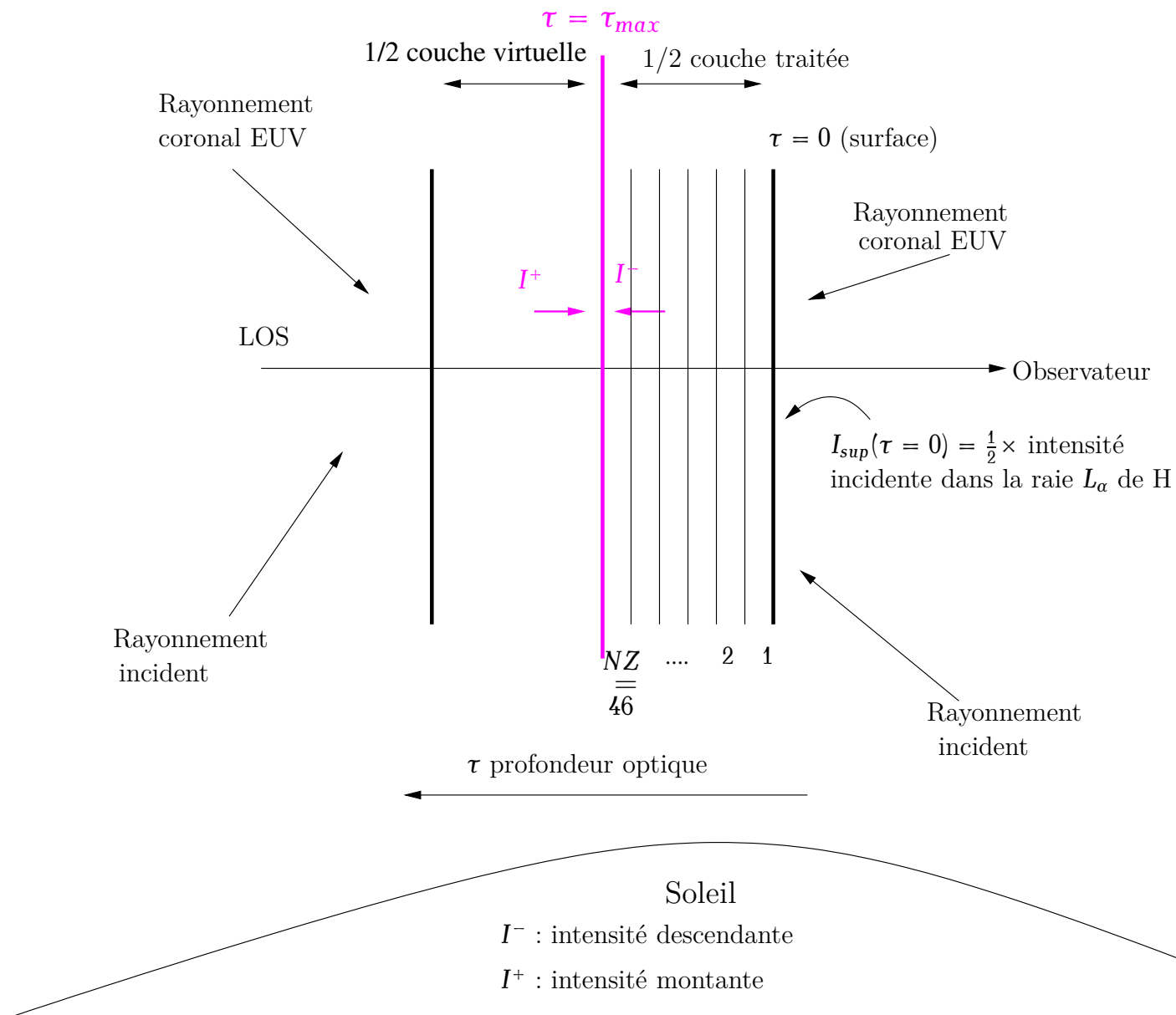


FIGURE 1.12 – Modélisation d'une protubérance solaire. La figure n'est pas à l'échelle.

1. à la surface de la protubérance : il s'agit de la même condition aux limites ( $I_{\text{inf}}$ ) pour le cas du filament mais divisé par 2 car on ne s'intéresse qu'à une demi-couche ici. On a donc  $I_{\text{sup}}(\tau = 0) = \frac{1}{2} \times \text{intensité incidente dans la raie } L\alpha \text{ de l'hydrogène}$ . En d'autres termes,  $I_{\text{sup}}(\text{protubérance}) = \frac{1}{2} I_{\text{inf}}(\text{filament})$
2. au centre de la protubérance : on repart des équations discrétisées de la section 1.1.2. On a :

$$I^+(\tau_{\text{max}}) = I^-(\tau_{\text{max}}), \quad (1.3.1)$$

avec  $I^-(\tau_{\text{max}}) = I(\tau_{\text{max}}, -\mu, \nu)$  et  $I^+(\tau_{\text{max}}) = I(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu)$ .

Or  $u = \frac{1}{2}(I_{\mu\nu} + I_{-\mu\nu})$  et  $v = \frac{1}{2}(I_{\mu\nu} - I_{-\mu\nu})$  d'après (1.1.8) et (1.1.9).

Alors :

$$\begin{aligned} u(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu) &= \frac{1}{2} [I(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu) + I(\tau_{\text{max}}, -\mu, \nu)] \\ \iff u(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu) &= \frac{1}{2} [I^+(\tau_{\text{max}}) + I^-(\tau_{\text{max}})] \\ \iff u(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu) &= I^+(\tau_{\text{max}}), \text{ d'après (1.3.1)} \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

Et

$$v(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu) = 0 \quad (1.3.3)$$

D'après (1.1.12), on a  $\mu \frac{du}{d\tau_v} = v$ . Donc  $\frac{du}{d\tau_v}(\tau_{\text{max}}, \mu, \nu) = 0$  d'après (1.3.2) et (1.3.3).

La discrétisation d'ordre 1 donne alors :

$$\begin{aligned} u_{N_d} - u_{N_d-1} &= 0 \\ \iff -A_{N_d-1} \cdot u_{N_d-1} + B_{N_d} \cdot u_{N_d} - C_{N_d+1} \cdot u_{N_d+1} &= E_{N_d}, \end{aligned}$$

avec  $A_{N_d-1} = 1$ ,  $B_{N_d} = 1$ ,  $E_{N_d} = 0$  (derniers coefficients de la matrice tridiagonale et du second membre (voir la subroutine `elimination_gauss`)).

### 1.3.2.2 Méthode de résolution hors ETL de l'ETR par la méthode ALI accélérée

L'algorithme par la méthode ALI accélérée pour la résolution de l'ETR ainsi que la structure du programme pour une protubérance sont les mêmes que pour un filament.

**Remarque 1.3.1**  $NZ = 46$  au lieu de 91 pour la grille de positions.

Les figures 1.13 et 1.14 représentent la fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, pour un profil Doppler, respectivement sans accélération (convergence au bout de 50 itérations) et avec accélération Ng (convergence au bout de 20 itérations). Il s'agit de la représentation d'une demi-couche.

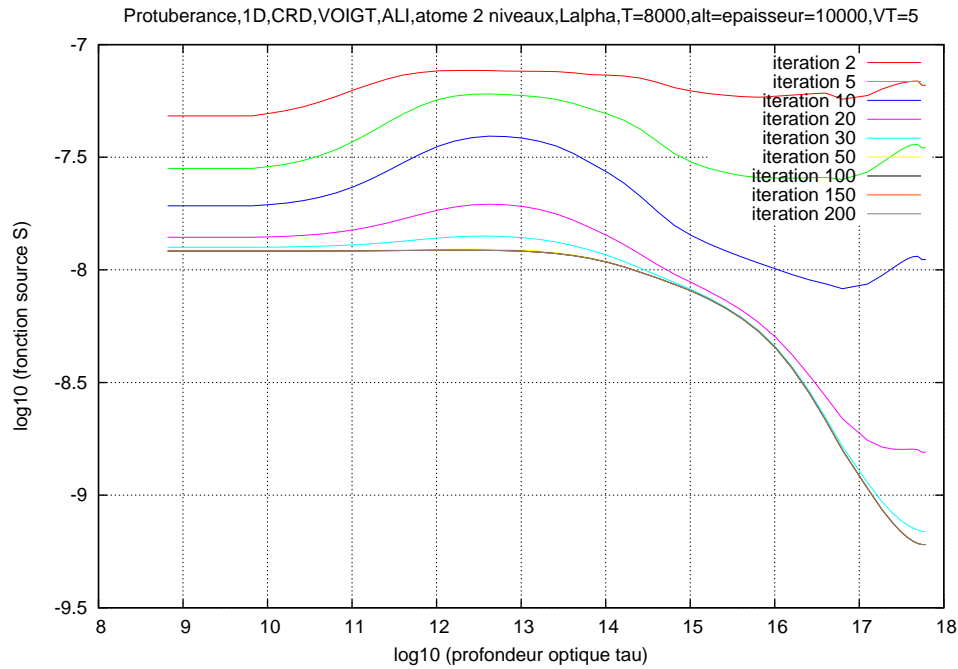


FIGURE 1.13 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI pour un profil Doppler (cas d'une protubérance). La convergence est atteinte au bout de 50 itérations.

