

MANUEL D'UTILISATEUR

HYDR_NV : Transfert radiatif hors ETL dans les atmosphères stellaires

Martine Chane-Yook

`martine.chane-yook@universite-paris-saclay.fr`

Avec la collaboration de :

Jean-Claude Vial
Pierre Gouttebroze
Jacques Dubau

Accès Web :

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

Table des matières

1	Introduction	2
2	Descriptif du programme HYDR_NV	2
3	Algorithme	3
4	Modélisation d'une atmosphère semi-infinie	5
5	Transitions Bound-Free (lié-libre) et Bound-Bound (lié-lié)	5
6	Modèle atomique de l'hydrogène, de Johnson, [16]	5
7	Equations de populations et de transfert radiatif	5
8	Méthode utilisée pour traiter le transfert radiatif	9
9	Explications des sousroutines	10
9.1	Liste de variables utilisées dans la sousroutine EXEATM	10
9.2	Partie hydrogène (modèle de Johnson, [16])	12
10	Résultats pour l'hydrogène	19
10.1	Atmosphère solaire (VAL3C)	19
10.2	Atmosphère stellaire (Altair)	25
11	Exécution de HYDR_NV	30
12	Temps de calcul	31
13	Remerciements	31
	Bibliographie	32

1 Introduction

HYDR_NV est un code écrit en Fortran 77 par P. Gouttebroze ([12], [10], [13]) décrivant le transfert radiatif hors ETL (1D) pour l'atome d'hydrogène dans les atmosphères stellaires (y compris solaire) et dans les protubérances (pour une version plus moderne des protubérances, il faut se référer au code PROM7 et à sa documentation) avec redistribution partielle des fréquences pour les raies de résonnance de l'hydrogène. Le problème consiste à résoudre un système d'équations comprenant l'équilibre hydrostatique, l'équilibre d'ionisation des éléments les plus abondants, l'équilibre statistique des populations des niveaux, le transfert de rayonnement dans les transitions étudiées. Le code HYDR_NV a été utilisé pour les comparaisons avec les observations.

La principale donnée caractérisant un modèle d'atmosphère stellaire est la variation de température T en fonction de la masse de la colonne de matière m (exprimée en g/cm^2). D'autres paramètres ont également leur importance (vitesse de microturbulence, abondance des principaux éléments, vitesse de rotation de l'étoile, gravité) mais, en première approximation, on les fixe à des valeurs moyennes généralement admises.

Il n'y a pas d'intensité incidente à la limite supérieure du modèle et on suppose à la limite inférieure que l'intensité est égale à la fonction de Planck à la température considérée (ETL).

Le code dans sa version originale, adaptée pour le compilateur **gfortran** est accessible depuis le site MEDOC :

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

Dans la suite, je détaillerai le programme HYDR_NV (HYDRogène, code Non Vectorisé) : compréhension détaillée des codes, équations implémentées, algorithme, méthodes numériques utilisées, etc.

2 Descriptif du programme HYDR_NV

Nature du problème physique : Transfert radiatif (1D) hors ETL pour les atmosphères semi-infinies et protubérances solaires (raies HI)

Méthode de résolution : Méthode de Feautrier + Facteurs d'Eddington variables

Autre information :

- Les modèles d'atmosphères semi-infinies considérés sont définis par une variation de la température T en fonction de la masse de la colonne de matière m , par la vitesse de microturbulence, par la gravité, par l'abondance des principaux éléments, par la vitesse de rotation de l'étoile
- On utilise la redistribution partielle des fréquences (PRD) pour les raies de résonnances de l'hydrogène et la redistribution complète des fréquences (CRD) pour les autres raies

Auteur : P. Gouttebroze

Programmes disponibles à partir de :

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

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 : Adapté en Fortran 90 pour le compilateur **gfortran**

Etat : Stable

Accessibilité : Groupe solaire et extérieur (MEDOC)

Nombre de lignes : ~ 9000

Temps de calcul : < 1 min pour un modèle d'atmosphère stellaire ALTAIR (y compris solaire VAL3C)

Références :

- P. Gouttebroze, P. Lemaire, J.-C. Vial and G. Artzner, "The solar hydrogen Lyman- β and Lyman- α lines : disk center observations from OSO 8 compared with theoretical profiles", APJ, 225 : 655-664, 1978
- P. Gouttebroze, P. Heinzel and J.C. Vial, "The hydrogen spectrum of model prominences", A&A Suppl. Ser. 99, 513-543, 1993

3 Algorithme

La figure 1 représente l'algorithme du programme HYDR_NV.

Il commence par une initialisation des paramètres physiques pour l'hydrogène :

- Equilibre statistique (voir figure 3) : A_{ji} (coefficient A d'Einstein), B_{ij} et B_{ji} (coefficient B d'Einstein), C_{ij} et C_{ji} (coefficients d'excitation et de désexcitation collisionnelles)
- Conditions aux limites
- Températures de rayonnement

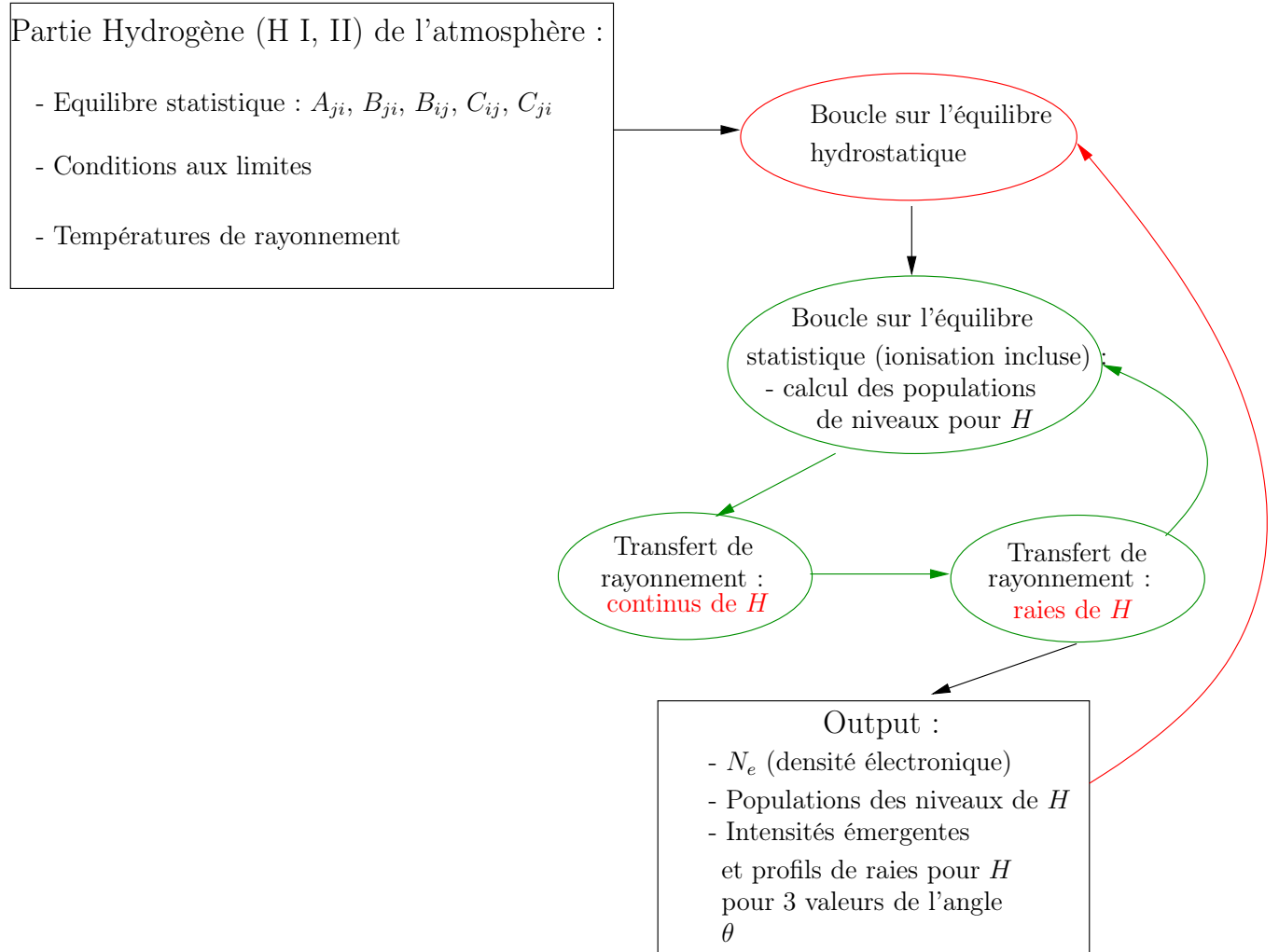


FIGURE 1 – Algorithme du programme HYDR_NV

Le but du code HYDR_NV est de calculer la densité des électrons, les populations des niveaux de l'hydrogène, les intensités émergentes pour plusieurs valeurs de $\mu = \cos \theta$ (ici, 3 valeurs : 0.2, 0.6 et 1) où θ est l'angle que fait le rayon lumineux avec la normale à la surface.

Dans le chapitre suivant, on ne considèrera que le cas des atmosphères semi-infinies. Pour le cas des protubérances, se référer à une version plus moderne PROM7 et à sa documentation.

4 Modélisation d'une atmosphère semi-infinie

L'atmosphère semi-infinie que l'on considère concerne la photosphère et la chromosphère. Les couches (ou mailles) commencent dans la couronne solaire et finissent dans la photosphère. Les couches sont sphériques mais elles sont traitées comme des couches parallèles.

La figure 2 illustre cette modélisation d'atmosphère semi-infinie.

5 Transitions Bound-Free (lié-libre) et Bound-Bound (lié-lié)

Les transitions prises en compte dans HYDR_NV sont les transitions Bound-Free et Bound-Bound, qui sont représentées sur la figure 3. Les Bound-Free sont les transitions qui vont d'un état (lié) i vers le continu et qui produisent un électron libre d'énergie ϵ . 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 .

6 Modèle atomique de l'hydrogène, de Johnson, [16]

Les transitions pour l'hydrogène sont résumées dans la Table 1. NN est le nombre de niveaux d'énergie (y compris le continu), $NTT = NN \times (NN - 1)/2$ le nombre total de transitions, $NTAC$ le nombre de transitions lié-libre et $NTAR = NTT - NTAC$ le nombre de raies. Dans HYDR_NV, $NN = 21$ (20 niveaux et 1 continu).

