Verfahren zur rechnerischen Lösung von Wolf- Rayet -Sternatmosphären

Diplom- Arbeit von Mario Schmidt

Institut f. Theoretische Astrophysik Heidelberg

Oktober 1984

Zusammenfassung

Zur theoretischen Erklärung der Atmosphären- und Windstruktur von Wolf- Rayet- Sternen ist es notwendig, leistungsfähige Computerprogramme zu entwickeln. Diese Modelle müssen aufgrund der besonderen Merkmale, wie z.B. dem hohen Massenverlust, den außergewöhnlichen Elementhäufigkeiten und den hohen Ionisationszuständen, eine Reihe von Effekten berücksichtigen: Sphärisch symmetrischen Strahlungstransport für ein bewegtes Medium, explizite Berücksichtigung der Opazitäten der CNO- Elemente, Abweichungen vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht und von einer hydrostatischen Dichteschichtung.

In dieser Arbeit wird eine Methode zur numerischen Lösung des Randwertproblems bei Systemen linearer Differentialgleichungen erster Ordnung vorgestellt und auf das Problem des sphärischen Strahlungsstransportes in einem bewegten Medium angewendet. Durch die geeignete Wahl der Winkeldiskretisierung können Fehler, wie sie bei vergleichbaren Verfahren auftreten, vermieden werden. Dieses Verfahren erscheint für die Modellberechnung von Wolf- Rayet- Sternatmosphären besonders geeignet zu sein.

Im Anhang sind Atomdaten der für die Wolf- Rayet- Sterne wichtigen Stickstoffionen N III - N V zusammengestellt. Sie stellen die Grundlage für das Lösen der statistischen Gleichungen und damit für die Berücksichtigung von non- LTE-Effekten bei Modellatmosphären dar.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung 3

1. Einleitung 7
   1.1. Das Wolf-Rayet- Phänomen 7
   1.2. Beobachtungen von WR- Sternen 9
   1.3. Die wichtigsten Sternparameter 11
   1.4. Die Emissionslinienprofile in WR- Sternen 13
   1.5. Der Massenverlust 16
   1.6. Die Temperaturen 17
   1.7. Ausblick auf neue Modelle 19

2. Der Strahlungstransport 21
   2.1. Die Strahlungstransport-Gleichung in sphärischer Symmetrie . 21
   2.2. Die Strahlungstransportgleichung im bewegten System 22
   2.3. Das Peraiah- Verfahren 24
   2.4. Probleme beim Peraiah- Verfahren 26

3. Das Matrixexponentialverfahren (MEV) 29
   3.1. Alternativen zum Peraiah- Verfahren 29
   3.2. Der Rechenformalismus des MEV 29
   3.3. Das MEV bei konstanter Quellfunktion 39
   3.4. Das MEV bei nicht- konstantem Verlauf der Quellfunktion . . . 39

4. Die Winkeldiskretisierung 41
   4.1. Nichtnegative Transmissions- und Refexionskoeffizienten . . . 42
   4.2. Die Winkelstützstellen und Integrationsgewichte 45

5. Diskussion 49

Anhang: Die Opazitäten von Stickstoff im Non-LTE 51
   Die Atomdaten von N III, N IV und N V 52

Literaturverzeichnis 64

1. Einleitung

Im Jahr 1867 endeckten die beiden französischen Astronomen C.J.E. Wolf und G. Rayet erstmals Vertreter einer Sternklasse, die später nach ihren beiden Entdeckern benannt wurde. Die auffälligen Emissionslinienspektren deuteten darauf hin, daß die Wolf- Rayet- Sterne (Abk.: WR- Sterne) eine außergewöhnliche Atmosphärenstruktur haben und sich in einem bemerkenswerten Entwicklungsstadium befinden. Sie waren in den vergangenen 2 Jahrzehnten wiederholt Gegenstand intensiver Forschung, nachdem der Umfang an aussagefähigem Beobachtungsmaterial zugenommen hat und auch die Theorie der Sternatmosphären einige Fortschritte machte. Die International Astronomical Union (IAU) hat bereits zwei ihrer Symposien dieser Sternklasse gewidmet(Bappu 1973, de Loore und Willis 1982); der Symposiumsband der letzten Tagung ist dabei eine gute Zusammenfassung der neueren Forschungsergebnisse und der momentanen Kenntnisse über das WR-Phänomen.

1.1. Das Wolf-Rayet- Phänomen

Bei Wolf- Rayet- Sternen handelt es sich im allgemeinen um sehr leuchtstarke und scheinbar heiße stellare Objekte. Das charakteristische Merkmal dieser Sternklasse ist im optischen und ultravioletten Spektralbereich ein Kontinuumsspektrum eines O- oder B- Sternes, das von sehr starken und breiten Emissionslinien überlagert ist. Die Emissionslinien zeigen teils abgeflachte, teils abgerundete oder typische P- Cygni- Profile (siehe Kapitel 1.4.) und stammen hauptsächlich von den hochionisierten Elementen Helium, Kohlenstoff, Stickstoff und Sauerstoff. Die Form und die Breite der Linien deuten darauf hin, daß sie in einem Bereich des Sternes gebildet werden, der von einem sehr großen Massenverlust gekennzeichnet ist und möglicherweise von dem Entstehungsgebiet der Kontinuumsstrahlung verschieden ist. Der Massenverlust kommt dabei bis in den extremen Größenbereich von 10^{-5} $M_{\odot}$/yr (siehe Kapitel 1.5.). Sowohl seine Ursache als auch die Sternentwicklung, die er sicher maßgeblich beeinflußt, sind heute weitgehend ungeklärt. Nicht verstanden ist auch eine erhebliche Temperaturdiskrepanz, die sich aus der Analyse der Kontinuumsstrahlung und der Emissionslinien ergibt. Erschwerend kommt

hinzu, daß WR- Sterne üblicherweise keine photosphärischen Absorptionslinien zeigen und die Struktur der Atmosphäre einschließlich der Sternwindregion unbekannt ist.

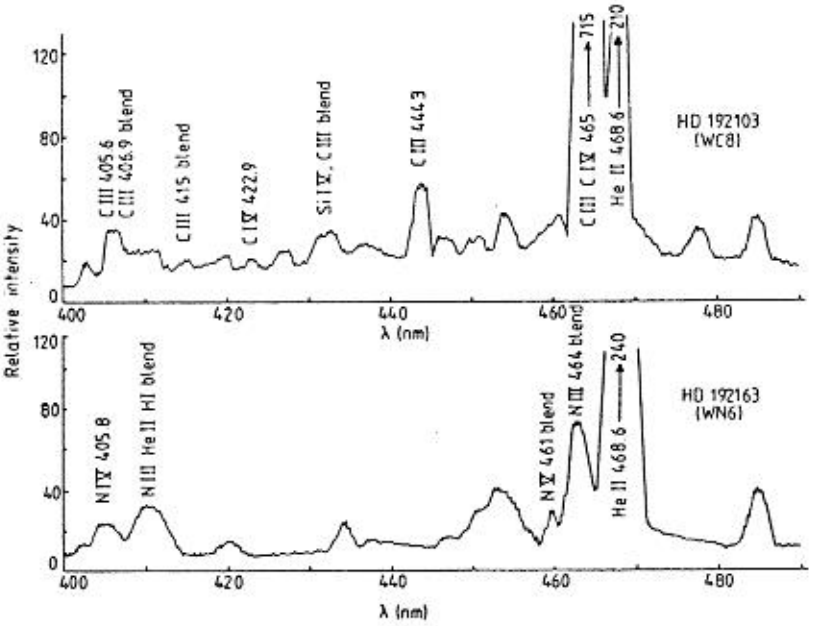


Abb.1: Typische WR-Spektren im blauen Spektralbereich (Kitchin,1982)

Insgesamt 159 Exemplare sind im 6. Katalog von galaktischen WR- Sternen (Van der Hucht et al. 1981) verzeichnet. Weitere 100 Sterne gibt es in der Großen Magellanschen Wolke und auch in der Kleinen Magellanschen Wolke und in M33 sind einige WR- Sterne als solche erkannt worden.

WR- Sterne werden anhand der Spektraleigenschaften klassifiziert (Smith 1968). Die Kopplung dieser Klassifikation an stellare Parameter, wie z.B. der Effektivtemperatur, ist eigentlich nicht sinnvoll, da die Typenunterteilung im wesentlichen nur die Ionisationszustände im Sternwind wiedergibt. Man unterteilt die WR- Sterne heute in 2 große Untergruppen: Sterne mit einem ausgeprägtem Kohlenstoff- Emissionslinienspektrum nennt man WC- Sterne; dagegen werden Objekte mit starken Emissionslinien vom Stickstoff als WN- Sterne bezeichnet. Die Klassifikation wird anhand verschiedener Verhältnisse von Linienstärken vorgenommen. Eine Übersicht dazu ist in Tab. 1 zu sehen.

Tabelle 1a: Klassifikationsschema von WN-Sternen

	Stickstofflinien	Sonstige Merkmale
WN2	N V schwach oder fehlt	He II stark
WN3	N IV << N V, N III schwach o.fehlt	
WN4	N IV ≈ N V, N III " "	
WN5	N III ≈ N IV N V	
WN6	N III ≈ N IV, N V schwach	
WN7	N III > N IV	He I schwach, N III 4640 < He II 4686
WN8	N III >> N IV	He I stark, N III 4640 ≈ He II 4686
WN9	N III vorhanden, N IV schwach oder fehlt	He I stark, Balmer-Serie schwach

Tabelle 1b: Klassifikationsschema von WC-Sternen

	Kohlenstofflinien	Sauerstofflinien
WC4	C III schwach oder fehlt, C IV stark	O V mäßig
WC5	C III << C IV	C III < O V
WC6	C III << C IV	C III > O V
WC7	C III < C IV	C III >> O V
WC8	C III ≈ C IV	O V schwach oder fehlt
WC9	C III > C IV, C II vorhanden	O V " "

1.2. Beobachtungen von WR- Sternen

Von WR- Sternen liegt mittlerweile in verschiedenen Spektralbereichen spektroskopisches und photometrisches Beobachtungsmaterial vor. Am umfangreichsten ist natürlich der optische Spektralbereich abgedeckt, detailliertere Arbeiten werden in der Bibliographie von Van der Hucht et al. (1981) zitiert. Smith und Kuhi (1981) haben einen Spektralatlas mit 10 WN- Sternen in einem Wellenlängenbereich zwischen 3000 und 6600 A

veröffentlicht; ein Atlas mit WC- Sternen soll in Kürze folgen. Optische Spektren von insgesamt 46 galaktischen WR- Sternen sind bei Lundström und Stenholm (1984) zu finden.

Wichtiger als der optische Bereich ist für die Klasse der WR- Sterne der UV- Spektralbereich. Das liegt einerseits daran, daß hier die meisten wichtigen Resonanzlinien der CNO- Ionen liegen; andererseits liegt auch das Maximum der Kontinuumsstrahlung im UV- Bereich. Eine fundierte Abschätzung der spektralen Energieverteilung ist somit nur mit Beobachtungsmaterial aus dem UV, wahrscheinlich sogar fernen UV, möglich.

UV- Spektren von WR- Sternen gibt es von den Raketenflügen in den 70er Jahren (z.B. Burton et al. 1975) und dem Copernicus- Satelliten (Johnson 1978). Seit dem Start des International Ultraviolet Explorer Satellit IUE liegen hochauflösende Spektren zwischen 1150A und 3150A mit $d\lambda \approx 0.1$Å von etwa 20 WR- Sternen vor. Diese Daten wurden hauptsächlich von A.J. Willis in den letzten Jahren ausgewertet(Willis 1981, 1982, 1983). Ein Atlas niedrigaufgelöster IUE- Spektren von 15 galaktischen WR- Sternen wurde von Nussbaumer et al. (1982) veröffentlicht. Für die ferne Zukunft scheint auch hochauflösende Spektroskopie zwischen 900A und 1150A möglich zu sein (z.B. Columbus- Projekt). Damit würde ein Spektralbereich mit wichtigen Linien von N III, C III, S IV, P IV usw., die zu einer Bestimmung der genauen Sternwindstruktur notwendig sind, erschlossen werden. Beobachtungen jenseits der H - Kante bei 912A scheinen nur von dem hellen WR- Stern γ^2 Vel möglich zu sein, so daß auch künftig die spektrale Energieverteilung im fernen UV weitgehend unbekannt bleiben wird.

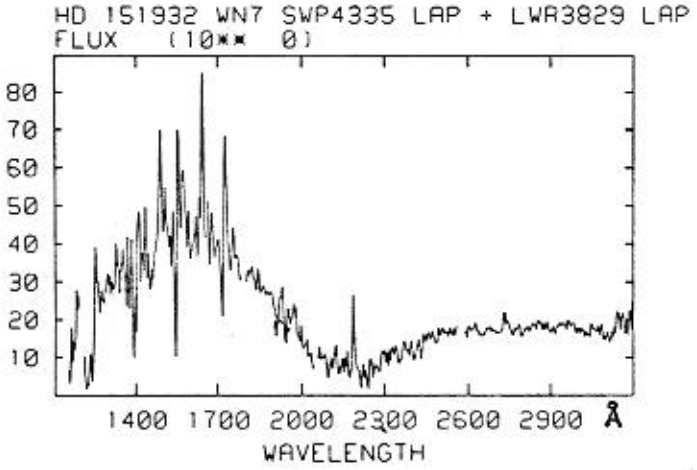


Abb.2: UV-Spektrum eines WN7-Sternes (Nussbaumer et al. 1982)

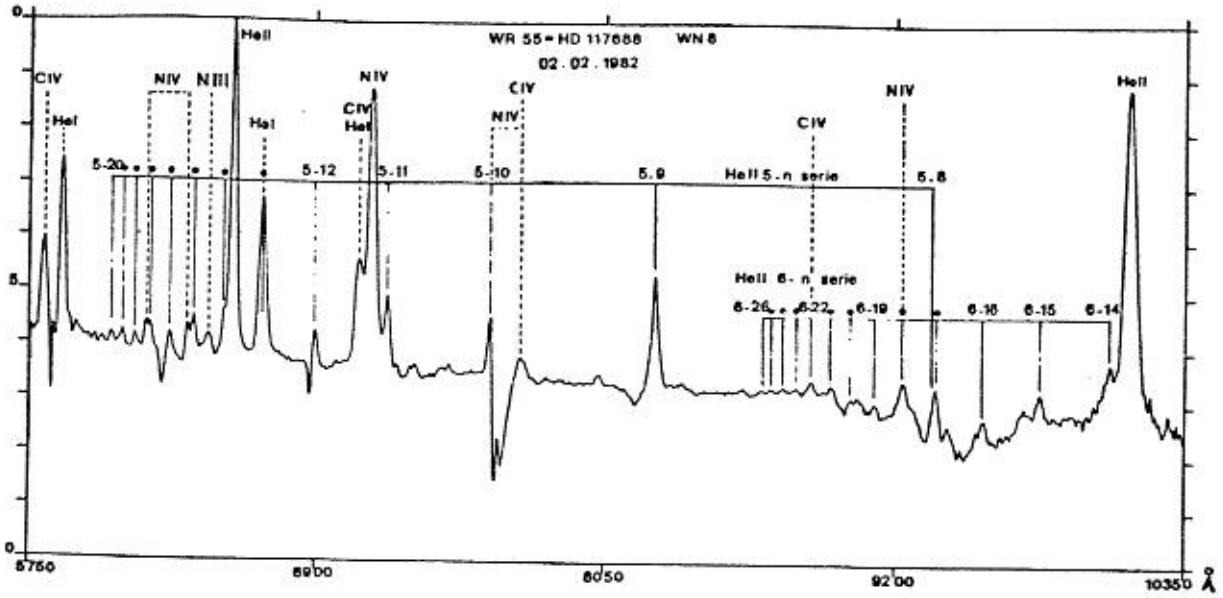


Abb. 3: IR-Spektrum eines WN8-Sternes (Vreux et al. 1983)

Aus dem IR- Bereich liegen etliche photometrische Messungen (z.B. Sterken u. deLoore 1982) und spektroskopische Daten (Williams 1982) vor. Vreux et al. (1983) haben einen spektroskopischen IR- Atlas von WR- Sternen auf der Südhalbkugel veröffentlicht. Die IR- Daten sind insbesondere zur Feststellung des IR- Exzesses und des daraus abzuleitenden Massenverlustes wichtig. Im Radiobereich wurden bisher weniger WR- Sterne beobachtet, z.B. γ^2 Vel, HD192163 und HD193793 (Morton u. Wright 1979, Florkowski u. Gottesman 1977, Dickel et al. 1980). Allerdings ist seit der Inbetriebnahme des Very Large Arrays mit neuen Radio- Beobachtungen in der nächsten Zeit zu rechnen (Florkowski 1982).

Seit den Beobachtungen des Einstein- Observatoriums sind auch Röntgenmessungen verfügbar. Sanders et al. (1982) konnte bei 4 von 20 beobachteten WR- Sternen Röntgenstrahlung feststellen.

1.3. Die wichtigsten Sternparameter

Die absoluten visuellen Helligkeiten von WR- Sternen liegen zwischen M_V = -4...-8 (Seitter u. Duerbeck 1982). Sie konnten für Sterne in der Großen Magellanschen Wolken bzw. in offenen Sternhaufen recht genau bestimmt werden. WC- Sterne sind relativ schwach und liegen bei M_V=-4, während die WN- Sterne im allgemeinen eine Helligkeit von M_V=-6, späte Spektraltypen sogar bis zu M_V=-8 besitzen.

Die Sternmasse konnte aus der Analyse der spektroskopischen Radialge-

schwindigkeiten bei Doppelsternen ermittelt werden. Im WR- Katalog von Van der Hucht et al. (1981) sind etwa 2o "echte", d.h. nachgewiesene Doppelsterne mit WR- Komponente verzeichnet. Einigen Sternen, die schwache Absorptionslinien zeigen, konnte bisher kein Begleiter nachgewiesen werden; man bezeichnet sie deshalb oft als "WR+abs"- Sterne. Da gewöhnlich der Inklinationswinkel bei der Doppelsternbahn unbekannt ist, können die Massen nur abgeschätzt werden. Es ergeben sich Werte zwischen 10 und 50 $M_\odot$, der Mittelwert liegt bei ungefähr 20 $M_\odot$ (Massey 1981). Eine Abhängigkeit der Sternmasse von dem Spektraltyp konnte aufgrund der geringen Anzahl von WR- Doppelsternsystemen nicht gezeigt werden.

Zuverlässige Radiusbestimmungen liegen von dem WC8- Stern γ^2 Vel vor. Der Radius der Kontinuumsstrahlung bei etwa 4300A wurde interferometrisch mit $R=(17\pm3)R_\odot$ bestimmt; der Radius, bei dem die Emissionslinien entstehen (CIII 4650A) ist etwa fünfmal so groß (Hanbury-Brown et al. 1970). Jenseits dieses Gebietes liegt noch eine Region mit starker Elektronenstreuung. Radiobeobachtungen, z.B. von V444Cyg, lassen darauf schließen, daß diese frei-frei- Emisssion noch in einem Abstand von 14000 R entstehen kann (Seaquist 1976).