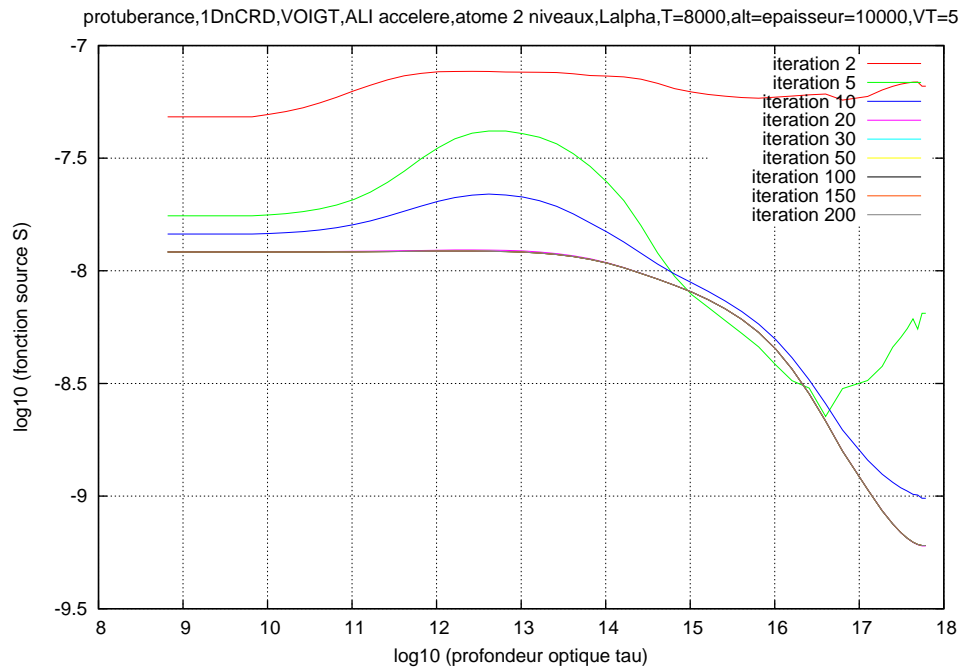


FIGURE 1.14 – Fonction source en fonction de la profondeur optique en échelle logarithmique, par la méthode ALI accélérée pour un profil Doppler (cas d'une protubérance). La convergence est atteinte au bout de 20 itérations.

### 1.3.3 Descriptif du programme

*Nature du problème physique* : transfert radiatif (1D) hors ETL dans une protubérance pour l'atome d'hydrogène à 2 niveaux (un fondamental et la raie  $L\alpha$ ), sans champ de vitesse interne

*Méthode de résolution* : méthode de Feautrier améliorée (Rybicki and Hummer, 1991) combinée à

- la méthode ALI (Accelerated Lambda Iteration)
- l'accélération du schéma ALI par la méthode Ng

*Autre information* : on utilise la redistribution complète des fréquences (CRD). Les densités d'électron et d'hydrogène sont obtenues à partir du code **PROM7**

*Auteurs* : M. Chane-Yook & P. Gouttebroze

*Programmes disponibles à partir de* :

<https://idoc.osups.universite-paris-saclay.fr/medoc/tools/radiative-transfer-codes/tools-for-radiative-transfer>

*Machines sur lesquelles le programme a été testé* : PC avec 4 processeurs Intel de 2.67GHz chacun

*Operating System pour lequel le programme a été testé* : Linux

*Langage de programmation* : Fortran 90/95 (avec le compilateur **gfortran**)

*Etat* : Stable

*Accessibilité* : Groupe solaire et extérieur (MEDOC)

*Nombre de lignes* : 1014

*Temps de calcul* : < 1 min pour 20 itérations du cycle ALI accéléré

*Références* :

- G. B. Rybicki & D. G. Hummer, "An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I- Non-overlapping lines with background continuum", A&A, 245, 171-181, 1991
- F. Paletou, "Transfert de rayonnement : méthodes itératives", C. R. Acad. Sci. Paris, t.2, Série IV, 885-898, 2001

Dans le paragraphe suivant, on va décrire les sous-routines utilisées dans le programme.

### 1.3.4 Explication des sous-routines

La structure du programme est la même que celle pour un filament solaire mais avec des modifications concernant les conditions aux limites.

#### 1.3.4.1 Description des variables utilisées

Nous allons décrire les variables utilisées dans le module **param\_mod** (fichier param.f90) :

- nfr=20 : dimension de la grille des fréquences réduites XFR
- n\_grille=46 : dimension du tableau grille
- NZ=nxmod=n\_grille : dimension du tableau xmod (voir plus loin).
- nmu=4 : dimension de la grille des directions  $\mu = \cos \theta$
- coeff\_extinction : tableau de dimension NZ correspondant à  $\epsilon$
- niter=200 : nombre d'itérations pour la convergence du schéma ALI accéléré
- T\_in=8000 : température en  $K$  (modèle)
- EPST\_in=10000 : épaisseur en  $km$  de la protubérance (modèle)
- VT\_in= $5 \times 10^5$  : vitesse de microturbulence en  $cm/s$  (modèle)
- altitude\_in =10000 : altitude de la protubérance en  $km$  (modèle)
- NFINT=20 : dimension du tableau FRFI et FINT pour la lecture des intensités incidentes solaires (input)
- a\_voigt : tableau de dimension NZ correspondant au paramètre  $a$  de la fonction de Voigt. Lorsque  $a = 10^{-3}$ , on retrouve la fonction Doppler
- grille : tableau de dimension n\_grille servant au calcul de la grille de positions
- position,VT : tableaux de dimension NZ représentant respectivement la grille de position et la vitesse de microturbulence
- xmod : tableau de dimension nxmod représentant la profondeur optique générique  $\tau = (\tau_d)$
- xfr : tableau de dimension nfr représentant la fréquence réduite  $x_i$
- mu : tableau de dimension nmu représentant les valeurs de  $\mu = \cos \theta$  (direction)
- I\_sup : tableau de dimension nfr représentant les intensités incidentes interpolées aux fréquences réduites
- J\_bar\_ali : tableau de dimension nxmod représentant  $\bar{J}$

- $J\_nu\_ali$  : tableau de dimension  $(nfr, nxmod)$  représentant  $J_\nu$
- $S\_ali$  : tableau de dimension  $(nxmod, niter)$  représentant la fonction source  $S$
- $N\_1, N\_2$  : tableaux de dimension  $(nxmod, niter)$  représentant respectivement les populations des niveaux 1 (fondamental) et 2 (raie  $L\alpha$ )
- $u\_ali$  : tableau de dimension  $(nxmod, nfr, nmu)$  représentant la solution de l'ETR pour la méthode ALI
- $lambda\_etoile$  : tableau de dimension  $nxmod$  représentant la matrice  $\Lambda^*$
- $lambda\_etoile\_mu\_nu$  : tableau de dimension  $(nxmod, nfr, nmu)$  représentant la matrice  $\Lambda_{\mu\nu}^*$
- $tau\_nu$  : tableau de dimension  $(nxmod, nfr)$  représentant la profondeur optique à la fréquence  $\nu$  :  $\tau_\nu = \phi_\nu \tau$
- $phi\_nu$  : tableau de dimension  $(nfr, NZ)$  correspondant au profil de la raie (profil de Voigt)  $\phi_\nu$  (profil non normalisé)
- $phi\_nu\_normalise$  : tableau de dimension  $(nfr, NZ)$  correspondant au profil normalisé par rapport aux fréquences relatives
- $M$  : tableau de dimension  $nfr$  représentant le poids d'intégration intermédiaire en fréquence
- $W$  : tableau de dimension  $nfr$  représentant le poids d'intégration en fréquence, normalisé et proportionnel au profil normalisé  $phi\_nu\_normalise$
- $Ne, NH$  : tableaux de dimension  $nxmod$  représentant respectivement la densité des électrons et celle de l'hydrogène
- $A21, B12, B21$  : coefficients d'Einstein
- $C12, C21$  : tableaux de dimension  $nxmod$  représentant respectivement le taux d'excitation par collisions et le taux de désexcitation par collisions
- $lambda\_0 = 1215$  : longueur d'onde centrale de la raie  $L\alpha$  en  $\text{\AA}$
- $gg1=1, gg2=8$  : représentent respectivement les poids statistiques des niveaux 1 et 2 de l'hydrogène
- $kappa\_bar$  : tableau de dimension  $NZ$  représentant le coefficient total d'absorption  $\bar{\kappa}$

- T : tableau de dimension NZ représentant la température en K
- delta\_nu\_D : tableau de dimension NZ représentant la largeur Doppler
- DFRNA : désigne l'élargissement naturel de la raie  $L\alpha$
- DFRCO : tableau de dimension NZ représentant l'élargissement collisionnel de la raie  $L\alpha$
- nu\_0=cl/(lambda\_0×10<sup>-8</sup>) : fréquence centrale de la raie  $L\alpha$  en s<sup>-1</sup> ou Hz
- nu : tableau de dimension nfr représentant la fréquence absolue  $\nu = \nu_0 + xfr \times \Delta\nu_D$
- coeff\_Lalpha=10<sup>-8</sup> : coefficient multiplicatif dans le fichier input des intensités incidentes solaires pour la raie  $L\alpha$
- FADIR : facteur de dilution pour la raie  $L\alpha$
- FRFI, FINT : tableaux de dimension NFINT représentant respectivement les fréquences (1ère colonne) et les intensités incidentes (2nde colonne) du fichier input "intensity\_incidente\_L\_alpha"
- EXPHN=2.65, EXPS=2/3, PIA02=π/2, XMEL=9.10956×10<sup>-28</sup>, CSE=8×bolt/π/XMEL : constantes

#### 1.3.4.2 Description des sousroutines par module

Les seules modifications concernent le module **general\_mod**.

##### Module **general\_mod** (fichier **general.f90**)

Le module **general\_mod** regroupe les sousroutines utiles pour la méthode ALI.

