

2023-5.21.-7.25.

B. Plez の Turbospectrum v19

未整理版

Bertrand Plez, Universit´e de Montpellier, France,
Jeffrey Gerber, Purdue University, Indiana, USA, Ekaterina Magg, MPIA Heidelberg, Germany,
and
Maria Bergemann, MPIA Heidelberg, Germany

<特徴>

Spshow に比べ優雅さに欠けるだけでなく、性能的にも劣る。ただ、分子はいろいろ入る。

マイクロ乱流速度は入るが、自転もマクロ乱流も入らない

観測との比較は別途

線データがフラックスに表示されることはなく、同定に不利

V20 は non-LTE 対応版

■全体の構成

README_getstarted	
DOC	
exec-gf-v19.1	for gnu fortran Makefile
exec-v19.1	for intel fortran Makefile
Utilities	MARCS model, VALD3, various profiles との合成など
COM-v19.1	コードを走らせるディレクトリー
COM-v19.1/contopac	continuous opacity file
COM-v19.1/linelists	VALD からの原子線データ
COM-v19.1/models	大気モデルのサンプル
COM-v19.1/syntspec	計算結果サンプル
DATA	主として分子線データ
source-v19.1	ソースプログラム群

■実行例

・現行システム

Epson AT993E (machild)

VMware 16 & Ubuntu 16.04

ディレクトリー-tubro-sp

・tubro-sp に用意するディレクトリ

source-v19.1

COM-v19.1

・コンパイル法

ifort - /exec-v19.1 に入り、#make。ディレクトリ/source-v19.1 にソースファイルがあるとする。
実行ファイル3つ (babsma_lu, bsyn_lu, eqwid_lu) できた。

・できた実行ファイルはここに置いたままに。

・実行

COM-v19.1 に入る

中にあるディレクトリの models, linelists に大気モデル、線データを置く。

実行用スクリプトを適宜編集し、例えば

```
#csh script-5000-intens.com
```

として実行。すぐにできる。c-shell なので注意。bash とだいぶ違う

計算は下の2段階で行われる。

1. babsma.f - 連続吸収係数

連続吸収係数とスペクトルを計算 in the **COM/** folder

2. bsyn.f - スペクトル

線データを読み込み、スペクトル合成

計算結果のフラックスはディレクトリの synspec に。

■線データとその形式 Readme-Linelist_format_v.19

<原子線データ>

元素ごとに並べないといけない。

Hlinedata - 水素用

Gaia-ESO 線リスト ([Heiter et al. 2021](#)) - その他の元素、分子

アップデート: C, N, O, Mg, Si, [Magg et al. \(2022\)](#)

<https://keeper.mpdml.mpg.de/d/6eaecbf95b88448f98a4/>

・Atomic case:

```
' 26.000          '      1      2342
' Fe I '
  4200.087  3.884 -1.130  -7.420    7.0  5.01E+07  0.000  'p' 'd'  0.0  1.0 'Fe I
LS:3p6.3d6. (5D).4s.4p. (3P*) z3D* LS:3p6.3d7. (4F).4d f3F'
  4200.463  4.154 -3.374  -7.290    9.0  2.45E+08  0.000  'p' 'd'  0.0  1.0 'Fe I
LS:3p6.3d7. (4F).4p y5D* LS:3p6.3d6. (5D).4s. ¥ (6D).5d 7F'
```

Header: ヘッダー部

26.000 : 元素名+アイソトープ (000 は他にない) 、つまり Fe では 26.056 for ⁵⁶Fe.

