

VERIFIZIERUNG VON NLTE-CODES

VERIFICATION OF NLTE-CODES

von
Florian Blumendorf
geboren am
02.11.1988

Bachelorarbeit im Studiengang Physik
Universität Hamburg

2013

1. Gutachter: Prof. Dr. Peter Hauschildt
2. Gutachter: Dr. Sören Witte

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Funktionsweise eines neuimplementierten Berechnungsmodus in den Sternatmosphärencode PHOENIX überprüft. Hierzu wird eine Reihe von Sternspektren jeweils einmal in dem etablierten Iongroup-Modus und einmal in dem neuen Elementgroup-Modus berechnet. Dabei wird die Effektivtemperatur zwischen 2800 K und 9800 K, die Oberflächenschwerkraft zwischen $\log g = 4,5$ und $\log g = 0,0$ und die Auswahl der chemischen Spezies, welche im NLTE berechnet werden, variiert. Zunächst wird die Stabilität des Elementgroup-Modus untersucht und auftretene Fehler protokolliert. Lässt sich eine Berechnung fehlerfrei durchführen, werden die mit Hilfe des Elementgroup-Modus berechneten Spektren anhand der Vergleichsspektren des Iongroup-Modus validiert, das Konvergenzverhalten anhand der Departure Coefficients untersucht und die Laufzeiten der Berechnungen verglichen.

Es stellt sich heraus, dass der Elementgroup-Modus für den oberen Temperaturbereich ab 5800 K einwandfrei funktioniert. Darunter kommt es vermehrt zu Abweichungen im Spektrum oder Abbrüchen der Berechnung, die in dieser Arbeit detailliert aufgezeigt werden.

Abstract

In this thesis the functionality of a newly implemented calculation mode into the stellar atmosphere code PHOENIX is analyzed. In order to achieve this a series of star spectra is calculated using both the new element group mode and the established ion group mode. In the analyzed series of stars the effective temperature ranges between 2800 K and 9800 K, the surface gravity varies between $\log g = 4,5$ and $\log g = 0,0$ and several selections of chemical species for NLTE calculations are tested. Initially the stability of the calculations is checked and occurring errors are recorded. If the calculation runs successful, the spectrum calculated by the element group mode is validated using the spectrum of the ion group mode. Furthermore the examination of the departure coefficients provides some information about the convergence behaviour and in the end the different run times are compared.

It then turns out that the element group mode works flawlessly in the high temperature range above 5800 K. Below that temperature there are some difference between the spectra and some calculations aren't possible at all. Both is described in detail.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	2
2.1	Grundlegende Definitionen	2
2.2	Strahlungstransportgleichung	3
2.3	Quellfunktion	4
2.4	Iterative Lösung	5
2.5	LTE vs. NLTE	6
3	Auswertung	9
3.1	Vergleich der Spektren	9
3.1.1	NLTE ohne Eisen	11
3.1.2	NLTE mit Eisen	12
3.2	Vergleich der Departure Coefficients	16
3.2.1	NLTE ohne Eisen	17
3.2.2	NLTE mit Eisen	19
3.3	Vergleich der Laufzeiten	22
3.3.1	NLTE ohne Eisen	22
3.3.2	NLTE mit Eisen	23
3.4	Liste aufgetretener Abbrüche	26
3.4.1	FE=NAN	26
3.4.2	segmentation fault	28
3.4.3	kapcal temperature < 0!	29
4	Fazit	30
	Literaturverzeichnis	31
	Abbildungsverzeichnis	31
	Tabellenverzeichnis	32
	Erklärung	34



1 Einleitung

Für die Berechnung der Spektren von Sternen durch den Sternatmosphärencode PHOENIX müssen Ratengleichungen gelöst werden, dies geschieht approximativ. Hierzu wurde mit dem sogenannten Elementgroup-Modus ein neues Berechnungsverfahren in PHOENIX implementiert, welches in dieser Arbeit überprüft werden soll. Der Elementgroup-Modus unterscheidet sich nun von dem bisherigen Iongroup-Modus dadurch, dass er alle Ionen eines Elementes zu einer Ratenmatrix zusammenfasst. Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass man dadurch eine direkte Kopplung aller Ionisationsstufen eines Elementes erhält, wodurch bei jeder Lösung dieser Ratengleichung die Verschiebung des Ionisationsgleichgewichtes direkt berücksichtigt wird. Der Nachteil dieses Verfahrens ist, dass dadurch die Matrix und auch der dynamische Bereich der Matrix sehr groß wird, da die Ionisationsverhältnisse sehr unterschiedlich sind. Um die Matrix zu lösen braucht man also mehr numerische Stellen, wodurch die Rechenzeit stark ansteigt.

Der Iongroup-Modus behandelt dagegen jedes Ion jeweils zusammen mit dem nächst höheren Ionisationsgrad unabhängig voneinander. Dadurch werden die Matrizen kleiner und die Lösung schneller. Die Kopplung der Ionisationsstufen geschieht so nachträglich über die Iterationen, wodurch mehr Iterationen benötigt werden. Am Ende, wenn alles auskonvergiert ist, sollte das Ergebnis theoretisch gleich sein. Es gibt nun Fälle, in denen die Verschiebung der Ionisation so groß ist, dass es wirklich nötig wird alle Ionen auf einmal zu behandeln. Ein typischer Fall dafür wäre eine Supernova. In einer Supernova erzeugen radioaktive Zerfälle durch hochenergetische Gammastrahlen hoch angeregte Ionen, die im thermischen Gleichgewicht oder durch "normale Strahlung", also rein thermische Strahlung, gar nicht erzeugt würden. In solch einem Fall funktioniert der Elementgroup-Modus durch die direkte Kopplung aller Ionisationsstufen vermutlich deutlich besser. Der Iongroup-Modus würde dafür nicht richtig funktionieren bzw. viel zu viele Iterationen benötigen.

Bevor nun Supernovae berechnet werden, muss der neue Berechnungsmodus zunächst in einfacheren Situationen ausgetestet werden, ob er tatsächlich das gleiche Ergebnis liefert oder zunächst einmal überhaupt stabil läuft. Dafür werden in dieser Arbeit Spektren von Sternen berechnet und überprüft. Zusätzlich dazu wird über einen Vergleich der sogenannten Departure Coefficients das Konvergenzverhalten überprüft und die Berechnungszeit analysiert.

Wenn die Funktionalität in normalen Sternen gegeben ist, kann in einem nächsten Schritt Radioaktivität in Sternen oder Supernovae getestet werden.

2 Theoretische Grundlagen

Um die äußeren Schichten eines Sterns, die Sternatmosphäre, und das Spektrum eines Sterns vernünftig beschreiben zu können, benötigt man zunächst einige Kenntnisse über den Strahlungstransport. Sämtliche im Stern durch Kernfusion entstandene Energie muss, um den Stern zu verlassen und ausgestrahlt zu werden, die Atmosphäre des Sterns durchqueren. Auch wenn in der Sternatmosphäre selbst für gewöhnlich keine zusätzliche Energie entsteht, hat sie einen maßgeblichen Einfluss auf das Spektrum, da die Photonen an Molekülen, Atomen oder Ionen wiederholt gestreut, von ihnen absorbiert und auch wieder emittiert werden.

Die gesamte Theorie in diesem Kapitel ist, soweit nicht explizit anderweitig angegeben, entnommen aus [Rutten 2003] und [Mihalas 1978].

2.1 Grundlegende Definitionen

Als *spezifische Intensität* bezeichnet man diejenige Energiemenge dE_ν , welche durch die Fläche dA am Ort \vec{r} pro Zeitintervall dt und pro Frequenzintervall $d\nu$ in einen Raumwinkels $d\Omega$ um eine Richtung (θ, φ) transportiert wird:

$$dE_\nu = I_\nu(\vec{r}, \theta, \varphi, t) \cos \theta \, dA \, dt \, d\nu \, d\Omega . \quad (2.1)$$

Die spezifische Intensität I_λ , welche die Frequenzabhängigkeit durch eine Wellenlängenabhängigkeit ersetzt, erhält man, indem man wegen $\lambda = c/\nu$ die Ersetzung $|d\nu| = c/\lambda^2 |d\lambda|$ durchführt.

Die *mittlere Intensität* J_ν erhält man, wenn man die spezifische Intensität über den Raumwinkel mittelt:

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi} \int I_\nu \, d\Omega . \quad (2.2)$$

Für den Fall einer eindimensionalen Betrachtung mit planparallelen Schichten vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$J_\nu = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} I_\nu \, d\mu \quad (2.3)$$

mit $\mu = \cos \theta$. Dabei ist θ der Winkel zur z -Achse, welche senkrecht auf den Schichten steht.

Als *monochromatischen Fluss* \mathcal{F}_ν bezeichnet man die Energiemenge, welche pro Sekunde durch eine Fläche am Ort \vec{r} senkrecht zu \vec{n} dringt:

$$\mathcal{F}_\nu(\vec{r}, \vec{n}, t) = \int I_\nu \cos \theta \, d\Omega . \quad (2.4)$$

Eigentlich ist der Fluss eine vektorielle Größe, jedoch wird bei der Betrachtung von Sternen meist die Radialrichtung vorausgesetzt. Dringt die Strahlung nach außen, ist das Vorzeichen positiv.

Ein *schwarzer Körper* ist ein idealisiertes Objekt, welches sämtliche elektromagnetische Strahlung absorbiert. Für ein solches Gebilde gilt die bekannte Plancksche Strahlungsformel

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} . \quad (2.5)$$

Durch Integration über alle Wellenlänge ergibt sich hieraus das Stefan-Boltzmann-Gesetz

$$B(T) = \int_0^\infty B_\nu d\nu = \frac{\sigma}{\pi} T_{\text{eff}}^4 \quad (2.6)$$

mit der Stefan-Boltzmann-Konstante

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} = 5,67 \times 10^{-5} \text{ erg cm}^{-2} \text{ K}^{-4} \text{ s}^{-1} . \quad (2.7)$$

Das Spektrum eines Sterns entspricht allerdings keinesfalls dem eines schwarzen Körpers, da es durch Effekte wie Absorption, Emission, Streuung beeinflusst wird. Allerdings ist es dennoch üblich, die *effektive Temperatur* eines Sterns zu definieren als:

$$\int_0^\infty \mathcal{F}_\nu \, d\nu = \sigma T_{\text{eff}}^4 . \quad (2.8)$$

Die effektive Temperatur ist also die Temperatur, die ein schwarzer Körper mit dem gleichen integrierten Fluss wie der Stern hätte.

2.2 Strahlungstransportgleichung

In der Sternatmosphäre wechselwirken Photonen ständig mit dem dort vorhandenen Material und werden dabei absorbiert, emittiert oder gestreut. Betrachtet man nun unter der Annahme, dass das Strahlungsfeld zeitlich konstant ist, wie sich die Intensität auf der zurückgelegten Strecke ds ändert, so erhält man die Strahlungstransportgleichung

$$\frac{\partial I_\nu}{\partial s} = \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu \quad (2.9)$$

mit der Opazität χ_ν und dem Emissionskoeffizienten η_ν . Die Opazität

$$\chi_\nu = \kappa_\nu + \sigma_\nu \quad (2.10)$$

setzt sich dabei zusammen aus dem Absorptionskoeffizienten κ_ν und dem Streukoeffizienten σ_ν . Wählt man nun ein orthogonales Koordinatensystem, so lässt sich die Ableitung entlang des Weges ausdrücken durch

$$\frac{\partial}{\partial s} = \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.11)$$

mit dem Einheitsvektor \vec{n} . Für den eindimensionalen Fall mit flacher Atmosphäre vereinfacht sich dieser Ausdruck zu $n_z = \partial z / \partial s = \cos \theta = \mu$. Setzt man dieses nun in Gleichung (2.9) ein, so ergibt sich

$$\mu \frac{\partial I_\nu}{\partial z} = \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu . \quad (2.12)$$

Dabei zeigt die Koordinate z senkrecht aus dem Sterninneren heraus und θ ist der Winkel zwischen z und s . Mit Hilfe der Definition der optischen Tiefe $d\tau_\nu = -\chi_\nu ds$ und der Definition der Quellfunktion

$$S_\nu = \frac{\eta_\nu}{\chi_\nu} \quad (2.13)$$

lässt sich die Strahlungstransportgleichung nun in ihrer Standardform aufstellen:

$$\mu \frac{\partial I_\nu}{\partial \tau_\nu} = I_\nu - S_\nu . \quad (2.14)$$

Mit dem Integrationsfaktor $\exp(\tau_\nu/\mu)$ lässt sich deren formale Lösung angeben:

$$I_\nu(\tau_1, \mu) = I_\nu(\tau_2, \mu) \exp\left(-\frac{\tau_2 - \tau_1}{\mu}\right) + \frac{1}{\mu} \int_{\tau_1}^{\tau_2} S_\nu(t) \exp\left(-\frac{t - \tau_1}{\mu}\right) dt . \quad (2.15)$$

In den meisten Fällen lässt sich diese Gleichung jedoch nicht ohne weiteres lösen, da S_ν beispielsweise von J_ν abhängt, wenn Streuung betrachtet wird.