Die Elementhäufigkeiten bei WR- Sternen sind durch 2 wesentliche Merkmale geprägt: 1. Die Unterhäufigkeit oder das Fehlen des Wasserstoffes, und 2. die Überhäufigkeit der Elemente Kohlenstoff und Stickstoff. Die Wasserstoff- Häufigkeitsbestimmung bei WC- Sternen ist sehr schwierig, da die Linien der Pickering- Serie mit vielen starken Kohlenstofflinien zusammenfallen. Das (H/He)- Teilchenzahlverhältnis ist, wenn überhaupt bestimmbar, etwa < 0.1. Auch WN- Sterne zeigen eine Wasserstoff- Unterhäufigkeit. Allerdings ist hier eine größere Bandbreite in den (H/He)- Werten zu beobachten: Späte WN- Sterne zeigen relativ viel Wasserstoff mit (H/He) $\lesssim$ 1-2. Die späten WN- Sterne scheinen somit, auch was die Emissionslinien angeht, den Of- Sternen ähnlich zu sein und werden deshalb auch gerne als Übergangs- WR- Sterne bezeichnet.

Bei WC- Sternen ist der Kohlenstoff mit etwa (C/He) $\simeq$ 0.8 (Vgl. O-Sterne: 0.0015) stark überhäufig, bei WN- Sternen ist (C/He) $\simeq$ 0.004 und (N/He) $\simeq$ 0.07 (Vgl. O- Sterne: 0.001). Das Kohlenstoff- Stickstoffverhältnis liegt bei WN- Sternen bei etwa 10^{-2} und bei WC- Sternen bei $\gtrsim$ 60 (Nugis 1975, Smith u. Willis 1982).

Die nicht solaren Elementhäufigkeiten weisen auf 2 wichtige Punkte hin: Einerseits müssen Atmosphärenmodelle dieser Elementzusammensetzung Rechnung tragen und die CNO- Ionen angemessen berücksichtigen. Andererseits sind die Wasserstoffunterhäufigkeit und die C- und N- Überhäufigkeiten wichtige Indizien dafür, daß es sich bei WR- Sternen um ent-

wickelte Objekte handelt. Die WN- Sterne scheinen sich in einer Entwicklungsphase zu befinden, bei der Brennprodukte des CNO- Zyklus an die Sternoberfläche gelangen, während bei WC- Sternen scheinbar bereits das He- Brennen eingesetzt hat.

1.4. Die Emissionslinienprofile in WR- Sternen

In den WR- Spektren treten verschiedene Emissionslinienprofile auf: Abgeflachte Profile, wie z.B. die Linie C III 5696A in Abb.4 oder abgerundete Profile wie die C IV- Linie bei 5805A. Form und Stärke der Linien ändern sich dabei erheblich mit dem Spektraltyp des Sternes.

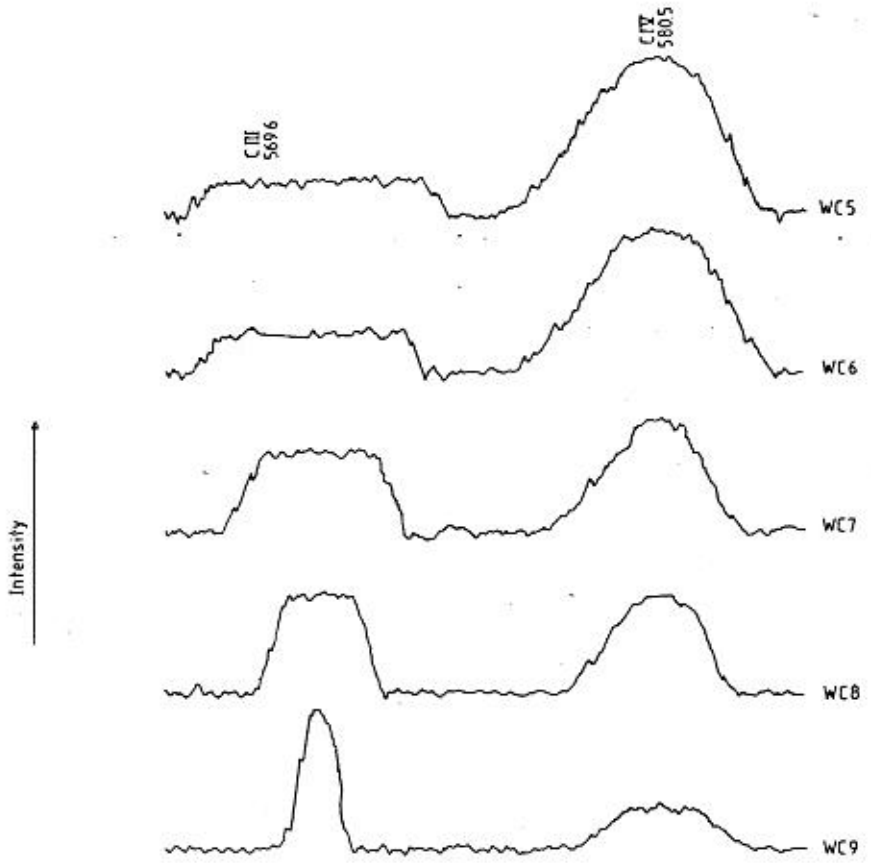


Abb.4: Emissionslinienprofile bei WC-Sternen (Kitchin 1982)

Bereits in den 30er Jahren versuchte Beals diese Linienformen zu erklären: Er deutete die Linien mit abgeflachten Profilen als Linien, die im optisch dünnen Fall in Gebieten konstanter Expansion (d.h. v=const.) gebildet werden. Die abgerundeten Linien hingegen entstehen, ebenfalls optisch dünn, in Gebieten gleichmäßiger Beschleunigung. Castor (1970) konnte durch Anwendung der Sobolev' schen Entweichwahrscheinlich-

keitstheorie zeigen, daß beide Profile verträglich sind mit einem nach außen beschleunigendem Geschwindigkeitsgesetz. Die abgerundeten Profile treten allerdings nach Castor bei optisch dicken Linien auf.

Die von Castor angewendete Sobolev- Theorie ist mittlerweile ein wichtiges Hilfsmittel zur Berechnung der Linienentstehung bei WR- Sternen und vergleichbaren Objekten und wird beispielsweise auch bei der Bestimmung der Elementhäufigkeiten verwendet (Smith u. Willis 1982). Die Sobolev- Theorie geht davon aus, daß die Entweichwahrscheinlichkeit eines Photons maßgeblich von dem Geschwindigkeitsgradienten der ausströmenden Materie und somit von der daraus resultierenden Dopplerverschiebung abhängt. Diese vereinfachende Annahme ermöglicht es, die Wechselwirkungen zwischen der expandierenden Materie und der Strahlung nur noch lokal zu betrachten. Allerdings kann die Sobolev- Theorie nur für die äußeren Atmosphärenschichten verwendet werden. Im Inneren, wo die Radialgeschwindigkeiten der Materie z.T. wesentlich geringer sind, darf keine lokale Entkopplung bei der Berechnung der Photonen- Entweichwahrscheinlichkeiten vorgenommen werden.

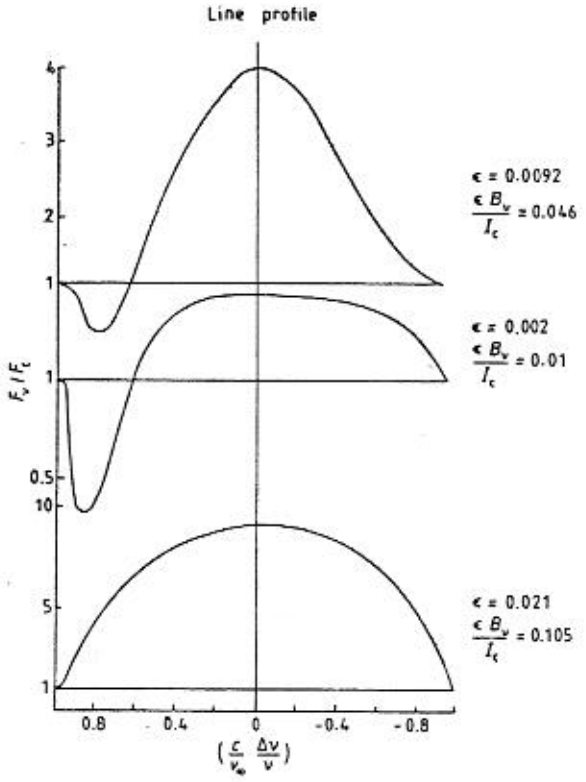


Abb.5: Theoretische Profile nach Castor (1970)
$(1-\varepsilon)$ ist der Streuanteil, B_ν ist die Planckfunktion,
I_c ist die "core"-Intensität

Um detaillierte Aussagen über das Entstehungsgebiet von Emissioslinien machen zu können, hatten Willis et al. (1982) UV- Beobachtungsdaten benutzt. Im UV zeigen sich bei WR- Sternen viele Emissionslinien von CNO-Ionen mit besonders ausgeprägten P- Cygni- Profilen. Es wurden die Geschwindigkeiten an den Kanten der Absorptionskomponenten gegen die Ionisationsspannungen der zu den Linien gehörenden Ionen aufgetragen. Bei den meisten untersuchten WR- Sternen zeigte sich ein Anstieg der Geschwindigkeiten mit zunehmender Ionisationsspannung. Allerdings war dieser Zusammenhang nur bei den Resonanzlinien der höchsten Ionen signifikant. Willis warnt davor, diesen Verlauf als Indiz für einen nach außen steigenden Temperaturverlauf zu nehmen. Die Zusamenhänge könnten ebenso durch optische Dichteeffekte im Sternwind entstehen, die theoretisch bisher allerdings noch nicht gerechnet werden konnten.

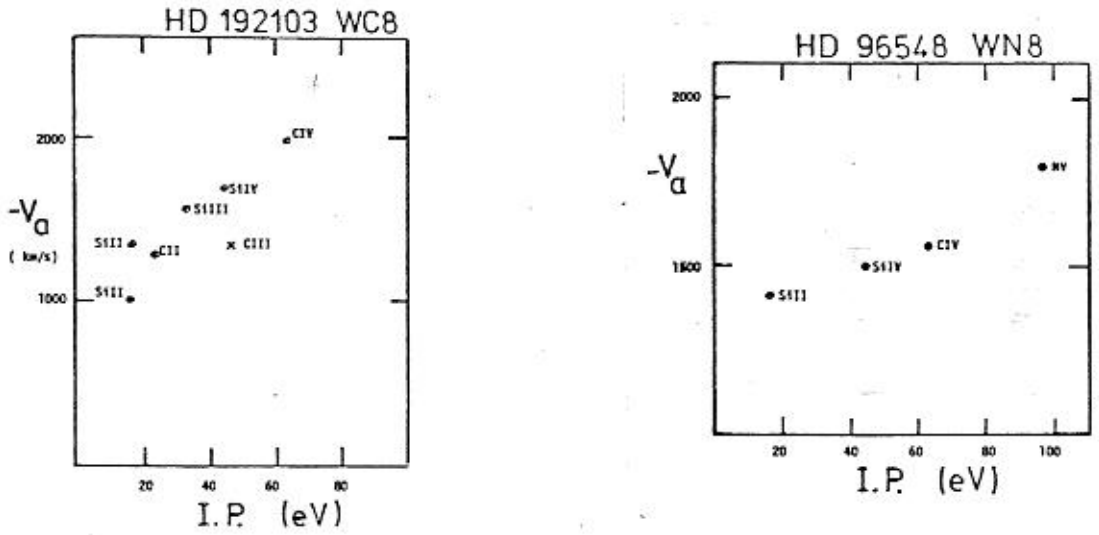


Abb.6: Korrelation zwischen Geschwindigkeit und Ionisationsspannung (Willis 1982)

Einen deutlicheren Trend erkennt man, wenn die Zentralgeschwindigkeit der Absorptionskomponente gegen die Anregungsspannung des niedrigeren Atomniveaus des betreffenden Linienübergangs zugeordnet wird. Die geringen Anregungsspannungen sind dabei an die sehr großen Geschwindigkeiten gekoppelt. Dieser Zusammenhang spiegelt eine Änderung der Anregungsbedingungen in den WR- Sternwinden wieder und ist bei einer nach außen monoton ansteigenden Geschwindigkeit mit einer Abnahme der Teilchendichte zu erklären (Willis 1982).

Eindeutigere Rückschlüsse aus diesen Analysen auf die Sternwindstruk-

tur sind wahrscheinlich erst dann möglich, wenn auch die Resonanzlinien im UV- Bereich unter 1150 A ausgewertet werden können.

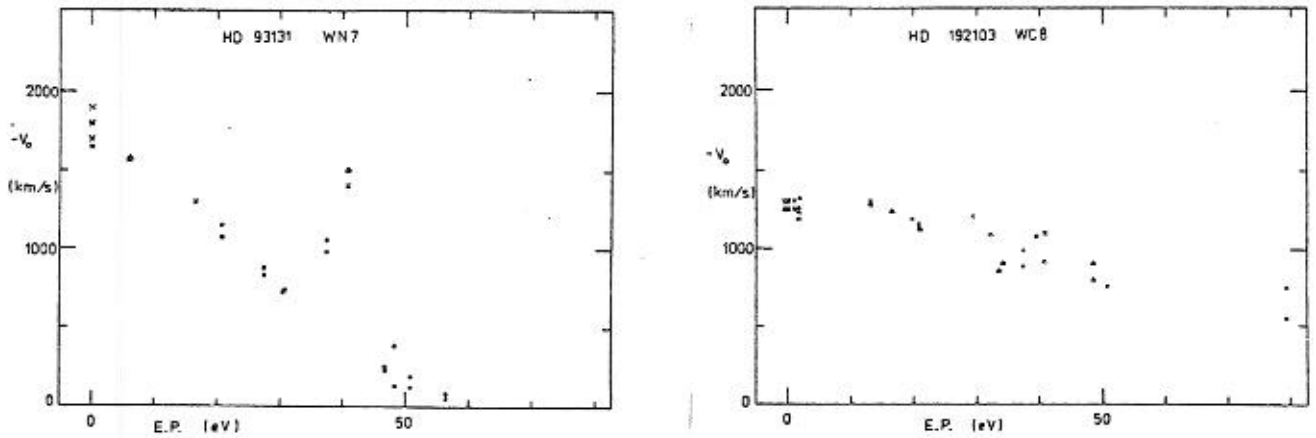


Abb. 7: Korrelation zwischen Geschwindigkeit und Anregungsspannung (Willis 1982)

1.5. Der Massenverlust

Der Massenverlust ist einerseits sicherlich einer der am genausten bestimmten Größen bei WR- Sternen; andererseits gibt gerade er die größten Rätsel auf.

Aus den Liniendaten im optischen und UV- Bereich kann durch die Kante der blauverschobenen Absorptionskomponente bei P- Cygni- Profilen oder aus der Breite der Emissionslinien auf die Expansionsgeschwindigkeit der ausströmenden Materie geschlossen werden. Man geht auch hier häufig von Geschwindigkeitsgesetzen v(r) aus, die in der Theorie der strahlungsgetriebenen Sternwinde üblich sind (Castor u. Lamers 1979), d.h.

$$v(r) = v_\infty \, (1 - R_*/r)^\beta$$

β ist ein Parameter für die Steilheit des Geschwindigkeitsanstieges in der Sternwindhülle. Die Endgeschwindigkeit v_∞ kann dabei Werte von 1000 km/sec bei WN- Sternen bis zu fast 3000 km/sec bei WC- Sternen annehmen.

Sind die Endgeschwindigkeiten des Windes v_∞, die Distanz zum Stern und

die chemische Zusammensetzung bekannt, so kann der Massenverlust relativ gut aus Radiomessungen abgeschätzt werden. Der Strahlungsexzess in diesen Wellenlängenbereichen stammt von ff- Strahlung in der äußeren Windregion, in der bereits die Geschwindigkeit v_∞ erreicht ist. Verschiedene Radiomessungen ergaben Massenverlustraten $\dot{M}$ von einigen 10^{-5} $M_\odot$/yr (Morton u. Wright 1978, Dickel et al. 1980). Auch im IR- Bereich kann die ff- Emission der ausströmenden Materie zur $\dot{M}$- Bestimmung herangezogen werden; allerdings stammt diese IR- Strahlung aus Gebieten, die wesentlich dichter sind, näher am Stern liegen und die Endgeschwindigkeit v_∞ wahrscheinlich noch nicht erreicht haben. Barlow et al. (1981) haben für 21 WR- Sterne den Massenverlust aus IR- Daten abgeschätzt und erhalten für WC- Sterne mittlere Werte von $\dot{M} = 4.1 \cdot 10^{-5}$ $M_\odot$/yr und für WN- Sterne $\dot{M} = 2.7 \cdot 10^{-5}$ $M_\odot$/yr.

Die Massenverlustraten bei WR- Sternen gehören somit zu den höchsten bekannten Raten bei stellaren Objekten. Sie liegen mindestens einen Faktor 10 über den Verlustraten bei hellen O- Sternen und ließen sich bisher nicht mit der Theorie der strahlungsgetriebenen Sternwinde (Castor, Abbott u. Klein 1975) erklären. Zum einen zeigen die Massenverlustraten keine Korrelation mit der Leuchtkraft der Sterne. Zum anderen liegt das Verhältnis von $\dot{M}$ zu der Verlustrate, die ein Kontinuumsstrahlungsdruck mit Einfachstreuung maximal erzeugen kann, zwischen 10 und 50. Selbst die Modelle mit Mehrfachstreuung scheinen diese Diskrepanz nicht beheben zu können. Nach Barlow et al. (1981) wären mindestens 40 Rückstreuungen notwendig, um die Antriebskraft derart hoher Massenströme zu erzeugen. Die Theorie der strahlungsgetriebenen Winde wäre scheinbar nur dann plausibel, wenn die Leuchtkraft von WR- Sternen bisher stark unterschätzt wurde und jenseits von 1150A Strahlungsflüsse auftreten, die Schwarzkörpertemperaturen von über 100000K entsprechen.

1.6. Die Temperaturen

Die Anregungstemperaturen liegen bei WR- Sternen je nach Spetraltyp zwischen 50000 und 120000 K (Van der Hucht et al. 1981). Sie sind somit wesentlich größer als die Farbtemperaturen, die aus dem Kontinuumsfluß abgeleitet werden. Die Farbtemperaturen hängen dabei erheblich von der Wellenlänge ab, bei der sie bestimmt werden. Sie können im nahen IR bei 10000K liegen und im UV um bis zu eine Größenordnung ansteigen.

Willis und Wilson (1978) haben für 9 WR- Sterne die Farbtemperaturen aus dem Kontinuumsfluß im UV- Bereich zwischen 1350 und 2250 A abgelei-

tet. Es wurden dazu Messungen des TD1-Satelliten verwendet, die auf interstellare Extinktion korrigiert wurden. Die Flußverteilung wurde mit klassischen planparallelen Modellatmosphären (Kurucz u. Peytremann 1974) und mit der Energieverteilung von Schwarzen Körpern verglichen. Die angepaßten Schwarz- Körper- Kurven hatten dabei Temperaturen um die 30000 K, die Kurucz' schen Modelle hatten mit etwa 25000 K etwas niedrigere Effektivtemperaturen. Ein wesentlicher Einfluß von sphärisch symmetrischen Modellen auf die Temperatur wurde von Willis und Wilson ausgeschlossen, da solche Modelle mit ihrem Temperaturverlauf angeblich zwischen denen eines Schwarzen Körpers und den Kurucz- Modellen liegen. Außerdem wurden auch die Zanstra- Temperaturen aus der Emissionslinie HeII 1640 abgeleitet, allerdings mit dem modifizierten Verfahren nach Miyamoto (1952), bei dem auch die Photoionisation vom 2. HeII- Niveau mit einbezogen wurde. Die korrigierten Zanstratemperaturen liegen ebenfalls bei etwa 30000 K, die unkorrigierten dagegen bei über 70000 K. Underhill (1983) hat mit Hilfe von klassischen Kurucz- Modellatmopshären die Effektivtemperaturen von 10 WR- Sternen abgeschätzt und erhält Werte zwischen 25000 und 30000 K.