**Subroutine grilles :** cette sousroutine met en place les différentes grilles pour la modélisation d'une protubérance. Plus particulièrement,

1. on lit les densités électronique ( $N_e$ ) et de l'hydrogène ( $N_H$ ) obtenues par le programme **PROM7**
2. on entre les paramètres du modèle (température, vitesse de microturbulence)
3. on considère une grille générale de taille n\_grille=46 qui servira de base pour la grille de position
4. on considère une grille de position calculée à partir de la grille précédente et de l'épaisseur de la protubérance

5. on calcule les paramètres atomiques :  $A_{21}$ ,  $B_{21}$ ,  $B_{12}$ ,  $C_{21}$ ,  $C_{12}$
6. on calcule  $\epsilon$
7. on calcule la largeur Doppler  $\Delta\nu_D$  et le coefficient total d'absorption  $\bar{\kappa}$
8. on considère une grille de profondeur optique générique  $\tau$  en cm représentée par le tableau xmod de taille nxmod
9. on considère une grille de fréquences réduites ( $x_i$ ,  $i=1,\dots,nfr$ ) représentée par le tableau xfr de taille nfr
10. on calcule les fréquences absolues  $\nu = \nu_0 + xfr \times \Delta\nu_D$
11. on calcule l'élargissement naturel DFRNA de la raie  $L\alpha$ , puis l'élargissement collisionnel DFRCO, qui serviront au calcul du coefficient  $a$  ( $a\_voigt$  dans le code) de VOIGT
12. on prend comme profil de raie  $\phi_\nu$  (à chaque fréquence) le profil de Voigt, non normalisé, par rapport aux fréquences réduites. Le profil est représenté par le tableau phi\_nu
13. on calcule  $\int \phi_\nu d\nu$  (aire par la méthode des trapèzes) afin de calculer le profil de raie normalisé par rapport à la fréquence relative (tableau phi\_nu\_normalise dans le code)
14. on considère la grille de profondeur optique à une fréquence  $\nu$  donnée :  $\tau_\nu$
15. on considère une grille de directions  $\mu = \cos \theta$  (tableau mu). Il faut que  $\mu$  soit différent de 0
16. calcul du poids en fréquences relatives  $M$  à l'aide de la subroutine TRAPEZ (pour le calcul de  $\bar{J}$ ) : étant donné que le profil  $\phi_\nu$  n'est pas normalisé, on va calculer le poids  $W$  normalisé et proportionnel au profil normalisé phi\_nu\_normalise
17. on calcule le facteur de dilution FADIR
18. on calcule la condition aux limites supérieure  $I\_sup$  à partir des intensités incidentes (subroutine SOLINH)

**Subroutine elimination\_gauss :** il s'agit d'implémenter les formules pour l'élimination de Gauss. Dans cette subroutine, il faut faire attention à l'initialisation du second membre du système linéaire (1.1.18) : la première composante est initialisée à  $I_{sup}$  à une fréquence donnée (intensité incidente calculée par la subroutine SOLINH), la dernière composante est nulle, et les autres composantes sont initialisées par la fonction source.

**Subroutine SOLINH :** cette subroutine lit le fichier (input) des intensités incidentes "intensite\_incidente\_L\_alpha". Les 2 colonnes (il y a NFINT=20 valeurs pour la fréquence et pour l'intensité) sont multipliées par des facteurs afin d'avoir des Hz et des  $\text{erg}/\text{cm}^2/\text{s}/\text{sr}/\text{Hz}$  comme unités pour la fréquence et l'intensité. Puis on fait une interpolation par rapport à la fréquence relative  $\Delta\nu = x \Delta\nu_D$  pour les intensités ( $I\_sup$ ), qui seront multipliées par le facteur de dilution.



### 1.3.5 Exécution du programme

- `make clean`
- `make`
- `./lambda_it`

Les fichiers résultats (`fort.100`, `fort.101`, `fort.102`, `fort.113`) sont lus par le logiciel **gnuplot** dont les commandes se trouvent dans la subroutine *methode\_ali*.

## 1.4 Conclusion

Dans ce chapitre 1, nous avons traité le transfert radiatif en 1D pour un atome à deux niveaux, dans le cas d'une atmosphère semi-infinie, d'un filament et d'une protubérance solaire, en utilisant la redistribution complète des fréquences (CRD).

Plus précisément, l'équation de transfert (1.1.7) a été discrétisée par la méthode des différences finies afin d'obtenir un système linéaire (1.1.18) que l'on résout par la méthode d'élimination de Gauss (1.1.21)-(1.1.22), pour déterminer l'intensité  $u$ . Deux schémas itératifs qui mettent à jour la fonction source  $S$  pas à pas, ont été implémentés : la méthode de la  $\Lambda$ -itération simple et la méthode ALI. On a ensuite accéléré le schéma ALI par la méthode Ng (voir section 1.1.5), qui consiste à accélérer toutes les trois itérations de la convergence d'ALI.

Dans le cas d'une atmosphère semi-infinie, pour  $B = 1$ ,  $\epsilon = 10^{-4}$ , on obtient les mêmes résultats (figures 1.3 et 1.4) que Paletou (2001). Cela permet donc de valider les résultats pour les schémas itératifs. La méthode de la  $\Lambda$ -itération simple ne converge toujours pas vers la solution au bout de 200 itérations (ni au bout de 1500 itérations). La méthode ALI converge vers la solution au bout de 100 itérations et la méthode ALI accélérée converge vers la solution au bout de 20 itérations.

On a ensuite appliqué le schéma ALI accéléré aux protubérances et aux filaments solaires. Dans ces cas, la géométrie du problème est différente.

Dans le chapitre suivant, on va s'intéresser au cas d'un atome multi-niveaux.



## Cas d'un atome multi-niveaux

### Sommaire

<b>2.1</b>	<b>Formulation multi-niveaux</b>	<b>59</b>
<b>2.2</b>	<b>Méthode itérative et choix de l'opérateur</b>	<b>63</b>
<b>2.3</b>	<b>Opérateur local, pas de "background continuum", pas d'absorption continue. Application au cas d'une atmosphère semi-infinie</b>	<b>65</b>

## 2.1 Formulation multi-niveaux

On s'intéresse ici à la résolution auto-cohérente des équations de l'équilibre statistique avec les équations de transfert radiatif hors ETL correspondant à chaque transition traitée en 1D pour un atome multi-niveaux. Les hypothèses considérées sont les suivantes :

- cas de raies isolées (c-à-d que les raies ne se chevauchent pas)
- il n'y a pas d'ionisation/recombinaison, plus généralement pas d'équilibre d'ionisation : on ne considère que les transitions entre 2 niveaux (transitions bound-bound)
- pas de "background continuum" donc pas d'absorption continue (voir section 2.3), puis avec "background continuum" donc avec absorption continue (voir section ??)
- pas de champ de vitesse interne : la structure est considérée comme statique dans l'atmosphère mais modifiable aisément (voir conditions aux limites)
- redistribution complète des fréquences (CRD)

Le traitement des raies multi-niveaux revient à résoudre simultanément les équations de l'équilibre statistique pour les populations des niveaux et chaque ETR (Equation de Transfert Radiatif) pour chaque transition.

Nous allons dans la suite décrire l'ETR et les équation de populations pour le cas d'un atome ayant plusieurs niveaux considérés (Rybicki and Hummer, 1991). Dans le paragraphe suivant, nous allons présenter la méthode numérique utilisée (MALI : Multi Accelerated Lambda Iteration).

L'équation de transfert radiatif (ETR) s'écrit selon [Rybicki and Hummer \(1991\)](#) :

$$\mu \frac{\partial I_{\mu\nu}}{\partial z} = -\chi_{\mu\nu} I_{\mu\nu} + \eta_{\mu\nu}, \quad (2.1.1)$$

où  $I_{\mu\nu}$  est l'intensité spécifique,  $\chi_{\mu\nu}$  est l'opacité totale et  $\eta_{\mu\nu}$  est l'émissivité totale, à la fréquence  $\nu$  et pour l'angle  $\theta$ .

On considère qu'un atome/ion possède plusieurs niveaux  $l, l', \dots$ . Soit  $n_l$  la (densité de) population du niveau  $l$ . Chaque niveau est caractérisé par son poids statistique  $g_l$  et son énergie  $E_l$ .

**Notations 2.1.1** Par exemple, si  $l' < l$ , alors on a le schéma suivant :  
 $E_{l'} < E_l \iff l' < l$  (voir figure 2.1 ci-dessous).

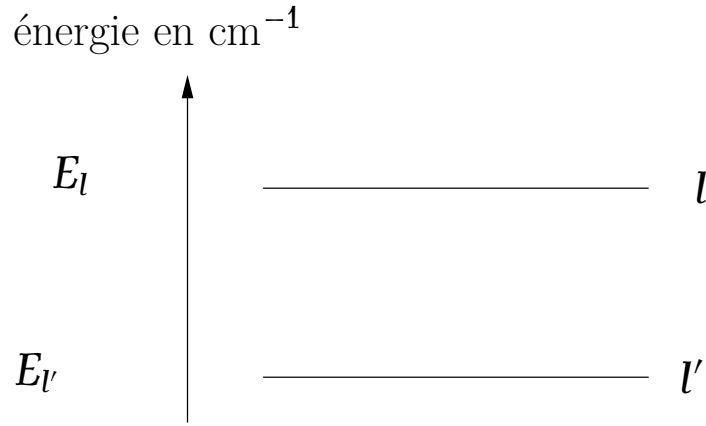


FIGURE 2.1 – Niveaux  $l$  et  $l'$  d'un atome/ion ainsi que leur énergie correspondante.

Considérons la transition entre les niveaux  $l$  et  $l'$  (voir figure 2.1). Les propriétés radiatives de la raie  $ll'$  sont caractérisées par son émissivité  $\eta_{ll'}$  et son opacité  $\chi_{ll'}$  (ces quantités peuvent dépendre de  $\mu$  en présence de champs de vitesse).

Pour  $l > l'$ , on a :

$$\eta_{ll'}(\mu, \nu) = \frac{h\nu}{4\pi} n_l A_{ll'} \varphi_{ll'}(\mu, \nu) \quad (2.1.2)$$

$$\chi_{ll'}(\mu, \nu) = \frac{h\nu}{4\pi} (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \varphi_{ll'}(\mu, \nu),$$

$A_{ll'}$  (émission spontanée),  $B_{ll'}$  (émission stimulée) et  $B_{l'l}$  (absorption) sont les coefficients d'Einstein, et  $\varphi_{ll'}(\mu, \nu)$  est le profil normalisé de la raie.