7 Equations de populations et de transfert radiatif

Considérons le niveau j de la figure 3. On introduit les équations de populations pour ce niveau qui donnent l'équilibre entre les processus de peuplement et de dépeuplement du niveau j à partir des autres niveaux i :

$$N_j \sum_{j \neq i}^n P_{ji} = \sum_{j \neq i}^n N_i P_{ij} \quad (7.1)$$

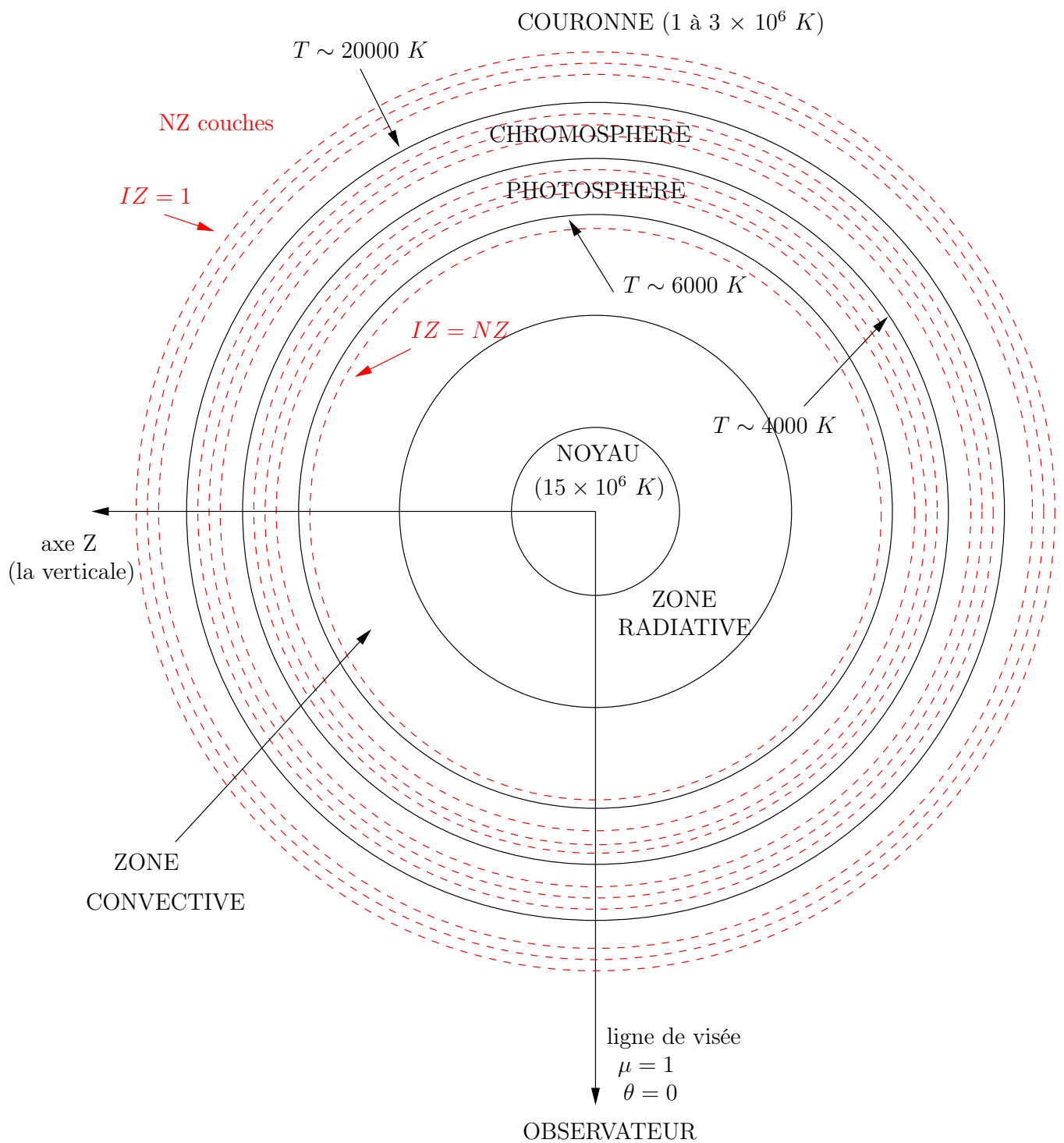


FIGURE 2 – Modélisation d’une atmosphère semi-infinie solaire. La figure n’est pas à l’échelle

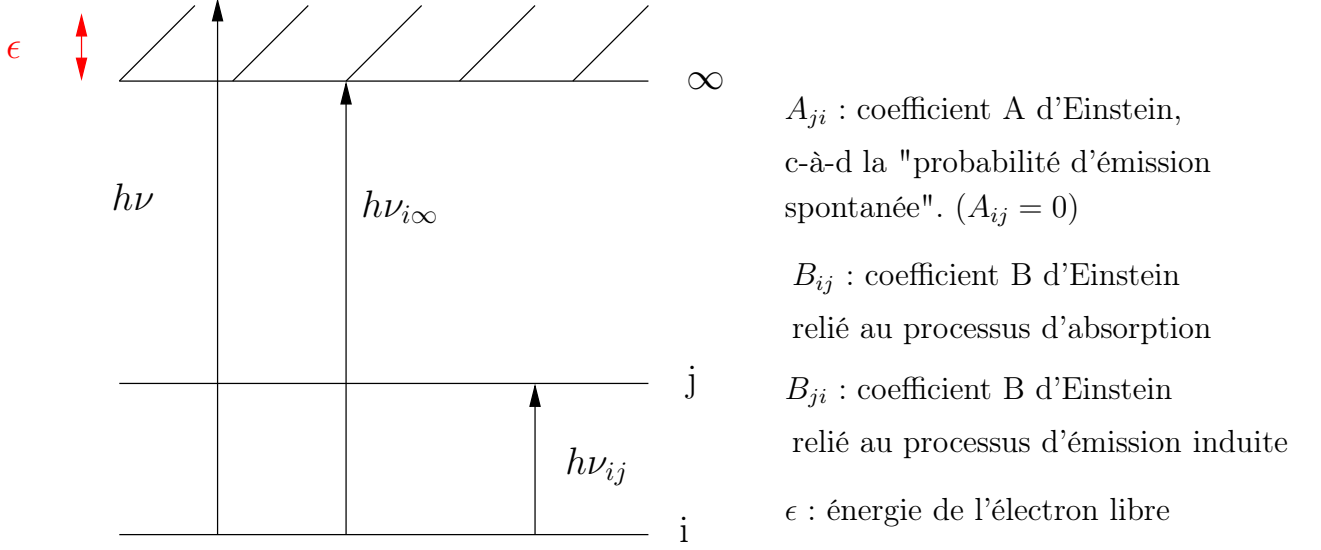


FIGURE 3 – Types de transitions considérées dans HYDR_NV

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

$$P_{ji} = A_{ji} + B_{ji}\bar{J}_{ij} + C_{ji} = R_{ji} + C_{ji} \quad (7.2)$$

où C_{ji} est le taux de désexcitation par collisions et est proportionnel à la densité électronique. R_{ji} est la probabilité de désexcitation par rayonnement. A_{ji} et B_{ji} sont les coefficients d'Einstein (voir figure 3).

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

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

R_{ij} étant la probabilité d'excitation par rayonnement et C_{ij} le taux d'excitation par collisions. Ici, $A_{ij} = 0$.

L'expression de \bar{J}_{ij} est donnée par :

$$\bar{J}_{ij} = \int_{-\infty}^{+\infty} J_{\nu} \Phi_{\nu} d\nu \quad (7.3)$$

où J_{ν} est l'intensité moyennée sur la direction $\mu = \cos \theta$, θ étant l'angle que fait le rayon lumineux avec la normale à la surface :

$$J_{\nu} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_{\nu}(\mu) d\mu \quad (7.4)$$

et Φ_{ν} le profil normalisé du coefficient d'absorption $\left(\int \Phi_{\nu} d\nu = 1 \right)$.

Le terme de gauche dans les équations de populations (7.1) représente tous les processus

Transition	Niveau inférieur	Niveau supérieur	Nom des transitions	Longueur d'onde $\lambda(\text{\AA})$
1	1	2	$Ly - \alpha$	1215
2	1	3	$Ly - \beta$	1025
3	2	3	$H - \alpha$	6564
4	1	4	$Ly - \gamma$	972
5	2	4	$H - \beta$	4862
6	3	4	$Pa - \alpha$	18756
7	1	5	$Ly - \delta$	949
8	2	5	$H - \gamma$	4341
9	3	5	$Pa - \beta$	12821
10	4	5	$Br - \alpha$	6563
11	1	6	$Ly - \epsilon$	973
12	2	6	$H - \delta$	4102
13	3	6	$Pa - \gamma$	10935
14	4	6	$Br - \beta$	4861
15	5	6	$Pf - \alpha$	7460
16	1	7	$Ly - 6$	931
17	2	7	$H - \epsilon$	3971
...
$NTAR + 1$	1	NN	Lyman Continu	911
$NTAR + 2$	2	NN	Balmer continu	3645
...
$NTT =$	$NN - 1$	NN		

TABLE 1 – Principales transitions pour l'hydrogène

qui vont dépeupler le niveau j et le terme de droite 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 : hydrogène) :

$$\sum_{j=1}^n N_j = N_T \quad (7.5)$$

où N_T est la population totale de l'élément.

Ces équations de populations (7.1) qui contiennent les intensités moyennes par l'intermédiaire de \bar{J}_{ij} (c-à-d intégrées sur le profil de la raie centrée en ν_0) sont couplées avec l'équation de transfert radiatif (7.6).

L'intensité dans la transition considérée s'obtient en résolvant l'équation de transfert :

$$\mu \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu \quad (7.6)$$

τ_ν est la profondeur optique à la fréquence ν , et S_ν est la fonction source totale définie par :

$$S_\nu = \frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu},$$

où κ_ν est le coefficient d'absorption et ϵ_ν le coefficient d'émission.

On obtient à la fin un système d'équations matricielles que l'on résout numériquement par la méthode de Feautrier ([14]). Pour plus de détails, voir les chapitres les deux chapitres suivants.

8 Méthode utilisée pour traiter le transfert radiatif

On commence par une initialisation : populations des niveaux, champ de rayonnement, densité électronique, paramètres atomiques (coefficients A et B d'Einstein, coefficients de taux de collision), lecture du modèle, intensités incidentes, conditions aux limites. Ensuite, on entre dans les processus itératifs :

- La première boucle externe (*ITG*) concerne le calcul de l'équilibre statistique, le calcul des fonctions de redistribution pour les raies, le calcul des facteurs d'Eddington variables, sous l'hypothèse d'un milieu optiquement mince (c-à-d qu'il n'y a pas de transfert radiatif).
- La seconde boucle interne concerne le transfert radiatif pour les transitions continues et les transitions discrètes. Elle se termine par un test de convergence. Puis on recalcule les nouveaux paramètres radiatifs (P_{ji}) ainsi que les températures de rayonnement pour les continus.

L'équilibre hydrostatique est une relation entre la pression et la gravité. La masse de matière contenue dans chaque couche du modèle étant fixée a priori, ainsi que la température, l'épaisseur de cette couche s'ajuste de façon à obtenir un équilibre entre les forces de pression (internes) et le poids des couches.

L'équilibre statistique (7.1, 7.5) consiste en la résolution d'un système linéaire (par les méthodes d'élimination) dont les termes sont obtenus à partir des coefficients de peuplement et de dépeuplement P_{ji} (7.2). Les inconnues sont les populations des niveaux.