Diese Bestimmungsmethoden wurden von van der Hucht et al. (1979) in Zweifel gezogen. Van der Hucht et al. analysierten UV- Beobachtungen von 36 WR- Sternen mit Hilfe von Modellen von Cassinelli und Hartmann (1975) und Hartmann und Cassinelli (1977). In beiden Modellen wurde versucht, die Dichtestruktur bei WR- ähnlichen Objekten anzugeben. Im ersten Modell wurde die geometrische Ausdehnung der kontinuumsbildenden Schicht so konstruiert, daß ein willkürlich angenommenes Verhältnis von Leuchtkraft zu Masse (letztendlich ein Wert für den dort eingeführten "radiation force multiplier") mit der Dichte- Struktur übereinstimmt. Hartmann und Cassinelli (1977) haben dagegen in einem halbempirischen Modell die Dichtestruktur mit Hilfe eines Potenzgesetzes so parametrisiert, daß auch der beobachtete IR- Fluß reproduziert werden konnte.

Van der Hucht et al. (1979) vergleichen diese Modelle mit 2 Non- LTE-Modellatmosphären von Mihalas(1972) bei Effektivtemperaturen von 50000 K und 30000 K und mit Schwarzkörper- Kurven. Sie kommen dabei zu dem Ergebnis, daß der theoretische Kontinuumsfluß eines WR- Sternes nur sehr wenig durch die Effektivtemperatur und das (H/He)- Häufigkeitsverhältnis beeinflußt wird. Dagegen scheint der Dichteverlauf in der Atmosphäre und der Windregion sich maßgeblich auf die IR- Flußverteilung auszuwirken. Die Modelle, die bei van der Hucht et al. die beste Übereinstimmung mit den beobachteten UV- Flüssen zeigen, haben eine Farbtemperatur von über 50000 K und liegen somit deutlich über den von Willis und Wilson (1978)

angegebenen Temperaturen.

Von de Loore und Willis (1982) wurden zur Erklärung der extremen Anregungs- und Ionisatioszustände auch mögliche Abweichungen vom Strahlungsgleichgewicht in den äußeren Atmosphärenbereichen in Erwägung gezogen.

1.7. Ausblick auf neue Modelle

Von diesen Diskrepanzen ausgehend, erscheint es wünschenswert zu sein. Modellatmopshären zu konstruieren, die allen wesentlichen Phänomene bei WR- Sternen Rechnung tragen: den besonderen Elementhäufigkeiten, den extremen Anregungs- und Ionisationszuständen, den in den Linien beobachteten Geschwindigkeitsfeldern und den beschriebenen Temperaturdiskrepanzen.

Die Geometrie sollte ir einem solchen Fall wegen der starken Ausdehnung der Atmopshäre sphärisch symmetrisch angesetzt werden. Eventuell könnte ein sphärisch symmetrischer Strahlungstransport den flachen Kontinuumsverlauf im optischen und nahen UV- Spetralbereich teilweise erklären. Sphärisch- symmetrische Modelle von Mihalas et al. (1974) und Kunasz et al. (1975) zeigen im ausgedehnten Fall und unter Berücksichtigung von Non- LTE eine deutliche Abflachung des optischen und nahen UV- Kontinuums im Vergleich zu planparallelen Modellen. Im fernen und bislang unbeobachteten UV, jenseits der Lyman- Kante, sagen sie dagegen einen erhöhten Fluß voraus.

Gemäß den Elementhäufigkeiten wäre eine Non- LTE- Behandlung zumindestens bei den Elementen Helium, Stickstoff und/ oder Kohlenstoff von Bedeutung. Je nach Spetraltyp könnte man auf einige Ionen verzichten, um den Aufwand für die Lösung der statischen Gleichungen gering zu halten. Für die Übergangssterne, d.h. die späten WN- Sterne, würden die Ionen HI, HeI, HeII, NIII, NIV und NV wahrscheinlich ausreichen.

Für die Reproduktion der Emissionslinienprofile müssen stark ansteigende Geschwindigkeitsfelder miteinbezogen werden. Schließlich muß auch die Dichtestruktur besser modelliert werden; man hat hier die Wahl zwischen der Bestimmung des Dichteverlaufs aus einem vogegebenen Massenverlust und einem angenommenen Geschwindigkeitsgesetz oder der selbstkonsistenten Lösung der Hüllenstruktur unter Berücksichtigung der windtreibenden Strahlungskraft, wie dies z.B. auch Weber (1982) versucht hat. Diese Kopplung der hydrodynamischen Struktur an den Strahlungstransport erscheint wegen des hohen Rechenaufwandes allerdings vorerst

nicht realisierbar zu sein.

In den folgenden Kapiteln wird für die Konstruktion eines solchen WR-Modells eine mögliche Methode zur Lösung des sphärisch symmetrischen Strahlungstransportes diskutiert. Diese Methode berücksichtigt auch größere Geschwindigkeitsfelder und sollte später in der Lage sein, sowohl den Kontinuumsfluß als auch die Linien zu reproduzieren.

2. Der Strahlungstransport

2.1. Die Strahlungstransport-Gleichung in sphärischer Symmetrie

Formuliert man den Strahlungstransport zunächst für den planparallelen und monochromatischen Fall, so erhält man die bekannte Gleichung (1):

$$\frac{dI}{dr} = -(\kappa+\sigma)\bullet I + \sigma\bullet\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} I\, d\mu + \kappa\bullet B \qquad (1)$$

Hierbei sind $I=I(r,\mu,\nu)$ die Intensitäten, r ist der Radius, μ ist der Kosinus des Austrittswinkels gegenüber der Normalenrichtung der Strahlung, d.h. $\mu \in \{-1,1\}$; κ ist der Absorptionskoeffizient und σ der Streuquerschnitt. Für die optische Tiefe τ gilt üblicherweise $d\tau=-\kappa dr$. Mit B wird die Planck- Funktion bezeichnet; das Integral über $I\bullet d\mu$ kann auch als mittlere Intensität J aufgefasst werden. Für Gleichung (1) und auch für alle folgenden Überlegungen wird kohärente und isotrope Streuung angenommen.

Für den sphärischen Fall muß die linke Seite der Gleichung (1) noch durch einen weiteren Term ergänzt werden. Er enthält die Differentiation nach μ.

$$\mu\bullet\frac{dI}{dr} + \frac{1-\mu^2}{r}\bullet\frac{dI}{d\mu} = -(\kappa+\sigma)\bullet I + \sigma\bullet J + \kappa\bullet B \qquad (2)$$

Verfahren zur numerischen Lösung dieser Gleichung wurden beispielsweise von Kunasz u. Hummer (1973) oder von Peraiah u. Grant (1973) angegeben. Kunasz u. Hummer verwendeten zur Lösung von Gleichung (2) eine Methode mit variablem Eddingtonfaktor, während Peraiah u. Grant den Algorithmus von Grant u. Hunt (1968 u. 1969) mit den Transmissions- und Reflexionsoperatoren benützten. Beide Verfahren wurden auch bei der Berechnung von Sternatmosphärenmodellen eingesetzt, etwa bei Mihalas u. Hummer (1974) oder bei Wehrse (1981). Eine Übersicht über verschiedene Verfahren zur Lösung der Strahlungstransportgleichung findet man auch in Kalkofen (1984).

2.2. Die Strahlungstransportgleichung im bewegten System

Linienentstehungsprobleme in Systemen mit großen Geschwindigkeitsfeldern, wie sie etwa in expandierenden Atmosphären früher Sterne auftreten, können nur unter großem numerischen Aufwand in den üblichen "Beobachter- Koordinaten" gelöst werden. Das liegt daran, daß die Emissivität und die Opazität aufgrund der verhältnismäßig starken Dopplerverschiebung winkelabhängig werden. Das Streuintegral enthält nun wichtige Beiträge aus einem breiten Frequenzband, dessen Breite durch die Expansionsgeschwindigkeit bestimmt wird. Das führt zu einer sehr schwierig zu behandelnden Kopplung zwischen den Frequenzen und den Austrittswinkeln der Strahlung. In der Regel können Systeme mit hohen Expansionsgeschwindigkeiten im ruhenden System nur durch Benutzen einer sehr großen Zahl von diskreten Winkel- und Frequenzstützstellen numerisch berechnet werden.

Dagegen muß beim lokalen Lösen der Strahlungstransportgleichung im bewegten Koordinatensystem, d.h. im Lagrange-System, lediglich die unmittelbare Umgebung der Linienzentrumsfrequenz für den Streuterm berücksichtigt werden. Die Opazität und Emissivität der Materie sind isotrop. Die Winkelintegration ist wieder von den Frequenzen entkoppelt. Allerdings muß dann die Transportgleichung neu formuliert werden. Es treten zusätzliche Terme auf, die die Behandlung zum Teil erheblich erschweren können.

Im bewegten System der Materie lautet die Gleichung für den sphärischen Fall unter Berücksichtigung aller Terme der Ordnung v/c (Castor 1972) und unter Vernachlässigung von Beschleunigungen der Größenordnung c•v/r (Mihalas,1981):

$$\{\mu + \underline{\frac{v}{c}}\}\frac{dI}{dr} + \frac{1-\mu^2}{r}\{1 + \underline{\mu(\frac{v}{c} - \frac{r}{c}\bullet\frac{dv}{dr})}\}\frac{dI}{d\mu} - \frac{\nu}{c}\{(1-\mu^2)\bullet\frac{v}{r} + \mu\frac{dv}{dr}\}\frac{dI}{d\nu} =$$

$$\eta - \{\chi + \underline{3\frac{1}{c}\{(1-\mu^2)\bullet\frac{v}{r} + \mu^2\frac{dv}{dr}\}}\}I \qquad (3)$$

Die radiale Expansionsgeschwindigkeit der Materie ist $v=v(r)$; $\eta = \eta(\nu,r)$ und $\chi = \chi(\nu,r)$ sind die Emissivität und Opazität, c die Lichtgeschwindigkeit.

Die unterstrichenen Terme in Gleichung (3) werden im allgemeinen als Advektions- bzw. Aberrationsterme bezeichnet. Mihalas et al. (1976) haben gezeigt, daß für Sternwinde mit $v/c < 0.01$ diese Terme vernachläs-

sigt werden können und lediglich der Dopplerverschiebungsterm mit der Differentiation nach der Frequenz berücksichtigt werden muß. Die Gleichung (3) reduziert sich dann auf:

$$\mu \cdot \frac{dI}{dr} + \frac{1-\mu^2}{r} \cdot \frac{dI}{d\mu} - \frac{\nu}{c} \{(1-\mu^2) \cdot \frac{v}{r} + \mu \cdot \frac{dv}{dr}\} \frac{dI}{d\nu} = \eta - \chi \cdot I \qquad (4)$$

Bei der Lösung dieser Gleichung werden die lokalen η und χ, d.h. die η und χ im bewegten System der Materie verwendet. Die Intensität wird jetzt natürlich im bewegten Koordinatensystem gelöst und muß zum Schluß noch in das System des Beobachters zurücktransformiert werden:

$$I(\mu, \nu) = (\nu/\nu_0)^3 \cdot I^0(\mu_0, \nu_0) \qquad (5)$$

I^0 ist die Intensität im ruhenden System des Beobachters, ν_0 die unverschobene Frequenz. μ und ν transformieren sich wie folgt (Mihalas, 1978):

$$\mu = (\mu_0 + v/c)/(1 + \mu_0 \cdot v/c) \quad \text{bzw.} \quad \mu_0 = (\mu - v/c)/(1 - \mu \cdot v/c) \qquad (6)$$

$$\nu = \nu_0 (1 + \mu_0 v/c) \quad \text{bzw.} \quad \nu_0 = \nu (1 - \mu v/c) \qquad (7)$$

Ersetzt man in Gleichung (4) η und χ durch die entsprechenden Ausdrücke für den Quell- und Streuterm und schreibt man für $\mu \in \{-1, 1\}$ fortan $\mu \in \{0, 1\}$ mit $I^{\pm} = I(\pm\mu)$, dann erhält man:

$$\pm\mu \cdot \frac{dI^{\pm}}{dr} \pm \frac{1-\mu^2}{r} \cdot \frac{dI^{\pm}}{d\mu} =$$

$$-(\kappa + \sigma) I^{\pm} + \sigma \cdot \frac{1}{2} \cdot \int_{-1}^{1} I^{\pm} d\mu + \frac{\nu}{c} (1-\mu^2) \cdot \frac{v}{r} + \mu^2 \cdot \frac{dv}{dr} \frac{dI}{d\nu} + \kappa \cdot B \qquad (8)$$

Die Gleichung (8) wurde von Mihalas et al. (1975) für Linienentstehungsprobleme numerisch gelöst. Grundlage war ein Feautrier- ähnliches Schema, daß von Nördlinger und Rybicki (1974) für Strahlungstransport im Lagrangesystem, aber für planparallele Geometrie entwickelt wurde. Die benötigte Rechenzeit des Computer- Programms von Mihalas et al. nahm dabei linear mit der Anzahl der verwendeten Fregeunzpunkte zu. Eine andere Lösungsmethode wurde von Peraiah (1980) als Weiterentwicklung seines sphärischen Strahlungstransportes entwickelt und auf Linienprobleme angewandt.

2.3. Das Peraiah- Verfahren

Peraiah u. Grant (1973) entwickelten ein Verfahren, mit dem es möglich ist, den sphärischen Strahlungstransport zu lösen. Hierbei wird von der Gleichung (8) ausgegangen, für die eine Variablentransformation vorgenommen wird:

$$U := 4\pi r^2 I \quad ; \quad \tilde{B} := 4\pi r^2 B \tag{9}$$

Gleichung (8) läßt sich dann in folgender Form schreiben:

$$\pm\mu \cdot \frac{dU^{\pm}}{dr} \pm \frac{1}{r} \cdot \frac{d}{d\mu} \left((1-\mu^2)\, U^{\pm} \right) = -(\kappa + \sigma)\, U^{\pm} + \frac{1}{2}\sigma \int_{-1}^{1} U^{\pm} d\mu + \kappa \tilde{B} \tag{10}$$

Gleichung (10) wird in einem 2- dimensionalen Gitter $(r_j, r_{j+1}) * (\mu_i, \mu_{i+1})$ diskretisiert, d.h. die Atmosphärenschicht wird in Schalen unterteilt. Die Differentiation nach dem Radius r bzw. der optischen Tiefe τ wird beim Peraiah- Verfahren linearisiert. Die Differentiation nach μ wird derart gewählt, daß folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Bei der Bildung der mittleren Intensitäten J wird die Integration möglichst gut durch eine Summe approximiert:

$$\int_0^1 U\, d\mu \approx \sum_{i=1}^{N} U_i \cdot w_i \qquad \text{mit} \qquad \sum_{i=1}^{N} w_i = 1 \tag{11}$$

- Die Integration für den Strahlungsfluß wird möglichst genau durch eine Summe genähert:

$$\int_0^1 U\, \mu\, d\mu \approx \sum_{i=1}^{N} U_i\, w_i\, \mu_i \qquad \text{mit} \qquad \sum_{i=1}^{N} \mu_i\, w_i = \frac{1}{2} \tag{12}$$

- Für den reinen Streufall muß der Strahlungsfluß F über die gesamte Schichtung erhalten bleiben; das heißt, es muß gelten:

$$\frac{dF}{dr} - \int_{-1}^{1} \frac{d}{d\mu} \left((1-\mu^2)\, U^{\pm} \right) d\mu = 0 \tag{13}$$

Das Integral ergibt "0" für den Fall, daß die gleichen Gewichte

sowohl für die Integration als auch für die Differentiation verwendet werden und der diskrete Punkt $\mu=1$ im Stützstellensatz enthalten ist.

Diese Bedingungen sind erfüllt, wenn für die Stützstellen μ_i und die Integrationsgewichte w_i die Gauss- Legendre- Integrationsformel verwendet wird und für die Differentiation einer beliebigen Funktion f nach μ geschrieben wird:

$$\left.\frac{df}{d\mu}\right|_i = \frac{f_{i-1/2} - f_{i+1/2}}{\mu_{i-1/2} - \mu_{i+1/2}} \qquad \text{mit } \mu_{i+1/2} = \sum_{k=1}^{i} w_k \tag{14}$$

wobei $w_{1/2}=0$ und $w_{N+1/2}=1$ sind und die $f_{i+1/2}$ aus den f_i und f_{i+1} linear interpoliert werden. Die Lösung der Gleichung (10) führt dann zu einem Ausdruck der Form:

$$\begin{vmatrix} U^+_{n+1} \\ U^-_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} t^+ & r^+ \\ r^- & t^- \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} U^+_n \\ U^-_{n+1} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \beta^+_{n+0.5} \\ \beta^-_{n+0.5} \end{vmatrix} \tag{15}$$

Die Größen U^+ und U^- entsprechen den Intensitäten in positiver bzw. negativer Richtung; je nach Vorzeichenwahl wären die U^+ die nach außen gerichteten und die U^- die nach innen gerichteten Intensitäten. U^+ und U^- müssen hierbei keine skalaren Größen sein, sondern sollten vielmehr als Vektoren aufgefaßt werden, so daß Gleichung (15) eine 2•N- dimensionale Matrix- Gleichung darstellt:

$$U^\pm = (U^\pm(\mu_1), U^\pm(\mu_2), U^\pm(\mu_3), \ldots U^\pm(\mu_N))^T \tag{16}$$

Die Gleichung (15) kann so aufgefaßt werden, daß sich die Intensitäten U^+_{n+1} zusammensetzen aus den Intensitäten U^+_n aus der unteren Schicht, die t^+ wären hierbei Transmissionskoeffizienten, und aus den Intensitäten U^-_{n+1} aus der oberen Schicht, wobei die r^+ die Reflexionskoeffizienten wären. β^+ wäre der Beitrag der internen Strahlungsquellen der Schicht. Das Gleiche gilt analog für die U^-. (Siehe Abb.8).

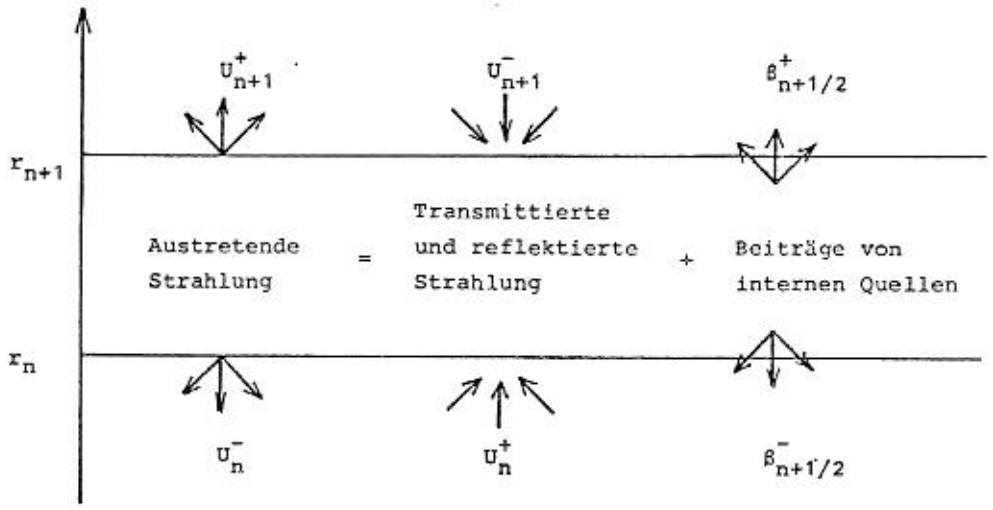


Abb. 8: Zusammensetzung der austretenden Intensitäten aus einer Schicht

2.4. Probleme beim Peraiah- Verfahren

Physikalisch gesehen dürfen die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten in Gleichung (15) maximal 1 und nie negativ werden. Beim Lösen der Gleichung (10) zeigt sich aber, daß aufgrund der Linearisierung nach dem Radius r bzw. der optischen Tiefe τ und der Diskretisierung der Winkel μ negative Werte auftreten können. Negative Werte infolge der μ-Diskretisierung treten nur im Fall sphärischer Symmetrie auf und machen sich erst bei großer Krümmung innerhalb einer Schicht mit vorgegebener Dicke bemerkbar. Peraiah hat als Grenzdicke eine Bedingung $\Delta r/r \cdot 1/\tau < \text{const.}$ aufgestellt, wobei Δr die Ausdehnung einer Schicht ist und $\Delta r/r$ dann ein Maß für die Krümmung dieser Atmosphärenschicht darstellt.