La fonction source de la transition radiative  $ll'$  (c-à-d la raie) s'écrit ( $l > l'$ ) :

$$S_{ll'} = \frac{n_l A_{ll'}}{n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}} \quad (2.1.3)$$

**Remarque 2.1.1** En CRD,  $S_{ll'}$  est indépendante de la fréquence  $\nu$ . On suppose que la diffusion du rayonnement sur les particules massives est isotrope, donc  $S_{ll'}$  est aussi indépendante de la direction  $\mu$ .

En PRD (redistribution partielle des fréquences),  $\varphi_{ll'} \neq \varphi_{l'l}$ , donc la fonction source dépend de la fréquence  $\nu$ .

L'émissivité totale  $\eta_{\mu\nu}$  et le coefficient d'absorption totale  $\chi_{\mu\nu}$  s'écrivent :

$$\begin{aligned}\eta_{\mu\nu} &= \sum_{l>l'} \eta_{ll'}(\mu, \nu) + \eta_c(\nu) \\ \chi_{\mu\nu} &= \sum_{l>l'} \chi_{ll'}(\mu, \nu) + \chi_c(\nu),\end{aligned}\tag{2.1.4}$$

où  $\eta_c(\nu)$  et  $\chi_c(\nu)$  sont l'émissivité et l'opacité du "background continuum".

**Remarque 2.1.2** L'émissivité totale  $\eta_{\mu\nu}$  et le coefficient d'absorption totale  $\chi_{\mu\nu}$  sont des fonctions de  $n_i$  (population des niveaux).

La fonction source totale s'écrit :

$$S_{\mu\nu} = \frac{\eta_{\mu\nu}}{\chi_{\mu\nu}}\tag{2.1.5}$$

Les équations de l'équilibre statistique pour les populations s'écrivent :

$$n_l \sum_{l'} (R_{ll'} + C_{ll'}) = \sum_{l'} n_{l'} (R_{l'l} + C_{l'l}),\tag{2.1.6}$$

où  $C_{ll'}$  est le taux de collisions,  $R_{ll'}$  est le taux radiatif avec :

$$\begin{aligned}R_{ll'} &= A_{ll'} + B_{ll'} \bar{J}_{ll'}, \quad l > l' : \text{émission} \\ R_{ll'} &= B_{ll'} \bar{J}_{ll'}, \quad l < l' : \text{absorption},\end{aligned}\tag{2.1.7}$$

où  $\bar{J}_{ll'}$  est l'intensité moyenne intégrée sur la direction  $\mu = \cos \theta$  (pour la raie  $ll'$ ) :

$$\bar{J}_{ll'} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) I_{\mu\nu} d\nu\tag{2.1.8}$$

Donc les équations de populations (2.1.6) s'écrivent (on considère le niveau  $l$  ici. Les  $l'$  sont les autres niveaux du modèle atomique) :

$$\begin{aligned}& \sum_{l'<l} [n_l A_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}] \\ & - \sum_{l'>l} [n_{l'} A_{l'l} - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}] \\ & + \sum_{l' \neq l} (n_l C_{ll'} - n_{l'} C_{l'l}) = 0\end{aligned}\tag{2.1.9}$$

Pour fermer le système d'équations de population, il suffit d'utiliser l'équation de conservation de l'élément (c-à-d l'atome considéré) :

$$\sum_l n_l = N_T, \text{ où } N_T \text{ est la population totale de l'élément.}$$

**Preuve de (2.1.9) :**

**Rappel 2.1.1** Les processus (c-à-d transitions entre 2 niveaux) radiatifs et collisionnels qui existent entre 2 niveaux d'énergie  $l$  et  $l'$  d'un atome ou d'un ion sont :

- l'émission spontanée (d'un photon) caractérisée par le taux  $A_{ll'}$
- l'émission stimulée caractérisée par le coefficient  $B_{ll'} \bar{J}$
- l'absorption radiative caractérisée par le coefficient  $B_{l'l} \bar{J}$  ( $\bar{J}$  dépend du rayonnement)
- l'excitation collisionnelle caractérisée par le coefficient  $C_{l'l}$
- la désexcitation collisionnelle caractérisée par le coefficient  $C_{ll'}$ .

Ces processus sont représentés sur la figure 2.2.

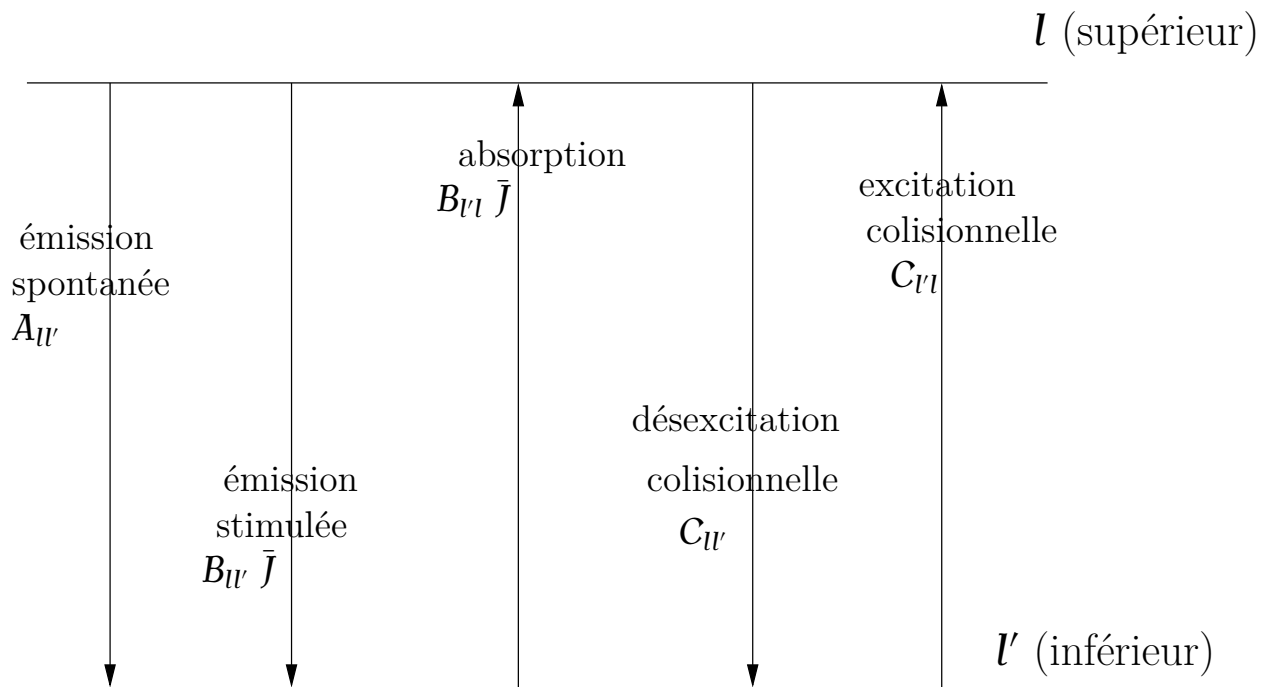


FIGURE 2.2 – Différents processus radiatifs et collisionnels qui existent entre 2 niveaux d'énergie  $l$  et  $l'$  ( $l' < l$ ) d'un atome ou d'un ion.

On part de l'équation (2.1.6). On considère un niveau  $l$ , les  $l'$  étant les autres niveaux du modèle atomique.

Le 1er terme de gauche de (2.1.6) s'écrit ( $n_e$  est implicite dans  $C_{ll'}$ ) :

$$\begin{aligned}
 n_l \sum_{l'} (R_{ll'} + C_{ll'}) &= \sum_{l < l'} n_l R_{ll'} + \sum_{l > l'} n_l R_{ll'} + \sum_{l' \neq l} n_l C_{ll'} \text{ d'après (2.1.7)} \\
 &= \sum_{l < l'} n_l B_{ll'} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l > l'} n_l (A_{ll'} + B_{ll'} \bar{J}_{ll'}) + \sum_{l' \neq l} n_l C_{ll'} \\
 &= \sum_{l' > l} n_l B_{ll'} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l' < l} n_l A_{ll'} + \sum_{l' < l} n_l B_{ll'} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l' \neq l} n_l C_{ll'}
 \end{aligned} \tag{2.1.10}$$

Le second terme de droite de (2.1.6) s'écrit :

$$\sum_{l'} n_{l'} (R_{l'l} + C_{l'l}) = \sum_{l' < l} n_{l'} R_{l'l} + \sum_{l' > l} n_{l'} R_{l'l} + \sum_{l' \neq l} n_{l'} C_{l'l} \tag{2.1.11}$$

Or, en CRD,  $\bar{J}_{ll'} = \bar{J}_{l'l}$ , et d'après (2.1.7), le terme de droite (2.1.11) s'écrit alors :

$$\sum_{l' < l} n_{l'} B_{l'l} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l' > l} n_{l'} A_{l'l} + \sum_{l' > l} n_{l'} B_{l'l} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l', l' \neq l} n_{l'} C_{l'l} \tag{2.1.12}$$

Donc les équations de populations (2.1.6) s'écrivent pour le niveau  $l$  (les  $l'$  étant les autres niveaux) :

$$\begin{aligned}
 &\sum_{l' > l} n_l B_{ll'} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l' < l} n_l A_{ll'} + \sum_{l' < l} n_l B_{ll'} \bar{J}_{ll'} + \sum_{l', l' \neq l} n_l C_{ll'} - \sum_{l' < l} n_{l'} B_{l'l} \bar{J}_{ll'} \\
 &- \sum_{l' > l} n_{l'} A_{l'l} - \sum_{l' > l} n_{l'} B_{l'l} \bar{J}_{ll'} - \sum_{l', l' \neq l} n_{l'} C_{l'l} = 0
 \end{aligned}$$

En regroupant les différents termes, on obtient (2.1.9). ■

## 2.2 Méthode itérative et choix de l'opérateur

### 2.2.1 Méthode MALI

Le schéma MALI à introduire ici est basé sur la technique de l'opérateur "splitting" donnée par l'équation (1.2) de [Rybicki and Hummer \(1991\)](#) :

$$I_{\mu\nu} = \Lambda_{\mu\nu}^* [S_{\mu\nu}] + (\Lambda_{\mu\nu} - \Lambda_{\mu\nu}^*) [S_{\mu\nu}^\dagger], \tag{2.2.1}$$

L'équation (2.2.1) donne  $I_{\mu\nu}$  en termes de populations. Il est important de remarquer que  $S_{\mu\nu}^\dagger$ ,  $\Lambda_{\mu\nu}$  et  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  sont construits à partir des populations  $n_l^\dagger$  calculées à l'itération précédente.