2.3 Quellfunktion

In thermodynamischen Gleichgewicht lässt sich nun eine direkte Beziehung zwischen echter Absorption, also der Vernichtung eines Photons, und Emission aufstellen:

$$\eta_\nu^{\text{th}} = \kappa_\nu B_\nu . \quad (2.16)$$

Für Streuprozesse unter der Annahme der Isotropie gilt hingegen

$$\begin{aligned}\eta_{\nu}^{\text{sc}} &= \sigma_{\nu} \int I_{\nu} \frac{d\Omega}{4\pi} \\ &= \sigma_{\nu} J_{\nu} .\end{aligned}\tag{2.17}$$

Die gesamte Emission η setzt sich nun als Summe aus diesen beiden Prozessen zusammen. Damit folgt für die Quellfunktion

$$\begin{aligned}S_{\nu} &= \frac{\eta_{\nu}}{\chi_{\nu}} = \frac{\eta_{\nu}^{\text{th}} + \eta_{\nu}^{\text{sc}}}{\chi_{\nu}} \\ &= \frac{\kappa_{\nu}}{\kappa_{\nu} + \sigma_{\nu}} B_{\nu} + \frac{\sigma_{\nu}}{\kappa_{\nu} + \sigma_{\nu}} J_{\nu} .\end{aligned}\tag{2.18}$$

Dies lässt sich nun mittels der Photonenvernichtungswahrscheinlichkeit

$$\epsilon_{\nu} = \frac{\kappa_{\nu}}{\kappa_{\nu} + \sigma_{\nu}}\tag{2.19}$$

schreiben als

$$S_{\nu} = (1 - \epsilon_{\nu}) J_{\nu} + \epsilon_{\nu} B_{\nu} .\tag{2.20}$$

2.4 Iterative Lösung

Geht man nun von der formalen Lösung in Gleichung (2.15) aus, setzt $\tau_1 = \tau_{\nu}$ und $\tau_2 = \infty$ für ausgehende Strahlung bzw. $\tau_2 = 0$ für eingehende Strahlung, setzt anschließend das Ergebnis in (2.3) ein und benutzt die Integraleponentialfunktion

$$E_n(x) = \int_1^{\infty} t^{-n} \exp(-xt) dt ,\tag{2.21}$$

so erhält man die sogenannte Schwarzschildgleichung:

$$J_{\nu}(\tau_{\nu}) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S_{\nu}(t_{\nu}) E_1(|t - \tau|) dt .\tag{2.22}$$

Für die ausführliche Herleitung, siehe [Mihalas 1978], S.38-40. Die Schwarzschildgleichung wird über die Definition eines Operators

$$\Lambda[f(t)] = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} E_1(|t - \tau| f(t)) dt\tag{2.23}$$

oft verkürzt geschrieben als

$$J(\tau) = \Lambda[S] .\tag{2.24}$$

Setzt man nun (2.20) in (2.24) ein, so erhält man

$$J_\nu = \Lambda[(1 - \epsilon_\nu)J_\nu + \epsilon_\nu B_\nu] . \quad (2.25)$$

Mittels dieser Gleichung lässt sich jetzt ein Iterationsschema erstellen. Als Anfangsbedingung lässt sich beispielsweise $J = B$ annehmen. Anschließend wendet man wiederholt

$$J^{(n)} = \Lambda[(1 - \epsilon)J^{(n-1)} + \epsilon B] \quad (2.26)$$

an, bis J konvergiert. Dieses Verfahren nennt man Λ -Iteration. Es stellt sich nun allerdings heraus, dass dies problematisch bezüglich der Konvergenz für große τ und kleine ϵ ist. Eine deutliche Verbesserung liefert hierzu das sogenannte Operator-Splitting. Die Informationen hierzu stammen aus [Hauschildt und Baron 2006]. Hierzu wird zunächst Λ durch Addition und Subtraktion eines iterativen Λ -Operators Λ^* modifiziert.

$$\Lambda = \Lambda^* + (\Lambda - \Lambda^*) \quad (2.27)$$

Hieraus lässt sich ein neues Iterationsschema ableiten

$$J^{(n)} = \Lambda^* S^{(n)} + (\Lambda - \Lambda^*) S^{(n-1)} \quad (2.28)$$

Dieses lässt sich nun mit (2.20) und $J_{\text{fs}} = \Lambda S^{(n-1)}$ umschreiben als

$$J^{(n)} = [1 - \Lambda^*(1 - \epsilon)]^{-1} (J_{\text{fs}} - \Lambda^*(1 - \epsilon)J^{(n-1)}) . \quad (2.29)$$

Für die Bestimmung von Λ^* und das weitere Vorgehen sei verwiesen auf [Hauschildt und Baron 2006].

2.5 LTE vs. NLTE

Der Zustand eines Gases bestimmt sich über die Verteilung der Besetzungszahlen aller Energielevel. Hierzu benötigt es eine genaue Kenntnis der Ionisation und Anregung jeder vorhandenen Spezies. Im allgemeinen Fall müssen hierzu Ratengleichungen für alle vorkommenden Spezies gelöst werden, was sehr rechenaufwändig ist. Im thermodynamischen Gleichgewicht hingegen reichen zwei Variablen, geeignet sind beispielsweise die Temperatur $T(\vec{r})$ und die Teilchendichte $N(\vec{r})$, um den Zustand des Gases vollständig zu beschreiben [Mihalas 1978].

Nun ist eine Sternatmosphäre zwar in keiner Weise abgeschlossen und hat auch nicht überall die gleiche Temperatur, jedoch lässt sich in bestimmten Situationen annehmen, dass dies zumindestens lokal für kleine Volumenelemente der Fall ist. Diese Annahme wird als *LTE* (*local thermodynamic equilibrium*) bezeichnet. In den tiefen Schichten der Atmosphäre ist diese Annahme gut erfüllt. Dort ist die Gasdichte hoch, die Kollisionsrate hoch und die optische Tiefe groß genug, dass kein Photon entkommt, ohne thermalisiert zu werden [Mihalas 1978]. Durch

eine genügend hohe Zahl an Stößen ohne Störung durch Photonen nähern sich die Geschwindigkeits-, Anregungs- und Ionisationsverteilungen einem thermodynamischen Gleichgewicht an. In den äußeren sichtbaren Schichten ist dies allerdings nicht der Fall. Dort ist das Gas dünn, das Strahlungsfeld stark und der Zustand des Gases wird durch Strahlungsübergänge dominiert.

Im LTE lässt sich das Verhältnis der Besetzungszahlen nun einfach über die Boltzmann-Verteilung

$$\left[\frac{n_{r,s}}{n_{r,t}} \right] = \frac{g_{r,s}}{g_{r,t}} \exp \left(- \frac{E_{r,s} - E_{r,t}}{kT} \right) \quad (2.30)$$

berechnen. Dabei ist $n_{i,j}$ die Besetzungsdichte des j -ten Energieniveaus im Ionisationsgrad i , g der Entartungsgrad und E die entsprechende Anregungsenergie vom Grundzustand dieses Ionisationsgrades aus. Die Ionisationsverhältnisse bestimmen sich aus der Saha-Gleichung und kombiniert man beide, so erhält man die Saha-Boltzmann-Verteilung.

Das *NLTE* (*non-local thermodynamic equilibrium*) ist zunächst einmal ein allgemeiner Begriff, der besagt, dass die Annahme des LTE falsch ist. In diesem Fall ist die Strahlung nicht mehr im Gleichgewicht mit der Materie, so dass die vollständige Kopplung zwischen Strahlung und Materie berechnet werden muss, um die Quellfunktion berechnen zu können. Eine typische Situation hierfür ist vermehrte Streuung von Photonen an dem Gas in der Sternatmosphäre. Durch Streuung können Photonen weite Wegstrecken zurücklegen und verschiedene Teile der Atmosphäre miteinander verbinden, so dass die Annahme des lokalen Gleichgewichts gestört wird.

Da sich im NLTE die tatsächlichen Besetzungszahlen nun von den LTE-Besetzungszahlen unterscheiden, eignen sich die sogenannten *Departure Coefficients* b_i

$$b_i = \frac{n_i}{n_i^{\text{LTE}}} \quad (2.31)$$

um diesen Unterschied auszudrücken. Dabei ist n_i tatsächliche Besetzungszahl für das i -te Energieniveau und n_i^{LTE} entspricht der Besetzungszahl aus der Saha-Boltzmann-Gleichung.

Für den folgenden Abschnitt sei auf [Hauschildt und Baron 1998] verwiesen. Alle hier genannten Informationen über NLTE-Berechnungen stammen direkt aus dieser Quelle.

Um die Strahlungstransportgleichung für den NLTE-Fall zu lösen, müssen die NLTE-Besetzungsdichten und damit die NLTE-Ratengleichung

$$\begin{aligned} & \sum_{j < i} n_j (R_{ji} + C_{ji}) \\ & - n_i \left\{ \sum_{j < i} (R_{ij} + C_{ij}) + \sum_{j > i} \left(\frac{n_j^*}{n_i^*} \right) (R_{ij} + C_{ij}) \right\} \\ & + \sum_{j > i} n_j \left(\frac{n_j^*}{n_i^*} \right) (R_{ji} + C_{ji}) = 0 \end{aligned} \quad (2.32)$$

simultan zur Strahlungstransportgleichung gelöst werden. Hierbei ist n_i die NLTE Besetzungsdichte von Level i und n_i^* die LTE Besetzungsdichte, welche durch

$$n_i^* = \frac{g_i}{g_k} n_k \frac{2h^3 n_e}{(2\pi m)^{3/2} (kT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{E_i - E_k}{kT}\right) \quad (2.33)$$

definiert wird. In dieser Gleichung ist n_k die NLTE Besetzungsdichte des Grundzustandes des nächsthöheren Ionisationsgrades desselben Elementes. E_i stellt die Anregungsenergie vom Zustand i und E_k die Ionisationsenergie vom Grundzustand zum Zustand k dar. R_{ij} ist dabei die Rate für strahlungsinduzierte Übergänge von i nach j und C_{ij} stellt die Rate für kollisionsinduzierte Übergänge dar.

Da ein einfaches Fixpunktiterationsschema für die meisten Fälle von Interesse viel zu langsam konvergiert, wendet man eine Analogie zum Operator-Splitting mit dem approximativem Λ -Operator an. Um die Ratengleichung (2.32) als Operatorgleichung umzuschreiben, definiert man zunächst einen Ratenoperator

$$R_{ij} = [R_{ij}][n] . \quad (2.34)$$

Hierbei ist $[n]$ der Besetzungsdichteoperator. Anschließend definiert man analog zum approximativem Λ -Operator einen approximierten Ratenoperator $[R_{ij}^*]$ und beschreibt R_{ij} nun durch

$$R_{ij} = [R_{ij}^*][n_{\text{neu}}] + ([R_{ij}] - [R_{ij}^*])[n_{\text{alt}}] \quad (2.35)$$

welches in (2.32) eingesetzt wird. Ausführlichere Informationen hierzu finden sich u.a. in [Hauschildt und Baron 1998].

3 Auswertung

Die in dieser Arbeit untersuchten Modelle wurden alle mit dem Computerprogramm PHOENIX erstellt. PHOENIX ist ein Sternatmosphärencode, der Modellatmosphären sowie synthetische Spektren von allen Sterntypen des Hertzsprung-Russel-Diagramms berechnen kann. Ausführlichere Beschreibungen der Funktionsweise von PHOENIX finden sich u.a. in [Hauschildt und Baron 1998] und [Hauschildt und Baron 2010].

Um nun die Funktionsweise des Elementgroup-Modus zu überprüfen, werden die Spektren einer Reihe von Sternmodellen jeweils einmal in dem neuen Elementgroup-Modus und einmal zum Vergleich mit ansonsten identischen Einstellungen im Iongroup-Modus berechnet. Dabei wird zunächst überprüft, ob die Rechnung überhaupt fehlerfrei ausgeführt wird. Ist dies der Fall, werden das Spektrum und die Departure Coefficients direkt verglichen, andernfalls wird der Fehler protokolliert.

Bei den betrachteten Modellen werden die Effektivtemperatur, die Oberflächengravitation und die Liste der NLTE-Spezies variiert. Die Masse des Sterns hingegen bleibt konstant bei einer Sonnenmasse. Die Oberflächengravitation ist ein Maß für die Größe des Sterns und wird logarithmisch als $\log g$ angegeben. Dabei ist g der Betrag der Schwerebeschleunigung auf der Oberfläche des Sterns im CGS-Einheitensystem, d.h. in cm s^{-2} . Für die Sonne beträgt $\log g$ beispielsweise etwa 4,5. Da Modellrechnungen mit Eisen als NLTE-Spezies wegen der vielen zu betrachtenden Energieniveaus sehr zeitaufwendig sind, wird jedes Modell als eine Art Vorabtest zunächst einmal nur mit H I, He I und He II berechnet. Dies verkürzt die Berechnungszeit um etwa den Faktor 30. Funktioniert dieses reduzierte Modell ohne größere Fehler, wird anschließend die Liste der NLTE-Spezies um Fe I, Fe II und Fe III erweitert. Bei einzelnen Modellen werden anschließend noch höhere Ionisationsgrade von Eisen der NLTE-Liste hinzugefügt.

3.1 Vergleich der Spektren

Dass sich ein direkter Vergleich der Spektren durch beispielsweise Overplotting nicht sehr gut eignet, lässt sich in Abbildung 3.1 erkennen. Dort ist je ein Spektrum als Beispiel für das untere Ende und eines für das obere Ende des betrachteten Temperaturbereiches dargestellt. In diesen beiden Graphen werden durch jeweils mehr als eine Million eingetragener Datenpunkte einzelne Flächen komplett geschwärzt. Um bei dieser Menge an Datenpunkten die einzelnen Linienprofile erkennen zu können, müsste man das Spektrum in viele kleine Wellenlängenintervalle zerlegen. Um diese Auswertung zu vereinfachen werden zwei verschiedene Differenzplots betrachtet. Da

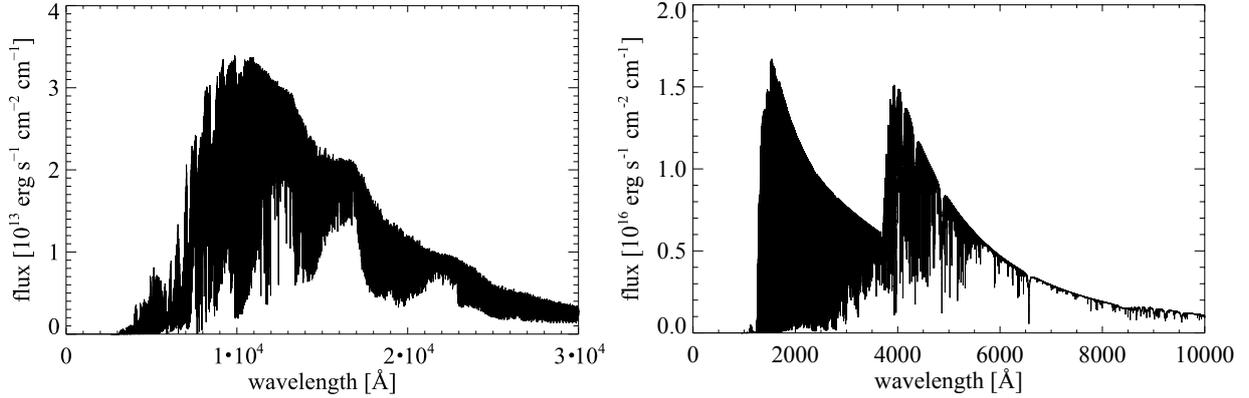


Abbildung 3.1: Zwei Spektren von Sternen mit $\log g = 4,5$ und H I, HeI-II und Fe I-III als NLTE-Spezies. Links: $T_{\text{eff}} = 2800$ K, Rechts: $T_{\text{eff}} = 9800$ K

sich der Wertebereich des errechneten Spektrums über mehr als 10 Größenordnungen erstreckt, ist die absolute Differenz des Flusses

$$\Delta\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{Ion}} - \mathcal{F}_{\text{Element}} \quad (3.1)$$

alleine nicht sehr aussagekräftig. Daher muss man diese jeweils im Zusammenhang mit der relativen Differenz des Flusses

$$f = \frac{\mathcal{F}_{\text{Ion}} - \mathcal{F}_{\text{Element}}}{\mathcal{F}_{\text{Ion}} + \mathcal{F}_{\text{Element}}} \quad (3.2)$$

betrachten. Bei der Erzeugung der Differenzplots kann es jedoch durch unterschiedliche Wellenlängengitter zu Schwierigkeiten kommen, wie in folgendem Absatz beschrieben wird.