Die negativen Faktoren bei der Linearisierung nach r treten dagegen prinzipiell auf und erfordern bei der Berechnung des Strahlungstransportes in einer Schicht die Verwendung einer kleinen Schichtdicke $\Delta\tau < \Delta\tau_{crit}$. Diese Einschränkung ist aber verständlich, da die halbimplizite Linearisierung natürlich nur für kleine $\Delta\tau$ gelten kann.

Damit man mit dem Verfahren auch Atmosphärenmodelle mit größerer Ausdehnung berechnen kann, wird in den Fällen, in denen die Werte für das $\Delta\tau_{crit.}$ überschritten werden, die Schicht solange in Unterschichten un-

terteilt, bis die Schrittweite in r und τ hinreichend klein ist. Die Transmissions- und Reflexionsmatrix wird dann für diese Unterschichten einzeln berechnet. Die Matrix für die eigentlich vorgegebene Schicht kann man dann mit Hilfe eines Algorithmus, dem sogenannten Stern- Produkt aus den Matrizen der Unterschalen so zusammensetzen, daß der Fehler minimal bleibt.

Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich bei Berechnung einer Schichtung mit einem nicht konstanten Verlauf des thermischen Anteils der Quellfunktion, d.h. $B=B(\tau)$. Da Peraiah die Planckfunktion B in den einzelnen Schichten als konstant annimmt, kann es bei großen optischen Tiefen zu großen Fehlern bei der Berechnung des Strahlungsflusses kommen. Als Beispiel seien hier Rechnungen im planparallelen Fall genannt, die mit Testprogrammen von J.Köpper durchgeführt wurden. Es wurden 20 Schichten mit $\tau=0.001 - 100$ und $B=\tau$ gewählt. Ein Vergleich der Peraiah- Ergebnisse mit den Werten aus einem Feautrier- Programm ergeben im Inneren der Schichtung Abweichungen im Strahlungsfluß bis zu einer Größenordnung von 10^2. Eine Verringerung der Schichtdicken, d.h. eine Erhöhung der Anzahl der Schichten kann den Fehler zwar verkleinern, liefert aber trotzdem noch nicht die gewünschte Übereinstimmung (siehe Abb.9 und 10).

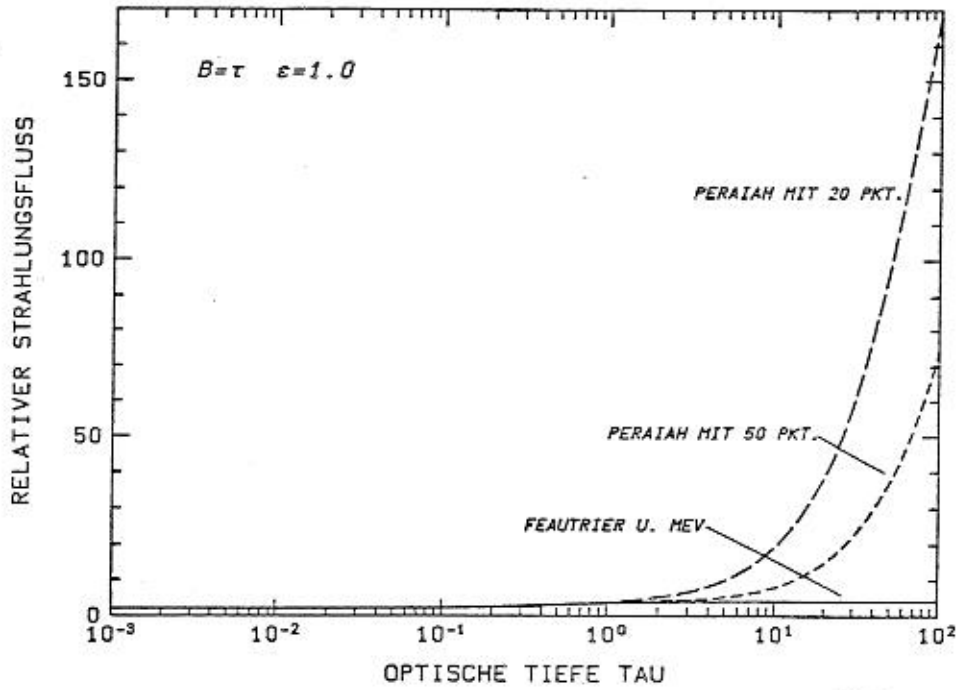
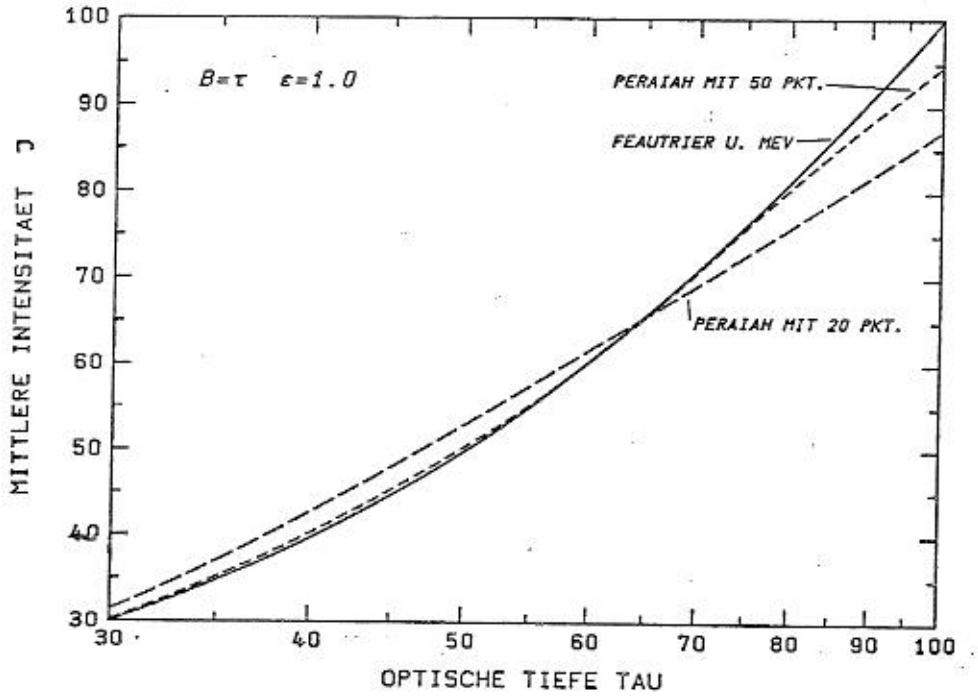


Abb. 9: Rechenvergleich Peraiah-Verfahren, Feautrierverfahren und Matrixeponentialverfahren (MEV) für den Strahlungsfluß

Abb.10: Rechenvergleich Peraiah-Verfahren, Feautrierverfahren und MEV für die relativen mittleren Intensitäten



3. Das Matrixexponentialverfahren (MEV)

3.1. Alternativen zum Peraiah- Verfahren

Das Problem der negativen Transmissions- und Reflexionsmatrizen infolge starker Krümmung konnte durch Peraiah (1984) in einer neuen Formulierung des Strahlungstransportes beseitigt werden. Peraiah linearisierte dabei die Intensitäten nach u und r und benutzte diesen Ansatz, um die Strahlungstransportgleichung (10) umzuschreiben. Mit dieser Methode bleibt die Invarianz der Intensitäten auch bei extremer Krümmung erhalten.

Die Beschränkungen des Peraiah- Verfahrens bei der Schichtdicke durch $\Delta\tau_{crit}$ können beseitigt werden, wenn statt der Linearisierung explizit mit einem Exponentialfunktionen- Ansatz gearbeitet wird. Dieser Gedanke ist Grundlage für das Matrixexponentialverfahren (MEV), das von Kalkofen und Wehrse (1984) vorgeschlagen wurde. Außerdem läßt sich in dem MEV die Quellfunktion so darstellen, daß der Fluß auch in einer dicken mit hoher Genauigkeit reproduziert werden kann und ähnliche Probleme wie beim Peraiah- Verfahren vermieden werden können. Durch geeignete Wahl der Diskretisierung nach μ läßt sich auch das Auftreten negativer Transmissions- und Reflexionsmatrizen vermeiden.

Allgemein betrachtet ist das MEV eine Methode zur quasiexakten Berechnung von Systemen linearer Differentialgleichungen 1. Ordnung. Das MEV läßt sich somit auch auf eine ganze Reihe von anderen physikalischen Problemen effizient anwenden. Im folgenden Kapitel soll das Verfahren am Beispiel des Strahlungstransportes hergeleitet und erklärt werden. Die für den sphärischen Fall notwendige u- Diskretisierung wird im folgenden 4. Abschnitt erklärt.

3.2. Der Rechenformalismus des MEV

Die Strahlungstransportgleichung läßt sich meistens auf folgende Form bringen.

$$\frac{dI(\tau)}{d\tau} = A(\tau)\cdot I(\tau) + B(\tau) \qquad (17)$$

Für den Fall, daß die Intensität I, ebenso wie die Koeffizienten A und

B skalare Größen sind, stellt Gleichung (17) eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung dar. Die Lösung lautet:

$$I = e^{\int_0^\tau A(x)\,dx} \cdot \left(I_0 + \int_0^\tau e^{-\int_0^y A(x)\,dx} \cdot B(y)\,dy \right) \qquad (18)$$

Im allgemeinen hängt I aber noch von zusätzlichen Variablen ab, z.B. von einem Winkel oder der Frequenz. Wir nehmen im folgenden an, daß I ein Vektor ist, dessen Komponenten beispielsweise einzelnen diskreten Winkelwerten zugeordnet sind (siehe auch Gleichung 16). μ ist dabei üblicherweise der Kosinus des Winkels zwischen Strahlrichtung und Normalenrichtung.

$$I = (I_i^+, I_i^-) = (I(\mu_1), I(\mu_2), \ldots I(\mu_{N/2}), I(-\mu_1), \ldots I(-\mu_{N/2})) \qquad (19)$$

Die $I(-\mu)$ sind hierbei die Intensitäten der einfallenden Strahlung. Gleichung (17) wird jetzt zu einer Vektorgleichung mit der N x N - Matrix $\tilde{A}$ und dem Vektor $\tilde{B} = (b_i^+, b_i^-)$. Sie ist ein System linearer Differentialgleichungen. Die Theorie ~~der Differentialgleichungen zeigt~~ (~~siehe~~ Arnol'd 1980), daß sich die Matrixgleichung (17) weitgehend analog zur skalaren Gleichung behandeln läßt; die Matrix A wird als linearer Operator $\tilde{A}$: $R^N \dashrightarrow R^N$ aufgefaßt, der jetzt beispielsweise auch einen Differentialoperator nach μ oder die Gewichte der μ- Integration für den Streuterm enthalten kann. Ebenso wie im skalaren Fall läßt sich auch im R^N ein Exponentialoperator $e^{\tilde{A}}$ als Potenzreihe definieren, der über die gleichen Konvergenzeigenschaften verfügt:

$$e^{\tilde{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \tilde{A}^n \qquad (20)$$

Es gilt:
$$e^{(x+y)\tilde{A}} = e^{x\tilde{A}} \cdot e^{y\tilde{A}} \qquad (21)$$

aber i.a.:
$$e^{\tilde{A}_1 + \tilde{A}_2} \neq e^{\tilde{A}_1} \cdot e^{\tilde{A}_2} \qquad (22)$$

Wegen der Ungleichheit (22), die sich mit Hilfe des Reihenansatzes zeigen läßt, gilt die Differentiation

$$\frac{d}{d\tau} e^{\tilde{A}(\tau)} = \frac{d\,\tilde{A}(\tau)}{d\tau} \cdot e^{\tilde{A}(\tau)} = \tilde{A}' \cdot e^{\tilde{A}(\tau)}$$

nur dann, wenn $\tilde{A}$ und $\tilde{A}'$ vertauschen, d.h. wenn der Kommutator verschwindet:

$$\left(\tilde{A}, \frac{d\tilde{A}}{d\tau} \right) = \tilde{A} \bullet \frac{d\tilde{A}}{d\tau} - \frac{d\tilde{A}}{d\tau} \bullet \tilde{A} = 0 \qquad (23)$$

Wenn Gleichung (23) erfüllt ist, können wir die Lösung (18) ebenfalls vom skalaren auf den n- dimensionalen Fall übertragen. Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß im folgenden die Matrix $\tilde{A}$ unabhängig von ist; Gleichung (23) ist dann erfüllt.

$$\frac{dI(\tau)}{d\tau} = \tilde{A} \bullet I(\tau) + B(\tau) \qquad (24)$$

Die Lösung lautet:

$$I(\tau) = e^{\tilde{A}\tau} \bullet \left(I(0) + \int_0^{\tau} e^{-\tilde{A}s} \bullet B(s)\, ds \right) \qquad (25)$$

Um den Exponentialoperator der Matrix $\tilde{A}$ zu berechnen, nutzen wir aus, daß der Exponentialoperator einer Diagonalmatrix eine Matrix ergibt, in der die Exponentialfunktion auf die Diagonalelemente angewendet wird. Wir müssen deshalb die Matrix $\tilde{A}$ in einer geeigneten Basis darstellen, in der sie diagonal wird. Diese Diagonalisierung ist mit der Lösung des Eigenwert- Problems identisch:

$$\tilde{A} \bullet v = l \bullet v \qquad (26)$$

Die Matrix $\tilde{A}$ besitzt die Eigenwerte l und die Eigenvektoren v und läßt sich darstellen als

$$\tilde{A} = T \bullet L \bullet T^{-1} \qquad (27)$$

L ist hierbei eine Diagonalmatrix, die die Eigenwerte l enthält, T ist die modale Matrix mit den Eigenvektoren als Spaltenvektoren. Wir setzen dabei voraus, daß die Eigenwerte paarweise verschieden sind. Für Funktionen $f(\tilde{A})$, die sich als rationale Funktionen oder Reihen darstellen lassen, gilt allgemein die Beziehung:

$$f(\tilde{A}) = T \bullet f(L) \bullet T^{-1}$$

Entsprechend Gleichung (20) kann deshalb für den Exponentialoperator folgendes geschrieben werden:

$$e^{\tilde{A}\tau} = T \bullet L' \bullet T^{-1} \qquad (28)$$

L' enthält die Werte λ_τ :

$$L' = (\lambda_\tau)_{ij} = (e^{l_i \tau} \cdot \delta_{ij}) \tag{29}$$

Da die Strahlungstransportgleichung in der Regel symmetrisch bezüglich der einfallenden und austretenden Strahlung ist, empfiehlt es sich, entsprechend Gleichung (19) auch die Matrizen in (28) aufzuspalten:

$$e^{\tilde{A}\tau} = \begin{vmatrix} u_\tau & v_\tau \\ w_\tau & x_\tau \end{vmatrix} = \underbrace{\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}}_{T} \cdot \underbrace{\begin{vmatrix} \lambda_\tau^+ & 0 \\ 0 & \lambda_\tau^- \end{vmatrix}}_{L'} \cdot \underbrace{\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}}_{T^{-1}} \tag{30}$$

Die Untermatrizen in T, L' und T^{-1} haben hierbei die Größe $N/2 \times N/2$. Der Ausdruck (30) für den Exponentialoperator kann nun in die Lösung (25) eingesetzt werden. Wir erhalten dann:

$$\begin{vmatrix} I^+(\tau) \\ I^-(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u_\tau & v_\tau \\ w_\tau & x_\tau \end{vmatrix} \cdot \left\{ \begin{vmatrix} I^+(0) \\ I^-(0) \end{vmatrix} + \int_0^\tau \begin{vmatrix} u_{-s} & v_{-s} \\ w_{-s} & x_{-s} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} b^+ \\ b^- \end{vmatrix} ds \right\} \tag{31}$$

oder kürzer:

$$\begin{vmatrix} I^+(\tau) \\ I^-(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u & v \\ w & x \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} I^+(0) \\ I^-(0) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} L^+(\tau) \\ L^-(\tau) \end{vmatrix} \tag{31'}$$

Die Größen $L^\pm$ sollen jetzt auch die Integrale enthalten. Für die Berechnung des Strahlungstransportes in einer Schicht interessieren als Lösung allerdings die Intensitäten I^+ an der Stelle $\tau=0$ bzw. I^- an der Stelle τ ; dagegen sind $I^-(0)$ und $I^+(\tau)$ vorgegebene Randbedingungen:

$$I^-_{bc} = I^-(0) \quad ; \quad I^+_{bc} = I^+(\tau) \tag{32}$$

Es ist also erforderlich, folgende Gleichung zu lösen:

$$\begin{vmatrix} I^+(0) \\ I^-(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} t^+ & r^+ \\ r^- & t^- \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} I^+(\tau) \\ I^-(0) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \beta^+ \\ \beta^- \end{vmatrix} \tag{33}$$

Die Matrizen $t^\pm$ und $r^\pm$ können, wie schon in Kapitel 2.3. gezeigt wurde, physikalisch als "Transmissions- und Reflexionskoeffizienten" der

durch die Schicht tretenden Strahlung interpretiert werden.