Les nouvelles populations  $n_l$  sont prises en compte uniquement dans la fonction source  $S_{\mu\nu}$  exprimée en terme de  $n_l$  grâce aux équations (2.1.2), (2.1.4) et (2.1.5).

Si on injecte l'expression de  $I_{\mu\nu}$  (2.2.1) dans l'équation (2.1.8) et en faisant de même pour  $\bar{J}_{ll'}$  dans les équations de l'équilibre statistique (2.1.9), alors ces dernières seront exprimées uniquement en terme de quantités connues et des nouvelles populations  $n_l$  (équations 2.3.8).

Le schéma itératif MALI est le suivant :

1. choix initial pour les anciennes populations  $n_l^{\dagger}$
2. mise à jour des équations de populations (2.1.9). On résoud ensuite les équations "préconditionnées" (2.3.8) pour obtenir les nouvelles populations  $n_l$
3. ces nouvelles populations  $n_l$  de l'étape 2 deviennent des anciennes populations pour l'itération suivante, etc. On continue ce processus itératif jusqu'à ce que la convergence soit atteinte.

## 2.2.2 Choix de l'opérateur lambda approché $\Lambda_{\mu\nu}^*$

On rappelle que l'opérateur exact  $\Lambda_{\mu\nu}$  est lui-même une approximation basée sur la discrétisation en espace (voir paragraphe 1.1.2 du chapitre 1 "Cas d'un atome à deux niveaux") de l'ETR (1.1.7) et apparaît comme un opérateur de matrice (l'inverse de la matrice  $T$  (1.1.19)) agissant sur les valeurs de la fonction source ((1.1.18) et (1.1.20)) pour une grille spatiale discrétisée choisie.

Un choix simple pour l'opérateur approché  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  est de prendre la diagonale de la matrice de l'opérateur complet  $\Lambda_{\mu\nu}$  (choix fait dans le chapitre précédent pour le cas d'un atome à 2 niveaux et aussi dans [Olson et al. \(1986\)](#)).  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  est recalculé à chaque mise à jour des populations  $n_i$  (contrairement au cas d'un atome à 2 niveaux). D'autres choix possibles sont : la partie tridiagonale de l'opérateur complet ou bien encore une bande encore plus large que la tridiagonale.

Le principal avantage de l'approximation par la diagonale est que les équations de l'équilibre statistique restent complètement locales. Tandis qu'une approximation par une bande comme la tridiagonale introduit une non-localité dans ces équations, qui seront plus compliquées à résoudre et qui peuvent entraîner une certaine instabilité.

Dans ce qui suit, nous allons établir les équations de l'équilibre statistique préconditionnées, en utilisant un opérateur local (c-à-d en prenant comme opérateur lambda approché  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  la diagonale de l'opérateur exact), dans les cas suivants :

- pas de "background continuum", donc pas d'absorption continue. Applications : atmosphère semi-infinie (voir paragraphe 2.3)
- avec "background continuum", donc avec de l'absorption continue. Application : atmosphère semi-infinie (voir paragraphe ??).

Il est important de préserver la linéarité des équations d'origine de l'équilibre statistique, tant que la densité électronique  $n_e$  est connue à priori.



## 2.3 Opérateur local, pas de “background continuum”, pas d’absorption continue. Application au cas d’une atmosphère semi-infinie

### 2.3.1 Équations de l’équilibre statistique

Dans le voisinage de la raie  $ll'$ , sa fonction source  $S_{\mu\nu} = S_{ll'}$  est indépendante de la fréquence (car les raies sont isolées).

En utilisant cette propriété dans l’équation (2.2.1), on obtient :

$$I_{\mu\nu} = \Lambda_{\mu\nu}^* S_{ll'} + I_{\mu\nu}^{eff}, \quad (2.3.1)$$

où

$$I_{\mu\nu}^{eff} = \Lambda_{\mu\nu} [S_{ll'}^\dagger] - \Lambda_{\mu\nu}^* S_{ll'}^\dagger := I_{\mu\nu}^\dagger - \Lambda_{\mu\nu}^* S_{ll'}^\dagger \text{ d'après (1.1.1)} \quad (2.3.2)$$

Ici,  $I_{\mu\nu}^\dagger$  est l’intensité obtenue à partir de la solution formelle.

**Remarque 2.3.1** Comme l’opérateur est local ici (c’est la diagonale de  $\Lambda_{\mu\nu}$ ), le produit d’une matrice par un vecteur revient à une multiplication simple entre les termes de la fonction source et la matrice  $\Lambda$ . C’est pourquoi les  $[ ]$  sont omis dans l’expression  $\Lambda_{\mu\nu}^*[S_{\mu\nu}] = \Lambda_{\mu\nu}^* S_{ll'}$ .

En injectant (2.3.1) dans l’expression de l’intensité moyenne intégrée  $\bar{J}_{ll'}$  (2.1.8), on obtient :

$$\bar{J}_{ll'} = \bar{\Lambda}_{ll'}^* S_{ll'} + \bar{J}_{ll'}^{eff}, \quad (2.3.3)$$

avec

$$\bar{\Lambda}_{ll'}^* = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'} \Lambda_{\mu\nu}^* d\nu, \quad (2.3.4)$$

et

$$\bar{J}_{ll'}^{eff} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'} I_{\mu\nu}^{eff} d\nu = \bar{J}_{ll'}^\dagger - \bar{\Lambda}_{ll'}^* S_{ll'}^\dagger \quad (2.3.5)$$

sont les moyennes d’angle et de fréquence de  $\Lambda_{\mu\nu}$  et de  $I_{\mu\nu}^{eff}$ , utilisant  $\varphi_{ll'}$  comme poids.

La quantité  $\bar{J}_{ll'}^\dagger$  définie ci-dessous, est la valeur de l’intensité moyenne intégrée sur les intensités à l’itération précédente :

$$\bar{J}_{ll'}^\dagger = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'} I_{\mu\nu}^\dagger d\nu \quad (2.3.6)$$

**Preuve de (2.3.4)-(2.3.6) :**

D’après (2.3.1) et (2.3.2), l’équation (2.1.8) s’écrit :

$$\begin{aligned}\bar{J}_{ll'} &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) \Lambda_{\mu\nu}^* S_{ll'} d\nu + \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) I_{\mu\nu}^{eff} d\nu \\ &= A + B\end{aligned}\quad (2.3.7)$$

Comme  $S_{ll'}$  est indépendant de la fréquence  $\nu$ , le premier terme  $A$  s'écrit alors :

$$\begin{aligned}A &= \frac{1}{4\pi} S_{ll'} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) \Lambda_{\mu\nu}^* d\nu \\ &= \frac{1}{4\pi} S_{ll'} \bar{\Lambda}_{ll'}^*, \quad \text{avec } \bar{\Lambda}_{ll'}^* = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'} \Lambda_{\mu\nu}^* d\nu.\end{aligned}$$

D'où (2.3.4). ■

Le second terme  $B$  est le terme  $\bar{J}_{ll'}^{eff}$  :

$$\begin{aligned}B &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) I_{\mu\nu}^{eff} d\nu = \bar{J}_{ll'}^{eff} \quad \text{par définition} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) I_{\mu\nu}^\dagger d\nu - \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int \varphi_{ll'}(\mu, \nu) \Lambda_{\mu\nu}^* S_{ll'}^\dagger d\nu \quad \text{d'après (2.3.2)} \\ &= \bar{J}_{ll'}^\dagger - \Lambda_{ll'}^* S_{ll'}^\dagger\end{aligned}$$

D'où (2.3.6) et (2.3.5). ■

En injectant ces résultats dans les équations des populations (2.1.9) et en utilisant l'expression de la fonction source de la raie  $ll'$  (2.1.3), on obtient les équations de l'équilibre statistique "préconditionnées" pour le niveau  $l$  (les  $l'$  étant les autres niveaux) :

$$\begin{aligned}&\sum_{l' < l} [n_l A_{ll'}(1 - \bar{\Lambda}_{ll'}^*) - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}^{eff}] \\ &- \sum_{l' > l} [n_{l'} A_{l'l}(1 - \bar{\Lambda}_{ll'}^*) - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}^{eff}] \\ &+ \sum_{l', l' \neq l} (n_l C_{ll'} - n_{l'} C_{l'l}) = 0\end{aligned}\quad (2.3.8)$$

**Preuve de (2.3.8) :**

D'après (2.1.3) et (2.3.3), les équations de l'équilibre statistique (2.1.9) s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{l' < l} [n_l A_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}] \\
 & - \sum_{l' > l} [n_{l'} A_{l'l} - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}] \\
 & + \sum_{l', l' \neq l} (n_l C_{ll'} - n_{l'} C_{l'l}) = 0 \\
 & \iff \sum_{l' < l} U - \sum_{l' > l} V + \sum_{l', l' \neq l} (n_l C_{ll'} - n_{l'} C_{l'l}) = 0
 \end{aligned} \tag{2.3.9}$$

Or  $U = n_l A_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}, \quad l' < l$

$= n_l A_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{\Lambda}_{ll'}^* S_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}^{eff}$  d'après (2.3.3)

$= U_1 - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}^{eff}$

Et  $U_1 = n_l A_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{\Lambda}_{ll'}^* S_{ll'}$