Zur Berechnung eines Sternspektrums wird von PHOENIX zunächst automatisch ein Wellenlängengitter generiert. Als Basis dafür dient ein Satz von generellen Wellenlängenstützpunkten, die in dem Programm manuell festgelegt werden können. Wird das Modell nun im NLTE berechnet, muss für jede Linie ihr Linienprofil abgebildet werden, um die Raten ausrechnen zu können. Da diese Linien recht schmal sind, baut das Programm etwa 5 bis 10 zusätzliche Wellenlängenpunkte für jede dieser Linien ein. Dies führt nun zunächst dazu, dass bei gleichen Wellenlängenstützpunkten die reduzierten Modelle mit H I, He I und He II als NLTE-Spezies ein Wellenlängengitter von etwa 60000 Wellenlängenpunkte haben, während die Modelle, bei denen zusätzlich Fe I-III im NLTE berechnet wird, über eine Million Wellenlängenpunkte berücksichtigen. Diese Wellenlängenpunkte variieren jedoch, da sich das Linienprofil mit der Temperatur ändert. Dies wird vom Algorithmus berücksichtigt. Anschließend benutzt PHOENIX einen Sweeper, um Wellenlängenpunkte, die zu dicht beieinander liegen oder sogar identisch sind, zu beseitigen, um die Datenmenge und Rechenzeit zu sparen, ohne dass sich dadurch

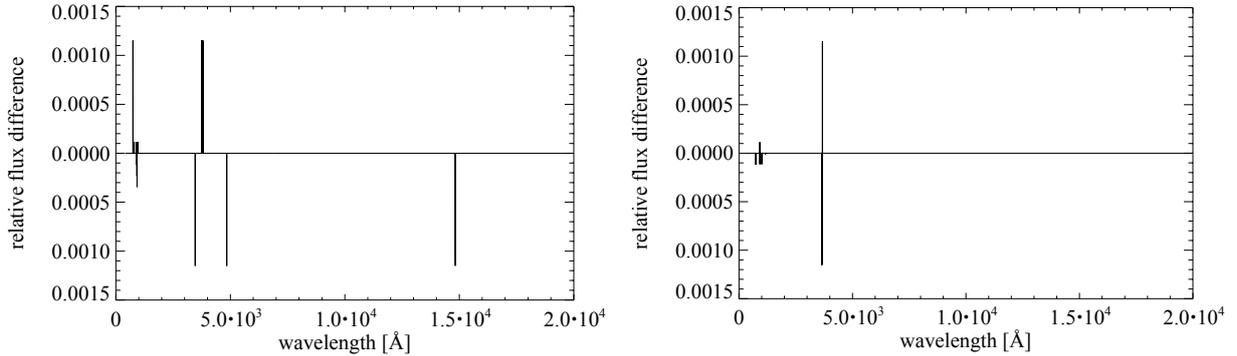


Abbildung 3.2: Relative Differenzen der Spektren zweier Sterne mit $\log g = 4,5$ ohne Eisen als NLTE-Spezies zwischen Elementgroup-Modus und Iongroup-Modus. Links: $T_{\text{eff}} = 3800$ K, Rechts: $T_{\text{eff}} = 4800$ K

das Ergebnis ändert. Wird eine Rechnung nun durch Zeitüberschreitung abgebrochen und anschließend an der Stelle der letzten vollständigen Iteration neu gestartet, so ändert sich das Wellenlängengitter, da sich die Temperatur durch die durchgeführten Iterationen geändert hat. Will man nun Differenzen plotten, so muss man zunächst einmal beide Spektren auf dasselbe Wellenlängengitter interpolieren, was aber nicht immer ideal funktioniert. Wenn sich einzelne Punkte des Wellenlängengitters stärker verschieben, so kann sich auch der zugehörige Fluss ändern. Dies lässt sich durch einfache Interpolation nur begrenzt korrigieren.

Als Spektrum gibt PHOENIX schließlich eine Wertetabelle mit den Wellenlängenpunkten und dem zugehörigen logarithmierten Fluss aus. Die Werte für die Wellenlängen werden dabei mit einer Genauigkeit von 15 Stellen und der logarithmierte Fluss mit einer Genauigkeit von 5 Ziffern in Exponentialdarstellung angegeben. Im Rahmen der beschränkten Genauigkeit beim plotten werden leichte Variationen in den letzten Stellen des Wellenlängengitters ignoriert.

3.1.1 NLTE ohne Eisen

Es werden nun zunächst die Modelle ohne Eisen im NLTE, d.h. mit H I, He I, und He II als NLTE-Spezies untersucht. Pro Modell werden dabei 30 Iterationen ausgeführt.

Zu Beginn wird bei fester Oberflächengravitation von $\log g = 4,5$ die Effektivtemperatur von 2800 K bis 9800 K in Schritten von 1000 K erhöht und die errechneten Spektren verglichen. Bei den hohen Effektivtemperaturen zwischen 5800 K und 9800 K sind die Spektren im Rahmen der Genauigkeit von IDL exakt identisch, beide Differenzplots sind also exakt null.

Bei Effektivtemperaturen von 3800 K und 4800 K treten einige wenige punktförmige Abweichungen auf. Betrachtet man die relative Differenz, zeigt sich allerdings, dass sie kaum größer als 10^{-3} sind, siehe Abbildung 3.2. Betrachtet man die Wertetabelle der Spektren hierzu, lässt sich erkennen, dass sich an diesen Stellen einzelne Werte für den logarithmierten Fluss in der letzten

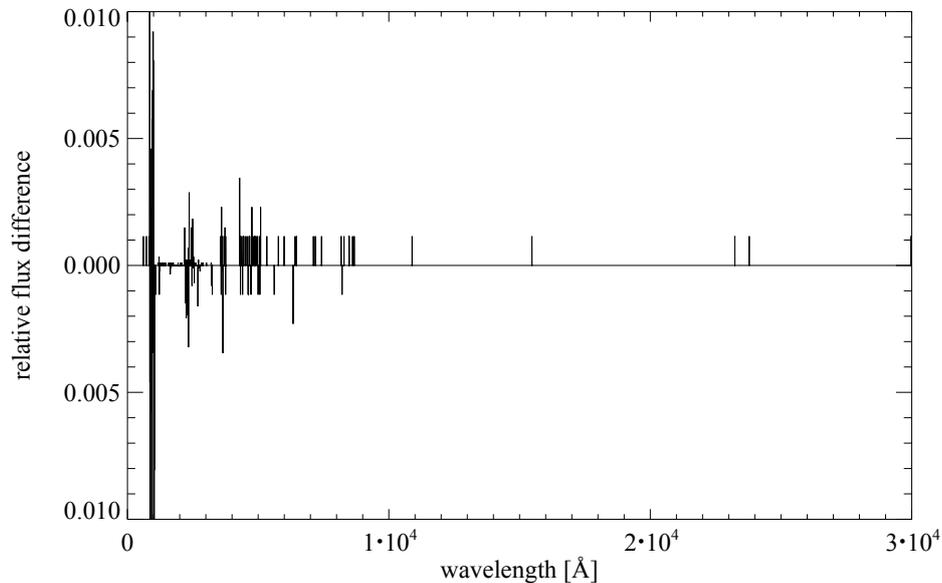


Abbildung 3.3: Relative Differenz des Spektrums eines Sterns mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 2800$ K ohne Eisen als NLTE-Spezies zwischen Elementgroup-Modus und Iongroup-Modus

ausgegebenen Stelle um 1 unterscheiden. Bei $T_{\text{eff}} = 3800$ K beispielsweise gibt der Elementgroup-Modus bei einer Wellenlänge von $\lambda = 14822,3$ Å als Wert für den logarithmierten Fluss $\mathcal{F} = 1,3726\text{D}+01$ an, während der Iongroup-Modus hier $\log \mathcal{F} = 1,3725\text{D}+01$ angibt. Solch geringe Abweichungen sind bei einer Wertetabelle mit etwa 60.000 Werten ohne Bedeutung. Solch minimale Abweichungen können z.B. auch durch die Rundungsarithmetik der Ausgaberroutine entstehen.

Bei einer Effektivtemperatur von 2800 K tauchen deutlich mehr dieser punktförmigen Abweichungen auf, siehe Abbildung 3.3. Besonders bei kleinen Wellenlängen unter 2000 Å beträgt die relative Differenz beider Spektren bis zu 0,04. Unterhalb dieser Wellenlänge ist das Spektrum jedoch um 11 Größenordnungen kleiner als im Bereich seines Maximums, so dass dies kaum ins Gewicht fällt. Bei Wellenlängen über 1500 Å betragen die relativen Differenzen höchstens noch 0,004 und sind damit auch lediglich Schwankungen in der letzten Nachkommastelle.

Anschließend werden bei einer Oberflächengravitation von $\log g = 1,0$ und $\log g = 0,0$ die Spektren bei Effektivtemperaturen von jeweils 3800 K und 4800 K bei ansonsten gleicher Konfiguration überprüft. Bei diesen vier Konfigurationen sind die Spektren jeweils exakt identisch.

3.1.2 NLTE mit Eisen

Nachdem die Berechnung ohne Eisen im NLTE recht gut funktioniert hat, wird nun Fe I, Fe II und Fe III der Liste der NLTE-Spezies hinzugefügt. Die Anzahl der Iterationen wird auf 10 reduziert, da diese Rechnungen deutlich zeitaufwändiger sind und die maximale Rechenzeit für

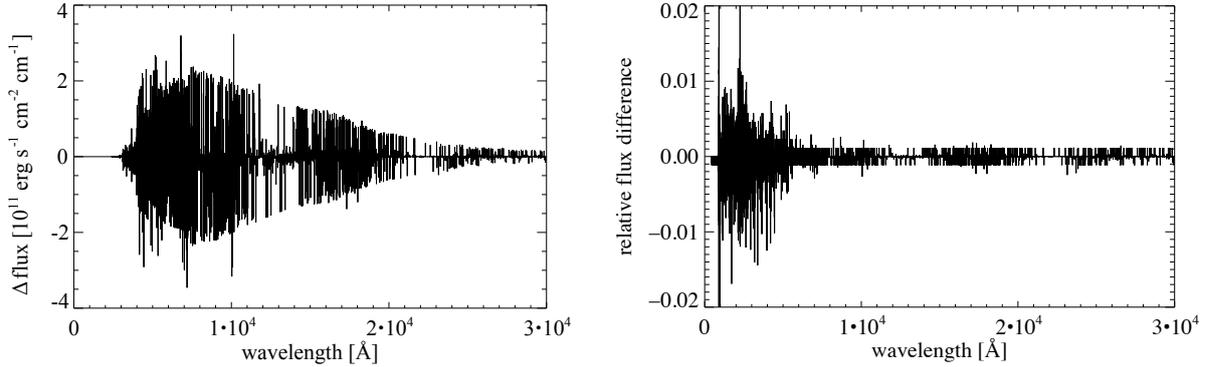


Abbildung 3.4: Vergleich der Spektren eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 3800$ K und Fe I-III als NLTE-Spezies zwischen Elementgroup-Modus und Iongroup-Modus. Links: absolute Differenz der Spektren, rechts: relative Differenz der Spektren

einen Auftrag begrenzt ist.

Mit ansonsten gleichen Einstellungen wie bei den Modellen ohne Eisen im NLTE wird nun bei $\log g = 4,5$ dasselbe Temperaturgitter von 2800 K bis 9800 K in 1000 K Schritten berechnet. Bei den Effektivtemperaturen von 4800 K bis 9800 K führen dabei beide Modi zum jeweils exakt gleichen Spektrum.

Bei den beiden niedrigsten Effektivtemperaturen 2800 K und 3800 K ist die Situation etwas komplizierter. Bei diesen Temperaturen ist die Berechnungszeit im Elementgroup-Modus so groß, dass die Berechnungen nach 8 Iterationen bei $T_{\text{eff}} = 3800$ K bzw. nach 9 Iterationen bei $T_{\text{eff}} = 2800$ K wegen Überschreitung der maximalen Rechenzeit von 96 Stunden abgebrochen werden. Mit diesem Zwischenergebnis werden dann in einem zweiten Rechenschritt die 10 Iterationen vervollständigt, um eine Vergleichsmöglichkeit mit dem Iongroup-Modus zu erlangen. Dieser Vorgang führt allerdings zu einer Änderung im Wellenlängengitter im Elementgroup-Modus, da sich durch bereits durchgeführten Iterationen die Temperatur in den einzelnen Schichten mittlerweile leicht geändert hat. Dies erkennt man daran, dass in den Differenzplots auf einen punktförmigen Ausschlag leicht verschoben ein punktförmiger Ausschlag mit gleichem Betrag aber umgekehrten Vorzeichen folgt. Durch Interpolation von einem Graphen auf das Wellenlängengitter des anderen Graphen vor der Differenzbildung lassen sich die Differenzen um den Faktor 100 verkleinern, allerdings nicht vollständig beheben. Im Nachhinein wäre es vermutlich sinnvoller gewesen, die Anzahl der Iterationen in beiden Modi zu verringern, so dass keine Rechnung abbricht und beide Modi genau gleich oft an den gleichen Stellen fortgesetzt werden. Hierdurch könnten sich möglicherweise die Differenzen der Spektren in diesen beiden Modell drastisch verkleinern.