Aus Gleichung (31') erhalten wir in Komponentenschreibweise:

$$I^{+}_{bc}(\tau) = u \bullet I^{+}(0) + v \bullet I^{-}_{bc}(0) + L^{+}(\tau) \qquad (34)$$

$$I^{-}(\tau) = w \bullet I^{+}(0) + x \bullet I^{-}_{bc}(0) + L^{-}(\tau)$$

Daraus folgt:

$$I^{+}(0) = u^{-1} \bullet I^{+}_{bc}(\tau) - u^{-1} \bullet v\, I^{-}_{bc}(0) - u^{-1} \bullet L^{+}(\tau) \qquad (35)$$

$$I^{-}(\tau) = w \bullet (u^{-1} \bullet I^{+}_{bc}(\tau) - u^{-1} \bullet v \bullet I^{-}_{bc}(0) - u^{-1} \bullet L^{+}(\tau)) + x \bullet I^{-}_{bc}(0) + L^{-}(\tau)$$

Gleichung (35) kann nun wieder in der Form (33) geschrieben werden:

$$\begin{vmatrix} I^{+}(0) \\ I^{-}(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u^{-1} & -u^{-1} \bullet v \\ w \bullet u^{-1} & x - w \bullet u^{-1} \bullet v \end{vmatrix} \begin{vmatrix} I^{+}_{bc}(\tau) \\ I^{-}_{bc}(0) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} -u^{-1} \bullet L^{+}(\tau) \\ L^{-}(\tau) - w \bullet u^{-1} \bullet L^{+}(\tau) \end{vmatrix} \qquad (36)$$

Koeffizientenvergleich ergibt die Ausdrücke für die Transmissions- und Reflexionsmatrizen:

$$\begin{aligned} t^{+} &= u^{-1} & r^{+} &= -u^{-1} \bullet v & \beta^{+} &= -u^{-1} \bullet L^{+}(\tau) \\ t^{-} &= x - w \bullet u^{-1} \bullet v & r^{-} &= w \bullet u^{-1} & \beta^{-} &= L^{-}(\tau) - w \bullet u^{-1} L^{+}(\tau) \end{aligned} \qquad (37)$$

Die Matrizen u, v, w und x lassen sich mit Hilfe der modalen Matrix und der Exponentialfunktion der Eigenwerte der Matrix $\tilde{A}$ einfach darstellen. Für die Matrizen T, T^{-1} und L' wurden hierbei die Schreibweise aus Gleichung (30) verwendet:

$$\begin{aligned} u &= A\, \lambda^{+} a + B\, \lambda^{-} c \\ v &= A\, \lambda^{+} b + B\, \lambda^{-} d \\ w &= C\, \lambda^{+} a + D\, \lambda^{-} c \\ x &= C\, \lambda^{+} b + D\, \lambda^{-} d \end{aligned} \qquad (38)$$

Theoretisch reduziert sich somit die Berechnung der Gleichung (33) auf das Lösen des Eigenwertproblems (26) und die Bestimmung der Integrale in den Größen $L^{\pm}(\tau)$. Praktisch treten jedoch bei der Bestimmung der Un-

termatrizen in (38) numerische Schwierigkeiten auf. Die Diagonalmatrizen λ^+ und λ^- enthalten ja die Exponentialfunktionen $e^{l_i\tau}$. Da wir in der Strahlungstransportgleichung beim Übergang von der austretenden Strahlung zur einfallenden Strahlung einen Vorzeichenwechsel haben, erhalten wir bei der Lösung von (26) in der Regel positive und negative Eigenwerte l_i. Wir ordnen die Eigenwerte so um, daß in λ^+ die positiven und in λ^- die negativen Werte enthalten sind. Für große optische Tiefen τ kann dann aber λ^+ so groß werden, daß es numerisch nicht mehr darstellbar ist. Außerdem kann für große λ^+ die Konditionierung der Gleichung 26 schlecht werden und sich nachteilhaft auf die Rechengenauigkeit auswirken. λ^- verhält sich dagegen gutartig für große und kleine τ.

Diese numerische Schwierigkeit kann dadurch umgangen werden, indem man in Gleichung (38) die Werte λ^+ ersetzt durch Γ mit

$$\lambda^+ \cdot \Gamma = 1 \tag{39}$$

Die Größe Γ ist dann identisch mit den Werten $e^{l_i\tau}$, wobei die l_i hier positiv sind, das heißt, die Größe Γ ist numerisch darstellbar. Mit der Beziehung (39) müssen nun sämtliche Ausdrücke in (37) umgeformt werden.

$$\begin{aligned} t^+ = u^{-1} &= (A\lambda^+ a + B\lambda^- c)^{-1} \\ &= (a + \Gamma A^{-1} B \lambda^- c)^{-1} \Gamma A^{-1} \end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned} r^+ = -u^{-1} v &= -(A\lambda^+ a + B\lambda^- c)^{-1} \cdot (A\lambda^+ b + B\lambda^- d) \\ &= -(a + \Gamma A^{-1} B \lambda^- c)^{-1} \Gamma A^{-1} (A\lambda^+ b + B\lambda^- d) \\ &= -(a + \Gamma A^{-1} B \lambda^- c)^{-1} \cdot (b + \Gamma A^{-1} B \lambda^- d) \end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned} r^- = w u^{-1} &= (C\lambda^+ a + D\lambda^- c) \cdot (A\lambda^+ a + B\lambda^- c) \\ &= (C\lambda^+ + D\lambda^- c a^{-1}) a ((A\lambda^+ + B\lambda^- c a^{-1}) a) \\ &= (C + D\lambda^- c a^{-1} \Gamma) \cdot (A + B\lambda^- c a^{-1} \Gamma) \end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned} t^- = x - w u^{-1} v &= C\lambda^+ b - C\lambda^+ a (A\lambda^+ a + B\lambda^- c)^{-1} (A\lambda^+ b + B\lambda^- d) \\ &\quad + D\lambda^- d - D\lambda^- c (A\lambda^+ a + B\lambda^- c)^{-1} (A\lambda^+ b + B\lambda^- d) \end{aligned}$$

Sei $\psi = C\,\lambda^{+} b - C\,\lambda^{+} a\,(A\,\lambda^{+} a + B\,\lambda^{-} c)\quad(A\,\lambda^{+} b + B\,\lambda^{-} d)$

und $\theta = D\,\lambda^{-} d - D\,\lambda^{-} c\,(A\,\lambda^{+} a + B\,\lambda^{-} c)\quad(A\,\lambda^{+} b + B\,\lambda^{-} d)$

Dann ist $t^{-} = \psi + \theta$

$$\begin{aligned}
\psi &= C\,\lambda^{+}\,(b - a(A\,\lambda^{+} a + B\,\lambda^{-} c)^{-1}(A\,\lambda^{+} b + B\,\lambda^{-} d)) \\
&= C\,\lambda^{+}\,(1 - (A\,\lambda^{+} + B\,\lambda^{-} c\,a^{-1})^{-1}(A\,\lambda^{+} + B\,\lambda^{-} d\,b^{-1}))\,b \\
&= C\,\lambda^{+}\,(A\,\lambda^{+} + B\,\lambda^{-} c\,a^{-1})^{-1}(A\,\lambda^{+} + B\,\lambda^{-} c\,a^{-1} - A\,\lambda^{+} - B\,\lambda^{-} d\,b^{-1})\,b \\
&= C\,(A\,\lambda^{+}\Gamma + B\,\lambda^{-} c\,a^{-1}\,\Gamma)^{-1} B\,\lambda^{-}\,(c\,a^{-1} b - d) \\
&= C\,(A + B\,\lambda^{-} c\,a^{-1}\Gamma)\;\; B\,\lambda^{-}\,(c\,a^{-1} b - d)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\theta &= D\,\lambda^{-} d - D\,\lambda^{-} c\,(A\,\lambda^{+} a + B\,\lambda^{-} c)^{-1}(A\,\lambda^{+} b + B\,\lambda^{-} d) \\
&= D\,\lambda^{-} d - D\,\lambda^{-} c\,(a + \Gamma A^{-1} B\,\lambda^{-} c)^{-1}\,\Gamma A^{-1} A\,\lambda^{+}\,(b + \Gamma\,A^{-1} B\,\lambda^{-} d) \\
&= D\,\lambda^{-}\,(d - c\,(a + \Gamma A^{-1} B\,\lambda^{-} c)^{-1}(b + \Gamma\,A^{-1} B\,\lambda^{-} d))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
t^{-} = {} & C\,(A + B\,\lambda^{-} c\,a^{-1}\Gamma)^{-1} B\,\lambda^{-}\,(c\,a^{-1} b - d) + \\
& D\,\lambda^{-}\,(d - c\,(a + \Gamma\,A^{-1} B\,\lambda^{-} c)^{-1}(b + \Gamma\,A^{-1} B\,\lambda^{-} d))
\end{aligned} \qquad (43)$$

Jetzt müssen noch die Integralausdrücke in L^{+} und in L^{-} formuliert werden. Aus Gleichung (31) ergibt sich

$$\begin{vmatrix} L^{+}(\tau) \\ L^{-}(\tau) \end{vmatrix} = e^{\tilde{A}\tau} \int_{0}^{\tau} e^{-\tilde{A} s} \begin{vmatrix} b^{+}(s) \\ b^{-}(s) \end{vmatrix} ds \qquad (44)$$

Die Quellfunktion $B(\tau)$ wird nun in Gleichung (45) als Produkt eines Polynoms $P(\tau)$ vom Grad m und eines Vektors mit den Komponenten p und q für die beiden unterschiedlichen Strahlungsrichtungen dargestellt. Durch diesen Polynomansatz, der die Quellfunktion meistens ausreichend genau approximiert, kann das Integral gelöst werden. Der Exponentialoperator wird dabei in gewohnter Weise durch Gleichung (30) ersetzt.

$$B(\tau) = \begin{vmatrix} b^{+}(\tau) \\ b^{-}(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} p \\ q \end{vmatrix} P(\tau) \qquad (45)$$

Es folgt:

$$\begin{vmatrix} L^{+}(\tau) \\ L^{-}(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \lambda_{\tau}^{+} & 0 \\ 0 & \lambda_{\tau}^{-} \end{vmatrix} \underbrace{\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}}_{=1} \int_{0}^{\tau} \begin{vmatrix} \Gamma_{s} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_{s}^{-}} \end{vmatrix} P(s)\, ds \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \begin{vmatrix} p \\ q \end{vmatrix} \quad (46)$$

Da die Größen Γ_s bzw. $1/\lambda_s^-$ nichts anderes als Exponentialfunktionen sind, können wir zur Auflösung des Integrals folgende Beziehung ausnutzen:

$$\int_{0}^{\tau} e^{l\cdot s} \cdot P(s)\, ds = \frac{e^{l\,s}}{l} \sum_{k=0}^{m} (-1)^{k} \cdot \frac{P^{(k)}(s)}{l^{k}} \Bigg|_{0}^{\tau} \quad (47)$$

Sei $$Q(s) := \sum_{k=0}^{m} (-1)^{k} \cdot \frac{P^{(k)}(s)}{l^{k+1}} \quad (48)$$

Dann folgt: $$\int_{0}^{\tau} e^{l\,s} P(s)\, ds = e^{l\,s} \cdot Q(t) \Big|_{0}^{\tau} = e^{l\tau} \cdot Q(\tau) - Q(0) \quad (49)$$

Im folgenden soll Q^- sich auf die Eigenwerte der Funktion Γ beziehen, d.h. auf die positiven Eigenwerte von $\tilde{A}$, allerdings mit negativem Vorzeichen, während sich Q^+ auf die Eigenwerte von $1/\lambda^-$ bezieht, also auf die negativen Eigenwerte von $\tilde{A}$, aber mit positivem Vorzeichen. Dann gilt:

$$\int_{0}^{\tau} \begin{vmatrix} \Gamma_{s} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_{s}^{-}} \end{vmatrix} P(s)\, ds = \begin{vmatrix} \Gamma & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda^{-}} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} Q_{\tau}^{-} & 0 \\ 0 & Q_{\tau}^{+} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} Q_{0}^{-} & 0 \\ 0 & Q_{0}^{+} \end{vmatrix} \quad (50)$$

$$\begin{vmatrix} L^{+}(\tau) \\ L^{-}(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \lambda^{+} & 0 \\ 0 & \lambda^{-} \end{vmatrix} \cdot \left\{ \begin{vmatrix} \Gamma & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda^{-}} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} Q_{\tau}^{-} & 0 \\ 0 & Q_{\tau}^{+} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} Q_{0}^{-} & 0 \\ 0 & Q_{0}^{+} \end{vmatrix} \right\} \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} p \\ q \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} A(Q_\tau^- - \lambda_\tau^+ Q_o^-)\,(a\,p + b\,q) + B\,(Q_\tau^+ - \lambda_\tau^- Q_o^+)\,(c\,p + d\,q) \\ C(Q_\tau^- - \lambda_\tau^+ Q_o^-)\,(a\,p + b\,q) + D\,(Q_\tau^+ - \lambda_\tau^- Q_o^+)\,(c\,p + d\,q) \end{vmatrix} \quad (51)$$

Die Gleichung (51) kann nun zur Berechnung von β^+ und β^- verwendet werden. Dabei müssen ebenfalls die λ^+ durch die Γ ersetzt werden.

$$\begin{aligned} \beta^+ &= -\,u^{-1} L^+(\tau) = -(A\,\lambda^+ a + B\,\lambda^- c) \cdot \\ &\quad (A\,(Q_\tau^- - \lambda^+ Q_o^-)\,(a\,p + b\,q) + B\,(Q_\tau^+ - \lambda^- Q_o^+)\,(cp + dq)) \\ &= -(a + \Gamma A^{-1} B\,\lambda^- c)^{-1} \cdot \\ &\quad ((\Gamma Q_\tau^- - Q_o^-)(a\,p + b\,q) + \Gamma A^{-1} B (Q_\tau^+ - \lambda^- Q_o^+)(c\,p + d\,q)) \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \beta^- &= L^-(\tau) - w\,u^{-1} L^+(\tau) = \\ &\quad C\,(Q_o^- - \lambda^+ Q_\tau^-)\,(a\,p + b\,q) + D\,(Q_o^+ - \lambda^- Q_\tau^+)\,(c\,p + d\,q) - \\ &\quad (C\,\lambda^+ a + D\,\lambda^- c)\,(A\,\lambda^+ a + B\,\lambda^- c)^{-1} \cdot \\ &\quad (A\,(Q_o^- - \lambda^+ Q_\tau^-)\,(a\,p + b\,q) + B\,(Q_o^+ - \lambda^- Q_\tau^+)\,(c\,p + d\,q)) \end{aligned}$$

Sei $\Theta := (D - (C\,\lambda^+ a + D\,\lambda^- c)(A\,\lambda^+ a + B\,\lambda^- c)^{-1} B)\,(Q_\tau^+ - \lambda^- Q_o^+)(cp + dq)$

$$\begin{aligned} &= (D - (C + D\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma)(A + B\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma)^{-1} B) \cdot \\ &\quad (Q_\tau^+ - \lambda^- Q_o^+)\,(c\,p + d\,q) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi^1 &:= (C - (C\,\lambda^+ a + D\,\lambda^- c)\,(A\,\lambda^+ a + B\,\lambda^- c)^{-1} A)\,Q_\tau^-\,(a\,p + b\,q) \\ &= (C - (C + D\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma)(A + B\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma)^{-1} A)\,Q_\tau^-\,(a\,p + b\,q) \\ &= (C\,(1 + A^{-1} B\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma) - (C + D\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma)) \cdot \\ &\quad (1 + A^{-1} B\,\lambda^- c\,a^{-1}\Gamma)^{-1} Q_\tau^-\,(a\,p + b\,q) \end{aligned}$$

$$= (C A^{-1} B - D)\, \lambda^{-} c\, a^{-1} (1 + A^{-1} B \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)^{-1}\, Q_{\tau}^{-}\, (a\, p + b\, q)$$

$$\psi^2 := (C - (C\, \lambda^{+} a + D\, \lambda^{-} c)(A\, \lambda^{+} a + B\, \lambda^{-} c)^{-1} A)\, \lambda^{+} Q_{o}^{-} (a\, p + b\, q)$$

$$= (C - (C + D\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)(A + B\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)\, \lambda^{+} Q_{o}^{-}\, (a\, p + b\, q)$$

$$= (C\, (1 + A^{-1} B\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma) - (C + D\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)) \cdot$$
$$(1 + A^{-1} B\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)^{-1}\, \lambda^{+} Q_{o}^{-} (a\, p + b\, q)$$

$$= (C A^{-1} B - D)\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma\, (1 + A^{-1} B \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)^{-1} \lambda^{+} Q_{o}^{-} (a\, p + b\, q)$$

$$= (C A^{-1} B - D)\, \lambda^{-} c\, a^{-1} (\lambda^{+} + A^{-1} B\, \lambda^{-} c\, a^{-1})^{-1}\, \lambda^{+} Q_{o}^{-}\, (a\, p + b\, q)$$

$$= (C A^{-1} B - D)\, \lambda^{-} c\, a^{-1} (1 + \Gamma A^{-1} B \lambda^{-} c\, a^{-1})^{-1}\, Q_{o}^{-}\, (a\, p + b\, q)$$

$$\bar{\beta} = \theta + \psi^1 + \psi^2$$

$$= (C A^{-1} B - D)\, \lambda^{-} c\, a^{-1} (\Gamma\, (1 + A^{-1} B\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)^{-1}\, Q_{\tau}^{-} -$$
$$(1 + \Gamma A^{-1} B\, \lambda^{-} c\, a^{-1})^{-1} Q_{o}^{-})\, (a\, p + b\, q) +$$
$$(C - (C + D\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)(A + B\, \lambda^{-} c\, a^{-1} \Gamma)^{-1} E)(Q_{\tau}^{+} - \lambda^{-} Q_{o}^{+})(cp + dq) \qquad (53)$$

Damit sind in den Größen t^{+}, r^{+}, t^{-}, r^{-}, β^{+} und β^{-} sämtliche numerisch kritische Größen entfernt. Die Gleichung (33) läßt sich somit auch numerisch berechnen bei einer gegebenen Matrix $\tilde{A}$. Für einige Anwendungsfälle empfiehlt sich ein etwas anderer Ansatz für die Quellfunktion. Beispielsweise können bei der Lösung der Strahlungstransportgleichung noch zusätzliche quellähnliche Summanden auftreten, etwa bei der Formulierung des Strahlungstransport- Problems im Lagrange- Koordinatensystem (siehe auch Kapitel 2.2.). B wird dann folgendermaßen angesetzt:

$$B(\tau) = \begin{vmatrix} b^{+}(\tau) \\ b^{-}(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} p \\ q \end{vmatrix} P(\tau) + \begin{vmatrix} p' \\ q' \end{vmatrix} \qquad (54)$$

Die Ableitung der Ausdrücke für β^{+} und β^{-} mit (54) verlaufen analog zum angegebenen Schema. Es treten dann zusätzliche Terme für p' und q' auf, für die allerdings $P(\tau) = 1$ gilt.

Ist die Strahlungstransportgleichung exakt symmetrisch bezüglich der Strahlungsrichtung, beispielsweise im planparallelen Fall, so sind die positiven und negativen Eigenwerte dem Betrag nach gleich, oder

$$\Gamma = \frac{1}{\lambda^+} = \lambda^- \tag{55}$$

Diese Beziehung gilt nicht für unsymmetrische Probleme, beispielsweise bei geometrisch ausgedehnten Modellen mit sphärischer Symmetrie. Hier muß streng zwischen den Werten Γ und λ^- unterschieden werden. Unter besonders extremen Zuständen kann es sogar vorkommen, daß die Matrix $\tilde{A}$ ausschließlich negative Eigenwerte besitzt. In diesem Fall funktioniert die Substitution für λ^+ nur bis zu einem bestimmten Wert im Exponenten, der durch den Wertebereich der Rechenmaschine vorgegeben ist. Es empfiehlt sich in diesem Fall, auf die Substitution ganz zu verzichten und die Gleichung (33) mit den Ausdrücken (38) in ihrer ursprünglichen Form zu berechnen.

3.3. Das MEV bei konstanter Quellfunktion

In Kapitel 2.4. wird beschrieben, daß Peraiah die Planckfunktion in den einzelnen Schichten als konstant annimmt. Interessant ist nun ein Vergleich des MEV mit dem Peraiah- Verfahren. Dies läßt sich beim MEV dadurch simulieren, indem man entweder die Quellfunktion B=const. wählt oder für das Polynom $P(\tau)$ in Gleichung (45) nur den Koeffizienten 0-ter Ordnung besetzt. Im letzteren Fall simuliert man das gleiche Vorgehen wie im Peraiah- Verfahren, d.h. die Quellfunktion wird für jede Schicht konstant angesetzt. Eine Vergleichsrechnung zwischem MEV und dem Peraiah- Verfahren zeigt für den planparallelen Fall gleiche Ergebnisse im Strahlungsfluß und in den mittleren Intensitäten.