$= n_l A_{ll'} - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{\Lambda}_{ll'}^* \frac{n_l A_{ll'}}{n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}} \quad \text{d'après (2.1.3)}$

$= n_l A_{ll'} - n_l A_{ll'} \bar{\Lambda}_{ll'}^*$

$= n_l A_{ll'} (1 - \bar{\Lambda}_{ll'}^*)$

Donc,

$U = n_l A_{ll'} (1 - \bar{\Lambda}_{ll'}^*) - (n_{l'} B_{l'l} - n_l B_{ll'}) \bar{J}_{ll'}^{eff}, \quad l' < l$

D'autre part,

$V = n_{l'} A_{l'l} - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}, \quad l' > l$

$= n_{l'} A_{l'l} - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{\Lambda}_{ll'}^* S_{l'l} - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}^{eff}$  d'après (2.3.3)

$= n_{l'} A_{l'l} - W - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}^{eff}$

Il faut démontrer que  $W = n_{l'} A_{l'l} \bar{\Lambda}_{ll'}^*$  pour  $l' > l$  :

$W = (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{\Lambda}_{ll'}^* S_{l'l}$

$= (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{\Lambda}_{ll'}^* \frac{n_{l'} A_{l'l}}{n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}} \quad \text{d'après (2.1.3)}$

$= n_{l'} A_{l'l} \bar{\Lambda}_{ll'}^*, \quad l' > l$

Donc,

$$V = n_{l'} A_{l'l} (1 - \bar{\Lambda}_{ll'}^*) - (n_l B_{ll'} - n_{l'} B_{l'l}) \bar{J}_{ll'}^{\text{eff}}$$

D'où (2.3.8). ■

**Remarque 2.3.2** *Le but de ces substitutions est de conserver la même forme pour les équations de populations (2.3.8) et pour les équations de l'équilibre statistique de départ (2.1.9). Excepté le fait que le coefficient d'Einstein  $A$  (c-à-d  $A_{ll'}$  ou  $A_{l'l}$ ) soit multiplié par  $(1 - \bar{\Lambda}_{ll'}^*)$  et que l'intensité moyenne intégrée  $\bar{J}_{ll'}$  soit remplacée par  $\bar{J}_{ll'}^{\text{eff}}$ .*

*Ces équations de l'équilibre statistique "préconditionnées" sont toujours linéaires (si la densité électronique  $n_e$  connue à priori) par rapport aux populations des ions/atomes.*

*Une dernière caractéristique de ces équations modifiées (2.3.8) est qu'elles garantissent automatiquement des solutions positives pour les nouvelles populations. Cette propriété découle de la positivité des "coefficients de taux (de collisions ou radiatif)".*

*Enfin, il est important que l'opérateur approché  $\Lambda_{\mu\nu}^*$  soit la diagonale de l'opérateur exact  $\Lambda_{\mu\nu}$  pour que l'on ait  $(\Lambda_{\mu\nu} - \Lambda_{\mu\nu}^*) > 0$ .*

## 2.3.2 Descriptif du programme H3CRD

*Nature du problème physique* : résolution auto-cohérente en 1D des équations de l'équilibre statistique avec les équations de transfert radiatif (hors ETL) correspondant à chaque transition traitée pour l'atome d'hydrogène (3 niveaux), pour une atmosphère semi-infinie, en CRD (distribution complète des fréquences), sans champ de vitesse interne

*Méthode de résolution* : méthode MALI (Multi Accelerated Lambda Iteration) et méthode des caractéristiques courtes

*Autre information* : l'équilibre d'ionisation n'est pas incluse. Toutes les transitions sont radiativement permises. Les conditions aux limites sont monochromatiques. Utilisation du (vieux) benchmark (historique) de [Avrett \(1968\)](#).

*Auteur* : F. Paletou (IRAP)

*Programmes disponibles à partir de* :

<https://idoc.osups.universite-paris-saclay.fr/medoc/tools/radiative-transfer-codes/tools-for-radiative-transfe>

*Machines sur lesquelles le programme a été testé* : PC avec 4 processeurs Intel de 2.67GHz chacun

*Operating System pour lequel le programme a été testé* : Linux

*Langage de programmation* : re-écrit en Fortran 90 par M. Chane-Yook (compilateur **gfortran**)

*Etat* : Stable

*Accessibilité* : Groupe solaire et extérieur (MEDOC)

*Nombre de lignes* : 781

*Temps de calcul* : < 1 min pour 50 itérations du cycle MALI

*Références* :

- G. B. Rybicki & D. G. Hummer, “An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I- Non-overlapping lines with background continuum”, A&A, 245, 171-181, 1991
- F. Paletou, “Transfert de rayonnement : méthodes itératives”, C. R. Acad. Sci. Paris, t.2, Série IV, 885-898, 2001
- E. H. Avrett, “Resonance lines in Astrophysics”, NCAR, 1968.

### 2.3.3 Algorithme

La figure 2.3 représente l’algorithme du programme H3CRD.

### 2.3.4 Physique atomique de l’atome d’hydrogène

On considère ici 3 niveaux pour l’hydrogène (voir figure 2.4). Plus particulièrement, il s’agit des transitions d’absorption et d’émission :

- 1 vers 2 : Ly $\alpha$
- 1 vers 3 : Ly $\beta$
- 3 vers 2 : H $\alpha$

Pour d’autres atomes simplifiés, se référer à Avrett (1968).

### 2.3.5 Explications des sous-routines

Le code H3CRD est écrit en fortran 90. Le programme principal “h3crd.f90” fait appel à 3 sous-routines :

- **grilles** : mise en place des grilles de fréquences, de profondeurs optiques, de directions, de poids statistiques des niveaux, des poids de quadrature angulaire, des coefficients d’Einstein  $A$  et  $B$ , des coefficients collisionnels et du profil de Gauss (pour chaque raie).
- **initialisation\_population** : estimation des populations du niveau 1 ( $n_1$ ) à partir de  $\chi_{21}$ , calcul des autres densités de populations à l’ETL, calcul de la densité électronique  $n_e$  en supposant que chaque profondeur optique est initialisée de la même façon, calcul des  $C_{ij}$  via

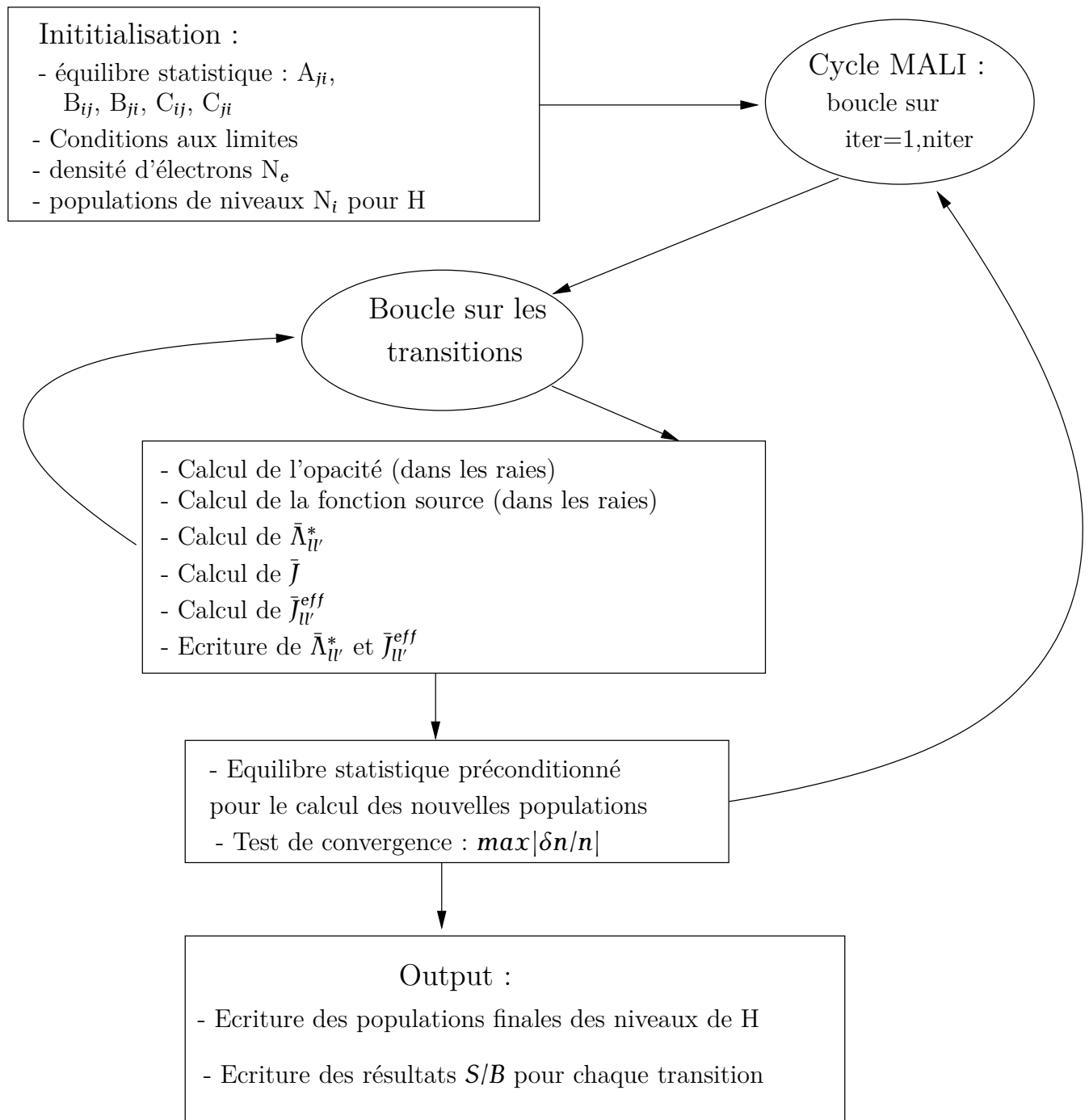


FIGURE 2.3 – Algorithme de H3CRD.