1 : 中性 (2 は1階電離)

2342 : 採録されている線の数

個々のデータ

col 1: 波長(A)

col 2: 励起ポテンシャル(eV)

col 3: log gf

col 4: fdamp (下記参照) C6

col 5: g 値、上レベル

col 6: 放射ダンピング (if =0, gf-value is used to compute gamma_rad) Crad

col 7: シュタルク効果 (省略可) C4

col 8: 上のレベルの s,p,d,f etc , see fdamp

col 9: 下のレベル、上と同じ

col 10: 等価幅、必要なら (元素量決定 : eqwidt run)

col 11: 等価幅の誤差

col 12: (in quotes) レベルについての注

' Fe I '

4200.087	3.884	-1.130	-7.420	7.0	5.01E+07	0.000	'p'	'd'	0.0	1.0
(A)	(eV)	gf	fdamp	g	γ_{rad}	γ_4	上	下	EW	誤差

' Fe I LS:3p6.3d6. (5D).4s.4p. (3P*) z3D* LS:3p6.3d7. (4F).4d f3F'
レベルについての注

<sample : vald-6700-6720.list>

4 番目の fdamp がいろいろ (下の説明のように 4 通りある。Kurucz_Bell の C6 か、Unsold 近似への補正值で良さそう)。上で γ_4 とされている項がないようだ。

' 3.000				1	2					
' Li I '										
6704.081	3.373	-3.261	2.500	4.0	3.31E+07	's'	'p'	0.0	1.0	' Li I
6704.081	3.373	-3.561	2.500	2.0	3.31E+07	's'	'p'	0.0	1.0	' Li I
' 3.006				1	2					isotope
' Li I '										
6707.921	0.000	-0.002	346.236	4.0	3.63E+07	's'	'p'	0.0	1.0	
6708.072	0.000	-0.303	346.236	2.0	3.63E+07	's'	'p'	0.0	1.0	
' 3.007				1	2					isotope
' Li I '										
6707.764	0.000	-0.002	346.236	4.0	3.63E+07	's'	'p'	0.0	1.0	
6707.915	0.000	-0.303	346.236	2.0	3.63E+07	's'	'p'	0.0	1.0	
' 6.000				1	3					
' C I '										
6711.320	8.537	-2.694	-7.230	3.0	8.32E+07	'p'	's'	0.0	1.0	' C I
6713.582	8.537	-4.024	-7.280	5.0	2.04E+07	'p'	's'	0.0	1.0	
6716.888	8.537	-5.419	-7.230	1.0	7.94E+07	'p'	's'	0.0	1.0	
' 7.000				1	5					
' N I '										
6700.494	11.838	-1.394	1908.317	4.0	1.00E+05	'p'	'd'	0.0	1.0	
6704.839	11.838	-1.394	1905.317	2.0	1.00E+05	'p'	'd'	0.0	1.0	
6706.107	11.840	-0.993	1910.317	6.0	1.00E+05	'p'	'd'	0.0	1.0	
6708.759	11.840	-1.288	1908.317	4.0	1.00E+05	'p'	'd'	0.0	1.0	
6713.114	11.840	-2.094	1904.317	2.0	1.00E+05	'p'	'd'	0.0	1.0	
' 9.000				1	2					
' F I '										
6708.275	12.697	-1.620	2.500	4.0	1.00E+05	's'	'p'	0.0	1.0	
6714.261	14.764	-1.490	2.500	4.0	1.00E+05	'p'	'd'	0.0	1.0	
' 13.000				2	1					
' Al II '										
6700.848	14.890	-2.570	2.500	1.0	1.00E+05	's'	'p'	0.0	1.0	

•NLTE case

NLTE flag is .true. – model atom や departure coefficient は
<https://keeper.mpdl.mpg.de/d/6eaecbf95b88448f98a4/>.
大きいので元素ごとが良い

• NLTE 情報ファイル

v20.0 に入れるには別の入力用ファイルから。'NLTEINFOFILE' in bsyn input
各元素についての情報。モデル原子、departure 係数ファイルを

```
An example
# some comment
# path for model atom files ! this comment line has to be here !
./modelAtoms/
# path for departure files ! this comment line has to be here !
./nlteDepFiles/
# atomic (non)LTE setup (another comment)
6.0  'C'  'lte'  '          ' '          ' '          '
8.0  'O'  'nlte' 'atom.o41f'  'depCoeff_O_9.591.dat' 'ascii'
12.0 'Mg' 'nlte' 'atom.mg86b' 'depCoeff_Mg_7.428.dat' 'ascii'
14.0 'Si' 'lte'  '          ' '          ' '          '