3.4. Das MEV bei nicht- konstantem Verlauf der Quellfunktion

Die Abweichungen, die das Peraiah- Verfahren im Strahlungsfluß und in den mittleren Intensitäten im Vergleich zu dem Feautrier- Verfahren bei nicht- konstanter Quellfunktion $B=B(\tau)$ zeigt, können im MEV vermieden werden, indem man für $P(\tau)$ in Gleichung (45) auch Koeffizienten höherer Ordnung besetzt. Das heißt, bei der Integration über die Quellfunktion

wird die Quellfunktion in den einzelnen Schichten linear, quadratisch o.ä. interpoliert. Für die Vergleichsrechnungen aus Kapitel 2.4. mit der Quellfunktion $B(\tau)=\tau$ wurde für das MEV eine lineare Interpolation gewählt. Da eine weitere Abhängigkeit von Variablen, wie etwa r oder in diesem einfachen, planparallelen Fall nicht gegeben ist, kann man den Strahlungstransport nach dem MEV auch insgesamt in einer einzigen Schicht exakt lösen. Sowohl beim Peraiah- Verfahren als auch beim Feautrierverfahren ist dagegen eine Unterteilung der Schicht in bis zu 50 Unterschalen notwendig. Hier liegt ein großer Vorteil des MEV, da man in vielen Anwendungsfällen mit wesentlich weniger Tiefen- oder Radiusgitterpunkten auskommt. Die Genauigkeit ist in diesem Fall die gleiche wie beim Feautrier- Verfahren. Zwecks Vergleichsmöglichkeit wurde jedoch auch mit dem MEV eine Unterteilung in 20 Schichten gewählt. Die Ergebnisse stimmen mit den Feautrier- Werten überein. Für $\Delta\tau_{crit} \to 0$ nähern sich auch die Ergebnisse aus dem Peraiah- Verfahren an die Lösungen des MEV an.

Wie in Kapitel 3.2. beschrieben kann im MEV die Quellfunktion auch als Polynom höheren Grades angesetzt werden. Die Genauigkeit der Lösung verbessert sich dabei. Als Beispiel sei hier der Fall $B(\tau)=\tau^2$ angeführt. Wieder wurde das MEV gegen das Feautrier- Verfahren getestet. Diesmal ergaben sich allerdings in den Lösungen Abweichungen, die sich nur verringern ließen, wenn man beim Feautrier- Verfahren die Anzahl der Schalen, d.h. der Tiefengitterpunkte, vergrößerte. In Abb.11 sind die Vergleichsrechnungen mit dem Feautrier- Verfahren für 20 und 40 Tiefenpunkte angegeben.

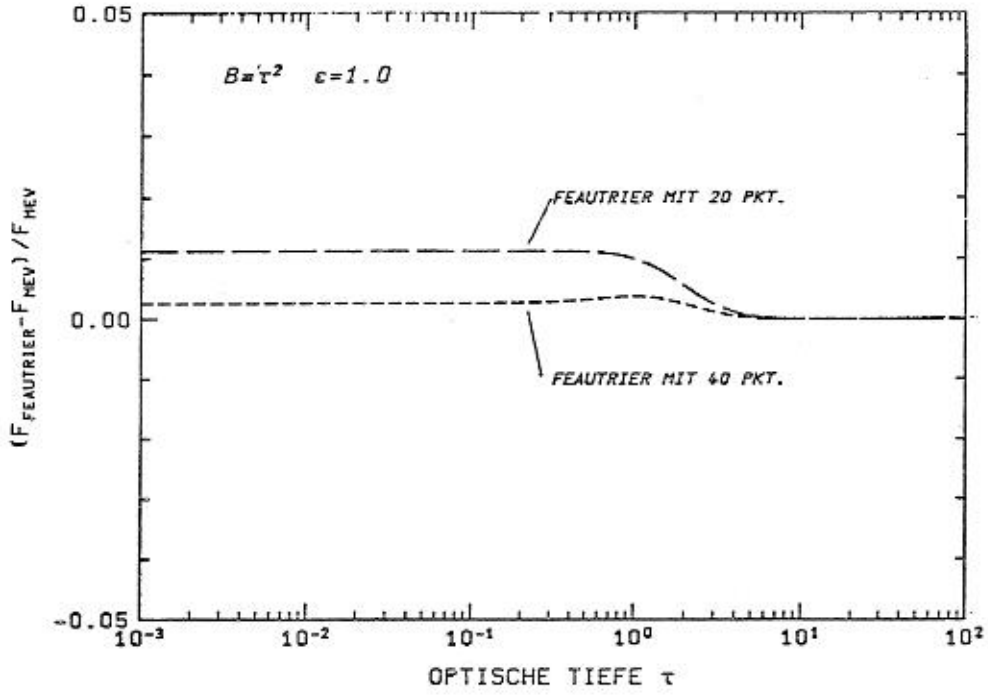


Abb.11: Relativer Flußunterschied beim Rechenvergleich Feautrier-verfahren und MEV für $B(\tau) = \tau^2$.

4. Die Winkeldiskretisierung

Beim spärischen Strahlungstransport müssen die diskreten Werte μ_i und die dazugehörigen Integrationsgewichte w_i so gewählt werden, daß die Bedingungen (11) - (13) aus Kapitel 2.3. erfüllt sind. Trotzdem reichen diese Forderungen nicht aus. In extremen Ausdehnungsfällen kann in der Strahlungstransportgleichung der Term der Winkeldifferentiation sehr groß werden. Seine Größe wird im wesentlichen durch den Faktor $1/(\kappa \cdot r)$ bestimmt, den man als das Verhältnis von freier Weglänge der Photonen zu der geometrischen Ausdehnung interpretieren kann. Für sehr große Werte von $1/(\kappa \cdot r)$ können bei ungeeigneter Diskretisierung der Winkel negative Intensitäten auftreten, d.h. die Invarianz der Intensitäten in einem Vakuum wäre nicht mehr erfüllt.

4.1. Nichtnegative Transmissions- und Refexionskoeffizienten

Eine wichtige Bedingung, die das MEV erfüllen muß, ist, daß die Elemente der Transmissions- und Refexionsmatrizen in Gleichung (15) nichtnegativ und maximal 1 sein dürfen. Rechnungen, bei denen die Diskretisierung und Differenzierung nach dem Winkel μ äquivalent zum Peraiah-Verfahren formuliert wurden (siehe 2.3.), zeigen im Falle sphärischer Geometrie bei großer Ausdehnung der Schichten negative Matrixelemente, die bei extremer Krümmung sogar negative Intensitäten erzeugen können. Das Stern- Produkt, wie es im herkömmlichen Peraiah- Verfahren an dieser Stelle eingesetzt wurde, kann nicht ohne weiteres auf das MEV übertragen werden. Eine Anwendung des Stern- Produktes würde außerdem den Vorteil des MEV, relative dicke Schichten rechnen zu können, zunichte machen. Deshalb muß versucht werden, die Diskretisierung nach den Winkeln u so zu wählen, daß die Elemente der Matrizen positiv bleiben. Eine Bedingung dafür läßt sich mit einigen Abschätzungen leicht herleiten. Dazu betrachten wir die Gleichungen (33) und (31):

$$\begin{vmatrix} I^+(0) \\ I^-(\tau) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} t^+ & r^+ \\ r^- & t^- \end{vmatrix} \bullet \begin{vmatrix} I^+(\tau) \\ I^-(0) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \beta^+ \\ \beta^- \end{vmatrix} \qquad (33)$$

$$\begin{vmatrix} I^+(\tau) \\ I^-(\tau) \end{vmatrix} = e^{\tilde{A}\cdot\tau} \bullet \begin{vmatrix} I^+(0) \\ I^-(0) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} L^+ \\ L^- \end{vmatrix} \qquad (31)$$

Beide Gleichungen müssen so umgeformt werden, daß sich durch Koeffizientenvergleich eine Beziehung zwischen $\tilde{A}$ und den Matrizen t^+, r^+, r^-, t^- herstellen läßt.

aus (33):

$$I^+(0) = t^+ \bullet I^+_{bc}(\tau) + r^+ \bullet I^-_{bc}(0) + \beta^+ \qquad (56)$$

$$I^-(\tau) = r^- \bullet I^+_{bc}(\tau) + t^- \bullet I^-_{bc}(0) + \beta^- \qquad (57)$$

aus (56):

$$I^+(\tau) = (t^+)^{-1} \bullet I^-(0) - (t^+)^{-1} r^+ \bullet I^-_{bc}(0) - (t^+)^{-1} \beta^+ \qquad (58)$$

aus (58) und (57):

$$I^-(\tau) = r^- \cdot (t^+)^{-1} \cdot I^+(0) - (r^- \cdot (t^+)^{-1} r^+ - t^-) \cdot I^-(0) - r^- (t^+)^{-1} \beta^+ + \beta^- \quad (59)$$

Daraus folgt:

$$e^{\tilde{A}\tau} = \begin{vmatrix} (t^+)^{-1} & -(t^+)^{-1} \cdot r^+ \\ r^- \cdot (t^+)^{-1} & t^- - r^- \cdot (t^+)^{-1} \cdot r^+ \end{vmatrix} \quad (60)$$

Das Problem besteht nun in der Auflösung der Exponentialfunktion. Da stark gekrümmte, d.h. ausgedehnte Schichten meist nur bei kleinen optischen Tiefen gerechnet werden, ist eine Taylorreihenentwicklung der Exponentialfunktion nach τ gerechtfertigt. Dabei sollen nur Glieder 1. Ordnung berücksichtigt werden:

$$e^{\tilde{A}\tau} \simeq 1 + \tilde{A}\tau \quad (61)$$

$$\text{Sei} \qquad \tilde{A} =: \begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{vmatrix} \quad (62)$$

dann gilt:

$$e^{\tilde{A}\tau} \simeq \begin{vmatrix} 1 + \alpha\tau & \beta\tau \\ \gamma\tau & 1 + \delta\tau \end{vmatrix} \quad (63)$$

Aus (63) und (60) folgt dann in erster Näherung:

$$\begin{aligned} 1 + \alpha\tau &\simeq (t^+)^{-1} \\ \beta\tau &\simeq -(t^+)^{-1} \cdot r^+ \\ \gamma\tau &\simeq r^- \cdot (t^+)^{-1} \\ 1 + \delta\tau &\simeq t^- - r^- \cdot (t^+)^{-1} \cdot r^+ \end{aligned} \quad (64)$$

Umformungen und Matrixinversionen führen zu den Gleichungen (65):

$$\begin{aligned} t^+ &\simeq (1 + \alpha\tau)^{-1} \\ r^+ &\simeq -(1 + \alpha\tau)^{-1} \cdot \beta\tau \end{aligned}$$

$$r^- \simeq \gamma\tau(1+\alpha\tau)^{-1} \qquad (65)$$

$$t^- \simeq 1 + \delta\tau - \gamma\tau\,(1+\alpha\tau)^{-1}\,\beta\tau$$

Für die Formulierung von Ungleichungen besteht die Schwierigkeit jetzt ganz offensichtlich in dem Ausdruck $(1+\alpha\tau)^{-1}$, jedoch kann auch dieser Term wieder mit einer Taylorreihe entwickelt werden:

$$(1+\alpha\tau)^{-1} \simeq 1 - \alpha\tau \qquad (66)$$

Aus (65) folgt:

$$t^+ \simeq 1 - \alpha\tau$$

$$t^+_{ij} > 0 \quad \longrightarrow \quad \alpha_{ii} < \frac{1}{\tau} \quad \text{und} \quad \alpha_{ij} < 0 \quad \text{für } i \neq j$$

$$r^+ \simeq -(1-\alpha\tau)\,\beta\tau$$

$$r^+_{ij} > 0\,,\; t^+_{ij} > 0 \quad \longrightarrow \quad \beta_{ij} < 0 \qquad (67)$$

$$r^- \simeq \gamma\tau\,(1-\alpha\tau)$$

$$r^-_{ij} > 0\,,\; t^+_{ij} > 0 \quad \longrightarrow \quad \gamma_{ij} > 0$$

$$t^- \simeq 1 + \delta\tau - \gamma\tau\,(1-\alpha\tau)\,\beta\tau$$

$$t^-_{ij} > 0\,,\; t^+_{ij} > 0 \quad \longrightarrow \quad \delta_{ij} > -\alpha_{ij}\cdot\beta_{ij}\cdot\gamma_{ij}\cdot\tau^2 =: c^-_{ij} \quad \text{mit } j \neq i$$

$$\delta_{ii} > \gamma_{ii}\cdot\beta_{ii}\cdot\tau - \gamma_{ii}\cdot\beta_{ii}\cdot\alpha_{ii}\cdot\tau^2 - 1 =: c^-_{ii}$$

$$\text{mit } c^-_{ij} < 0$$

Wenn die Bedingungen (67) bei der Konstruktion der Matrix $\tilde{A}$ erfüllt sind, werden die Matrizen t^+, r^+, r^-, t^- nicht negativ. Die Matrix $\tilde{A}$ muß dann folgende Vorzeichenstruktur haben:

$$\tilde{A} \approx \left| \begin{array}{cc} \ddots & \begin{array}{c} <0 \quad \frac{1}{\tau} \quad <0 \\ \ddots \end{array} \\ \begin{array}{c} >0 \\ \ddots \end{array} & \begin{array}{c} <0 \\ \ddots \quad >c_{ij} \\ >c_{ij} \quad >c_{ii} \quad \ddots \end{array} \end{array} \right| \qquad (68)$$

Es wird nun auch sofort verständlich, warum die Diskretisierung, wie sie von Peraiah vorgenommen wird, negative Koeffizienten sowohl bei seinem als auch beim MEV produziert; die Differentiation nach dem Winkel μ, wie sie im sphärischen Fall auftritt, hat die Struktur:

$$\left.\frac{df}{d\mu}\right|_i \approx \frac{f_{i-.5} - f_{i+.5}}{\mu_{i-.5} - \mu_{i+.5}} \qquad (14)$$

Das führt aber dazu, daß die Bedingungen z.B. für die Nebendiagonalen in der Matrix $\tilde{A}$ nur für (i-1) nicht aber für (i+1) erfüllt sind. Obwohl (14) eigentlich die beste Näherung für die Differentiation nach μ ist, erfüllt sie nicht die Forderung nach nicht negativen Refexions- und Transmissionskoeffizienten und damit nach nicht- negativen Beiträgen zur Strahlungsintensität.

4.2. Die Winkelstützstellen und Integrationsgewichte

Die Bedingung (68) für die positiven Transmissions- und Reflektionskoeffizienten läßt sich einfach erfüllen, wenn man statt der Gleichung (14) einen links- bzw. rechtsseitigen Differenzenquotienten verwendet. An der Stelle $\mu=0$ greifen die Differenzenquotienten in ähnlicher Weise wie bei Peraiah u. Grant (1973) auf die andere Vorzeichenseite über. Der Differentialoperator wird dann folgendermaßen geschrieben:

$$\left.\frac{d}{d\mu}\left((1-\mu^2)\cdot U^{\pm}\right)\right|_{i=1} \cong \frac{(1-\mu_1^2)\cdot U_1^{+} - (1-\mu_1^2)\cdot U_1^{-}}{2\cdot\mu_1}$$

$$\left.\frac{d}{d\mu}\left((1-\mu^2)\cdot U^{\pm}\right)\right|_{i=2,N-1} \cong \pm\frac{(1-\mu_i^2)\cdot U_i^{\pm} - (1-\mu_{i-1}^2)\cdot U_{i-1}^{\pm}}{\mu_i - \mu_{i-1}} \qquad (69)$$

$$\frac{d}{d\mu}\left((1-\mu^2)\cdot U^{\pm} \right)\Bigg|_{i=N} \cong -\frac{(1-\mu_{N-1})\cdot U^{\pm}_{N-1}}{1-\mu_{N-1}}$$

An den Stützstellen bei i=N wurde von dem einfachen Differenzenquotienten abgewichen. Statt der Stützstelle i=N wurde der Punkt mit $\mu=\pm 1$ zur Berechnung des Differenzenquotienten benutzt. Das führt dazu, daß bei einer Integration des Differentialoperators nach Gleichung (13) auch im diskreten Fall die Randwerte durch den Faktor $(1-\mu^2)$ verschwinden. Die numerischen Werte der μ_i müssen so gewählt werden, daß auch die Summationsbedingungen in den Gleichungen (11)- (13) erfüllt sind. Aus (13) ergeben sich die Bedingungsgleichungen (70):

$$\begin{aligned}
&i=1 && \frac{w_1}{\mu_1} - \frac{w_2}{\mu_2-\mu_1} = 0 \\
&i=2,N-2 && \frac{w_i}{\mu_i-\mu_{i-1}} - \frac{w_{i+1}}{\mu_{i+1}-\mu_i} = 0 \\
&i=N && \frac{w_{N-1}}{\mu_{N-1}-\mu_{N-2}} - \frac{w_N}{1-\mu_{N-1}} = 0
\end{aligned} \tag{70}$$

Zusammen mit der Summationsbedingung (11) ergibt sich:

$$\begin{aligned}
&i=1 && w_1 = \mu_1 \\
&i=2,N-1 && w_i = \mu_i - \mu_{i-1} \\
&i=N && w_N = 1-\mu_N
\end{aligned} \tag{71}$$

Das Einsetzen von (71) in die Summationsformel (12) ergibt eine quadratische Gleichung, die nach den Stützstellen μ aufgelöst werden kann. Es folgt als Lösung:

$$\mu_N = \frac{N}{N-1} - \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right)^2 - \frac{N}{N-1}}$$

$$i=1,N-1 \qquad \mu_i = \frac{i}{i+1}\cdot \mu_{i+1} \tag{72}$$

bzw. $$\mu_1 = \frac{1}{N} \cdot \mu_N$$

Mit den Gleichungen (69), (71) und (72) können für eine beliebige Anzahl von Winkelpunkten die Stützstellen und Gewichte so gewählt werden, daß

1. die Invarianz der Intensitäten erhalten bleibt,

2. die Summation in Gleichung (11) exakt erfüllt wird, was einer genauen Berechnung der mittleren Intensitäten J entspricht,

3. die Summation in Gleichung (12) exakt erfüllt wird, was einer genauen Berechnung des Strahlungsflusses F entspricht und

4. das Integral in Gleichung (13) erfüllt ist, d.h. daß im reinen Streufall die Strahlungsflußerhaltung erfüllt ist.

In Tabelle 2 sind die numerischen Werte der μ_i und w_i für 3, 5 und 8 Stützstellen angegeben. Man sieht, daß selbst für N=8 der größte Wert μ erst bei 0.73 liegt. Hier liegt eine gewisse Schwäche dieser Diskretisierung, da man in einigen Anwendungsfällen, z.B. bei einem starken Peaking der Strahlung, μ-Werte nahe bei 1 benötigt, da in diese Richtung die meiste Strahlung abgegeben wird. Man kann dieses Problem natürlich durch eine Erhöhung von N umgehen, allerdings würde sich das nachteilhaft auf den Rechenzeitbedarf auswirken.

Tab. 2: Die Winkelstützstellen und dazugehörigen Integrationsgewichte

	N = 3		N = 5		N = 8	
i	μ_i	w_i	μ_i	w_i	μ_i	w_i
1	.2113248..	.2113248..	.1381966..	.1381966..	.0923495..	.0923495..
2	.4226497..	"	.2763932..	"	.1849903..	"
3	.6339745..	.3660254..	.4422291..	"	.2770485..	"
4			.5527864..	"	.3693980..	"
5			.6909830..	.3090169..	.4617475..	"
6					.5540970..	"
7					.6464466..	"
8					.7387961..	.2612038..

5. Diskussion

Die Entwicklung von Modellatmosphären für Wolf- Rayet- Sterne wird in Zukunft von großer Bedeutung sein, nicht nur, um die beobachteten Emissionslinienspektren zu erklären. Das Verständnis der WR- Atmosphären und deren Windregionen ist eine wichtige Voraussetzung, die Lokalisierung der WR- Sterne im Hertzsprung- Russell- Diagramm künftig genauer festlegen zu können. Umfassende WR- Modellatmosphären müßten in der Lage sein, genaue Effektivtemperaturen für diese Sternklasse anzugeben. Der Standort im HR- Diagramm ist dabei nicht nur für das Verständnis der Sternentwicklung von Bedeutung. Da WR- Sterne zu den hellsten stellaren Objekten gehören, kommt ihnen bei extragalaktischen Beobachtungen eine steigende Bedeutung zu.