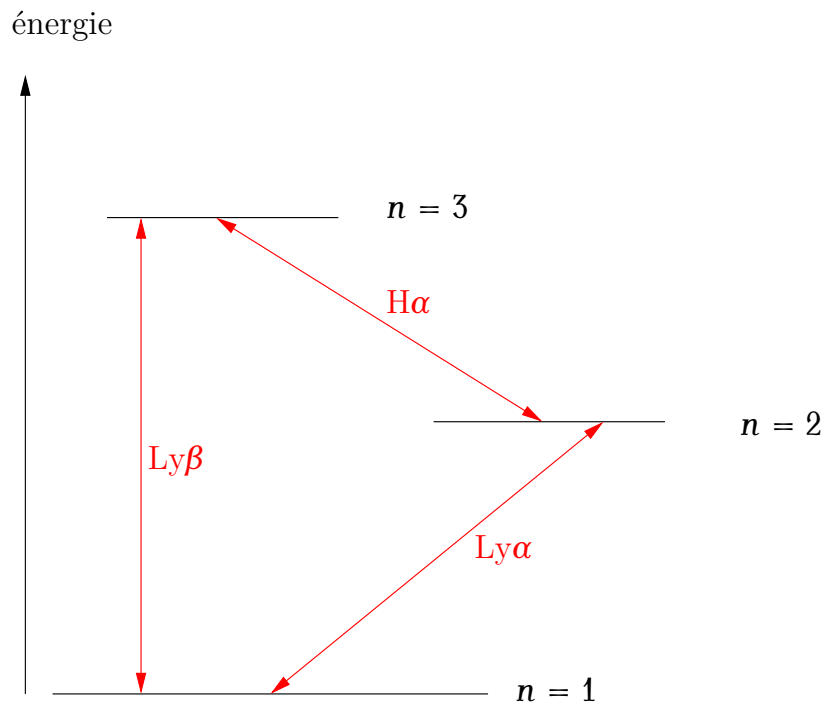


FIGURE 2.4 – Diagramme d'énergie de l'hydrogène (la figure n'est pas à l'échelle) - 3 transitions radiatives (en rouge).

les populations à l'ETL.

- **cycle\_mali** : 1) solution formelle de l'ETR (par la méthode des caractéristiques courtes). 2) couplage avec les équations de l'équilibre statistique (par la méthode MALI).

Le programme principal "h3crd.f90" utilise plusieurs modules dont les fichiers sont (voir le paragraphe suivant 2.3.5.1 pour la liste des variables utilisées) :

- **param.f90** : contient toutes les variables globales ainsi que les constantes définies comme *nlev*, *nfreq*, *ndir*, ...
- **general.f90** : contient plusieurs sous-routines comme la définition des grilles, l'initialisation des populations, le calcul des coefficients  $B$  d'Einstein, le calcul de la largeur Doppler, la définition de la fonction de Planck (condition aux limites inférieure; pas d'illumination sur la surface), le calcul de la profondeur optique, la décomposition en LU pour la résolution de systèmes linéaires.
- **mali.f90** : contient plusieurs sous-routines utilisées pour le cycle MALI : la résolution des équations de l'équilibre statistique "préconditionnées" (Rybicki and Hummer, 1991), la résolution de l'équation de transfert par la méthode des caractéristiques courtes.

Le fichier en sortie est "fort.1" qui contient les résultats  $S/B$  ( $\tau$ ) pour chaque transition.

### 2.3.5.1 Liste des variables utilisées dans le module “param\_mod” (fichier param.f90)

Ceux sont ici des variables globales.

- nlev=3 : nombre de niveaux atomiques
- nfrq=16 : nombre de fréquences
- ndir=3 : nombre de directions
- nord=2 : ordre de quadrature
- nd=53 : nombre de couches pour la grille de profondeur optique
- pi : valeur de  $\pi$
- h : constante de Planck en  $\text{cm}^2.\text{g}.\text{s}^{-1}$
- ryd : constante de Rydberg en erg
- bolt : constante de Boltzmann en  $\text{cm}^2.\text{g}^{-1}.\text{s}^{-2}.\text{K}^{-1}$
- cl : vitesse de la lumière en  $\text{cm}.\text{s}^{-1}$
- m\_H : masse de l'atome d'hydrogène en g
- RS : rayon du Soleil en cm
- ta=5000K : température atmosphérique
- chil21=1 : coefficient d'absorption
- g (tableau de dimension nlev) : poids statistique des niveaux de l'hydrogène
- nu (tableau de dimension (nlev,nlev)) : fréquence des transitions
- A, B, C (tableaux de dimension (nlev,nlev)) : coefficients A et B d'Einstein, coefficients C pour les taux collisionnels
- tau0, tau (tableaux de dimension nd) : grilles de profondeur optique
- csz, wtdir (tableaux de dimension ndir) : quadrature angulaire (cosinus de l'angle entre le rayonnement et l'axe z) et poids en quadrature angulaire
- wtneu (tableau de dimension nfrq) : poids d'intégration en fréquence
- phi (tableau de dimension nfrq) : profil de raie
- phij, chi, jeff (tableaux de dimension nd) :  $\bar{J}$ , coefficient d'absorption de la raie,  $\bar{J}_{ll'}^{eff}$
- sl (tableau de dimension (nfrq,nd)) : fonction source
- n, nprec (tableaux de dimension (nlev,nd)) : densité de population, densité de population calculée à l'ETL
- ne : densité électronique
- bc0, bcd (tableaux de dimension (nfrq,ndir)) : conditions aux limites supérieure (top de la couche, z(1)) et inférieure (z(nz))
- lstar (tableau de dimension nd) :  $\bar{\Lambda}_{ll'}^*$
- erls (tableau de dimension niter, niter est le nombre d'itérations dans le cycle MALI. Pour plus de détails, voir la subroutine “cycle\_mali” dans le fichier “mali.f90”) : erreur
- jjeff, llstar (tableaux de dimension (nlev,nlev,nd)) : tableaux intermédiaires pour  $\bar{J}_{ll'}^{eff}$  et  $\bar{\Lambda}_{ll'}^*$

### 2.3.5.2 Explications des sousroutines du module “general\_mod” (fichier general.f90)

Le module **general\_mod** regroupe les sousroutines utilisées pour le cycle MALI.



**Subroutine grilles :** cette subroutine met en place les différentes grilles pour la modélisation d’une atmosphère semi-infinie. Plus particulièrement,

- on considère une grille d’épaisseur optique “tau0” en cm, rangée par valeur croissante (voir figure 1.1)
- on considère les poids statistiques des niveaux de l’hydrogène, la quadrature angulaire (cosinus de l’angle entre le rayonnement et l’axe z), les poids en quadrature angulaire, les fréquences des 3 transitions, les coefficients A d’Einstein et les coefficients  $C_{ji}$  (voir page 46 de Avrett (1968)),
- on calcule les coefficients B d’Einstein
- on calcule le profil de raie (Gaussienne), on renormalise le profil et la quadrature en fréquence
- grille de fréquences réduites  $x = \nu - \nu_0/\Delta\nu_D$ ,  $\nu$  étant la fréquence,  $\nu_0$  la fréquence centrale de la raie et  $\Delta\nu_D$  la largeur Doppler

**Subroutine initialisation\_population :** estimation de  $n_1$  (population du niveau 1) à partir du coefficient d’absorption  $\chi_{21} = 1$  (la grille d’opacité est fixée et est confondue avec la grille géométrique “tau0”). On calcule les autres densités de population à l’ETL. On calcule aussi la densité totale d’électrons en supposant que chaque profondeur est initialisée de la même façon. On calcule les  $C_{ji}$  à l’aide des populations à l’ETL

**Subroutine eincoef :** calcul des coefficients d’émission induite  $B_{ji}$  et  $B_{ij}$

**Function dopwidth :** calcul de la largeur Doppler

**Subroutine boltzex :** calcul de la densité de population à l’ETL

**Function planckf :** calcul de la fonction de Planck

**Subroutines ludcmp et lubksb :** résolution du système d’équations *matsys* .  $N = SEC$  en utilisant la décomposition LU (numerical recipes)

### 2.3.5.3 Explications des subroutines du module “mali\_mod” (fichier mali.f90)

Le module **mali\_mod** regroupe les subroutines résolvant de manière auto-cohérente les équations de l’équilibre statistique avec les équation de transfert radiatif hors ETL correspondant à chaque transition traitée, par la méthode MALI et par la méthode des caractéristiques courtes.

**Subroutine cycle\_mali :** niter est le nombre d’itérations du cycle MALI, entré par l’utilisateur. On définit ensuite les conditions aux limites bc0 et bcd. On entre ensuite dans le cycle MALI :

- pour chaque transition, on calcule le coefficient d’absorption renormalisé, on calcule  $\bar{\Lambda}_{ll'}^*$  (on choisit evaldiag=true dans la subroutine rt1d), on calcule  $\bar{J}$  (on choisit evaldiag=false dans la subroutine rt1d), on calcule  $J^{eff}$ . On stocke  $J^{eff}$  et  $\bar{\Lambda}_{ll'}^*$  qui serviront au calcul des populations de niveau
- on résout les équations de l’équilibre statistique “préconditionnées” (subroutine malieqstat)

et on calcule l'erreur

- on termine par l'écriture des populations finales et de S/B (output) pour chaque transition.