Le transfert radiatif (7.6) consiste à calculer les intensités dans les raies ou les continus à partir de la connaissance de la fonction source et des intensités aux limites. On utilise la méthode dite de Feautrier ([14], [22]), méthode de résolution d'un système linéaire aboutissant à une matrice tridiagonale, dont chaque élément est une matrice carrée (direction-fréquence). Cependant, pour diminuer la taille des matrices, on réalise une intégration sur la direction à l'aide des facteurs d'Eddington variables (technique proposée par L.H. Auer et D. Mihalas, [3]). La méthode de Feautrier originale aurait produit des matrices carrées d'ordre 60, alors qu'ici on obtient des matrices d'ordre 20, ce qui réduit considérablement le temps de calcul. A la sortie, on obtient les intensités J_ν (7.4) moyennées sur toutes les directions à partir desquelles on peut recalculer de nouvelles fonctions sources et de nouveaux taux de transition. Les fonctions sources seront utilisées ultérieurement pour calculer les intensités émergentes

et les profils de raies.

Pour les raies, on utilise deux processus de redistribution en fréquence. La redistribution partielle ne concerne que les photons absorbés et réémis dans la même raie. La redistribution complète consiste à supposer qu'il n'y a aucune relation entre la fréquence du photon absorbé et la fréquence du photon réémis. C'est le cas général qu'on utilise pour les raies de Paschen, Balmer et les raies de Lyman formées à partir de niveaux élevés. Pour l'hydrogène, la redistribution partielle ne concerne que les raies $Ly\ \alpha$ et $Ly\ \beta$.

Tandis que pour les continus, il n'y a pas de problème de redistribution en fréquence.

Les sous-routines appelées dans HYDR_NV vont être détaillées dans le chapitre suivant.

9 Explications des sous-routines

Le programme HYDR_NV commence par l'appel de la sous-routine INIT (options du code, voir le paragraphe 9.1), de la sous-routine INIMET (abondance des métaux, relative à l'hydrogène) et de la sous-routine principale EXEATM (calculs dans le cas d'une atmosphère stellaire, y compris solaire). Le paragraphe 9.2 explique ce que fait chaque sous-routine.

Le code HYDR_NV prend en entrée le fichier fort.3 qui contient un modèle d'atmosphère solaire ou stellaire. La première ligne de fort.3 comprend 4 valeurs : ILG (donne l'accélération de la pesanteur en valeur réelle si ILG=0 ou en valeur logarithmique si ILG=1), GGG (valeur de l'accélération de la pesanteur en cm.s^{-1}), ILM (donne la masse-colonne en valeurs réelles si ILM=0 ou en valeurs logarithmiques si ILM=1), VISINI (la vitesse de rotation de l'étoile). Les 4 colonnes suivantes représentent la masse-colonne, la température, la vitesse de micro-turbulence et l'index spécifiant l'altitude de référence (index=1 signifie qu'il y a une altitude de référence, index=0 signifie qu'il n'y en a pas et index=-1 signifie que c'est la fin du fichier).

Les fichiers de sortie sont :

- fort.21 : intensité émergentes pour 3 valeurs de $\mu = \cos \theta$ pour chaque transition
- fort.22 : intensités $L\ \alpha$ en fonction de la fréquence et pour chaque direction $\mu = \cos \theta$
- fort.24 : paramètres atmosphériques, densité d'hydrogène, densité électronique, températures de rayonnement, populations des niveaux de H
- fort.28 : intensités moyennes (pour déterminer les taux de photoionisation de divers éléments)
- fort.8 : résumé des itérations en temps CPU

9.1 Liste de variables utilisées dans la sous-routine EXEATM

- IVERT = -1 : cas atmosphère stellaire y compris solaire, IVERT = 0 : cas protubérance (couche verticale)
- NZ : nombre total de mailles

- NFR : nombre de fréquences dans chaque raie
- NMU : nombre de directions $\mu = \cos \theta$, où θ est l'angle que fait le rayon lumineux avec la normale à la surface
- NPSOR : nombre de points pour la visualisation (profils de raies)
- NFRC : nombre de fréquences dans chaque continu
- NTAB : taille du tableau de températures TAB (pour le calcul des coefficients de taux de collision)
- NINF : niveau inférieur de la transition considérée
- NSUP : niveau supérieur de la transition considérée
- ITP : définit une transition permise ou non
- IOPRN = 1 : redistribution complète (CRD), IOPRN = 0 : redistribution partielle (PRD), IOPRN = 4 : PRD avec coefficient de cohérence dépendant de la fréquence (cas particulier pour $Ly \alpha$)
- IOPERA = 1 : on sort les profils de raies, IOPERA = 0 : on ne sort pas les profils de raies. IOPERA est lié à DL2
- DL1 : représentation graphique (abscisse des profils de raies) pour les premières longueurs d'onde
- DL2 : représentation graphique (abscisse des profils de raies) pour les dernières longueurs d'onde
- IOPMRU = 1 : on calcule une seule matrice de redistribution, IOPMRU = 0 : on calcule toutes les matrices de redistribution
- EPS et BEN : coefficients de couplage pour les raies
- CSI0 et ETA0 : paramètres qui sont pour les continus les équivalents de EPS et EPSxBEN pour les raies
- GIBAR : intensité moyenne pondérée par le profil d'absorption
- IOPECO : équivalent pour les continus de IOPERA (pour les raies)
- IOPFEV : option pour calculer les facteurs d'Eddington
- IPROF = 1 : on imprime les profondeurs optiques, sinon IPROF = 0
- IOPMIC = 1 : on tient compte de la pression microturbulente, sinon IOPMIC = 0
- INIDLD : option pour initialiser automatiquement les largeurs Doppler à partir d'une température de référence TEREf (pour la représentation graphique)
- IOPCAC = 0 : pas d'absorption continue, IOPCAC = 3 : absorption continue incluse dans les calculs
- IOPEAC : écriture de l'absorption continue
- IOPATM : écriture des paramètres atmosphériques
- IOPTTC : écriture des taux de transitions continues
- PMU : valeurs de μ ($\mu = 1$ correspond au tracé continu sur les profils de raies, $\mu = 0.6$ correspond au tracé en tiret, et $\mu = 0.2$ correspond au tracé en pointillé)
- IVTR : indice pour la visualisation dans le transfert radiatif
- HNH : densité de l'hydrogène (nombre d'atomes par unité de volume)
- HNE : densité des électrons
- XM : masse-colonne

- ETOT : énergie totale émise par la structure dans une raie donnée
- RDMAT : matrices de redistribution
- AJI : coefficient A d'Einstein pour l'émission spontanée
- BJI, BIJ : coefficients B d'Einstein pour l'émission induite et l'absorption
- CIJ, CJI : taux d'excitation/désexcitation par collisions
- CAC : coefficient d'absorption continue
- TR : température de rayonnement pour une transition lié-libre
- FADI : facteur de dilution pour les raies et continus
- FEVK et FEVL, FKTC et FLTC : facteurs d'Eddington variables (resp. raies et continus)
- HIEMC : intensité émise dans le continu (pour la sortie)
- RIK, RKI : taux de transitions radiatifs
- FIIR, FISR : flux incident inférieur et supérieur dans la raie
- FRR : fréquence dans la raie
- IOPTR (pour les continus) = 0 : on fixe la température de rayonnement égale à la température électronique locale, IOPTR = 1 : jonction dans la chromosphère, IOPTR = 2 : jonction dans la photosphère
- TROM (pour les continus) : température de rayonnement correspondant à la partie optiquement mince de l'atmosphère
- XFR et XFRC : modèles de découpage en fréquence pour les raies et les continus
- NTR et NTC : numérotation des transitions discrètes et continues
- ICTR et ICTC : indices de contrôle pour les raies et les continus
- FRN : fréquence des niveaux
- BRN et BRP : Bilan radiatif net avant et après les calculs (pour la convergence)
- SC : fonctions source pour le continu
- STR : fonction source totale (raie + continu)
- CARR : coefficient d'absorption dans la raie
- COHER : coefficient de cohérence
- OIS : coefficient de taux d'ionisation collisionnelle

9.2 Partie hydrogène (modèle de Johnson, [16])

La partie hydrogène (subroutine EXEATM) se décompose d'après le schéma suivant :

- INIATM3 : lecture des paramètres du modèle d'atmosphère (fichier input "fort.3")
- INIFEV : initialisation des facteurs d'Eddington (raies + continus)
- JEUXDO : données atomiques pour l'hydrogène
- COLIM3 : conditions aux limites CL (raies et continus)
- INITR3 : initialisation des températures de rayonnement TR (correspondant au rayonnement d'un corps noir) à l'intérieur de la couche pour H
- PENDULE : mesure du temps CPU
- Boucle sur l'équilibre hydrostatique :
 $do ITG = 1, ITGMAX :$

- HYESEH : équilibre hydrostatique + équilibre d'ionisation
- ABSCON (si $IOPCAC = 3$) : calcul de l'absorption continue due aux différents éléments (définis dans la subroutine INIMET)
- *do IT = 1, NTAR* : boucle sur les transitions discrètes
 RPCDEF : calcul des matrices de redistribution partielles et complètes
 enddo
- Si $IOPFEV \geq 3$, on imprime les facteurs d'Eddington pour les raies et les continus via la subroutine ECRFEV
- *do itac = 1, NTAC* : boucle sur les continus
 ECRFEV
 enddo
 endif(pour IOPFEV \geq 3)
- ESTR6 : résolution des équations de l'équilibre statistique pour les populations des niveaux excités de l'hydrogène : HN
- NOVTER : mise à jour des températures de rayonnement TR
- PENDULE
 enddo (pour ITG)
- Si $IOPFEV \geq 2$:
 - *do IT = 1, NTAR* : boucle sur les transitions discrètes
 ECRFEV
 enddo
 - *do itac = 1, NTAC* : boucle sur les continus
 ECRFEV
 enddo
 endif(pour IOPFEV \geq 2)
- TESTH6 : test (on recalcule encore une fois toutes les quantités)
- IMTOCS (si $IOPTOC = 1$) : écriture des profondeurs optiques continues en fonction de l'altitude pour diverses longueurs d'onde
- CSHYDR : calcul du spectre de l'hydrogène (UV, $H\alpha$, $L\alpha$)
- CATFIC (si $ICATA = 1$) : écriture (output : fort.24) des paramètres atmosphériques, de la densité d'hydrogène, de la densité électronique, des températures de rayonnement, des populations des niveaux de H
- CATF27 (si $ICATA = -1$) : variante de CATFIC adaptée aux problèmes d'hydrodynamique, écriture des paramètres dans le fichier fort.27
- IMPIMO (si $ICATA = 2$) : calcul des intensités moyennes (pour déterminer les taux de photoionisation de divers éléments) et écriture dans le fichier fort.28

On va maintenant décrire les sousroutines appelées ci-dessus.

INIT

Définition des options du code pour les calculs (voir paragraphe 9.1 pour la liste des options).

INIMET

Cette subroutine calcule le poids total des éléments C_1 et l'abondance totale C_2 relative à l'hydrogène des $NEL = 20$ éléments suivants : He, C, N, O, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Ar, K, Ca, Cr, Mn, Fe, CO, Ni, H.

Outputs : C_1 et C_2

INIATM3

Lecture des paramètres du fichier input "fort.3". Après lecture des données (masse-colonne m , température T et vitesse de microturbulence V_T), on détermine NZ le nombre de couches à considérer, T_e la température électronique, V_T la vitesse de microturbulence en fonction de T_e .