Da die Differenzen der Spektren nach 10 Iterationen bei $T_{\text{eff}} = 3800$ K noch recht groß sind, werden beide Modelle in 2 Schritten auf insgesamt 20 Iterationen weiter auskonvergiert, da

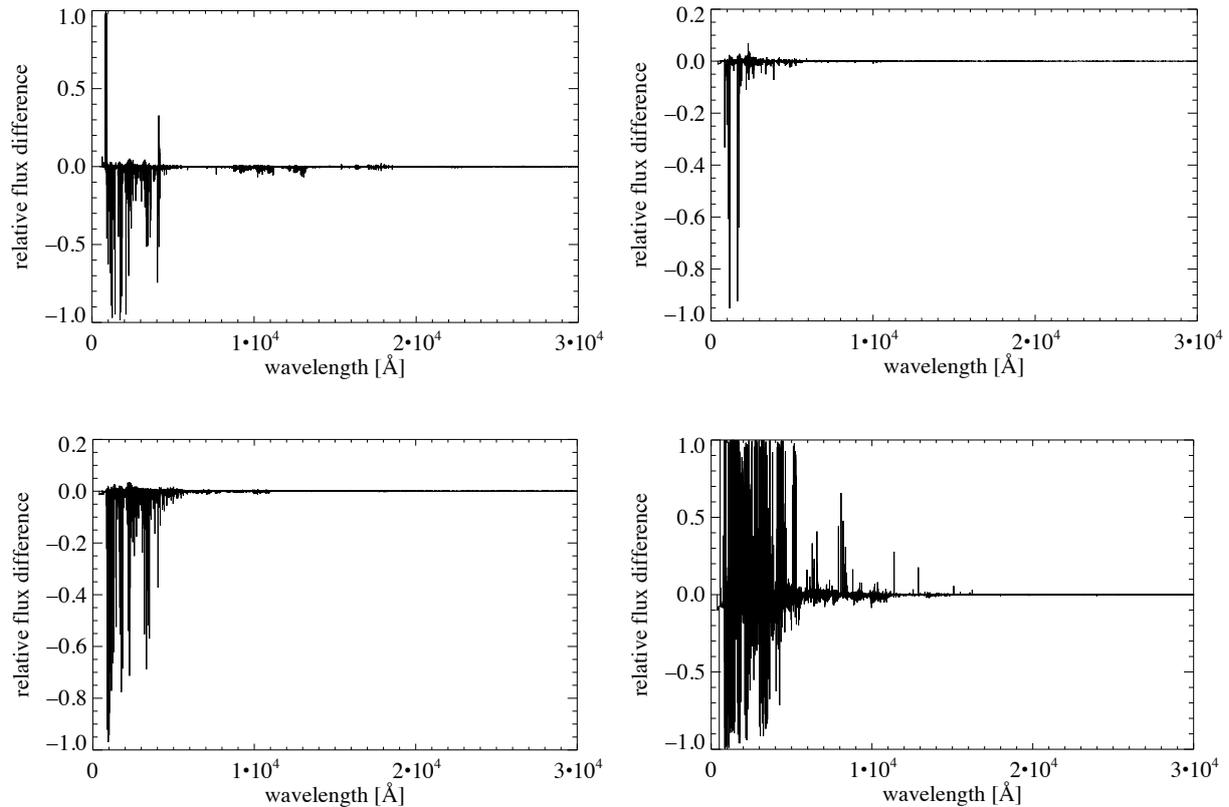


Abbildung 3.5: Relative Differenz der Spektren eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 2800$ K und Eisen als NLTE-Spezies zwischen Elementgroup-Modus und Iongroup-Modus. Links oben: nach 10 Iterationen, rechte oben: nach 15 Iterationen, links unten: nach 20 Iterationen, rechts unten: nach 25 Iterationen

sich die Differenz der Spektren so immer weiter verkleinert. In Abbildung 3.4 sind die absolute und die relative Differenz beider Spektren nach 20 Iterationen und anschließender Interpolation abgebildet. Man erkennt, dass es unter 2500 \AA einige größere relative Differenzen gibt, die das ausgewählte Y-Achsen-Intervall verlassen. Diese liegen jedoch in einem Bereich, in dem der Fluss noch um 4 Größenordnungen kleiner als im Bereich seines Maximums ist, weswegen diese Ausschläge im Graphen der absoluten Differenz überhaupt nicht sichtbar sind. Bei Wellenlängen über 2500 \AA sind die Abweichungen beider Modi kaum größer als 1 Prozent.

Bei $T_{\text{eff}} = 2800$ K werden beiden Modelle in drei Schritten auf insgesamt 25 Iterationen weiter auskonvergiert. Interessanterweise sind die Differenzen der Spektren hier nach 15 Iterationen am kleinsten und vergrößern sich anschließend wieder, siehe Abbildung 3.5. Nach 15 Iterationen sind die Differenzen nicht zu vernachlässigen, auch wenn die größten Differenzen in dem Wellenlängenbereich liegen, in dem das Spektrum im Vergleich zum Maximum sehr klein ist, vgl. Abbildung 3.1. Aber selbst über 4000 \AA sind die relativen Größenordnungen immer noch von der Größenordnung einiger Prozent.

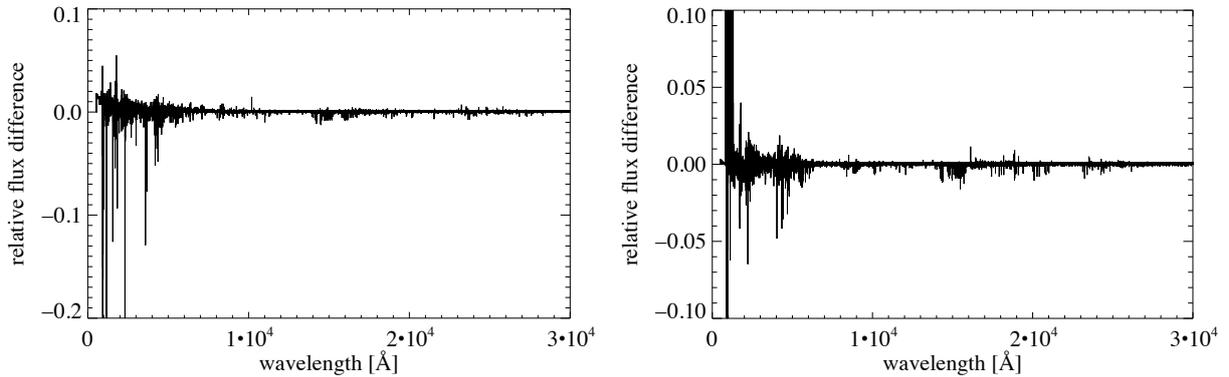


Abbildung 3.6: Relative Differenz beider Modi der Spektren zweier Sterne mit $T_{\text{eff}} = 3800$ K und Eisen als NLTE-Spezies. Der Elementgroup-Modus lief mit verringerter Prozessorenzahl. Links: $\log g = 0,0$, rechts: $\log g = 1,0$

Diese Differenzen im Spektrum bei $T_{\text{eff}} = 2800$ K und $T_{\text{eff}} = 3800$ K zeigen sich auch bei einem Blick in die Wertetabelle in der Datei fort.7. Neben klaren Differenzen im Wellenlängengitter gibt es viele Abweichungen in der Spalte mit dem logarithmierten Fluss. Möglicherweise werden diese Differenzen im Fluss nur durch das veränderte Wellenlängengitter hervorgerufen. Um dies zu klären, sollten beide Modelle erneut berechnet werden, ohne dass eines der Modelle vorzeitig abbricht, da dies möglicherweise die Vergleichbarkeit einschränkt.

Bei dem Modell mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 9800$ K wird die Liste der NLTE-Spezies testweise verlängert. Zusätzlich zu H I, He I und He II werden Fe I-IV, Fe I-V, Fe I-VI und Fe I-VII jeweils getrennt hinzugefügt und die Modelle in beiden Modi berechnet. Hier sind alle Differenzen der Spektren exakt null.

Verringert man die Oberflächengravitation auf $\log g = 1,0$, so lässt sich bei 3800 K die Berechnung mit dem Elementgroup-Modus nicht normal durchführen, siehe Kapitel 3.4.1. Verringert man die Zahl der verwendeten Prozessoren von 32 auf 24 lässt sich das Modell berechnen. Vergleicht man das resultierende Spektrum mit dem des Iongroup-Modus, der unverändert mit 32 Prozessoren berechnet wird, so erhält man nach Interpolation relative Differenzen von der Größenordnung 0,01 im Bereich über 2000 Å. Bei kleineren Wellenlängen sind die relativen Differenzen sehr stark, allerdings ist der Fluss hier sehr klein im Vergleich zu seinem Maximum, so dass dies bei der Betrachtung der absoluten Differenzen nicht ins Gewicht fällt. Hier ist anzumerken, dass die Berechnung mit einer unterschiedlichen Anzahl von Prozessoren möglicherweise die Vergleichbarkeit der Modelle einschränkt. Aus Zeitmangel konnte das Modell im Iongroup-Modus mit 24 Prozessoren zum Vergleich jedoch nicht mehr berechnet werden. Bei $T_{\text{eff}} = 4800$ K lässt sich die Berechnung beider Modelle hingegen mit 32 Prozessoren fehlerfrei durchführen und man erhält ein exakt identisches Spektrum.

Verringert man die Oberflächengravitation weiter auf $\log g = 0,0$ und betrachtet wieder die Effektivtemperaturen von 3800 K und 4800 K, so lässt sich in beiden Modellen der Elementgroup-Modus nicht mehr ohne Änderung der Konfiguration fehlerfrei durchführen.

Entfernt man bei 3800 K Fe III aus der Liste der NLTE-Spezies bei beiden Modellen, so erhält man ein fast identisches Spektrum. Lediglich unter 2500 Å gibt es ein paar punktförmige Abweichungen der Größenordnung 10^{-4} . Lässt man stattdessen die Liste der NLTE-Spezies unverändert und reduziert die Anzahl der Prozessoren im Elementgroup-Modus auf 24, so zeigt die relative Differenz hauptsächlich Rauschen der Größenordnung 10^{-2} mit einigen größeren Ausreißern im niedrigen Wellenlängenbereich, siehe Abbildung 3.6.

Entfernt man bei $T_{\text{eff}} = 4800$ K sowohl Fe II als auch Fe III aus der Liste der NLTE-Spezies, so ist das Spektrum identisch. Tests mit einer anderen Prozessorenzahl wurden bei dieser Konfiguration nicht durchgeführt.

3.2 Vergleich der Departure Coefficients

In diesem Abschnitt sollen die sogenannten Departure Coefficients b_i , siehe Gleichung (2.31), untersucht werden. Da PHOENIX, falls gewünscht, einen dieser Koeffizienten für jedes Energieniveau aller NLTE-Spezies in jedem der 64 Layer für alle durchgeführten Iterationen separat ausgibt, geben die Departure Coefficients einen gewissen Aufschluss über das Konvergenzverhalten der Berechnung. Für H I werden dabei 30, für He I 19, für He II 10, für Fe I 902, für Fe II 894 und für Fe III 555 Energieniveaus im NLTE berechnet.

In Abbildung 3.7 ist ein Beispiel für das typische Aussehen der Departure Coefficients dargestellt. Zwar variiert die Form der Graphen grundsätzlich, so kann der Graph beispielsweise auch

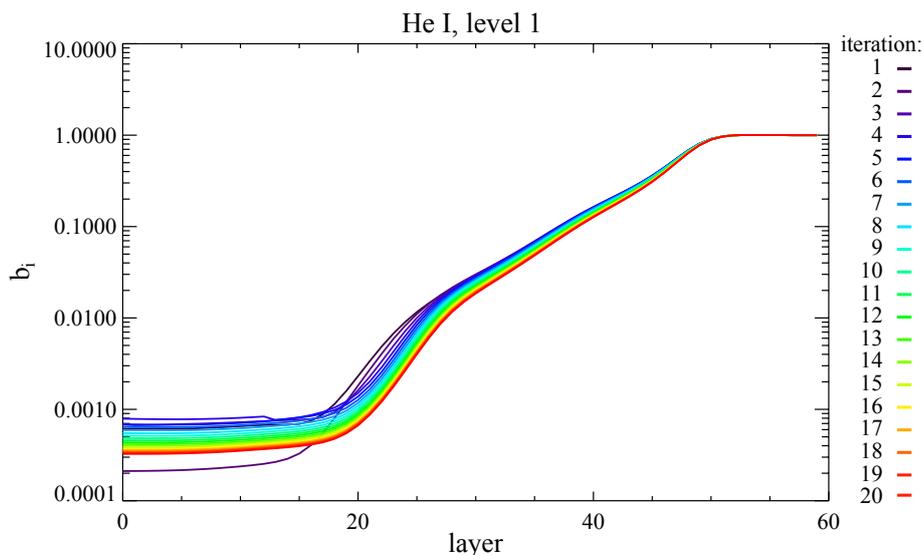


Abbildung 3.7: Departure Coefficients von He I Level 1 bei einem Stern mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 9800$ K im Iongroup-Modus ohne Eisen im NLTE