```

•モデル原子

アスキーで、MULTI2.3。
変位係数とともにダウンロードするらしい。

•変位係数 departure coefficients

各モデル原子に対し求められたバイナリーファイル。諸モデル大気に対して。そのグリッドから内挿して求める。
それが interpolator/フォルダー。
各バイナリーファイルにはアスキーファイルが同梱
これもやりながらでないリアリティーある内容が書けない。
v20 の売りだからこれがないといけないだろうが、私の役に立つのかな？ v19 にしようか？

•Departure coefficient file

departure coefficients を持ってきたら input_file に書くことで v20 にかげられる。
PYTHON wrapper, Sec. [8.1 f](#) を参照。

•Interpolator of departure coefficients

上で紹介済。
Thomas Masseron が作成し、MARCS web page にある。

<分子線データ> 別の FeH の解説も参照

•fdamp 全て 2.5 と。

•fdamp: – ファンデルワールス定数

=====

*1) use ABO theory (Anstee, Barklem, O'Mara) for collisional damping with H,

with data taken from line list: fdamp contains sigma.alpha.

This number is available starting with VALD3 version of the VALD database.

See : <http://www.astro.uu.se/~barklem/howto.html>

- 2) if (1) not available check if something can be computed in the anstee.f routine using generic broadening recipes from the ABO formalism
- 3) if (2) not available, check in line list for a gamma6 at 10000K
- 4) if nothing else worked, compute Unsold approximation, using a fudge factor read from column 4.

One example:

```
5349.465 2.709 -0.428 -7.652 7.0 2.69E+06 's' 'p' 0.0 1.0
'Ca I LS:3p6.3d.4s 1D LS:3p6.3d.4p 1F*' 8 26 '13D1D' '14P1FP'
```

fdamp = -7.652 :the calculation will be made according to the generic ABO recipe for s-p transition (case 2).

If I replace 's' 'p' by 'x' 'x' in the line list, broadening will be computed using -7.652 and the gam_6 recipe from Kurucz (case 3),

If in addition I replace -7.652 by 1.0, The Unsold recipe with a fudge factor = 1 will be used.

=====

•FeH_Dulick_6190_458950.list <Plez>

```
'0126.001056 ' 1 111404
```

```
'/Users/ulrike/Molecules/Data/FeH/FEH??.DAT
```

```
6195.989 0.097 -9.234 0.00 24.0 0.00E+00
```

```
6196.054 0.115 -9.060 0.00 26.0 0.00E+00
```

```
6196.787 0.081 -9.412 0.00 22.0 0.00E+00
```

```
6203.813 0.042 -10.284 0.00 16.0 0.00E+00
```

Turbo-SP v19 との対応は？ 下が v19 形式、頭の部分か？

```
6700.167 1.422 0.516 2.500 255.0 8.49E+06 'X' 'X' 0.0 1.0 注略
```

•FeH_Plez_Langhoff-Bauschlicher_bsyn.list <Plez>

```
'0126.000000 ' 1 19380
```

```
'FeH_Plez.lis
```

```
7626.509 0.086 -4.789 0.00 20.0 0.00E+00 'X' 'X' 0.0 1.0 ' 2 0 SR32 8.5 FeH FX'
```

```
7633.363 0.097 -4.463 0.00 26.0 0.00E+00 'X' 'X' 0.0 1.0 ' 2 0 SR21 11.5 FeH FX'
```

```
7633.410 0.081 -4.773 0.00 24.0 0.00E+00 'X' 'X' 0.0 1.0 ' 2 0 SR21 10.5 FeH FX'
```