INIFEV

Initialisation des facteurs d'Eddington pour les raies ($FEVK$ et $FEVL$) et les continus ($FKTC$ et $FLTC$) à chaque fréquence et pour chaque maille.

Inputs : NZ (nombre de mailles), $NTAR$ (nombre de raies), $NTAC$ (nombre de continus), NFR (nombre de fréquences dans une raie), $NFRC$ (nombre de fréquences dans un continu)

Outputs : $FEVK$, $FEVL$, $FKTC$ et $FLTC$

JEUXDO

Calcul des paramètres atomiques pour l'équilibre statistique pour l'hydrogène : coefficients A et B d'Einstein pour les photons (AJI , BIJ , BJI qui sont indépendants de la température des électrons), coefficients de taux d'excitation collisionnelle et coefficients de taux d'ionisation collisionnelle (OIS dans HYDR_NV) pour les électrons, appelés S_e et S_i dans les formules ci-dessous. Ces coefficients sont indépendants de la densité électronique.

Le modèle utilisé pour l'hydrogène est le modèle de L.C. Johnson ([16]).

Le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée de l'atome d'hydrogène AJI est donné par la fonction AEMS (dans HYDR_NV) qui est calculée à partir des "facteurs de Gaunt" (Table 1 de [16]).

BJI est obtenu à partir de AJI et BIJ est tel que $\omega_i B_{ij} = \omega_j B_{ji}$, où ω_i est le poids statistique associé au niveau i .

Calcul des coefficients de taux d'excitation collisionnelle (fonction CECH dans HYDR_NV) :

Soient n et n' deux niveaux ($n < n'$). Le coefficient taux d'excitation est donné par la formule suivante (Johnson, [16]) implémentée dans HYDR_NV

$$S_e(n, n') = (8kT/\pi m)^{1/2} \frac{2n^2}{x} \pi a_0^2 y^2 \left(A_{nn'} \left[\left(\frac{1}{y} + \frac{1}{2} \right) E_1(y) - \left(\frac{1}{z} + \frac{1}{2} \right) E_1(z) \right] \right) \\ + (8kT/\pi m)^{1/2} \frac{2n^2}{x} \pi a_0^2 y^2 \left(\left[B_{nn'} - A_{nn'} \ln \frac{2n^2}{x} \right] \left[\frac{1}{y} E_2(y) - \frac{1}{z} E_2(z) \right] \right) \quad (9.1)$$

$E_i(z) = \int_1^\infty e^{-zt} t^{-i} dt$ 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 2 (Table 1 de [16]) :

	$n = 1$	$n = 2$	$n \geq 3$
$g_0(n)$	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 2 – Facteurs de Gaunt

Calcul des coefficients de taux d'ionisation collisionnelle (fonction CICH dans HYDR_NV) :

On considère ici le niveau n . Le coefficient du taux d'ionisation est donné par la formule suivante (Johnson, [16]) implémentée dans HYDR_NV :

$$S_i(n) = (8kT/\pi m)^{1/2} 2n^2 \pi a_0^2 y_n^2 A_n \left[\frac{1}{y_n} E_1(y) - \frac{1}{z_n} E_1(z_n) \right] \\ + (8kT/\pi m)^{1/2} 2n^2 \pi a_0^2 y_n^2 (B_n - A_n \ln 2n^2) [\zeta(y_n) - \zeta(z_n)], \quad (9.2)$$

où m est la masse de l'électron et

$$y_n = I_n/kT, \\ z_n = r_n + I_n/kT,$$

$$\zeta(t) = E_0(t) - 2E_1(t) + E_2(t)$$

avec I_n qui est l'énergie d'ionisation du niveau n de l'hydrogène.

Outputs : AJI , BIJ , BJI , OIS , $DLDREF$ en fréquence et $DNDREF$ en longueur d'onde (largeurs Doppler pour les transitions Bound-Free).

COLIM3

Conditions aux limites (CL) pour une atmosphère semi-infinie concernant les transitions Bound-Free (continus) et Bound-Bound (raies).

Pour les raies : la CL inférieure $FIIR$ est égale à la fonction de Planck. La CL supérieure $FISR$ est nulle.

Pour les continus : la CL inférieure $FIIC$ est égale à la fonction de Planck. La CL supérieure $FISC$ est nulle.

Outputs : $FIIR$ et $FISR$ (pour les raies), $FIIC$ et $FISC$ (pour les continus).

INITR3

Initialisation de la température de rayonnement (TR) correspondant aux taux de photoionisation dans les transitions Bound-Free (continus) de l'hydrogène à partir des températures de rayonnement incident et du facteur de dilution $FADIC$. On suppose au départ que la structure est optiquement mince.

La section efficace de photoionisation SEP pour l'hydrogène est obtenue à l'aide des facteurs de Gaunt ([8]).

La température de rayonnement va changer au cours des itérations.

Inputs : NZ , NN , NTT , $NTAC$, $NFRC$, NTC , $NINF$, FRN , $XFRC$, $FADI$, RIK , TE

Output : TR

HYESEH

Résolution de l'équilibre statistique et d'ionisation pour des températures et pressions données : on calcule les populations des niveaux de H et la densité électronique.

La subroutine HYESEH fait appel aux subroutines suivantes :

EQHYST : calcul de l'équilibre hydrostatique.

TXCOLL : on calcule les probabilités de transition collisionnelle (CII et CJI). On a besoin de la densité des électrons.

INIRIK : initialisation des probabilités de photoionisation pour l'hydrogène à partir des températures de rayonnement.

EQST : calcul des populations des niveaux conformément à l'équilibre statistique. On obtient à la fin un système linéaire à résoudre. Output : HN pour chaque niveau et chaque maille.

SAHARA : calcul de la densité électronique HNE et de la densité des autres éléments $HNION$. La loi de Saha à l'ETL donne le degré d'ionisation de chaque ion. On utilise ici HNH (et non HN).

Inputs pour HYESEH : $NZ, NN, NTT, NTAR, NTAC, NFRC, C1, C2, ITP, NINF, NSUP, NTC, FRN, POM, XFRC, Z, XM, TE, VT, HNH, HNE, HN, NTAB, TAB$

Outputs pour HYESEH : $CII, CJI, RIK, RKI, HNE, HNION$

ABSCON

Cette subroutine est appelée lorsque $IOPCAC = 3$ (elle n'entre pas dans le transfert radiatif). Elle calcule l'absorption continue au voisinage des raies étudiées et fait appel à la subroutine PROFSC.

PROFSC : calcule la profondeur optique additionnelle $TAUC$ (due aux processus d'absorption continue), la fonction source continue FSC , le taux de diffusion pure $CSCAT$ pour une fréquence donnée ainsi que le coefficient d'absorption continu $CABCO$.

Pour calculer $CABCO$, on a besoin de l'absorption continue (ETL) par les ions négatifs de H, l'aluminium, l'hydrogène (la section efficace de photoionisation $SEPION$ est calculée à partir des facteurs de Gaunt ([8])), le carbone, le magnésium, le silicium et le fer.

Input : $IVISU$

Outputs pour ABSCON : $TAUC, FSC, CSCAT, CABCO$

RPCDEF (pour les raies de résonance)

Redistribution partielle pour l'hydrogène. On calcule aussi les constantes d'élargissement des raies (naturel et collisionnel).

RPCDEF fait appel aux subroutines suivantes :

ELCOH : calcul de l'élargissement collisionnel $DFRCO$ pour les raies de l'hydrogène

COHEVA : calcul du coefficient de cohérence pour différentes fréquences de la raie $Ly\ \alpha$ de l'hydrogène

MARALA : calcul de la matrice de redistribution pour la raie $Ly\ \alpha$ de l'hydrogène

MAREDI : calcul de la matrice de redistribution pour les raies autres que $Ly\ \alpha$, version générale (cas des raies avec un coefficient de cohérence indépendant de la fréquence)

Inputs pour RPCDEH : *ITAR*, *IVISU*

Output pour RPCDEF : *RDMAT* (matrice de redistribution)

ECRFEV

Ecriture des facteurs d'Eddington variables *FEVK*

ESTR6

Calcul des populations des niveaux de l'hydrogène (subroutine EQST) et transfert radiatif (subroutines NLTEBF (calcul hors ETL des champs de rayonnement et des probabilités de transitions radiatives pour les continus de l'hydrogène), RPRAIE (transfert radiatif pour les raies), RAOPMI (transfert radiatif pour les raies optiquement minces)) et calcul des taux de transition radiatif pour les continus (subroutine NOVRIK) et pour les raies (subroutine NOVBRN)

Input : Liste de “common” (variables communes)

Output pour ESTR6 : *RIK* (taux de transition radiatif pour les continus), *BRN* (bilan radiatif net), *HN* (populations des niveaux de H)

NOVTER

Mise à jour des températures de rayonnement dans les transitions continues pour l'itération (*ITG*) suivante

Input : Liste de “common” (variables communes)

Output pour NOVTER : *TR*

TESTH6

Test global : on recalcule toutes les quantités une dernière fois. On appelle de nouveau les sousroutines suivantes : EXOATM (écriture des paramètres d'atmosphère c-à-d pression, altitude, température électronique, densité de l'hydrogène, etc), ABSCON (calcul de l'absorption continue due aux différents éléments), ECRITAU (écriture des taux de transitions collisionnelles et des bilans radiatifs nets), EQST (calcul des populations des niveaux de l'hydrogène), ECRIPOP (écriture des populations de niveaux de H), RPCDEF (Redistribution

partielle pour l’hydrogène dans les raies de résonance), RPRAIE (transfert radiatif pour les raies), EXOTDE (écriture de la profondeur optique, de la largeur doppler, etc), PROEM1 (calcul du profil émergent en incidence normale), PROEM2 (calcul du profil émergent pour plusieurs incidences avec écriture dans le fichier “fort.21”), NLTEBF (calcul hors ETL des champs de rayonnement et des probabilités de transitions radiatives pour les continus de l’hydrogène), EXOTCO (écriture des intensités émergentes pour différentes directions), EX-PROB (écriture des probabilités de transition pour les raies et continus), COMPAR (test de comparaison entre *EMIN*, *EMAX*, *EQM*, *EQMR*), COMPAC (comparaison entre *EMIN* et *EMAX*).

IMTOCS

Imprime à l’écran les profondeurs optiques continues en fonction de l’altitude pour diverses longueurs d’onde.

CATFIC

Ecriture dans le fichier de sortie “fort.24” des paramètres atmosphériques, de la densité des électrons, des populations de niveaux, de la température de rayonnement, de la densité d’hydrogène.

Résultats pour l’hydrogène

10.1 Atmosphère solaire (VAL3C)

On prend ici comme exemple d’atmosphère le modèle VAL3C ([24]).

Les demi-profils sont donnés pour trois valeurs de $\mu = \cos \theta$. L’intensité émergente I_ν est en unité $\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1} \text{ Hz}^{-1}$.

La courbe pour $\mu = 1$ est représentée par un trait continu. La courbe pour $\mu = 0.6$ est représentée par des tirets et la courbe pour $\mu = 0.2$ par des pointillés.

Les courbes (demi-profils de raies) pour l’hydrogène se trouvent dans le répertoire **results** du package HYDR_NV.tgz à télécharger sur le site MEDOC.