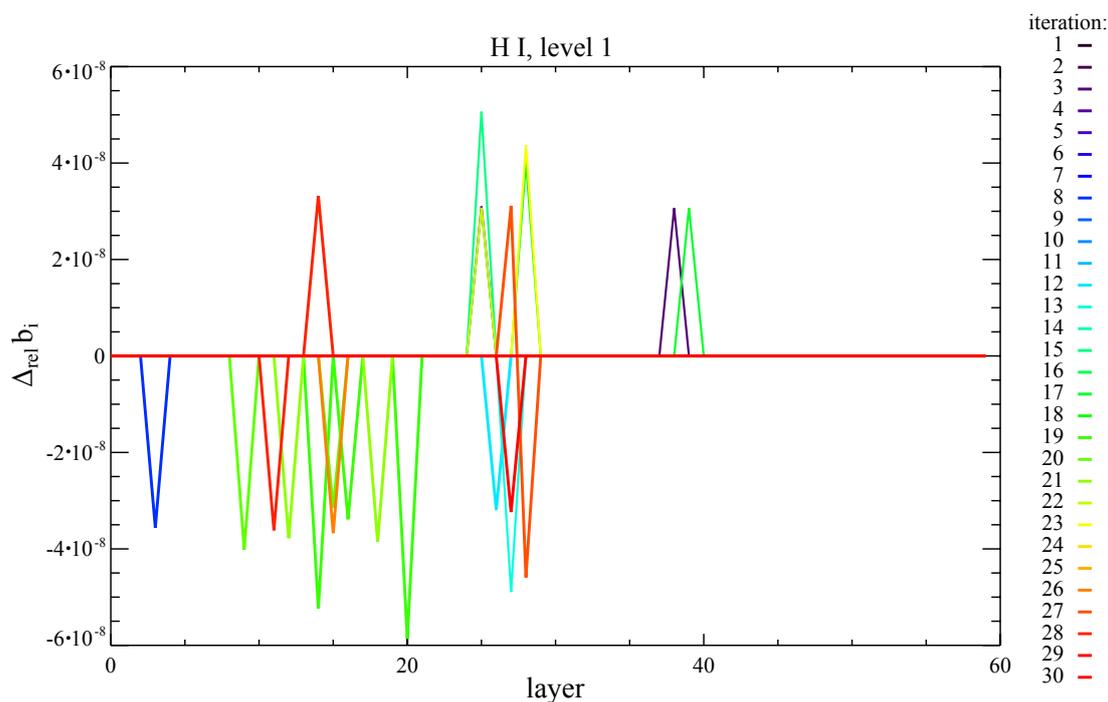


Abbildung 3.8: Typisches Rauschen in der relativen Differenz der Departure Coefficients bei einem Stern mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 8800$ K ohne Eisen als NLTE-Spezies

Extrema annehmen oder im Außenbereich, d.h. bei niedriger Layerzahl sehr unterschiedliche Werte annehmen, jedoch sind die Koeffizienten im Inneren des Sterns immer etwa vom Wert 1, was bedeutet, dass hier die LTE Annahme funktioniert, während die Werte in den äußeren Bereichen abfallen. Im Allgemeinen nehmen die Werte in den Außenbereichen aber mit ansteigendem Energieniveau zu und können bei höheren Energieniveaus auch vereinzelt größer als 1 sein.

Da man im direkten Vergleich der Graphen zwischen dem Elementgroup-Modus und dem Ion-group-Modus keine Unterschiede ausmachen kann und sich der Wertebereich der b_i über einige Größenordnungen erstreckt, werden die relativen Differenzen beider Modi bei festem Energieniveau, fester Spezies, festem Layer und fester Iteration betrachtet:

$$\Delta_{\text{rel}} b_i = \frac{b_i^{\text{Ion}} - b_i^{\text{Element}}}{b_i^{\text{Ion}} + b_i^{\text{Element}}} \quad (3.3)$$

3.2.1 NLTE ohne Eisen

Zunächst werden die Departure Coefficients für alle Modelle ohne Eisen als NLTE-Spezies, deren Spektren in Kapitel 3.1.1 betrachtet werden, verglichen. Für die meisten Differenzen der Departure Coefficients zeigt sich dabei ein unspektakuläres Bild. Ein typischer Differenzgraph ist in Abbildung 3.8 gegeben und zeigt numerisches Rauschen in den letzten von IDL ausgewerteten Stellen. Solche zufälligen punktförmigen Abweichungen wie hier in der Größenordnung 10^{-8} sind für das Modell und das resultierende Spektrum nicht von Bedeutung. Bevorzugt tritt

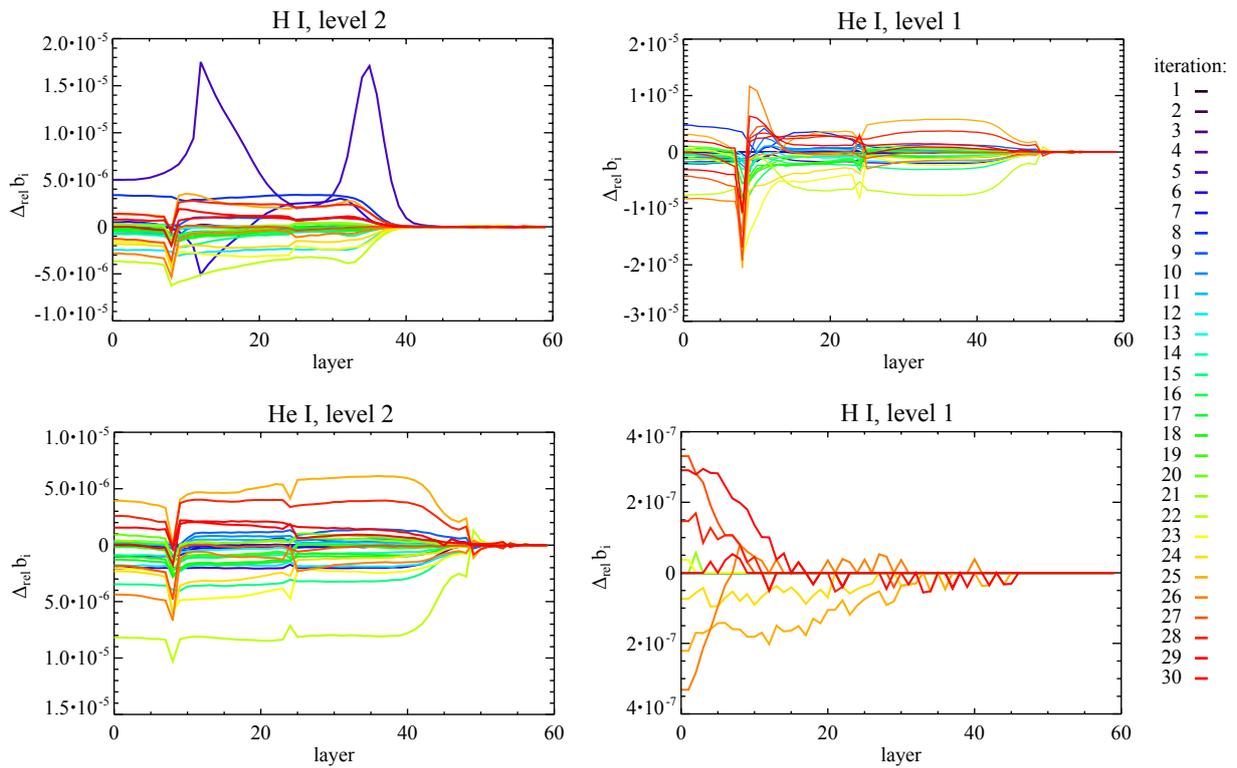


Abbildung 3.9: Relative Differenzen der Departure Coefficients zweier Sternmodelle mit $\log g = 4,5$. Oben links, oben rechtes und unten links: $T_{\text{eff}} = 2800 \text{ K}$, unten rechts $T_{\text{eff}} = 3800 \text{ K}$

dieses Rauschen in der relativen Differenz in den äußeren Schichten wo die Departure Coefficients kleiner sind als in der Mitte des Sterns.

Bei allen Modellen mit $\log g = 4,5$ und einer Effektivtemperatur zwischen 5800 K und 9800 K , sowie bei $\log g = 1,0$ und $\log g = 0,0$ bei den Effektivtemperaturen von 3800 K und 4800 K zeigt sich als relative Differenz der b_i genau so ein strukturloses Rauschen wie in Abbildung 3.8. Dabei ist es immer höchstens von der Größenordnung 10^{-8} . Nur bei $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 6800 \text{ K}$ ist das Rauschen etwas stärker und von der Größenordnung 10^{-7} . Dieses Rauschen von einzelnen Werten um den Wert null herum zeigt, dass sich die Konvergenz der b_i durch alle durchgeführten Iterationen quasi identisch ist. Bei all diesen Modellen war außerdem das Spektrum identisch.

Bei den Modellen mit $\log g = 4,5$ und einer Effektivtemperatur von 3800 K und 4800 K zeigt sich hingegen so etwas wie der Ansatz einer Struktur. Im Bereich der niedrigen Layer sind die Abweichungen mehr als einzelne Punkte, die von Null abweichen. Da dieses Verhalten sich in vielen Energieniveaus zeigt und in beiden Modellen sehr ähnlich aussieht, ist in Abbildung 3.9 exemplarisch ein solcher Graph für 3800 K dargestellt. Allerdings sind die relativen Differenzen in beiden Modellen noch sehr klein, da sie höchstens von der Größenordnung 10^{-7} sind. Lediglich im Modell mit $T_{\text{eff}} = 3800 \text{ K}$ bei der Spezies He II sind die relativen Differenzen auf

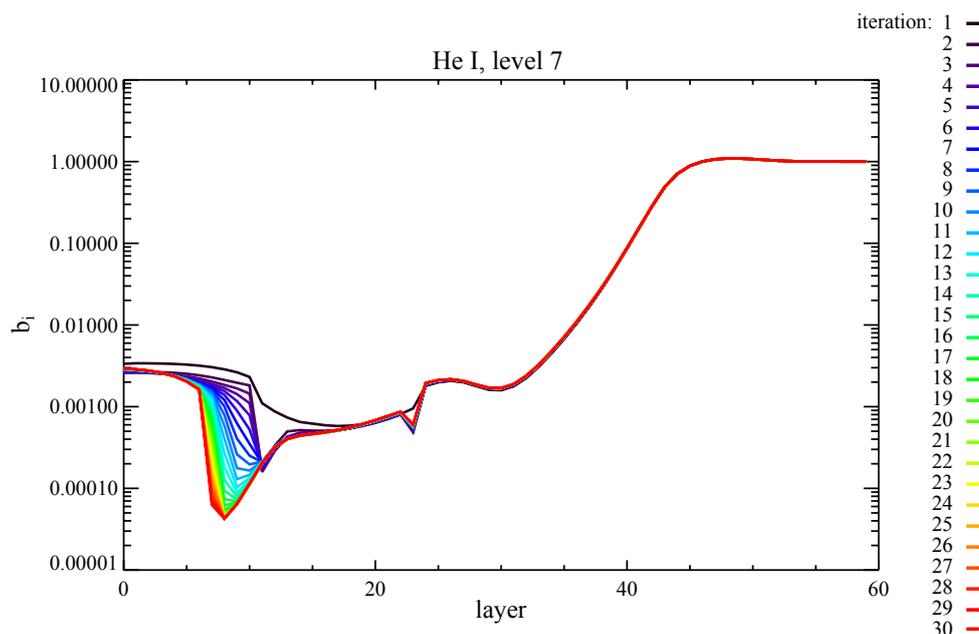


Abbildung 3.10: Departure Coefficients eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 2800$ K ohne Eisen als NLTE-Spezies

die Größenordnung 10^{-6} etwas größer. Allerdings dürfte der Anteil von He II bei solch einer niedrigen Temperatur relativ klein sein. Bei diesen Modellen gab es einige wenige punktförmige Abweichungen im Spektrum.

Bei $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 2800$ K werden die Unterschiede der Departure Coefficients deutlich chaotischer, hierfür sind in Abbildung 3.9 drei Beispiele abgebildet. Hier liegen die relativen Differenzen in den ersten 10 Iterationen bei etwa 10^{-4} . Betrachtet man hingegen nur Iteration 10-30, sinken diese Abweichungen auf 10^{-6} bei H I bzw. 10^{-5} bei He I und He II. Bei diesem Modell konvergiert die Differenz nicht mehr gegen null, sondern es zeigt sich eine echte Differenz beider Modi. Interessant ist, dass die meisten der Differenzkurven im Layer 9 und 25 eine Extremstelle oder zumindestens einen Knick aufweisen. Diesen Knick kann man auch in den plots der b_i selber beobachten, also wenn man gerade nicht die Differenzen betrachtet, siehe Abbildung 3.10. Am größten werden diese Knicks bei He II, welches jedoch wegen der geringen Temperatur nur zu sehr geringen Anteilen vorliegen dürfte. Diese Differenzen in den Departure Coefficients geben eine mögliche Erklärung für die etwas größeren Differenzen im Spektrum.

3.2.2 NLTE mit Eisen

Wenn man zunächst die Modelle mit $\log g = 4,5$ und den Eisenspezies Fe I, Fe II und Fe III im NLTE betrachtet, so stellt man fest, dass sich bei den Effektivtemperaturen zwischen 4800 K und 9800 K in allen Energieniveaus lediglich Rauschen von der Größenordnung 10^{-8} zeigt. Bei all diesen Modellen war das Spektrum identisch.