**Subroutine malieqstat :** On forme la matrice “*matsys*” de dimension (nlev,nlev) à partir des équations (2.17) de l'équilibre statistique “préconditionnées” de [Rybicki and Hummer \(1991\)](#). Dans le programme H3CRD, les termes de la matrice *matsys* s'écrivent :

$$\star \text{ matsys}(1,1) = A_{12}(1 - \bar{\Lambda}_{12k}^*) + B_{12}\bar{J}_{12k}^{eff} + C_{12} + A_{13}(1 - \bar{\Lambda}_{13k}^*) + B_{13}\bar{J}_{13k}^{eff} + C_{13} \text{ avec } A_{12} = 0 \text{ et } A_{13} = 0$$

$$\star \text{ matsys}(1,2) = -A_{21}(1 - \bar{\Lambda}_{12k}^*) - B_{21}\bar{J}_{12k}^{eff} - C_{21}$$

$$\star \text{ matsys}(1,3) = -A_{31}(1 - \bar{\Lambda}_{13k}^*) - B_{31}\bar{J}_{13k}^{eff} - C_{31}$$

$$\star \text{ matsys}(2,1) = -A_{12}(1 - \bar{\Lambda}_{12k}^*) - B_{12}\bar{J}_{21k}^{eff} - C_{12} \text{ avec } A_{12} = 0$$

$$\star \text{ matsys}(2,2) = A_{21}(1 - \bar{\Lambda}_{21k}^*) + B_{21}\bar{J}_{21k}^{eff} + C_{21} + A_{23}(1 - \bar{\Lambda}_{23k}^*) + B_{23}\bar{J}_{23k}^{eff} + C_{23} \text{ avec } A_{23} = 0$$

$$\star \text{ matsys}(2,3) = -A_{32}(1 - \bar{\Lambda}_{23k}^*) - B_{32}\bar{J}_{23k}^{eff} - C_{32}$$

$$\star \text{ matsys}(3,1) = \text{matsys}(3,2) = \text{matsys}(3,3) = 1 : \text{condition de fermeture. On remplace la dernière équation de (2.3.8) par } n_e = n_1 + n_2 + n_3 \text{ (cas particulier de l'hydrogène car } n_p = n_1 + n_2 + n_3 = n_H \text{ et } n_p = n_e).$$

On obtient donc le système linéaire suivant :

$$\text{matsys} \cdot N = SEC, \quad (2.3.10)$$

$$\text{avec } N = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} \text{ et } SEC = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ n_e \end{pmatrix}$$

On résout le système (2.3.10) à l'aide des sousroutines **ludcmp** et **lubksb** (décomposition en LU). La matrice *matsys* s'écrit aussi :

$$\begin{pmatrix} A_{12}(1 - \bar{\Lambda}_{12k}^*) + B_{12}\bar{J}_{12k}^{eff} + C_{12} + A_{13}(1 - \bar{\Lambda}_{13k}^*) + B_{13}\bar{J}_{13k}^{eff} + C_{13} & -A_{21}(1 - \bar{\Lambda}_{12k}^*) - B_{21}\bar{J}_{12k}^{eff} - C_{21} & -A_{31}(1 - \bar{\Lambda}_{13k}^*) - B_{31}\bar{J}_{13k}^{eff} - C_{31} \\ -A_{12}(1 - \bar{\Lambda}_{12k}^*) - B_{12}\bar{J}_{21k}^{eff} - C_{12} & A_{21}(1 - \bar{\Lambda}_{21k}^*) + B_{21}\bar{J}_{21k}^{eff} + C_{21} + A_{23}(1 - \bar{\Lambda}_{23k}^*) + B_{23}\bar{J}_{23k}^{eff} + C_{23} & -A_{32}(1 - \bar{\Lambda}_{23k}^*) - B_{32}\bar{J}_{23k}^{eff} - C_{32} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

**Subroutine `rt1d` :** La figure 2.5 résume le calcul de  $\bar{J}$ . La subroutine `rt1d` calcule soit la diagonale de l'opérateur  $\Lambda$  (lorsque `evaldiag=true`), soit  $\bar{J}$  (lorsque `evaldiag=false`), en utilisant la méthode des caractéristiques courtes (Leger, 2008; Lambert et al., 2016).

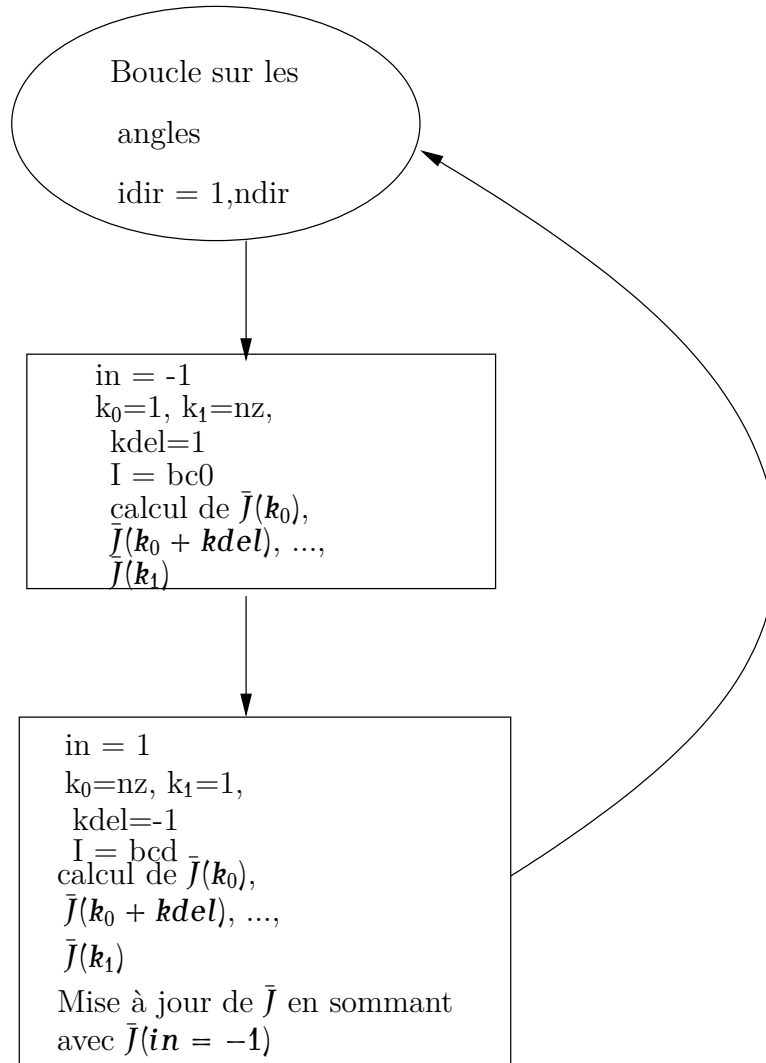


FIGURE 2.5 – Algorithme pour le calcul de  $\bar{J}$ .

### 2.3.6 Exécution du programme H3CRD

- `make clean`
- `make`
- `./h3crd`

Le fichier en sortie est "fort.1" qui contient les résultats  $S/B$  ( $\tau$ ) pour chaque transition.

## Remerciements

Je tiens à remercier le directeur de MEDOC, Eric Buchlin. Je remercie aussi Pierre Gouttebroze pour son aide sur le cas d'un atome à deux niveaux en 1D. Je remercie Jacques Dubau pour la partie physique atomique.

Le 31 octobre 2025  
M. C-Y



## Bibliographie

- L. Auer. Improved Boundary Conditions for the Feautrier Method. *Astrophys. J. Lett.*, 150 : L53, October 1967. doi : 10.1086/180091.
- E. H. Avrett. Resonance lines in Astrophysics. *NCAR*, 1968.
- A. Hui. Rapid computation of the Voigt and complex error functions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 19 :509–516, May 1978. doi : 10.1016/0022-4073(78)90019-5.
- J. Humlicek. Optimized computation of the Voigt and complex probability functions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 27 :437–444, 1982.
- D. G. Hummer. Non-coherent scattering-VI. Solutions of the transfer problem with a frequency-dependent source function. *Monthly Notices of the RAS*, 145 :95, 1969. doi : 10.1093/mnras/145.1.95.
- D. G. Hummer and G. Rybicki. Computational Methods for Non-LTE Line\_transfer Problems. *Methods in Computational Physics*, 7 :53–126, 1967.
- J. T. Jefferies. *Spectral line formation*. Blaisdell, 1968.
- L. C. Johnson. Approximations for Collisional and Radiative Transition Rates in Atomic Hydrogen. *Astrophys. J.*, 174 :227, May 1972. doi : 10.1086/151486.
- J. Lambert, F. Paletou, E. Josselin, and J-M. Glorian. Numerical radiative transfer with state-of-the-art iterative methods made easy. *European Journal of Physics*, 37(1) :015603, January 2016. doi : 10.1088/0143-0807/37/1/015603.
- L. Leger. *Transfert de rayonnement hors-ETL multidimensionnel. Application au spectre de l'hélium dans les protubérances solaires*. PhD thesis, Université de Toulouse III - Paul Sabatier, 2008.
- K.-C. Ng. Hypernetted chain solutions for the classical one-component plasma up to Gamma equals 7000. *Journal of Chemical Physics*, 61 :2680–2689, October 1974. doi : 10.1063/1.1682399.

- G. L. Olson and P. B. Kunasz. Short characteristic solution of the non-LTE transfer problem by operator perturbation. I. The one-dimensional planar slab. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 38 :325–336, 1987. doi : 10.1016/0022-4073(87)90027-6.
- G. L. Olson, L. H. Auer, and J. R. Buchler. A rapidly convergent iterative solution of the non-LTE line radiation transfer problem. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 35 :431–442, June 1986. doi : 10.1016/0022-4073(86)90030-0.
- F. Paletou. A note on improved computations of solar prominences : 2D radiative models. *Astron. Astrophys.*, 311 :708–709, July 1996.
- F. Paletou. Transfert de rayonnement : méthodes itératives. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 2 : 885–898, 2001.
- G. B. Rybicki. Recent Advances in Computational Methods. In L. Crivellari, I. Hubeny, and D. G. Hummer, editors, *NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C*, volume 341 of *NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C*, page 1, 1991.
- G. B. Rybicki and D. G. Hummer. An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I - Non-overlapping lines with background continuum. *Astron. Astrophys.*, 245 :171–181, May 1991.