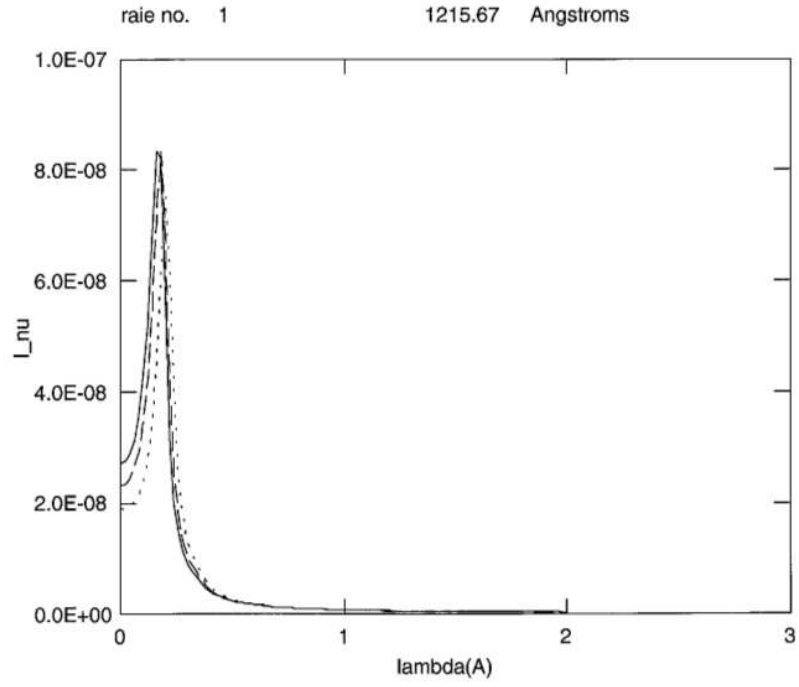


FIGURE 4 – Demi-profil de la raie $L\alpha$ à 1215Å de l'hydrogène

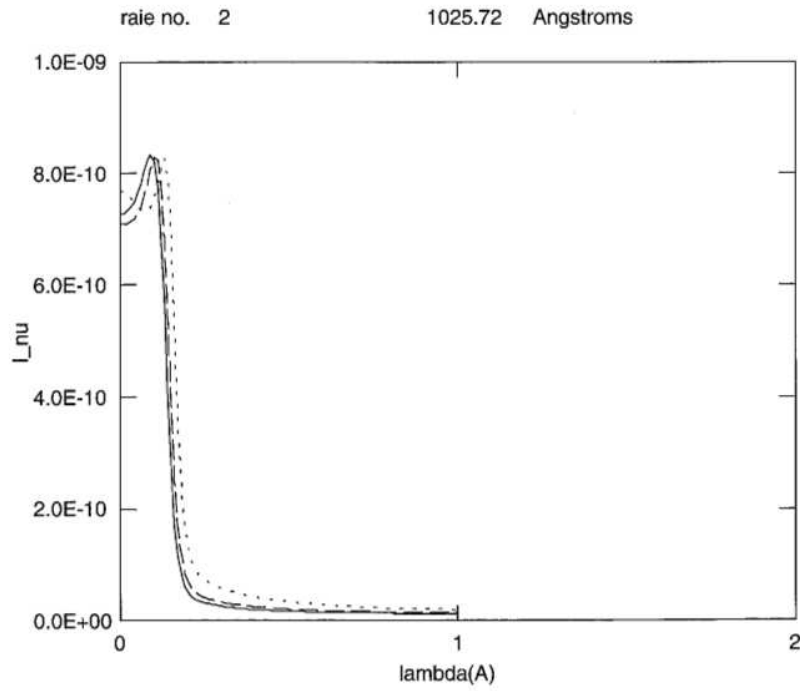


FIGURE 5 – Demi-profil de la raie $L\beta$ à 1025Å de l'hydrogène

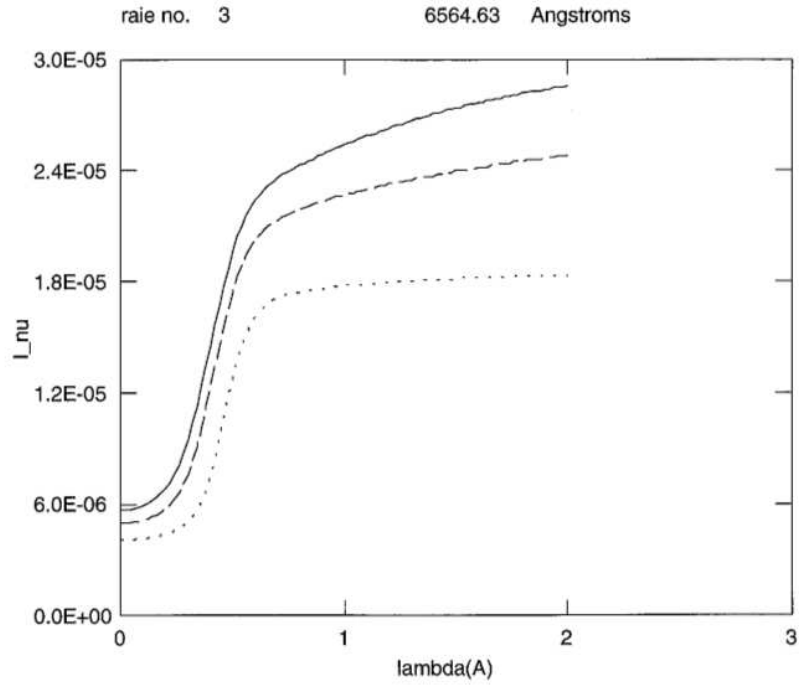


FIGURE 6 – Demi-profil de la raie $H\alpha$ à 6564\AA de l'hydrogène

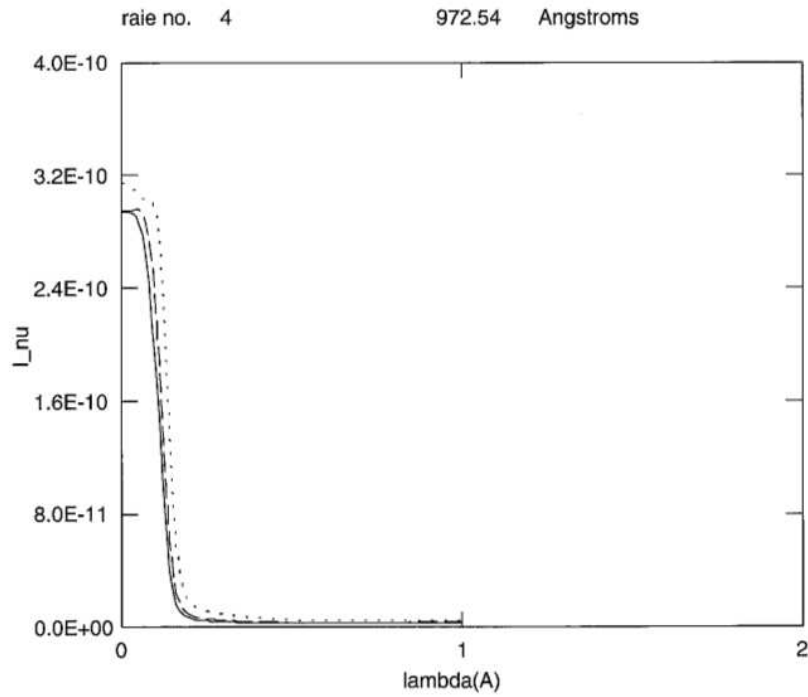


FIGURE 7 – Demi-profil de la raie $L\gamma$ à 972\AA de l'hydrogène

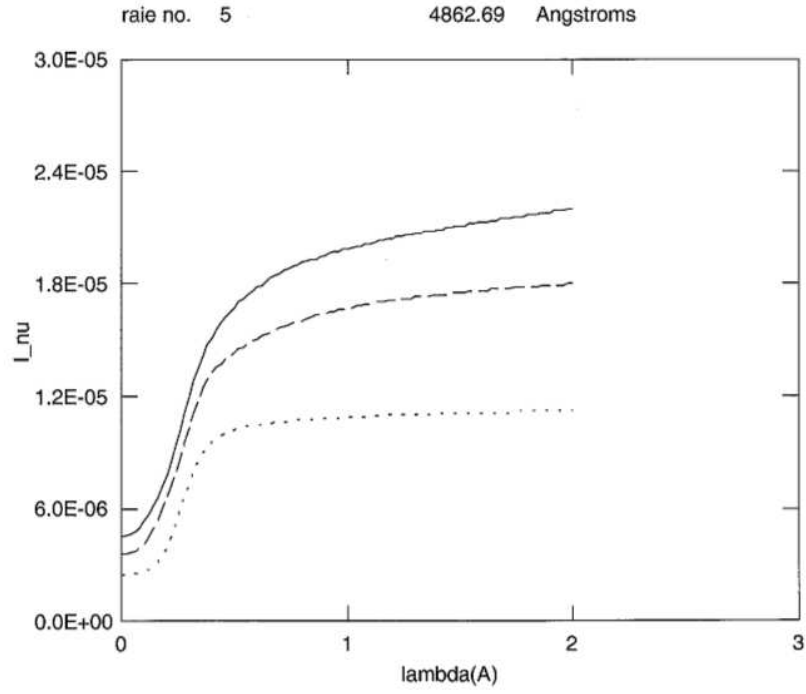


FIGURE 8 – Demi-profil de la raie $H\beta$ à 4862Å de l'hydrogène

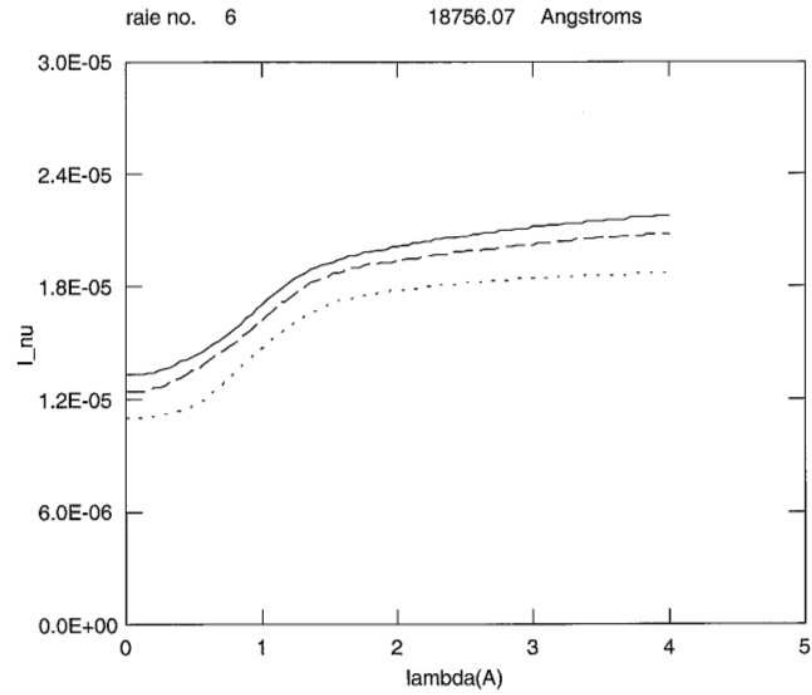


FIGURE 9 – Demi-profil de la raie $Pa - \alpha$ à 18756Å de l'hydrogène

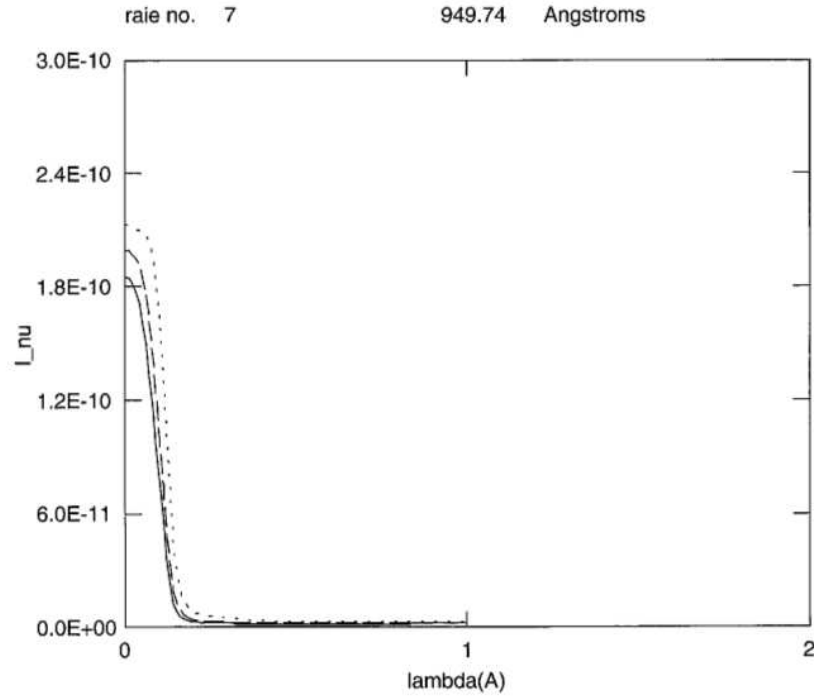


FIGURE 10 – Demi-profil de la raie $L\delta$ à 949Å de l'hydrogène

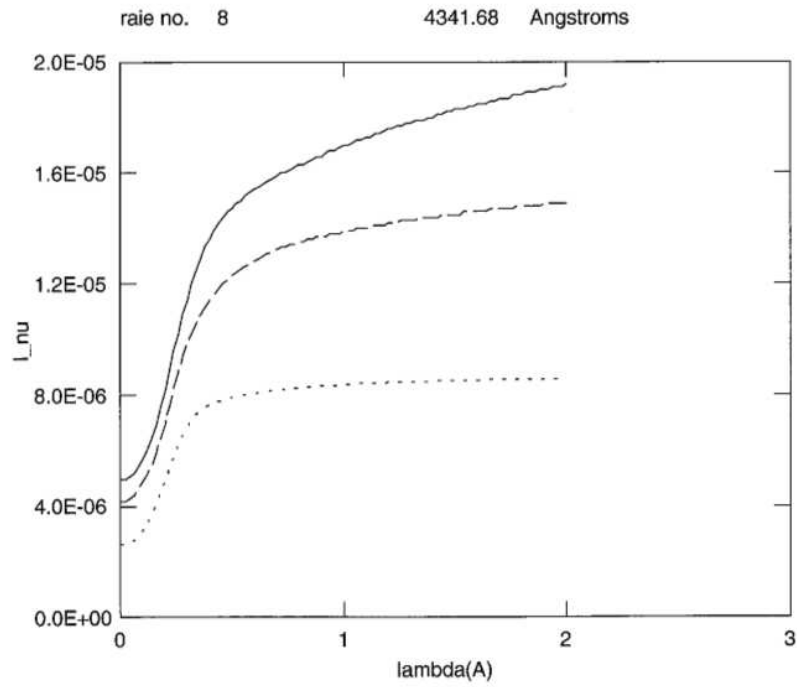


FIGURE 11 – Demi-profil de la raie $H\gamma$ à 4341Å de l'hydrogène