Die Berechnung der WR- Atmosphären- und Windstruktur setzt eine numerische Methode zur Lösung des Strahlungstransportes voraus, die in sphärischer Symmetrie formuliert ist und große Massenströme mit vertretbarem Rechenaufwand berücksichtigt. Das vorgestellte Matrixexponentialverfahren (MEV) verfügt über diese Eigenschaften. Das Randwertproblem ist hierbei genauso einfach zu lösen wie bei dem Verfahren nach Peraiah. Allerdings übertrifft das MEV das Peraiah- Verfahren in der Genauigkeit, da die Tiefenabhängigkeit in der Strahlungstransportgleichung exponentiell angesetzt wird; Peraiah linearisiert dagegen die Tiefenabhängigkeit und ist somit an eine Tiefendiskretisierung mit kleinen Schrittweiten gebunden. Das MEV kann im Gegensatz zum Peraiah- Verfahren auch Quellterme, die im optisch dicken Medium stark ansteigen, quasi- exakt behandeln. Die mangelnde Invarianz der Intensitäten, wie sie gelegentlich beim Peraiah- Verfahren auftritt, kann beim MEV durch eine andere Wahl der Winkeldiskretisierung vermieden werden. Das geht allerdings auf Kosten der Rechenzeit, da mehr Winkelstützstellen benötigt werden, und auf Kosten einer angemessenen Behandlung des Peaking- Effekts der austretenden Strahlung bei stark ausgedehnten Atmosphären. Hier ist eine weitere Suche nach geeigneten Winkeldiskretisierungen notwendig.

Da der Rechencode des MEV hauptsächlich aus Matrixrechenoperationen besteht, ist das Verfahren besonders geeignet für Computer mit Vektorprozessoren (z.B. Cray I oder Cyber 205). Dadurch könnte der Rechenaufwand bei der Berechnung von Modellatmosphären gering gehalten werden, selbst wenn man im Non- LTE- Fall viele Frequenzpunkte explizit berücksichtigt. Für die Konstruktion eines geeigneten Modellatmosphärenpro-

gramms ist im weiteren die Wahl der Atmosphärendichteschichtung, die Berücksichtigung von bestimmten Ionenmodellen und eine gut konvergierende Iterationsmethode mit Temperaturkorrektur nötig. Für letzteres könnte das Verfahren nach Höflich (1983), das sehr gute Konvergenzeigenschaften zeigt, angewendet werden. Die Vervollständigung der Ionenmodelle (siehe Anhang) kann sinnvollerweise erst in Zusammenhang mit weiteren, detaillierteren Rechnungen erfolgen.

Anhang: Die Opazitäten von Stickstoff im Non-LTE

Für die Wolf- Rayet- Modellatmosphären werden Opazitäten bei zum Teil extremen Abweichungen vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) benötigt. Das liegt einerseits an den hohen Temperaturen und andererseits an den relativ geringen Dichten, die in weiten Bereichen von WR-Sternatmosphären zu erwarten sind. Dadurch können bei atomaren Übergängen die radiativen Prozesse die Kollisionsprozesse, die in Richtung eines Gleichgewichtes wirken, um ein Mehrfaches übertreffen.

Für Wasserstoff und Helium liegen Atommodelle, die alle wesentlichen Übergänge explizit berücksichtigen, und entsprechende Rechenprogramme, die die statistischen Gleichungen und die Opazitäten berechnen, bereits aus der Arbeit von Höflich(1983) vor. Für den Wasserstoff werden Energieniveaus bis zur Hauptquantenzahl 8 mit insgesamt maximal 28 gebunden-gebunden (gg) Übergängen im Non- LTE berücksichtigt. Beim Helium sind es 15 Niveaus bis zur Hauptquantenzahl 5 mit insgesamt 46 gg-Übergängen. Da bei der Linienverbreiterung die Dopplerverbreiterung aufgrund der hohen Geschwindigkeitsfelder bei WR- Sternen bei weitem überwiegt, können die weitere Verbreiterungsmechanismen, die in der Arbeit von Höflich(1983) berücksichtigt werden, in erster Näherung vernachlässigt werden.

Die Ionen der isoelektronischen CNO- Sequenzen werden im allgemeinen bei der Konstruktion von Modellatmosphären nur für das Spektrum, nicht aber für die Energiebilanz der Atmosphäre berücksichtigt, da sie nur Spurenelemente sind und die Effektivtemperatur des Sternes sehr groß sein muß, damit das Energiegleichgewicht erheblich beeinflußt wird. Allerdings liegen WR- Sterne genau in dem entsprechenden Temperaturbereich und zeigen außerdem eine merkliche Überhäufigkeit von Kohlenstoff und Stickstoff (siehe S.9). Die CNO- Ionen müssen deshalb ebenfalls wie Wasserstoff und Helium im Non-LTE behandelt werden. Mihalas (1972) hat darauf hingewiesen, daß eine vereinfachte Behandlung der Ionen im LTE zu Kühlungseffekten und damit zu verfälschten Temperaturverläufen in den äußeren Atmosphärenbereichen führen kann. Eine Vernachlässigung von CNO für die Energiebilanz führt ebenfalls zu falschen Ergebnissen, insbesondere bei den Kanten. Um den Rechenaufwand gering zu halten, benutzt Mihalas deshalb ein "mittleres" CNO- Atom, bestehend aus 5 Ionisationsstufen mit jeweils einem Niveau. Allerdings kann auch diese "1-Level-Atom"- Näherung zu Ungenauigkeiten führen, da eine Einbeziehung höherer

Niveaus beispielsweise größere effektive Stoßraten und damit eine geringere Abweichung vom LTE ergeben kann.

Ein weiteres Beispiel für die Notwendigkeit, die CNO- Opazitäten im Non- LTE zu berücksichtigen, ist Gegenstand einer Arbeit von Mihalas und Hummer(1973). Hier wurde versucht zu erklären, warum es O- Sterne gibt, bei denen die NIII- Linie $3p^2P^0 \rightarrow 3d^2D$ bei 4640A in Emission erscheint, während die Linie $3s^2S \rightarrow 3p^2P^0$ bei 4099A in Absorption erscheint. Mihalas und Hummer konnten zeigen, daß eine dazu notwendige Besetzungsinversion der entsprechenden Energieniveaus unter anderem auch durch den Swing-Mechanismus, d.h. der verstärkten Anregung infolge starker Kontinuumsstrahlung, oder aber durch Berücksichtigung von dielektronischer Rekombination erklärt werden kann.

Für die Berechnung von sogenannten Übergangs- WN-Sternen werden Atom-Modelle für die Stickstoffionen N III, N IV und N V entworfen und entsprechende Programme erstellt. Um den Rechenaufwand möglichst gering zu halten, ist es nicht möglich, genauso viele Niveaus und Übergänge zu berücksichtigen, wie dies in vergleichbaren Linienentstehungsprogrammen (z.B. Simon 1979) der Fall ist. Die Multiplett- Aufspaltung wird prinzipiell vernachlässigt, ebenfalls detaillierte Mechanismen der Linienverbreiterung. Allerdings lassen sich die Programme bei Bedarf relativ einfach ergänzen und erweitern. Für die dielektronische Rekombination bei N III werden die Atomdaten und der entsprechende Formalismus aus der Arbeit von Mihalas und Hummer(1972) verwendet. Mit neueren, kürzlich publizierten Atomdaten von Nussbaumer und Storey(1984) ist es jetzt allerdings auch bei anderen Ionen möglich, die dielektronische Rekombination mit einzubeziehen.

Die Atomdaten von N III, N IV und N V

In den Abbildungen 12 bis 14 sind die Grotrian- Diagramme der verwendeten Atommodelle aufgetragen. Die dazugehörigen Energieniveaus und Linienübergänge sind in den Tabellen 3 bis 8 zusammengestellt. Darüber hinaus wurden weitere Energieniveaus nur noch zur Teilchenzahl- Erhaltung benutzt. Die Zustandssummen für die Ionen werden aus Traving, Baschek und Holweger(1966) verwendet. Die Photoionisationsquerschnitte für die einzelnen Niveaus sind parametrisiert und durch die Konstanten σ_0, β und s gegeben. Es gilt:

$$\sigma(\nu) = \sigma_0 \cdot (\nu_0/\nu)^s \cdot (\beta + (1-\beta)\cdot(\nu_0/\nu))$$

Die Photoionisationsquerschnitte werden, soweit angegeben, von Mihalas und Hummer(1972) übernommen; für N V werden Rechnungen von Hidalgo (1968,1969) verwendet. Für Niveaus, für die es sonst keine Werte gibt, wurden theoretische Querschnitte von Hofsäss(1979) verwendet. Die Stoßionisationraten für die Grundniveaus der Ionen werden mit halbempirischen Näherungsformel nach Lotz(1968) berechnet(in 1/s):

$$C_{1k} = 5.465\cdot 10^{-11} N_e T^{0.5} (2.5\zeta (13.6/E_{1k})^2)\cdot U_o \cdot (E_1(U_o) - b\cdot U_o/U_1 \cdot E_1(U_1))$$

mit $U_1 = U_o + C$ und $U_o = E_{1k}/kT$

Die dazugehörigen Parameter lauten:

	ζ	b	c
N III $2p^2P^o$	1.0	0.2	0.6
N IV $2s^2\ ^1S$	2.2	0.	0.
N V $2s\ ^2S$	1.1	0.	0.

Für die Stoßionisation von höheren Niveaus wird die Dipol- Näherung (s. Baschek und Scholz 1982) verwendet:

$$C_{ik} = 1.55\cdot 10^{13} N_e T^{-0.5} \cdot \sigma_{ik}(\nu_o)\cdot \bar{g}_i \cdot \frac{kT}{E_{ion} - E_i} \cdot \exp(-\frac{E_{ion} - E_i}{kT})$$

Für N III ist der Skalierungsfaktor $\bar{g}=0.2$ und für N IV und N V ist g=0.3. Die Stoßanregungsraten für erlaubte Übergänge werden für alle 3 Ionen nach Van Regemorter(1962) behandelt:

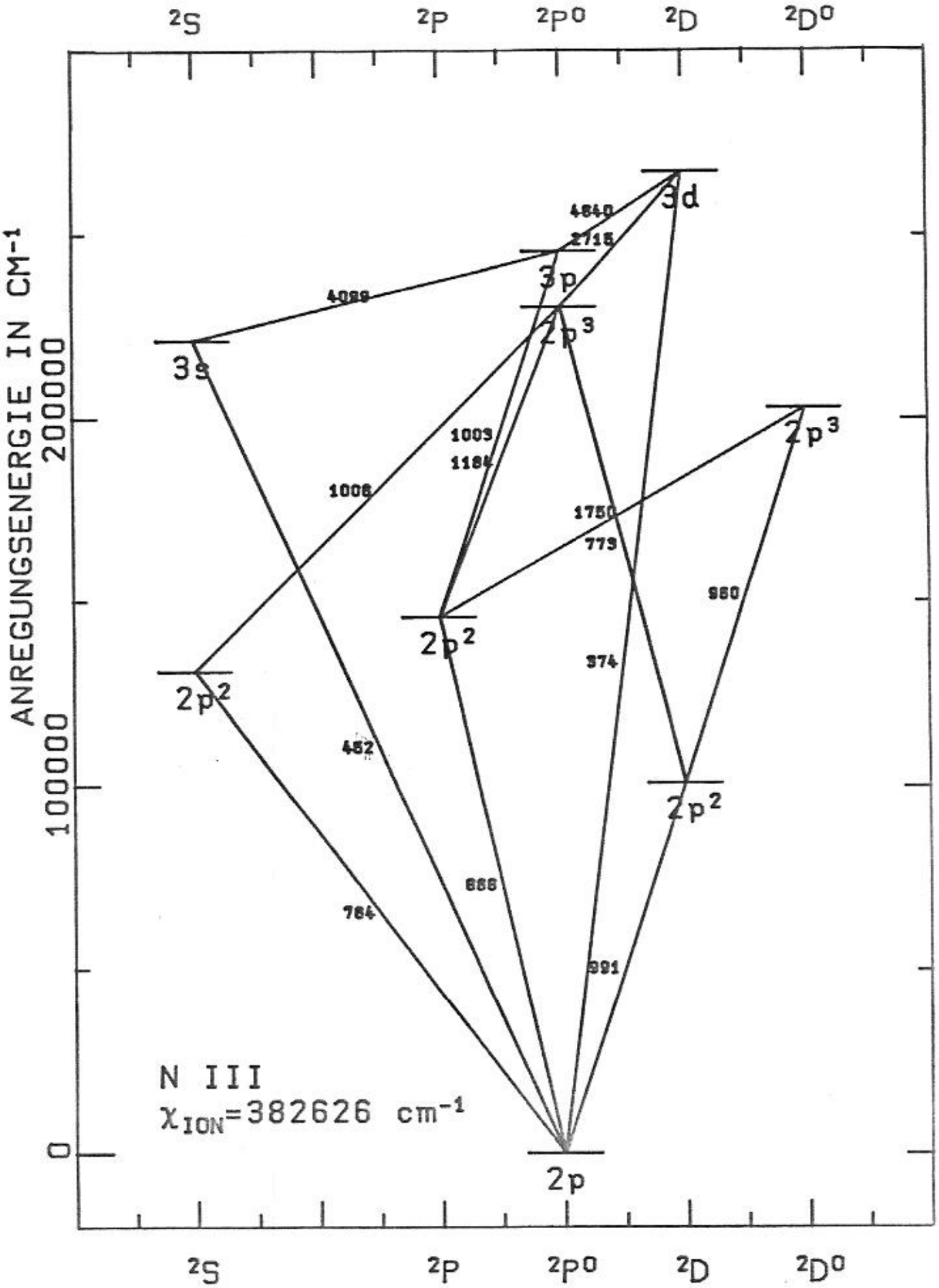
$$C_{ij} = 5.465\cdot 10^{-11}\cdot N_e \cdot T^{0.5} \cdot (14.5\cdot f_{ij} \cdot (13.6/E_{ij})^2)\cdot U_o \cdot \exp(-U_o)\cdot \Gamma(U_o)$$

mit $\Gamma(U_o) = \max(\bar{g}, 0.276\cdot \exp(U_o)\cdot E_1(U_o))$

wobei $\bar{g}$ bestimmt wird durch die Art des Übergangs:

$$\bar{g} = 0.7 \quad \text{wenn} \quad nl \rightarrow nl'$$
$$\bar{g} = 0.2 \quad \text{wenn} \quad nl \rightarrow n'l'$$

Bei den Oszillatorenstärken wird auf Daten aus Mihalas u. Hummer (1972), Nussbaumer et al. (1972,1979), Ganas (1980) und Wiese et al. (1966) zurückgegriffen.


2S
2P
2P0
2D
2D0
ANREGUNGSENERGIE IN CM-1
200000
100000
0
3d
3p
2p3
3s
2p3
2p2
2p2
2p2
2p
4640
2715
4089
1003
1184
1006
1750
773
960
374
452
666
764
391
N III
χION=382626 cm-1

Tab. 3: berücksichtigte Energieniveaus von N III, χ_{ion} = 382625.5 cm

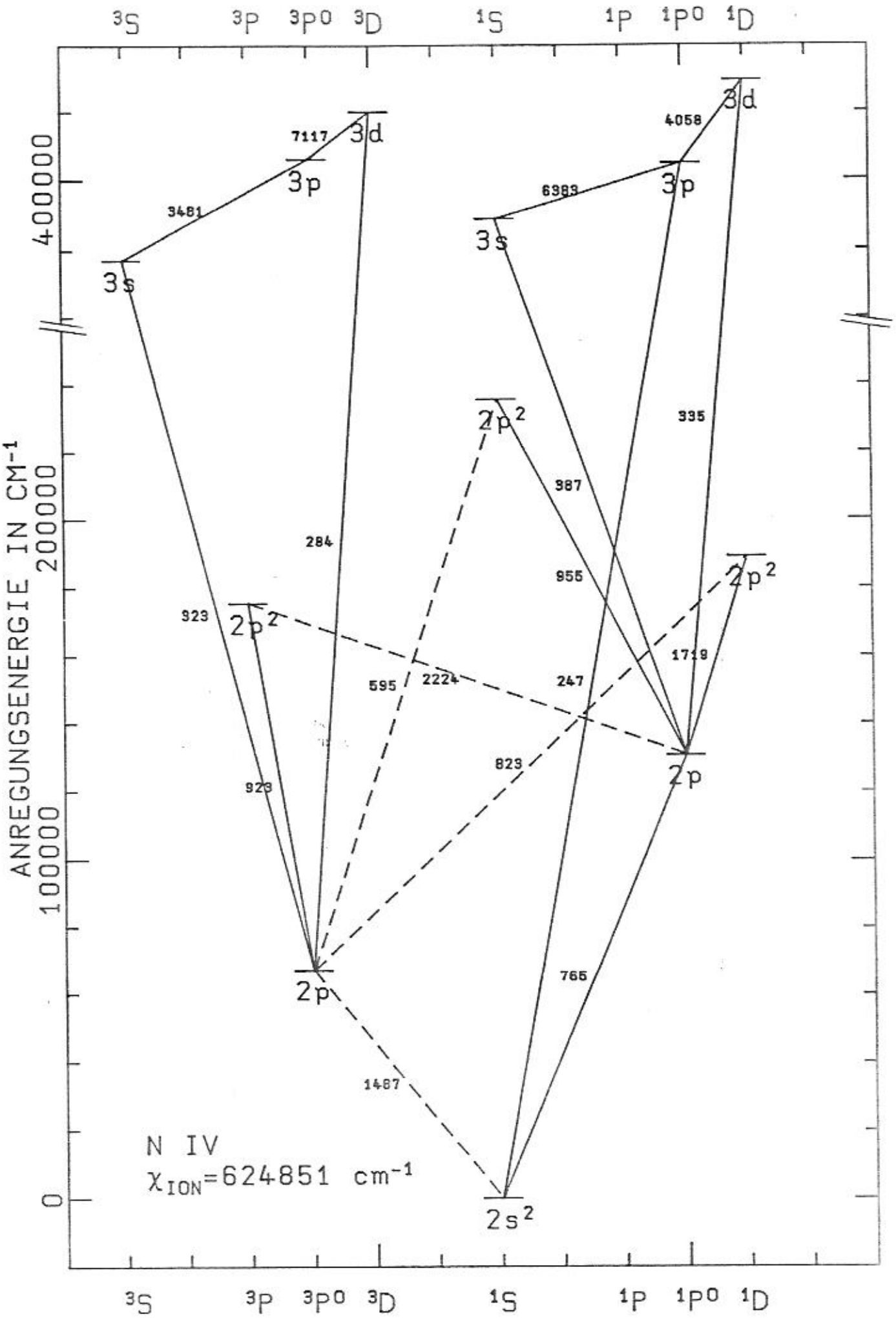
Nr	Term	E_k (cm^{-1})	λ_{ion} (A)	g_k	γ_k ($10^8 sec^{-1}$)	σ_o ($10^{-18} cm^2$)	β	S	
1	$2p^2\ ^2P^o$	116.3	261.4	6		2.16	.895	2.00	
2	$2p^2\ ^2D$	101027.	286.6	10	4.25	3.71	2.457	3.00	
			242.5			1.45	2.519	3.50	
3	$2p^2\ ^2S$	131004.	313.6	2	29.2	3.42	2.784	3.00	
			261.6			1.38	2.245	3.25	
4	$2p^2\ ^2P$	145950.	329.0	6	59.0	3.24	3.053	3.00	
			272.2			1.33	2.441	3.25	
5	$2p^3\ ^2D^o$	203079.	281.6	10	10.5	6.89	2.638	2.75	
6	$3s\ ^2S$	221302.	619.8	2	25.3	0.65	2.309	2.50	
7	$2p^3\ ^2P^o$	230407.	305.1	6	21.9	3.13	-0.267	1.01	*
			293.			1.75	1.672	2.81	*
			258.			1.41	1.856	2.67	*
8	$3p\ ^2P^o$	245690.	730.3	6	2.48	2.46	1.562	2.25	
9	$3d\ ^2D$	267242.	866.7	10	101.	2.83	-0.100	2.10	