以上のとおりで、Turbo-SP v19 用に近い

```
6700.167 1.422 0.516 2.500 255.0 8.49E+06 'X' 'X' 0.0 1.0 注略
```

•FeH_Plez_scaledLanghoff.list <Plez> このままでは使えない

```
FeH 02 00 008 + SR32 .1626E-04 13108.550 .086 F
```

```
FeH 02 00 011 + SR21 .3442E-04 13096.780 .097 F
```

```
FeH 02 00 010 + SR21 .1686E-04 13096.700 .081 F
```

Turbo-SP v19 との対応は？ 線データ？ レベルデータかな？

```
6700.167 1.422 0.516 2.500 255.0 8.49E+06 'X' 'X' 0.0 1.0 注略
```

その他の線データ : VALD5([Ryabchikova et al. 2015](#)) から。Utilities/vald3line-BPz-freeformat.f. で TS format に。

・Molecular species

Gaia-ESO project からダウンロード、<https://keeper.mpd.lupm.mpg.de/d/6eaecbf95b88448f98a4/>.

それに独自に加えた。それが、

<https://nextcloud.lupm.in2p3.fr/s/r8pXijD39YLzw5T>,

<https://nextcloud.lupm.in2p3.fr/s/r8pXijD39YLzw5T?path=%2FPROGRAMS>.

<vald データのサンプル> FeH も同形式で。

上のサンプルでは γ_4 が入っているが、ここにはない。はて？ でもこれで上手くいく。

```
' 26.000          ' 1          81
' Fe I          '
 6700.453  5.507 -8.941  -7.180   7.0  5.37E+07 'd' 'f'  0.0  1.0
 6700.885  5.067 -4.037  -7.720   7.0  1.15E+08 'd' 'p'  0.0  1.0

' 607.012014      ' 1          101
' CN I          '
 6700.027  1.420 -3.815   2.500  146.0  1.48E+06 'X' 'X'  0.0  1.0 注略
 6700.122  0.935 -1.929   2.500   60.0  1.48E+06 'X' 'X'  0.0  1.0 注略
' 822.000048      ' 1          309
' TiO I         '
 6700.167  0.364  0.350   2.500  145.0  9.86E+06 'X' 'X'  0.0  1.0 注略
 6700.167  1.422  0.516   2.500  255.0  8.49E+06 'X' 'X'  0.0  1.0 注略
' 126.000056      ' 1          82  同じ形式で
' FeH I         '
 6700.599  0.619 -7.375   2.500   56.0  0.00E+00 'X' 'X'  0.0  1.0
 6700.927  0.160 -5.834   2.500   18.0  0.00E+00 'X' 'X'  0.0  1.0
```

■Kurucz line list から Turbo-sp 用に変換

VALD から落とすのもやっかいなので、GF10_KB から落としておく。

■ 大気モデル

いろんな形式が入るとされている。ただし、MARCS がメイン。Kurucz も入る。

Various model formats

- ・MARCS ([Gustafsson et al. 2008](https://marcs.astro.uu.se)) models、most users will download ".mod" files.
<https://marcs.astro.uu.se> - Plez の FeH データに言及
MARCS の opacity file (.opa from the MARCS web site)が使えるなら(bsyn.f)を動かす必要はない。
表面的には log g = 2.0 位までだが、詳しい検索の方で見るともっと低いものまである。

- ・ATLAS ([Kurucz 1970](#); [Castelli & Kurucz 2003](#)) models
- ・MULTI ([Carlsson 1986](#)) formatted model.
- ・other format

・Kurucz 大気モデルの採用法

実行用スクリプトで、

```
'MARCS-FILE:' '.false.'
```

```
foreach MODEL (kurucz-3500g000.mod)
```

と。大気モデルの名称は先頭に“kurucz-”が必要らしい

■入力時の制御データ

v20 用ではあるが...