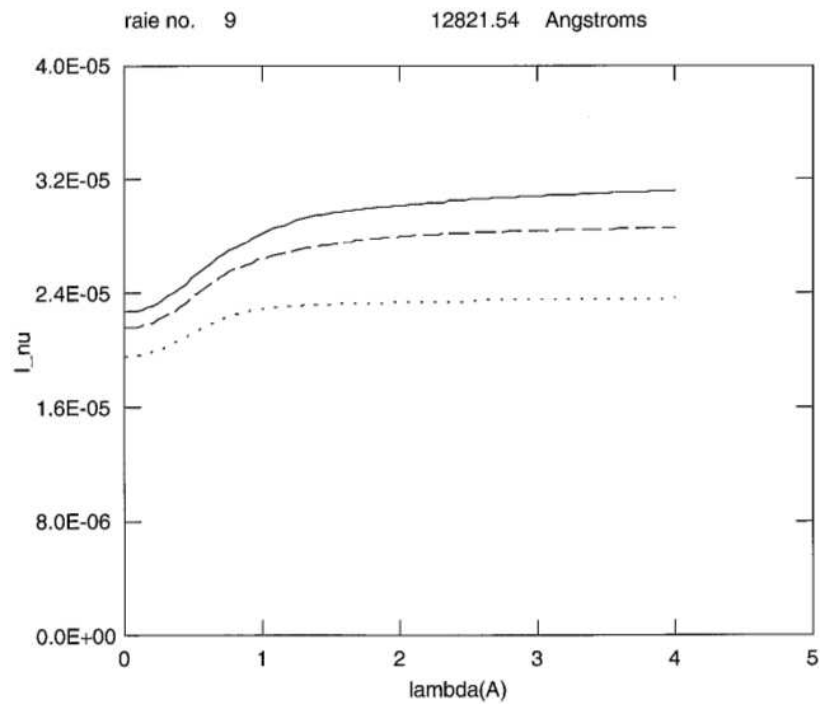


FIGURE 12 – Demi-profil de la raie $Pa - \beta$ à 12821Å de l'hydrogène

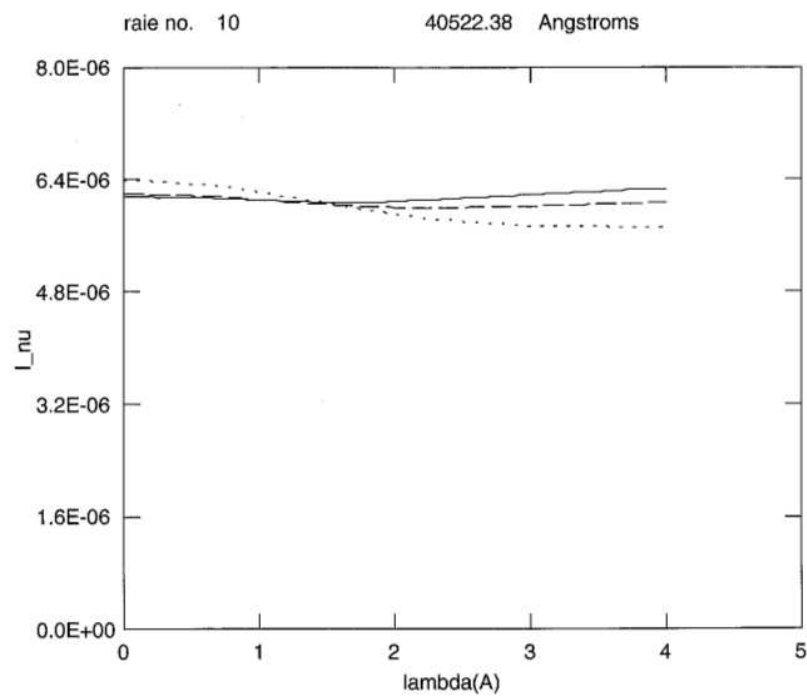


FIGURE 13 – Demi-profil de la raie $Br - \alpha$ à 40522Å de l'hydrogène

10.2 Atmosphère stellaire (Altair)

On prend ici comme exemple d'atmosphère celle d'ALTAIR.

Les demi-profil sont donnés pour trois valeurs de $\mu = \cos \theta$. L'intensité émergente I_ν est en unité $\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1} \text{ Hz}^{-1}$.

La courbe pour $\mu = 1$ est représentée par un trait continu. La courbe pour $\mu = 0.6$ est représentée par des tirets et la courbe pour $\mu = 0.2$ par des pointillés.

Les courbes (demi-profil de raies) pour l'hydrogène se trouvent dans le répertoire **results** du package HYDR_NV.tgz à télécharger sur le site MEDOC.