Bei 2800 K und 3800 K gestaltet sich die Situation allerdings etwas schwieriger. Wenn man bei 2800 K lediglich die ersten 9 Iterationen und bei 3800 K lediglich die ersten 8 Iteratio-

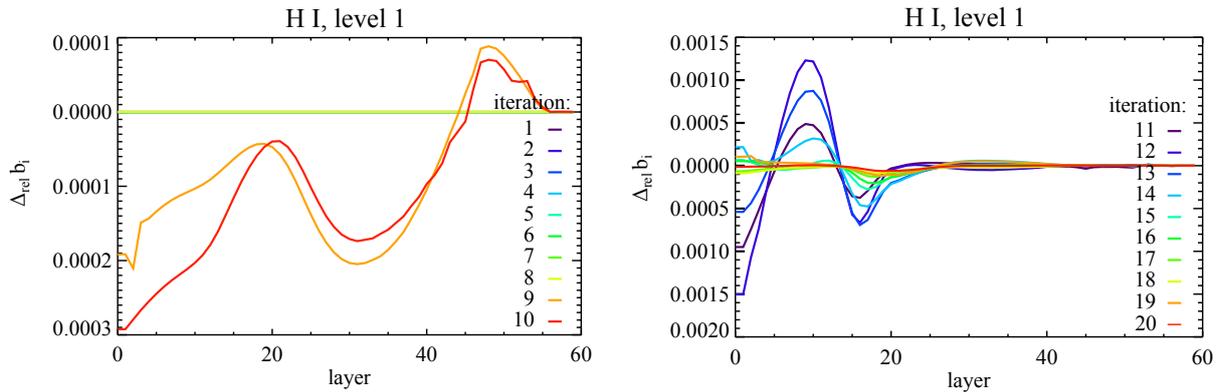


Abbildung 3.11: Relative Differenzen der Departure Coefficients eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 3800$ K und Eisen als NLTE-Spezies. Links: Iteration 1-10, rechts: Iteration 11-20

nen, die maximal durchgeführt werden können, bis die Berechnung des Elementgroup-Modus nach 96 Stunden durch Zeitüberschreitung abgebrochen wird, so zeigt sich auch lediglich dieses Rauschen von der Größenordnung 10^{-8} . Anschließend wurden mit den Zwischenergebnissen die Rechnung um 1 bzw. 2 Iterationen fortgesetzt, um auf insgesamt 10 Iterationen zu kommen, die im Iongroup-Modus auf Anhieb berechnet wurden. Ab exakt der Iteration, in dem die Berechnung im Elementgroup-Modus mit dem Zwischenergebnis fortgesetzt wird, zeigen sich nun relative Differenzen der Departure Coefficients, welche einige Größenordnungen größer sind.

Für $T_{\text{eff}} = 3800$ K ist dies deutlich in Abbildung 3.11 zu sehen. Die Iterationen 1-8 sind von leichtem Rauschen abgesehen, welches bei dieser Skalierung der Y-Achse aber nicht erkennbar ist, null. Ab Iteration 9, bei der die Berechnung des Elementgroup-Modus abgebrochen und wieder fortgesetzt wurde wachsen die Differenzen schlagartig um mehrere Größenordnungen. Von da an allerdings werden sie mit jeder Iteration kleiner und scheinen gegen null zu konvergieren. Dies erklärt warum die Differenzen im Spektrum immer kleiner werden. Möglicherweise würden sie auf annähernd null zurückgehen, wenn man das Modell genügend auskonvergieren ließe. Hierfür reichen die durchgeführten 20 Iterationen jedoch nicht aus. Die grundsätzliche Form der Differenzplots und ihr Wertebereich sind allerdings je nach betrachtetem Energieniveau und Spezies recht unterschiedlich. Die relative Differenz nimmt dabei Größenordnungen von bis zu 10^{-1} an.

Bei $T_{\text{eff}} = 2800$ K ist der Sprung in der relativen Differenz in Abbildung 3.12 von Iteration 9 auf Iteration 10 eindeutig zu erkennen. Im Gegensatz zu dem wärmeren Modell mit 3800 K scheinen die Departure Coefficients hier allerdings nicht gegen null konvergieren. Ab Iteration 16 wachsen die Differenzen sogar an. Interessant ist, dass die relativen Differenzen hier ein ähnliches Verhalten mit den Knicks in den Graphen zeigen, wie das gleiche Modell ohne Eisen im NLTE, vgl. Abbildung 3.9. Da 10 Iterationen auf den verwendeten Computern bei der Nutzung von 32 Prozessoren etwa 100 Stunden Rechenzeit benötigen, sind in diesem Modell keine weiteren

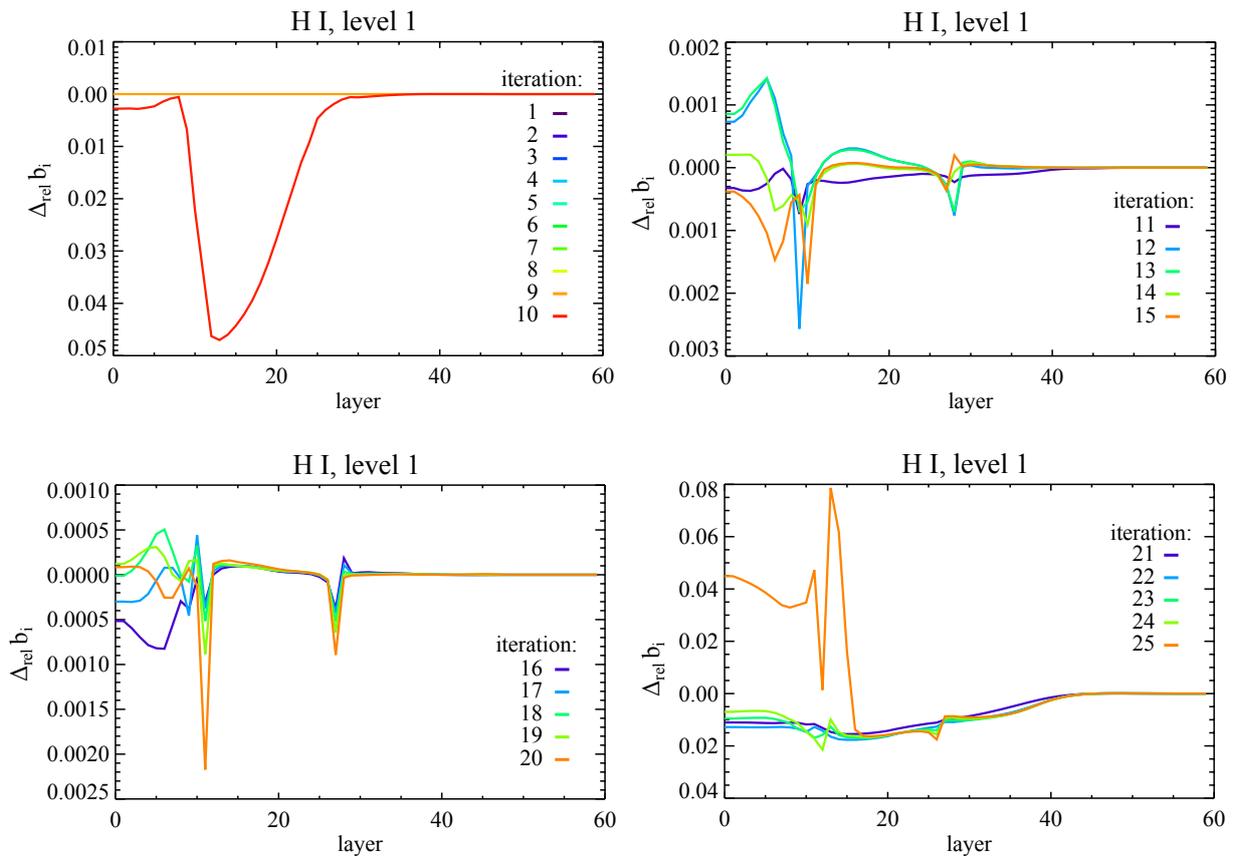


Abbildung 3.12: Relative Differenzen der Departure Coefficients eines Sterns mit $T_{\text{eff}} = 2800$ K, $\log g = 4,5$ und Eisen als NLTE-Spezies

Iterationen ausgeführt worden.

Anhand der Departure Coefficients von den Modellen mit $T_{\text{eff}} = 2800$ K und $T_{\text{eff}} = 3800$ K drängt sich die Vermutung auf, dass eine Rechnung, die nach Iteration x abbricht und fortgesetzt wird, um auf die gewünschten y Iterationen zu kommen nicht das gleiche Ergebnis liefert wie eine Rechnung, in der alle y Iterationen in einem Durchlauf durchgeführt werden. Möglicherweise erhält man deutlich weniger Abweichungen im Spektrum, wenn man entweder die Zeitbeschränkung umgeht oder stattdessen weniger Iterationen auf einmal berechnet, so dass nichts verfrüht abbricht und beide Modi gleich oft gestartet werden. Aus Zeitmangel konnte dies leider nicht weiter überprüft werden.

Betrachtet man die Modelle mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 9800$ K, bei denen die Liste der NLTE-Spezies auf Fe I-IV, Fe I-V, Fe I-VI und Fe I-VII vergrößert wurde, so zeigt sich hier in allen relativen Differenzen der Departure Coefficients lediglich ein schwaches Rauschen der Größenordnung 10^{08} . Das Spektrum dieser Modelle ist jeweils exakt identisch.

Bei $\log g = 1,0$ und der Effektivtemperatur von 3800 K lassen sich die Departure Coefficients nicht wirklich vergleichen, da die Rechnungen hier unter ungleichen Bedingungen durchgeführt

wurden. Damit die Rechnung ohne Absturz möglich war, musste die Anzahl der verwendeten Prozessoren im Elementgroup-Modus reduziert werden, siehe Kapitel 3.4.1. Vergleicht man die b_i trotzdem, so ergeben sich hier relative Differenzen von 10^{-1} . Bei $T_{\text{eff}} = 4800$ K hingegen ist die Berechnung der Modelle problemlos möglich und die b_i zeigen nur das schwache Rauschen von 10^{-8} . Hier war auch das Spektrum identisch.

Wenn man bei $\log g = 0,0$ und $T_{\text{eff}} = 3800$ K das reduzierte Modell ohne Fe III im NLTE betrachtet und die Departure Coefficients vergleicht, so zeigt sich in den ersten 10 Iterationen lediglich das schwache Rauschen von 10^{-8} . Anschließend wurde das reduzierte Modell um weitere 10 Iterationen fortgesetzt, um zu überprüfen ob es wirklich absturzfrei läuft. Überprüft man nun Iteration 11-20 ist auch nichts anderes als schwaches Rauschen zu beobachten. Bei diesem Modell wurde allerdings auch eine Rechnung mit verringerter Prozessorenzahl und Fe III im NLTE durchgeführt. Dabei wurde aber das Vergleichsmodell im Iongroup-Modus mit allen 32 Prozessoren berechnet, so dass die Bedingungen nicht gleich sind. Es zeigen sich auch hier starke relative Unterschiede der b_i in der Größenordnung 10^{-1} . Bei $T_{\text{eff}} = 4800$ K lässt sich auch nur ein reduziertes Modell ohne Fe II und Fe III betrachten, da es sonst abstürzt. Beim Vergleich der b_i im reduzierten Modell zeigt sich lediglich Rauschen der Größenordnung 10^{-7} .

3.3 Vergleich der Laufzeiten

Der Output von PHOENIX enthält neben dem Spektrum und den Departure Coefficients auch Informationen über die Laufzeiten verschiedener Unterabteilungen des Programms, die in diesem Kapitel verglichen werden. Betrachtet wird dabei die benötigte Zeit für die Abteilungen *structure integration*, *LTE line opacity*, *NLTE opacity*, *radiative rates*, *radiative transfer*, *total time for spectrum* und *solve NLTE stat eqs*. Diese Zeiten werden von PHOENIX einzeln für jede durchgeführte Iteration angegeben. Um einen groben Überblick zu erhalten, werden hier jeweils die Mittelwerte dieser Zeiten für die ersten 10 Iterationen angegeben.

Dabei ist zu beachten, dass die angegebene Zeit die Wallclock-Zeit und damit keine CPU-Zeit ist. Das bedeutet, dass die Zeit weiterläuft, wenn der Computer gerade andere Aufgaben bearbeitet oder auf Dateien per Network File System, kurz NFS, zugreift und das Netzwerk gerade überlastet ist. Außerdem setzt sich der Wallclock-Timer uhrzeitabhängig, zum Beispiel immer um Mitternacht zurück, wodurch vereinzelt negative Zahlenwerte als Laufzeit angegeben werden. Damit diese Werte die Mittelwerte nicht völlig verfälschen, werden Laufzeiten, die um mehr als den Faktor 2 vom Mittelwert abweichen und damit auch alle negativen Werte, aus der Berechnung ausgenommen. Eine gewisses Restmaß an Verfälschung lässt sich jedoch nicht völlig verhindern.

3.3.1 NLTE ohne Eisen

In der Tabelle 3.1 sind die Laufzeiten für die betrachteten Modelle ohne Eisen als NLTE-Spezies angegeben. Da die Berechnung dieser Modelle sehr schnell geht, sind dementsprechend die Lauf-

Tabelle 3.1: Vergleich der Laufzeiten des Iongroup-Modus mit denen des Elementgroup-Modus für verschiedene Unterabteilungen von PHOENIX bei Modellen ohne Eisen als NLTE-Spezies

log g	T_{eff} [K]	structure integration [s]		LTE line opacity [s]		radiative transfer [s]		total time for spectrum [s]		solve NLTE stat eqs [s]	
		Ion	Elem	Ion	Elem	Ion	Elem	Ion	Elem	Ion	Elem
4,50	2800	494,8	501,9	17,6	17,5	10,7	10,7	31,7	31,7	12,8	13,6
	3800	315,0	321,3	5,1	5,0	11,8	12,0	20,7	20,6	10,5	10,8
	4800	258,1	258,7	2,2	2,2	12,4	12,4	18,3	18,3	10,7	10,3
	5800	243,4	244,3	2,1	2,1	12,5	12,2	18,2	18,1	9,8	9,8
	6800	272,6	267,8	1,8	1,8	12,6	12,4	18,2	18,1	9,8	10,7
	7800	263,5	260,8	1,6	1,6	12,6	12,6	18,0	17,9	10,2	10,4
	8800	272,7	271,2	1,4	1,4	12,5	12,7	17,9	18,1	9,8	9,5
	9800	214,2	215,8	1,3	1,3	12,5	12,5	17,9	17,9	10,5	9,5
1,00	3800	301,4	304,2	4,4	4,5	12,7	12,2	20,5	20,3	10,5	10,2
	4800	262,4	263,3	1,1	1,0	12,5	12,5	17,8	17,4	10,5	11,1
0,00	3800	343,5	348,5	5,0	5,0	12,0	11,9	20,7	20,7	10,5	10,4
	4800	303,2	297,8	3,0	3,2	12,5	12,6	19,2	19,4	10,5	10,4

zeiten sehr kurz. Die Zeiten für *radiative rates* und *NLTE opacity* sind in der Tabelle nicht aufgeführt, da sie zu kurz sind, um irgendeine Aussagekraft zu besitzen. Erstere ist nämlich immer kürzer als 0,5 s und letztere immer kürzer als 2 s. Außerdem zeigen sich bei diesen beiden Zeiten keine wesentlichen Unterschiede zwischen den berechneten Modellen. Betrachtet man die übrigen Werte, so zeigt sich, dass die Werte für *structure integration*, *LTE line opacity* und *total time for spectrum* eine gewisse Temperaturabhängigkeit zeigen, da sie mit sinkender Temperatur ansteigen. Die übrigen sind in einem gewissen Rahmen konstant. Die Änderung von log g hat keine wesentliche Änderung für die Laufzeit zur Folge. Bei allen hier aufgeführten Modellen ohne Eisen im NLTE ist kein Unterschied der Laufzeiten zwischen Elementgroup-Modus und Iongroup-Modus feststellbar.