Quellen: * Hofsäss(1982)
sonst Mihalas u. Hummer(1973)

Tab. 4: berücksichtigte Linienübergänge des N III, g_i sind die Gewichte, f_{ij} die Oszillatorenstärken

Nr.	Linie			g_i/g_j	λ_{ij} (A)	f_{ij}
1	$2p\ ^2P^o$	-	$2p^2\ ^2D$	0.6	990.98	0.104
2		-	$2p^2\ ^2S$	3	764.01	0.085
3		-	$2p^2\ ^2P$	1	685.71	0.417
4		-	$3s\ ^2S$	3	452.11	0.026
5		-	$3d\ ^2D$	0.6	374.36	0.350
6	$2p^2\ ^2D$	-	$2p^3\ ^2D^o$	1	979.87	0.130
7		-	$2p^3\ ^2P^o$	1.666	772.91	0.072
8	$2p^2\ ^2S$	-	$2p^3\ ^2P^o$	0.333	1006.0	0.100
9	$2p^2\ ^2P$	-	$2p^3\ ^2D^o$	0.6	1750.4	0.112
10		-	$2p^3\ ^2P^o$	1	1184.0	0.132
11		-	$3p\ ^2P^o$	1	1002.6	0.024
12	$3s^2\ S$	-	$3p\ ^2P^o$	0.333	4099.2	0.632
13	$2p^3\ ^2P^o$	-	$3d\ ^2D$	0.6	2714.8	0.0002
14	$3p\ ^2P^o$	-	$3d\ ^2D$	0.6	4639.9	0.428

Quellen: Mihalas u. Hummer (1973)


3S 3P 3P0 3D 1S 1P 1P0 1D
ANREGUNGSENERGIE IN CM-1
400000
200000
100000
0
3s
3p
3d
2p2
2p
2s2
7117
3481
4058
6383
284
923
595
2224
247
955
387
335
1719
823
765
1487
N IV
χION=624851 cm-1

Tab. 5: berücksichtigte Energieniveaus von N IV $\chi_{ion} = 624866$ cm

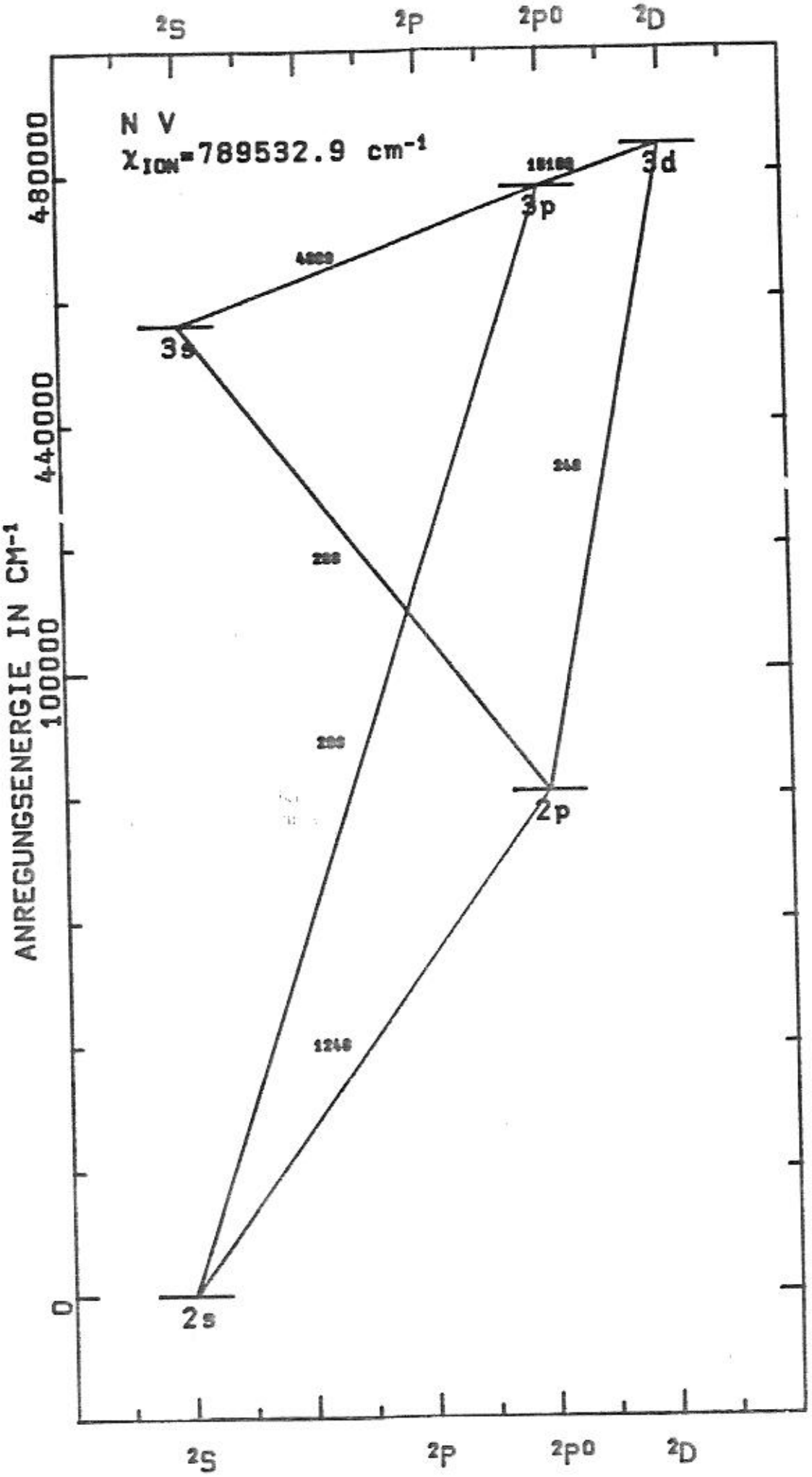
Nr	Term	E_k (cm^{-1})	λ_{ion} (A)	g_k	γ_k ($10^8 sec^{-1}$)	σ_o ($10^{-18} cm^2$)	β	s	
1	$2s^2\ ^1S$	0.	160.0	1		0.91	3.019	2.00	*
2	$2p\ ^3P^o$	(67273)	179.4	9	$4.71 \cdot 10^{-6}$	1.30	1.750	3.50	*
3	$2p\ ^1P^o$	130695.	202.4	3	22.	1.12	1.728	3.50	*
4	$2p^2\ ^3P$	(175598)	188.	9	18.8	2.22	1.836	3.14	
5	$2p^2\ ^1D$	188885.	193.	5	2.57	1.65	0.132	2.68	
6	$2p^2\ ^1S$	235370.	212.	1	29.1	1.32	-0.449	2.44	
7	$3s\ ^3S$	(377206)	403.	3	80.	0.71	1.427	1.85	
8	$3s\ ^1S$	388858.	423.	1	25.3	1.25	1.273	2.19	
9	$3p\ ^1P^o$	404521.	453.	3	114.1	1.63	1.617	2.53	
10	$3p\ ^3P^o$	(405927)	456.	9	1.08	1.69	-0.211	0.95	
11	$3d\ ^3D$	(419974)	488.	15	290.1	1.60	1.108	3.10	
12	$3d\ ^1D$	429158.	510.	5	231.7	1.20	-0.152	2.27	

Quellen: Photoionisationsquerschnitte: * Mihalas u. Hummer (1972)
sonst Hofsäss (1982)
Dämpfungskonstanten: Nussbaumer (1972, 1978)

Tab. 6: berücksichtigte Linienübergänge des N IV

Nr.	Linie		g_i/g_j	λ_{ij} (A)	f_{ij}
1	$2s^2\ {}^1S$	- $2p\ {}^3P^o$	0.111	(1486.5)	$1.4 \cdot 10^{-6}$
2		- $2p\ {}^1P^o$	0.333	765.1	0.579
3		- $3p\ {}^1P^o$	0.333	247.2	0.313
4	$2p\ {}^3P^o$	- $2p^2\ {}^3P$	1	923.2	0.24
5		- $2p^2\ {}^1D$	1.8	(822.9)	$1.88 \cdot 10^{-6}$
6		- $2p^2\ {}^1S$	9	(595.)	$8.3 \cdot 10^{-9}$
7		- $3s\ {}^3S$	3	322.7	0.0416
8		- $3d\ {}^3D$	0.6	283.5	0.583
9	$2p\ {}^1P^o$	- $2p^2\ {}^3P$	0.333	(2223.5)	$2.8 \cdot 10^{-6}$
10		- $2p^2\ {}^1D$	0.6	1718.5	0.189
11		- $2p^2\ {}^1S$	3	955.3	0.176
12		- $3s\ {}^1S$	3	387.4	0.0189
13		- $3d\ {}^1D$	0.6	335.1	0.648
14	$3s\ {}^3S$	- $3p\ {}^3P^o$	0.333	3480.8	0.588
15	$3s\ {}^1S$	- $3p\ {}^3P^o$	0.333	6383.0	0.238
16	$3p\ {}^1P^o$	- $3d\ {}^1D$	0.6	4057.8	0.277
17	$3p\ {}^3P^o$	- $3d\ {}^3D$	0.6	7117.0	0.166

Quellen: Nussbaumer et al. (1972, 1979)


N V
χ_{ION}=789532.9 cm^{-1}
^2S
^2P
$^2P^0$
^2D
480000
440000
100000
0
ANREGUNGSENERGIE IN CM^{-1}
3d
3p
3s
2p
2s

Tab. 7: berücksichtigte Energieniveausvon N V χ_{ion} = 789532.9 cm

Nr	Term	E_k (cm^{-1})	λ_{ion} (A)	g_k	γ_k ($10^8 sec^{-1}$)	σ_o ($10^{-18} cm^2$)	β	s	
1	$2s\ ^2S$	0.	126.6	2		0.57	0.453	1.44	*
2	$2p\ ^2P^o$	80637.	141.0	6	3.38	0.59	0.462	2.54	*
3	$3s\ ^2S$	456134.	299.	2	90.8	0.74	-0.125	0.68	
4	$3p\ ^2P^o$	477826.	320.	6	119.1	1.10	-0.195	1.18	
5	$3d\ ^2D$	484417.	327.	10	429.	0.73	1.378	3.79	

Quellen: * Hidalgo(1968,1969)
sonst Hofsäss(1982)

Tab. 8: berücksichtigte Linienübergänge des N V

Nr.	Linie			g_i/g_j	λ_{ij} (A)	f_{ij}
1	$2s\ ^2S$	-	$2p\ ^2P^o$	0.333	1240.1	0.222 *
2		-	$3p\ ^2P^o$	0.333	209.3	0.234 *
3	$2p\ ^2P^o$	-	$3s\ ^2S$	3	266.3	0.0322
4		-	$3d\ ^2D$	0.6	247.7	0.658
5	$3s\ ^2S$	-	$3p\ ^2P^o$	0.333	4608.7	0.395
6	$3p\ ^2P^o$	-	$3d\ ^2D$	0.6	15168.0	0.0544

Quellen: * Ganas (1980)
sonst Wiese et al. (1966)

Literaturverzeichnis
==========

Arnol'd,V.I.: Gewöhnliche Differentialgleichungen, Springer Verlag,1980
Auer,L.H. und Mihalas,D.: 1969, Astrophys.J. 158, 641
Bappu,M.K.V. und Sahade,J.: 1973, Wolf-Rayet and High Temperature Stars, IAU-Symposium No. 49, Reidel
Barlow,M.J., Smith,L.J. und Willis,A.J.: 1981, Monthly Notices Roy. Astron. Soc.196, 101
Barlow,M.J. und Cohen, 1982
Baschek,B.und Scholz,M.: 1982, "Physics of stellar atmospheres" in Landolt-Börnstein - Numerical data and fundamental relationships in science and technology - New Series, Springer Heidelberg
Burton,W.M., Evans,R.G., und Griffin,W.G.: 1975, Phil.Trans.Roy.Soc. A279,355
Cassinelli,J.P.: 1971, Astrophys.J. 165,265
Cassinelli,J.P. u. Hartmann,L.: 1975,Astrophys.J. 202, 718
Castor,J.I.: 1970, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 149, 111
Castor,J.I.: 1972, Astrophys.J. 178,779
Castor,J.I.: 1974, Astrophys.J. 189,273
Castor,J.I., Abbott,D.C. und Klein,R.I.: 1975, Astrophys. J. 195, 157
Castor,J.I. und Lamers,H.J.G.L.M.: 1979, Astrophys.J. Suppl. 39,481
Chandrasekhar,S.: 1934, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 94,444
Dickel,H.R., Habing,H.J. und Isaacman,R.: 1980, Astrophys.J. 238,L39
Duerbeck,H.W. und Seitter,W.C.: 1982, "Special types of stars" in Landolt-Börnstein - Numerical data and fundamental relationships in science and technology - New Series, Springer Heidelberg
Florkowski,D.R. und Gottesman,S.T.: 1977, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 179, 105
Florkowski,D.R.: 1982, IAU- Symposium Nr. 99, S.63
Ganas,P.S.: 1980, J.Opt.Soc.Am. 70,250
Hanbury Brown,R., Davis,J., Herbison-Evans,D. und Allen,L.R.: 1970, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 148,103
Hartmann,L. und Cassinelli,J.P.: 1977, Astrophys.J. 215,155
Hidalgo,M.B.: 1968, Astrophys.J. 153,981
Hidalgo,M.B.: 1969, Astrophys.J. 157,479
Höflich,P.: 1983, Diplomarbeit, Heidelberg
Hofsaess,D.: 1979, Atomic Data and Nuclear Data Tables 24,285
Van der Hucht,K.A., Cassinelli,J.P., Wesselius,P.R. und Chi-Chao Wu:

1979, Astron. Astrophys. Suppl. 38,279
Van der Hucht,K.A., Conti,P.S., Lundström,I. und Stenholm,B.: 1981, Space Sci. Rev. 28,227
Husfeld,D.: 1982, Diplomarbeit, Kiel
Johnson,H.M.: 1978, Astrophys.J. Suppl. 36,217
Kalkofen,W.: 1984, Methods in radiative transfer, Cambridge Univ. Press
Kosirev,N.A.: 1934, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 94,430
Kunasz,P.B.,Hummer,D.G.: 1974a,Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 166,19
Kunasz,P.B.,Hummer,D.G.: 1974b,Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 166,57
Kunasz,P.B.,Hummer,D.G. u. Mihalas,D.: 1975, Astrophys.J. 202,92
deLoore,C.W.H. und Willis,A.J.: 1982, Wolf-Rayet-Stars: Observations, Physics,Evolution, IAU-Symposium No. 99, Reidel
Lotz,W.: 1968, Zeitschr. f. Phys. 216,241
Lundström,I., Stenholm,B.: 1984, Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 56, 43
Massey,P.: 1981, Astrophys.J. 246, 153
Mihalas,D.: 1972, NCAR Technical Note NCAR-TN/STR-76, Boulder
Mihalas,D.: 1981, Astrophys.J. 250, 373
Mihalas,D. und Hummer,D.G.: 1973, Astrophys.J. 179,827
Mihalas,D. und Hummer,D.G.: 1974, Astrophys.J. Suppl. 265,343
Mihalas,D., Kunasz,P.B. und Hummer,D.G.: 1975, Astrophys.J. 202,465
Mihalas,D., Kunasz,P.B. und Hummer,D.G.: 1976a, Astrophys.J. 203,647
Mihalas,D., Kunasz,P.B. und Hummer,D.G.: 1976b, Astrophys.J. 206,515
Miyamoto,S.: 1952, Cont. Inst. Astrophys. Kyoto, no.24
Morton,D.C. und Wright,A.E.: 1979, IAU-Symposium 83,155
Nugis,T.: 1975, IAU-Symp. 67,291
Nussbaumer,H.: 1972, Astron. Astrophys. 16,77
Nussbaumer,H. und Storey,P.J.: 1979, Astron. Astrophys. 74,244
Nussbaumer,H., Schmutz,W., Smith,L.J. und Willis,A.J.: 1982, Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 42,257
Nussbaumer,H. und Storey,P.J.:1984,Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 56,293
Peraiah,A. und Grant,I.P.: 1973, J.Inst.Maths.Applcs. 12,75
Peraiah,A.: 1980, Acta atsronomica 30,525
Van Regemorter,H.: 1962, Astrophys.J. 136,906
Sanders,W.T., Cassinelli,J.P. und van der Hucht,K.A.: 1982, IAU-Symp. 99,589
Seaquist,E.R.: 1976, Astrophys.J. 203, 135
Simon,K.P.: 1979, Doktorarbeit, Kiel
Smith,L.F.: 1968, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 138, 109
Smith,L.F. und Kuhi,L.V.: 1981, JILA- Report No. 117, Boulder
Smith,L.F. und Willis,A.J.: 1982, Monthly Notices Roy. Astron.

Soc. 182, 559

Sterken,C. und de Loore,C.: 1982, IAU- Symposium Nr. 99, S.67

Traving,G., Baschek,B. und Holweger,H.: 1966, Tabellen für die Berechnung der Zustandssummen, in "Abhandlungen der Hamburger Sternwarte", Bd. VIII Nr.1, Hamburg-Bergedorf

Underhill,A.B.: 1983, Astrophys.J. 266, 718

Vreux,J.M., Dennefeld,M und Andrillat,Y.: 1983, Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 54, 437

Weber,S.V.: 1981, Astrophys.J. 243, 954

Wehrse,R.: 1981, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 195, 553

Wehrse,R.: 1984, in "Trieste workshop on progress in stellar spectral line formation theory", Reidel

Wiese,W.L., Smith,M.W. und Glennon,B.M.: 1966, Atomic Transition Probabilities Vol 1,NSRDS-NB94, Washington

Williams,P.M.: 1982, IAU- Symposium Nr.99,S.73

Willis,A.J.: 1981, IAU-Collogium No.59, 27, Reidel

Willis,A.J.: 1982, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 198, 897

Willis,A.J.: 1983, Proc. of Trieste Workshop "The Observatinal basis for Velocity Fields in Stellar Atmospheres", p. 111

Willis,A.J.: R.Wilson, 1978, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 182, 559

Ich danke Herrn Prof.Dr. B. Baschek und Herrn Dr. R. Wehrse herzlich für die Themenstellung und die intensive Betreuung meiner Arbeit. Mein besonderer Dank gilt den Herren Dr. Köppen und P. Höflich, die meine Arbeit durch viele interessante Diskussionen unterstützt haben. Allen Angehörigen des Instituts sei an dieser Stelle für die nette Arbeitsatmosphäre gedankt.
Ich danke der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 132.
Schließlich möchte ich mich bei meinen ehemaligen Lehrern Dr. Kornwachs und Dr. Roether dafür bedanken, daß sie vor zehn Jahren in mir das Interesse für die Naturwissenschaft geweckt haben.
Die Rechnung wurden auf dem IBM-3081D-Computer des Rechenzentrums der Universität Heidelberg und auf der Cray-I des MPI für Physik und Astrophysik in Garchingen durchgeführt.