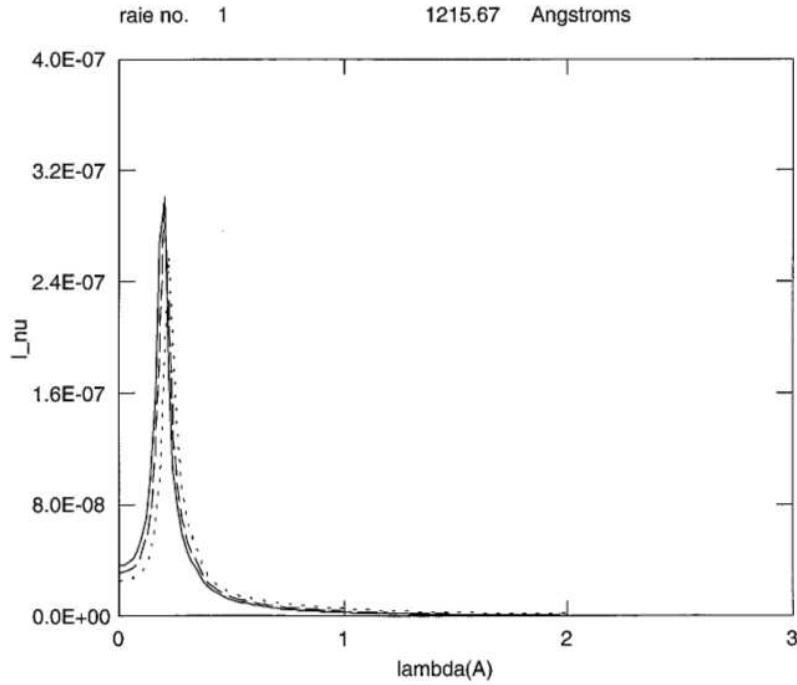


FIGURE 14 – Demi-profil de la raie $L\alpha$ à 1215Å de l'hydrogène

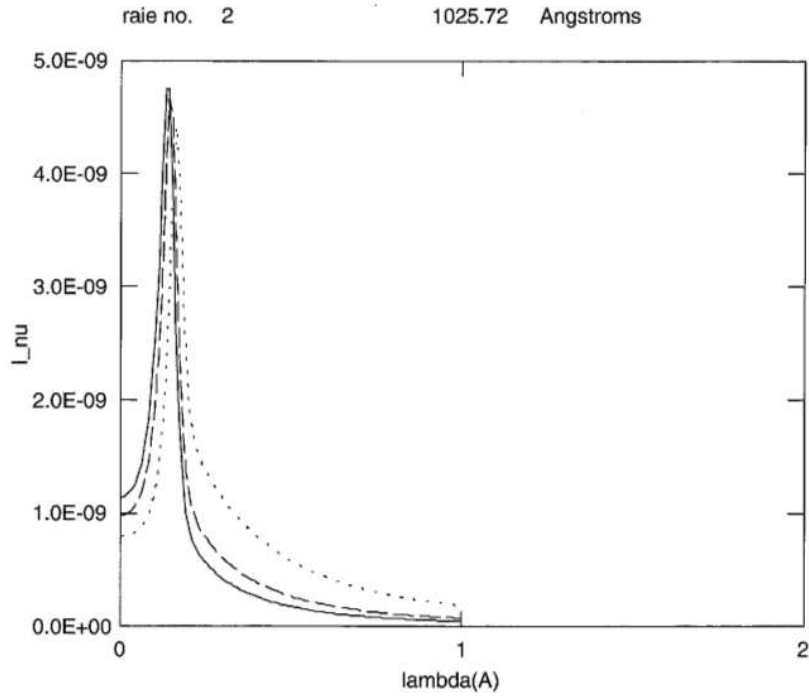


FIGURE 15 – Demi-profil de la raie $L\beta$ à 1025Å de l'hydrogène

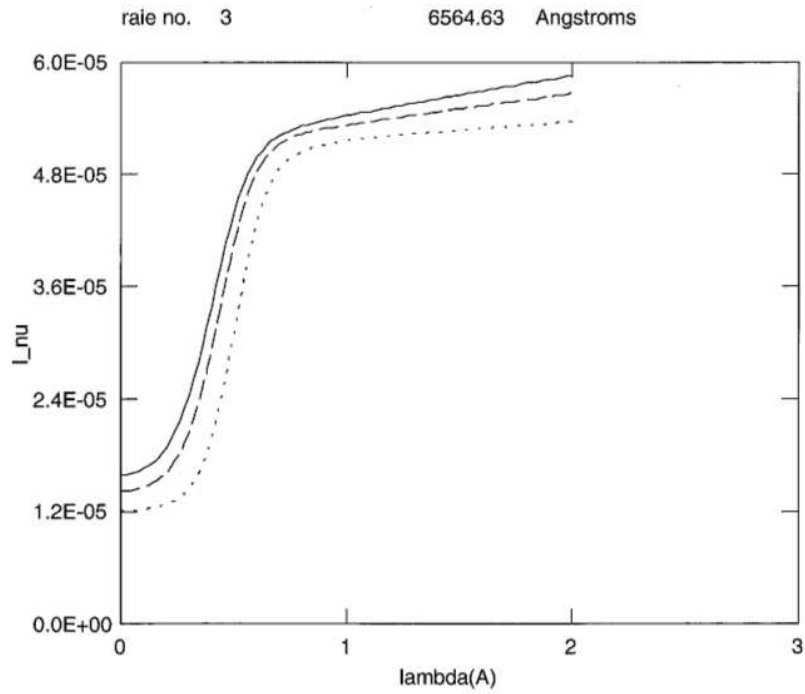


FIGURE 16 – Demi-profil de la raie $H\alpha$ à 6564Å de l'hydrogène

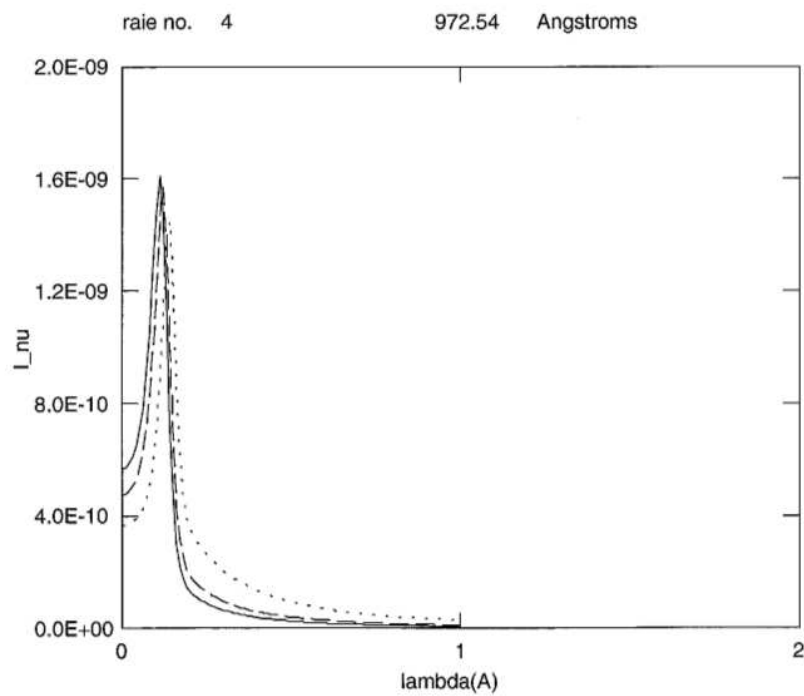


FIGURE 17 – Demi-profil de la raie $L\gamma$ à 972\AA de l'hydrogène

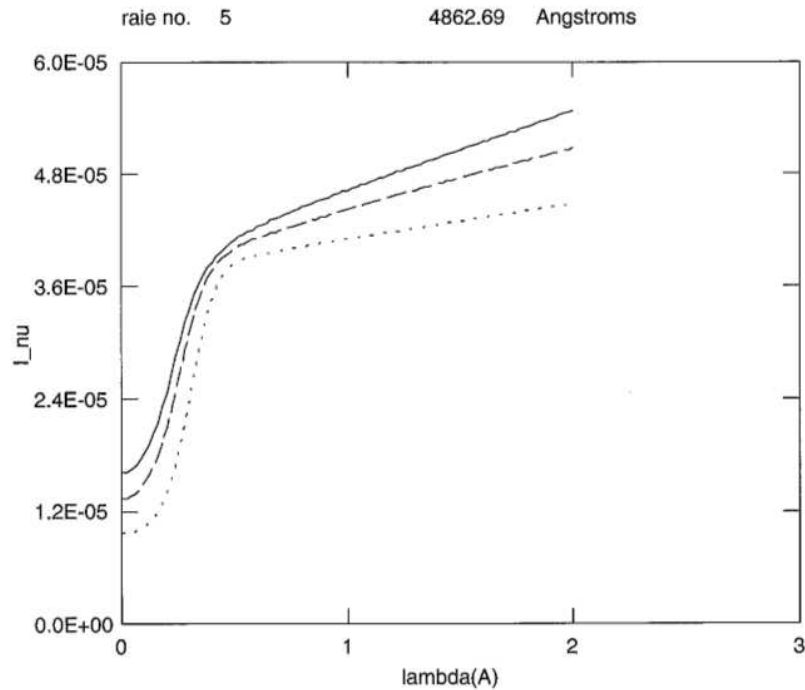


FIGURE 18 – Demi-profil de la raie $H\beta$ à 4862\AA de l'hydrogène

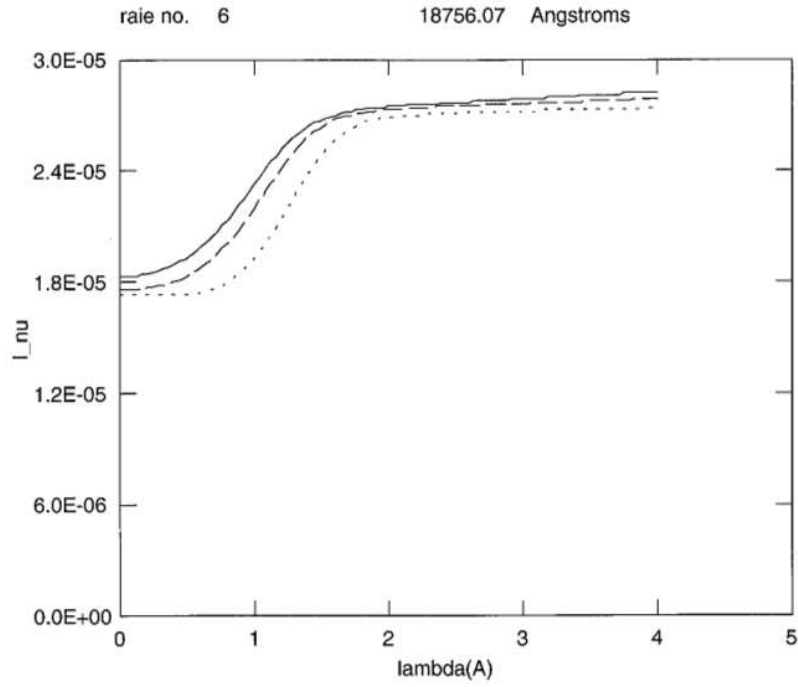


FIGURE 19 – Demi-profil de la raie $Pa - \alpha$ à 18756Å de l'hydrogène

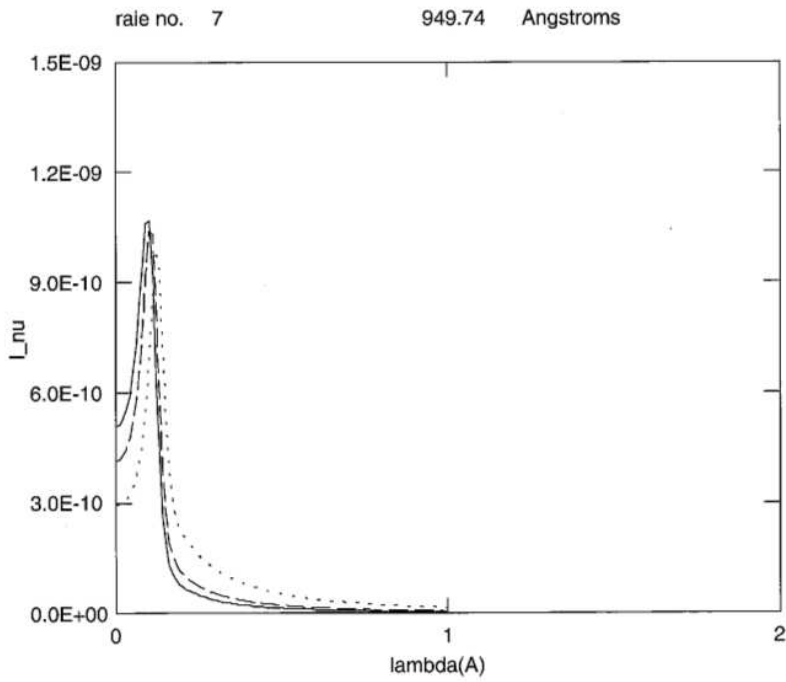


FIGURE 20 – Demi-profil de la raie $L\delta$ à 949Å de l'hydrogène

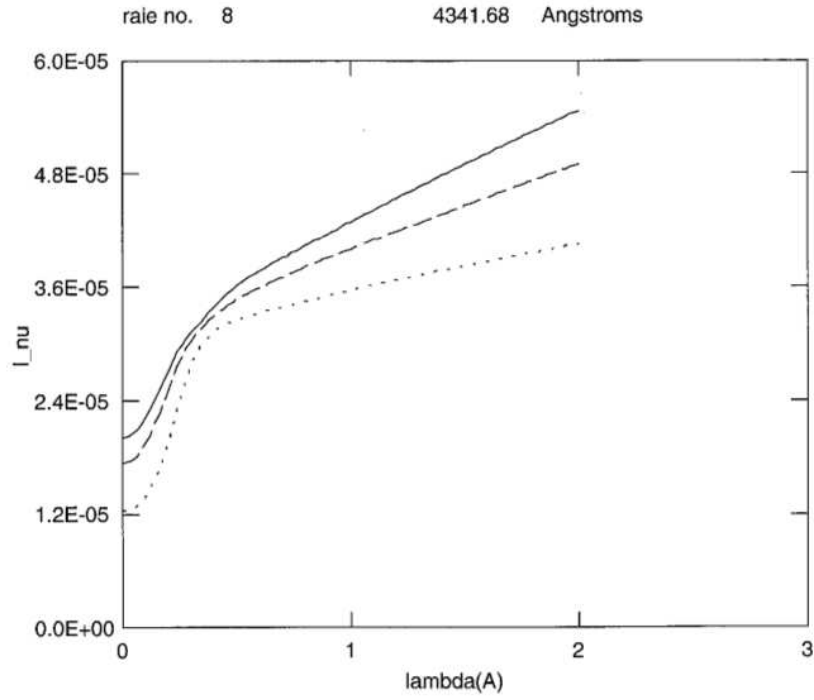


FIGURE 21 – Demi-profil de la raie $H\gamma$ à 4341Å de l'hydrogène

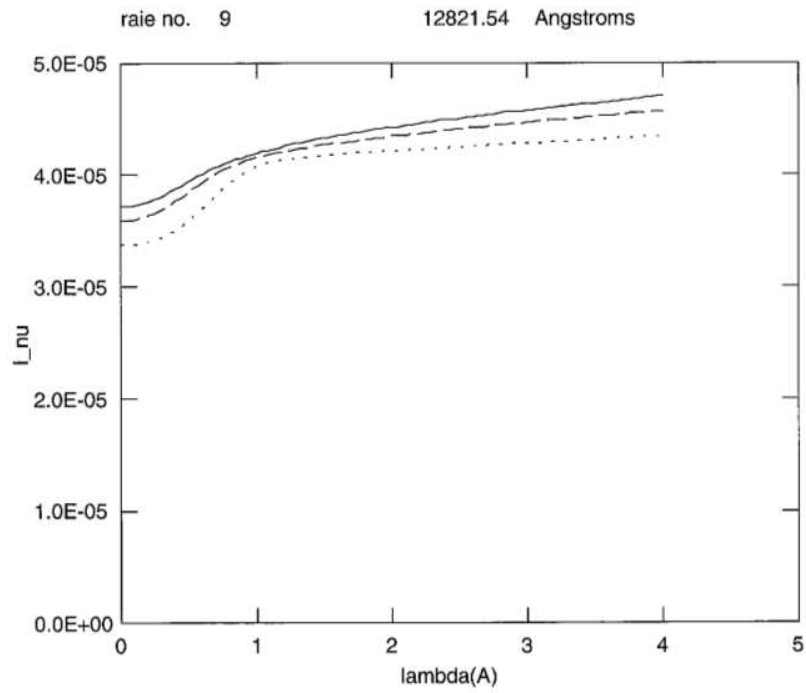


FIGURE 22 – Demi-profil de la raie $Pa - \beta$ à 12821Å de l'hydrogène

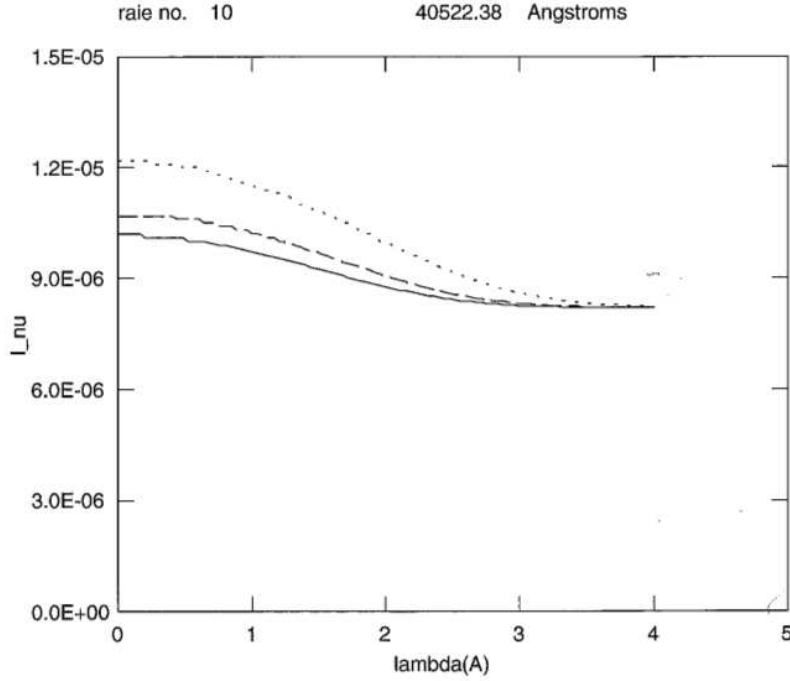


FIGURE 23 – Demi-profil de la raie $Br - \alpha$ à 40522Å de l'hydrogène

11 Exécution de HYDR_NV

- Télécharger le package HYDR_NV.tgz sur le site MEDOC :
<https://idoc.osups.universite-paris-saclay.fr/medoc/tools/radiative-transfer-codes/>
- Le compilateur gfortran est nécessaire. Taper les commandes suivantes dans un terminal :
- **tar -xvzf HYDR_NV.tgz**
- **cd HYDR_NV**
- Le répertoire contient deux sous-répertoires correspondant à deux cas d'atmosphère : solaire (sous-répertoire SOLEIL, modèle VAL3C) et stellaire (sous-répertoire ALTAIR). Chaque sous-répertoire contient les fichiers suivants : fort.3 (input), makefile, hydr_nv.f90, visu21.f90
- **make**
- **./hydr_nv**
- Les fichiers de sortie sont : fort.8 (résumé des itérations), fort.21 (intensités émergentes pour 3 directions et pour chaque transition), fort.22 (intensités L_{α} en fonction de la fréquence et pour chaque direction), fort.24 (paramètres atmosphériques, N_e , N_H), fort.28 (intensités moyennes)
- Le répertoire **results** contient les outputs correspondant à un cas test afin de vérifier si les résultats obtenus sont les mêmes

- Pour visualiser les profils de raies (fichier fort.21), on utilise un programme de visualisation visu21.f90 en tapant les commandes suivantes :

```
gfortran -o visu21 visu21.f90  
./visu21
```

Le fichier de sortie est **v21.ps**

12 Temps de calcul

Sur un PC avec 4 processeurs Intel de 2.67 GHz chacun :

- Temps CPU pour le modèle d'atmosphère stellaire ALTAIR : $46.988\text{ s} < 1\text{ min}$
- Temps CPU pour le modèle d'atmosphère solaire VAL3C : $28.094\text{ s} < 1\text{ min}$

13 Remerciements

Je tiens à remercier les directeurs de MEDOC : Eric Buchlin (actuel) et Frédéric Baudin (précédent).

Le 31 octobre 2025

M. C-Y

Références

- [1] C.W. Allen. *Astrophysical quantities*. The Athlone Press, University of London, 1973.
- [2] M. Arnaud and R. Rothenflug. An updated evaluation of recombination and ionization rates. *A&A suppl. Ser.*, 60 :425–457, 1985.