3.3.2 NLTE mit Eisen

In den Tabellen 3.2 und 3.2 sind die Laufzeiten für die Modelle mit Eisen als NLTE-Spezies für die Modelle mit log $g = 4,5$ angegeben. Die Laufzeiten aus den Modellen mit log $g = 1,0$ und log $g = 0,0$ werden hier nicht aufgeführt, da dort die Berechnung im Elementgroup-Modus nur möglich ist, wenn man entweder die Liste der NLTE-Spezies reduziert oder die Anzahl der Prozessoren zur Berechnung verringert. Beides sorgt aber dafür, dass für die Laufzeiten keine Vergleichsmöglichkeit mehr besteht.

Schaut man nun die Laufzeiten in den beiden Tabellen an, so fällt auf, dass die Zeit für die *structure integration* und *LTE line opacity* in beiden Modi mit sinkender Temperatur ansteigen. Ein Unterschied zwischen beiden Modi ist hier jedoch nicht festzustellen. In den Bereichen *NLTE opacity*, *radiative rates*, *radiative transfer* und *total time for spectrum* ist die Laufzeit unabhängig von der Wahl der Temperatur und des Berechnungsmodus. Im Bereich *solve NLTE stat eqs*

Tabelle 3.2: Vergleich der Laufzeiten des Iongroup-Modus mit denen des Elementgroup-Modus verschiedene Unterabteilungen von PHOENIX bei Modellen mit Eisen als NLTE-Spezies für $\log g = 4,5$.

Eisen NLTE- Spezies	T_{eff} [K]	structure integration [s]		LTE line opacity [s]		NLTE opacity [s]		radiative rates [s]	
		Ion	Elem	Ion	Elem	Ion	Elem	Ion	Elem
Fe I-III	2800	1602	1606	438	438	2167	2110	1548	1550
	3800	1151	1123	168	166	2236	2243	1641	1620
	4800	904	912	109	109	2163	2218	1609	1607
	5800	934	945	101	101	2234	2217	1606	1609
	6800	979	969	70	70	2145	2146	1623	1645
	7800	983	976	100	102	2292	2183	1573	1617
	8800	939	948	98	98	2250	2165	1609	1627
	9800	780	780	95	94	2190	2255	1608	1606
Fe I-IV	9800	838	846	104	104	2759	2754	1969	1993
Fe I-V		873	883	109	107	2952	2967	2195	2195
Fe I-VI		912	894	104	103	3127	3103	2167	2185
Fe I-VII		936	930	109	109	3188	3172	2273	2200

Tabelle 3.3: Vergleich der Laufzeiten des Iongroup-Modus mit denen des Elementgroup-Modus verschiedene Unterabteilungen von PHOENIX bei Modellen mit Eisen als NLTE-Spezies für $\log g = 4,5$.

Eisen NLTE- Spezies	T_{eff} [K]	radiative transfer [s]		total time for spectrum [s]		solve NLTE stat eqs [s]	
		Ion	Elem	Ion	Elem	Ion	Elem
Fe I-III	2800	264	268	4470	4418	6077	28622
	3800	293	290	4391	4373	5589	27498
	4800	300	293	4238	4283	5571	20518
	5800	292	296	4289	4279	5222	12783
	6800	295	298	4202	4216	5218	9809
	7800	286	296	4306	4254	5244	8651
	8800	299	300	4312	4247	6010	8842
	9800	305	300	4254	4311	5789	7928
Fe I-IV	9800	304	306	5227	5216	5474	9517
Fe I-V		307	314	5635	5645	5695	11958
Fe I-VI		319	322	5781	5775	4966	16934
Fe I-VII		312	320	5945	5865	5471	26133

Tabelle 3.4: Anzahl der verwendeten Stellen zum Lösen der *NLTE stat eqs*. Dabei sind die Mittelwerte von Layer 1 und 2 über alle 10 Iterationen angegeben.

T_{eff} [K]	Ion Group Mode						Element Group Mode		
	H I	He I	He II	Fe I	Fe II	Fe III	H	He	Fe
2800	63	96	193	46	68	112	62	225	134
3800	50	74	139	41	55	84	50	174	101
4800	45	68	125	40	50	76	45	154	89
5800	40	59	101	40	44	65	40	121	72
6800	38	53	91	39	42	59	38	105	63
7800	36	49	83	39	40	54	36	94	57
8800	36	46	76	39	38	51	36	85	51
9800	36	43	71	39	38	47	36	76	47

hingegen zeigt sich ein deutlicher Unterschied beider Modi. Während im Iongroup-Modus die Zeit temperaturunabhängig bleibt, so ist sie im Elementgroup-Modus für alle Modelle zunächst einmal größer und steigt zudem mit sinkender Temperatur an. Während sie bei 9800 K noch fast identisch ist, so ist sie bei 2800 K im Elementgroup-Modus etwa 5 Mal größer als im Iongroup-Modus

Wenn man nun die Liste der Eisenionen im NLTLE erweitert und die Effektivtemperatur konstant bei 9800 K lässt, fällt auf, dass alle Zeiten mit wachsender Speziesliste leicht ansteigen. Auch hier liegt der einzige Unterschied im Bereich *solve NLTE stat eqs*. Während sich die Zeit im Iongroup-Modus nicht signifikant ändert, wächst sie im Elementgroup-Modus stark an.

Um den wachsenden Unterschied der Unterabteilung *solve NLTE stat eqs* bei sinkender Temperatur näher zu untersuchen, wird die Anzahl der Stellen betrachtet, die zum Lösen der Gleichungen verwendet werden. Um die Gleichungen zu lösen, berechnet der Arbitrary-Precision-Solver zunächst den Dynamic Range zwischen Maximum und Minimum und vergrößert ihn anschließend noch pauschal um 24 Stellen, damit die Gleichung gelöst werden kann, ohne dass kleinere Zahlen verloren gehen. Je mehr Stellen in diesem Dynamic Range enthalten sind, desto länger dauert die Berechnung. Dieser Dynamic Range wird nun einzeln für jede der 64 Schichten, für jede der Iterationen und für jedes Ion im Iongroup-Modus bzw. für jedes Element im Elementgroup-Modus ausgerechnet. Die zu berechnenden Schichten werden auf die verwendeten 32 Prozessoren aufgeteilt. Da standartmäßig nur der Output vom ersten Prozessor aufgehoben wird, sind hier also die Informationen über Layer 1 und Layer 2 angegeben. Da hier die Temperatur am niedrigsten und damit die Anzahl der verwendeten Stellen im Allgemeinen am höchsten ist, sind diese aber auch am relevantesten. In Tabelle 3.4 ist nun die Anzahl der verwendeten Stellen angegeben. Da sich Schicht 1 und 2 wenn überhaupt nur um sehr wenig unterscheiden und sich im Verlauf der Iterationen nur geringfügig ändern, ist hier der Mittelwert beider Schichten über alle Iterationen angegeben.

Allgemein lässt sich erkennen, dass der dynamische Range bei heißen Temperaturen deutlich kleiner ist als bei kalten. Dass sich die Zeit für *solve NLTE stat eqs* nun mit sinkender Temperatur

etwa verdreifacht, ist anhand dieser Tabelle nachvollziehbar, da sich die Anzahl der Stellen für Eisen mit sinkender Temperatur von 47 auf 134 stark erhöht. Die Anzahl der Stellen für Wasserstoff und Helium wachsen zwar auch an, allerdings fällt Eisen vermutlich deutlich mehr ins Gewicht, da hier etwa 50 Mal so viele Energieniveaus berechnet werden. Interessant ist nun allerdings, dass die Zeit im Iongroup-Modus quasi konstant bleibt, obwohl sich die Anzahl der verwendeten Stellen bei Fe II mit etwa 900 Energieniveaus fast verdoppelt und bei Fe III mit etwa 500 Energieniveaus etwa verzweieinhalbfacht. Das heißt, hier scheint die Rechenzeit eher von der Größe der Matrizen als von der Anzahl der verwendeten Stellen abzuhängen.

3.4 Liste aufgetretener Abbrüche

3.4.1 FE=NAN

Bei Oberflächengravitationen von $\log g = 1,0$ und $\log g = 0,0$ brechen einige Rechnungen im Elementgroup-Modus mit der Meldung „x FE=NAN“ in der Datei fort.6*000 ab. Wenn man bei diesen Modellen die Departure Coefficients betrachtet, fällt auf, dass die Departure Coefficients einzelner Layer für bestimmte Spezies exakt null sind. Dieser Abbruch lässt sich im Allgemeinen auf zwei verschiedene Weisen verhindern. Entweder reduziert man die Liste der NLTE-Spezies oder man ändert die Anzahl der verwendeten Prozessoren zur Berechnung.

Aufgetreten ist der Fehler bei folgenden Modellen:

- Bei $\log g = 0,0$ mit $T_{\text{eff}} = 3800$ K und den NLTE-Spezies H I, He I-II, Fe I-III bricht die Rechnung zu Beginn der 9. Iteration mit der Meldung 1FE=NAN ab. Die Departure Coefficients von H I im Level 27 und 30 sind jeweils im Layer 20 exakt null. Wie in Abbildung 3.13 zu sehen ist, verhalten sich die umliegenden Departure Coefficients weitestgehend normal, wenn man von ein paar kleinen Schwankungen absieht, die in den vorherigen Iterationen nicht aufgetaucht sind. Schaltet man testweise den Staub durch die Änderung von $\text{igrains}=1$ auf $\text{igrains}=0$ ab, so bricht die Rechnung zu Beginn der 8. Iteration mit 1FE=NAN ab. Hier sind die Departure Coefficients von der Spezies H I im Level 24 in Layer 19, im Level 26 in Layer 18-20, in Level 27 im Layer 19-20, in Level 28 im Layer 16 und von Level 30 im Layer 18 exakt gleich null. Entfernt man Fe III aus der Liste der NLTE-Spezies, geschieht kein Abbruch mehr. Reduziert man die Anzahl der Prozessoren von 32 auf 24, ohne dass man Fe III aus der Liste entfernt, so geschieht auch kein Abbruch mehr.
- Bei $\log g = 0,0$ mit $T_{\text{eff}} = 4800$ K und den NLTE-Spezies H I, He I-II, Fe I-III bricht die Rechnung zu Beginn der 5. Iteration mit der Meldung 8FE=NAN ab. Hier ist der Departure Coefficient in Level 133 im Layer 3 Fe I exakt gleich null. Entfernt man bei ansonsten gleicher Konfiguration Fe III aus der Liste der NLTE-Spezies, bricht die Rechnung zu Beginn der 5. Iteration mit der Meldung 8FE=NAN ab. Hier ist der Departure Coefficient

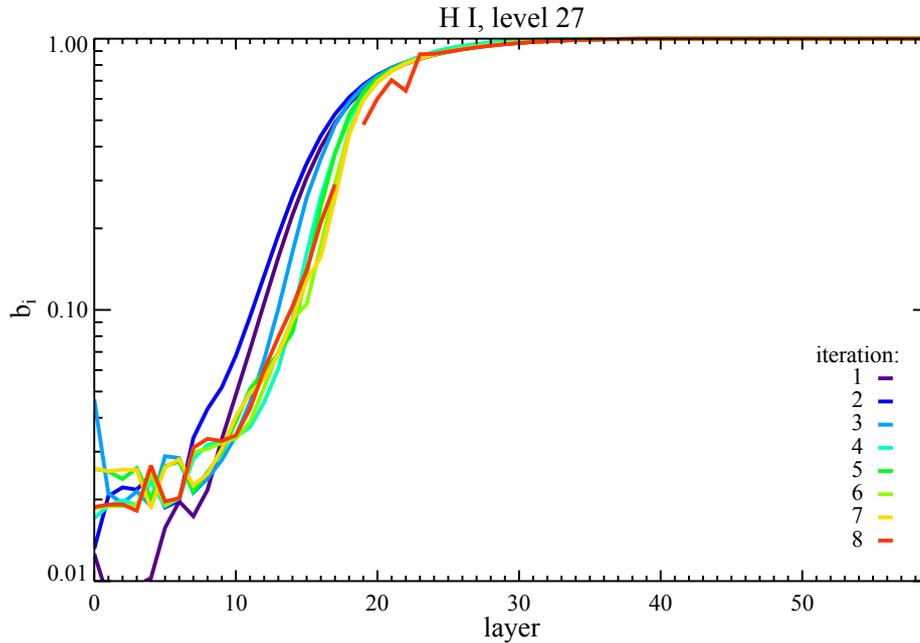


Abbildung 3.13: Departure Coefficients eines Modell mit $T_{\text{eff}} = 3800$ K, $\log g = 0,0$ und den NLTE-Spezies: H I, He I-II, Fe I-III Abbruch nach Iteration 8 mit der Meldung FE=NAN

im Layer 3 des Energieniveaus 124 und 133 von Fe I exakt gleich null. Entfernt man schließlich auch noch Fe II, geschieht kein Abbruch mehr.