- [3] L.H. Auer and D. Mihalas. On the use of variable Eddington factors in Non-LTE stellar atmospheres computations. *Mon. Not. R. astr. Soc.*, 149 :65–74, 1970.
- [4] Eugene H. Avrett. *Introduction to Non-LTE radiative transfer and atmospheric modeling*. Lecture notes, 2008.
- [5] S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Dover Publications, 1960.
- [6] CHIANTI Database. George Mason University (USA) and University of Michigan (USA) and University of Cambridge (UK). <http://www.chiantidatabase.org/>, Mai 2014.
- [7] K.P. Dere, E. Landi, H.E. Mason, B.C. Monsignori Fossi, and P.R. Young. CHIANTI - an atomic database for emission lines : I. Wavelengths greater than 50a. *A&A suppl. Ser.*, 125 :149–173, 1997.
- [8] O. Gingerich. Review of Opacity Calculations. *Proceedings of the First Harvard-Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres*, 167 :1–25, 1964.
- [9] P. Gouttebroze and P. Heinzel. Calcium to hydrogen line ratios in solar prominences. *A&A*, 385 :273–280, 2002.
- [10] P. Gouttebroze, P. Heinzel, and J.-C. Vial. The hydrogen spectrum of model prominences. *A&A Suppl. Ser.*, 99 :513–543, 1993.
- [11] P. Gouttebroze and N. Labrosse. A ready-made code for the computation of prominence NLTE models. *Solar Physics*, 196 :349–355, 2000.
- [12] P. Gouttebroze, P. Lemaire, J.-C. Vial, and G. Artzner. The solar hydrogen lyman- β and lyman- α lines : disk center observations from oso 8 compared with theoretical profiles. *APJ*, 225 :655–664, 1978.
- [13] Pierre Gouttebroze. *Formation des raies spectrales et oscillations dans la chromosphère solaire*. Thèse d’Etat, Université Paris 7, 1980.
- [14] I. Hubeny and D. Mihalas. *Theory of Stellar Atmospheres : An introduction to Astrophysical Non-equilibrium Quantitative Spectroscopic Analysis*. Princeton University Press, 2015.
- [15] J.T. Jefferies. *Spectral line formation*. Blaisdell, 1968.
- [16] L.C. Johnson. Approximation for collisional and radiative transition rates in atomic hydrogen. *A&A*, 174 :227–236, 1972.
- [17] Nicolas Labrosse. *Modélisation du spectre de l’hélium dans les protubérances solaires*. PhD thesis, Université Paris XI Orsay, 2001.
- [18] P. Lemaire, P. Gouttebroze, J.-C. Vial, and G. E. Artzner. Physical properties of the solar chromosphere deduced from optically thick lines : I. Observations, data reduction, and modelling of an average plage. *A&A*, 103 :160–176, 1981.

- [19] J. Oxenius. *Kinetic Theory of Particles and Photons. Theoretical Foundations of Non-LTE Plasma Spectroscopy*. Springer-Verlag, 1986.
- [20] G. Peach. A general formula for the calculation of absorption cross sections for free-free transitions in the field of positive ions. *Royal Astronomical Society*, 130 :361–377, 1964.
- [21] C. Pecker-Wimel. *Introduction à la spectroscopie des plasmas*. Gordon and Breach, 1966.
- [22] R.J. Rutten. *Radiative transfer in stellar atmospheres*. 2003.
- [23] E. Schatzman. *Astrophysique*. Masson et Cie, 1963.
- [24] J.E. Vernazza, E. H. Avrett, and R. Loeser. Structure of the Solar chromosphere; ii. The underlying photosphere and temperature-minimum region. *ApJS*, 30 :1–60, 1976.