- Bei $\log g = 1,0$ mit $T_{\text{eff}} = 3800$ K und den NLTE-Spezies H I, He I-II, Fe I-III bricht die Rechnung zu Beginn der 3. Iteration mit der Meldung 1FE=NAN ab. Hier sind die Departure Coefficients von Level 24 im Layer 11 und 12, im Level 25 im Layer 9, 10 und 13, im Level 26 im Layer 7,11 und 12, im Level 27, Layer 11 und 12, im Level 29 im Layer 11 und in Level 30 im Layer 7,10 und 13 exakt gleich null. Die Anzahl der Spezies wurde hier nicht weiter reduziert. Reduziert man die Anzahl der Prozessoren von 32 auf 24, so funktioniert die Rechnung ohne Abbruch.
- Der Vollständigkeit halber wird auch folgendes Modell aufgeführt, selbst wenn die gewählte Temperatur von $T_{\text{eff}} = 5900$ K bei einem $\log g = 0,0$ zu hoch ist, als dass der Stern stabil sein könnte. Denn an diesem Modell zeigt sich, dass das Auftreten von FE=NAN nicht an das Vorhandensein von Eisen in der Liste der NLTE-Spezies gebunden ist, denn es wurden nur H I, He I und He II als NLTE-Spezies ausgewählt. Diese Rechnung bricht zu Beginn der 3. Iteration mit 1FE=NAN ab. Hier sind die Departure Coefficients von Level Level 24 im Layer 12, von Level 26 im Layer 12, von Level 27 im Layer 11 und 12 und von Level 28 im Layer 12 exakt gleich null. Schaltet man den Staub durch die Änderung von $\text{igrains}=1$ zu $\text{igrains}=0$ ab, kommt es zum gleichen Resultat. Ändert man die Anzahl der verwendeten Prozessoren von 32 auf 24, bricht die Rechnung zu Beginn der 5. Iteration it

1FE=NAN ab. Hier ist der Departure Coefficient von Level 21 im Layer 21 exakt gleich null. In dieser Konfiguration bricht auch der Iongroup-Modus mit der Meldung „fcthyd: convection theta .lt. 0!“ in der Datei fort.6 ab.

Außer in dem letzten hier aufgeführten Modell funktionierte der Iongroup-Modus jeweils ohne Probleme.

3.4.2 segmentation fault

Ein weiterer Abbruch laufender Rechnungen geschieht mit der Meldung

```
+ mpistart ./phoenix
[thing:176184] [0,0,0] ORTE_ERROR_LOG:
    Timeout in file base/pls_base_orted_cmds.c at line 275
[thing:176184] [0,0,0] ORTE_ERROR_LOG:
    Timeout in file pls_rsh_module.c at line 1166
[thing:176184] [0,0,0] ORTE_ERROR_LOG:
    Timeout in file errmgr_hnp.c at line 90
mpirun noticed that job rank 2 with PID 229682 on node thing exited
on signal 11 (Segmentation fault).
[thing:176184] [0,0,0] ORTE_ERROR_LOG:
    Timeout in file base/pls_base_orted_cmds.c at line 188
[thing:176184] [0,0,0] ORTE_ERROR_LOG:
    Timeout in file pls_rsh_module.c at line 1198
-----
mpirun was unable to cleanly terminate the daemons for this job.
    Returned value Timeout instead of ORTE_SUCCESS.
-----
```

in der .e Protokolldatei. Dies geschieht oft dann, wenn höhere Eisenionen der Liste der NLTE-Spezies hinzugefügt werden. Dieser Abbruch tritt jeweils nach etwa 2 Stunden Laufzeit und zwar ausschließlich im Elementgroup-Modus auf. Dieser Abbruch taucht einigermaßen regelmäßig auf, ist allerdings nicht ständig reproduzierbar. Wiederholt man eine zuvor mit dieser Meldung abgebrochene Rechnung ohne irgendeine Änderung, kommt es vor, dass sie funktioniert. Der Grund dafür konnte nicht geklärt werden. Möglicherweise waren die zur Verfügung stehenden 256GB Arbeitsspeicher voll.

Dieser Abbruch tritt unter anderem bei folgenden Konfigurationen auf. Die Oberflächengravitation beträgt jeweils $\log g = 4,5$.

- Bei einer Effektivtemperatur von $T_{\text{eff}} = 9800$ K tritt dieser Fehler mit den NLTE-Spezies H I, He I-II und Fe I-VII auf. Diese Rechnung lässt sich durch wiederholtes Versuchen fehlerfrei durchführen.

- Bei einer Effektivtemperatur von $T_{\text{eff}} = 3800$ K tritt dieser Fehler sowohl bei den eingeschalteten NLTE-Spezies H I, He I-II und Fe I-V als auch bei H I, He I-II und Fe I-VI auf.
- Bei einer Effektivtemperatur von $T_{\text{eff}} = 2800$ K tritt dieser Fehler sowohl bei den eingeschalteten NLTE-Spezies H I, He I, He II und Fe I-IV als auch bei H I, He I, He II und Fe I-V auf. Erstere Konfiguration lässt sich durch Wiederholung fehlerfrei durchführen.

3.4.3 kapcal temperature < 0!

Bei der Oberflächengravitation $\log g = 0,0$ und einer Temperatur von 5800 K kam es zum sofortigen Abbruch nach spätestens 2 Minuten mit der Meldung „kapcal: temperature < 0!“ in der Datei fort.6. Dies geschah in beiden Modi sowohl mit als auch ohne Eisen als NLTE-Spezies. Obwohl die Temperatur vermutlich zu heiß für solch einen Stern ist, als dass er stabil sein könnte, ist dieser Abbruch hier aufgeführt, da dieser spezielle Fehler nicht auftritt wenn man statt des Startfiles „lte58-0.00-0.0.AGS.Cond.PHOENIX-ACES-2009.20“ das um 100 K heißere „lte59-0.00-0.0.AGS.Cond. PHOENIX-ACES-2009.20“ nimmt und dann die Effektivtemperatur auf 5800 K im .dqs File einstellt. Möglicherweise ist etwas mit dem Startfile nicht in Ordnung.

4 Fazit

Abschließend lässt sich sagen, dass der Elementgroup-Modus in den meisten betrachteten Modellen sehr schön funktioniert. Die berechneten Spektren sind bis auf punktförmige Abweichungen meist identisch. Einzig bei Modellen mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 2800$ K und $T_{\text{eff}} = 3800$ K und bei Modellen mit niedrigeren Oberflächengravitationen, wenn der Elementgroup-Modus stabilitätsbedingt mit einer anderen Prozessorzahl ausgeführt wird oder durch Zeitüberschreitung seine Berechnung abbricht und manuell wieder fortgesetzt wird, tauchen recht starke Differenzen auf. Auch sind dies die einzigen Modelle, bei denen das Wellenlängengitter interpoliert werden muss, um einen sinnvollen Differenzplot überhaupt erst zu ermöglichen.

Bei der Untersuchung der Departure Coefficients der beiden Modelle mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 2800$ K bzw. $T_{\text{eff}} = 3800$ K zeigt sich, dass starke Abweichungen auftreten, sobald der Elementgroup-Modus nach einem vorzeitigen Abbruch durch Überschreitung der Rechenzeit fortgesetzt wurde. Um hier eine bessere Aussage über die Funktionsweise des Elementgroup-Modus zu erhalten, sollten diese beiden Modelle neu berechnet werden. Dies kann entweder auf einem schnelleren Computer, z.B. dem HLRN, oder durch Verringerung der geforderten Anzahl der Iterationen erreicht werden. Werden beide Modelle nach gleicher Anzahl an Iterationen mit ihrem Ergebnis fortgesetzt, ist dies unproblematisch, wie sich bei dem Modell mit $\log g = 0,0$ und $T_{\text{eff}} = 3800$ K zeigt. Bricht jedoch das eine ab und wird fortgesetzt, während das andere durchläuft wird die Vergleichbarkeit der Modelle zerstört. Ebenso scheint die Vergleichbarkeit bei unterschiedlicher Prozessorzahl nicht gegeben zu sein.

Als nächstes sollten die Gründen für die aufgetretenen Berechnungsabbrüche näher untersucht werden. Vermutlich ist es auch hier sinnvoll auszuprobieren, ob diese Fehler möglicherweise architekturabhängig sind, indem man die Berechnungen auf einem anderen Computer wiederholt. Anschließend kann ausgetestet werden, wie der Elementgroup-Modus mit Radioaktivität in Sternen oder Supernovae zurechtkommt, wofür er ursprünglich auch konzipiert wurde.

Literaturverzeichnis

- [Hauschildt 1993] Hauschildt, P.H.: *Multi-level Non-LTE radiative transfer in expanding shells*, J. Quant.Spectrosc. Radit. Transfer Vol. 50, No. 3, pp. 301-318, 1993
- [Hauschildt und Baron 1998] Hauschildt, P. H., and Baron, E.: *Numerical solution of the expanding stellar atmosphere problem*, J.Comput.Appl.Math.109:41-63,1999
- [Hauschildt und Baron 2006] Hauschildt, P.H., and Baron, E.: *A 3D radiative transfer framework. I. Non-local operator splitting and continuum scattering problems*, A&A 451, 273–284 (2006)
- [Hauschildt und Baron 2010] Hauschildt, P. H., and Baron, E: *PHOENIX version 16 manual*, http://www.hs.uni-hamburg.de/index.php?option=com_phocadownload&view=file&id=6&Itemid=266&lang=de, 2010
- [Hauschildt 2012] Hauschildt, P. H.: *Stern- und Planetenatmosphären*, Universität Hamburg, Vorlesung, 2012
- [Mihalas 1970] Mihalas, D.: *Stellar Atmospheres*, San Francisco: Freeman, first edition, 1970
- [Mihalas 1978] Mihalas, D.: *Stellar Atmospheres*, San Francisco: Freeman, second edition, 1978
- [Rutten 2003] Rutten, R.J.: *Radiative Transfer in Stellar Atmospheres*, 8. Auflage, Utrecht University lecture notes, Mai 2003

Abbildungsverzeichnis

3.1	Zwei Spektren von Sternen mit $\log g = 4,5$ und H I, HeI-II und Fe I-III als NLTE-Spezies. Links: $T_{\text{eff}} = 2800$ K, Rechts: $T_{\text{eff}} = 9800$ K	10
3.2	Relative Differenzen der Spektren zweier Sterne mit $\log g = 4,5$ ohne Eisen als NLTE-Spezies. Links: $T_{\text{eff}} = 3800$ K, Rechts: $T_{\text{eff}} = 4800$ K	11
3.3	Relative Differenz des Spektrums eines Sterns mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 2800$ K ohne Eisen als NLTE-Spezies zwischen Elementgroup-Modus und Iongroup-Modus	12
3.4	Vergleich der Spektren eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 3800$ K und Fe I-III als NLTE-Spezies. Links: absolute Differenz, rechts: relative Differenz	13
3.5	Relative Differenz der Spektren eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 2800$ K und Eisen als NLTE-Spezies, Iteration 1-25	14
3.6	Relative Differenz der Spektren zweier Sterne mit $T_{\text{eff}} = 3800$ K und Eisen als NLTE-Spezies. Elementgroup-Modus lief mit verringerter Prozessorenzahl. Links: $\log g = 0,0$, rechts: $\log g = 1,0$	15
3.7	Departure Coefficients von He I Level 1 bei einem Stern mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 9800$ K im Iongroup-Modus ohne Eisen im NLTE	16
3.8	Typisches Rauschen in der relativen Differenz der Departure Coefficients bei einem Stern mit $\log g = 4,5$ und $T_{\text{eff}} = 8800$ K ohne Eisen als NLTE-Spezies	17
3.9	Relative Differenzen der Departure Coefficients zweier Sternmodelle mit $\log g = 4,5$. Oben links, oben rechts und unten links: $T_{\text{eff}} = 2800$ K, unten rechts $T_{\text{eff}} = 3800$ K	18
3.10	Departure Coefficients eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 2800$ K ohne Eisen als NLTE-Spezies	19
3.11	Relative Differenzen der Departure Coefficients eines Sterns mit $\log g = 4,5$, $T_{\text{eff}} = 3800$ K und Eisen als NLTE-Spezies. Links: Iteration 1-10, rechts: Iteration 11-20	20
3.12	Relative Differenzen der Departure Coefficients eines Sterns mit $T_{\text{eff}} = 2800$ K, $\log g = 4,5$ und Eisen als NLTE-Spezies	21
3.13	Departure Coefficients eines Modell mit $T_{\text{eff}} = 3800$ K, $\log g = 0,0$ und den NLTE-Spezies: H I, He I-II, Fe I-III Abbruch nach Iteration 8 mit der Meldung FE=NAN	27

Tabellenverzeichnis

3.1	Vergleich der Laufzeiten des Iongroup-Modus mit denen des Elementgroup-Modus für verschiedene Unterabteilungen von PHOENIX bei Modellen ohne Eisen als NLTE-Spezies	23
3.2	Vergleich der Laufzeiten des Iongroup-Modus mit denen des Elementgroup-Modus verschiedene Unterabteilungen von PHOENIX bei Modellen mit Eisen als NLTE-Spezies für $\log g = 4,5$	24
3.3	Vergleich der Laufzeiten des Iongroup-Modus mit denen des Elementgroup-Modus verschiedene Unterabteilungen von PHOENIX bei Modellen mit Eisen als NLTE-Spezies für $\log g = 4,5$	24
3.4	Anzahl der verwendeten Stellen zum Lösen der <i>NLTE stat eqs</i> . Dabei sind die Mittelwerte von Layer 1 und 2 über alle 10 Iterationen angegeben.	25

Erklärung

Hiermit bestätige ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbständig verfasst wurde und ich keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel – insbesondere keine im Quellenverzeichnis nicht benannten Internet-Quellen – benutzt habe und die Arbeit von mir vorher nicht einem anderen Prüfungsverfahren eingereicht wurde. Die eingereichte schriftliche Fassung entspricht der auf dem elektronischen Speichermedium. Ich bin damit einverstanden, dass die Bachelorarbeit veröffentlicht wird.

Hamburg, 25.4.2013

(Florian Blumendorf)