Keyword	value	comment
LAMBDA MIN_	wavelength in A	minimum wavelength for synthesis
LAMBDA MAX_	A	maximum wavelength for synthesis
LAMBDA STEP	A	wavelength step for synthesis
METALLICITY	[Fe/H]	global metallicity relative to solar
ALPHA/Fe	[α /Fe]	α -elements abundance ^a
HELIUM	[He/H]	Helium abundance
R-PROCESS	[r/Fe]	r-process fraction enhancement ^b
S-PROCESS	[s/Fe]	s-process fraction enhancement ^c
INDIVIDUAL ABUNDANCES	integer	number of elements with special abundance ^d
MODELINPUT	model atmosphere	for babsma.f only
MARCS-FILE	T or F	default is true ^e
MODELOPAC	continuous opacity file	output for babsma.f, input for bsyn.f
XIFIX	T or F	true if constant vmicro to be read ^f
following parameters for spectral synthesis only in bsyn.f		
RESULTFILE	output spectrum	
SEGMENTSFILE	file name	contains non overlapping spectral segments
RESOLUTION	$\lambda/\Delta\lambda$	spectral resolution in segments if applicable ^g
INTENSITY/FLUX	Intensity or Flux	type of spectrum to be calculated
SPHERICAL	T or F	geometry for radiative transfer ^h
ISOTOPES	integer	number of isotopic abundances ⁱ
NFILES	integer	number of line lists to be read ⁱ
NLTE	T or F	NLTE or LTE calculation
NLTEINFOFILE	file name	on N/LTE species and associated files

a O, Ne, Mg, Si, S, Ar, Ca, Ti

b see makeabund.f

c see makeabund.f

d if different from 0, this is followed by lines of data with the element atomic number and its abundance (scale H=12)

e ascii or binary MARCS model file
 f if .true. followed by a line with vmicro in km/s, for babsma.f only
 g default is 500 000
 h followed by 4 lines of data controlling the solver, that should not be changed
 i if not 0, followed by lines indicating the isotopic abundances. See makeabund.f for default values
 j followed by lines with file names

■サンプル計算結果

<EX> script-5000-intens.com

```
#!/bin/csh -f
# compute intensity spectrum for the Sun, at 2 different angles

date
set mpath=models      *** COM19.1 の中の /models に大気モデルを収納

foreach MODEL
(s5000_g+2.0_m1.0_t02_st_z+0.00_a+0.00_c+0.00_n+0.00_o+0.00_r+0.00_s+0.00.mod)

set lam_min      = '6700'          *** 以下自明なパラメータを設定
set lam_max      = '6720'

set deltalam     = '0.01'
set METALLIC     = '      0.000'
set TURBVEL      = '2.0'

#
# ABUNDANCES FROM THE MODEL ARE NOT USED !!!

../exec-v19.1/babsma_lu << EOF      *** 1. 連続吸収係数計算
'LAMBDA_MIN:'   '${lam_min}'
'LAMBDA_MAX:'   '${lam_max}'
'LAMBDA_STEP:'  '${deltalam}'
'MODELINPUT:'   '$mpath/${MODEL}'
'MARCS-FILE:'   '.true.'          *** MARCS 大気モデルを選択
'MODELOPAC:'    'contopac/${MODEL}opac'
'METALLICITY:'  '${METALLIC}'
'ALPHA/Fe      :'   '0.00'
'HELIUM        :'   '0.00'
'R-PROCESS     :'   '0.00'
'S-PROCESS     :'   '0.00'
'INDIVIDUAL ABUNDANCES:' '0'
'XIFIX:'       'T'
$TURBVEL
EOF
```

#####


```
set SUFFIX      = _${lam_min}-${lam_max}_xit${TURBVEL}.intensity
set result      = ${MODEL}${SUFFIX}
```

```
../exec-v19.1/bsyn_lu <<EOF          *** 2. 線を入れ、intensity, flux を計算
'LAMBDA_MIN:'      '${lam_min}'
'LAMBDA_MAX:'      '${lam_max}'
'LAMBDA_STEP:'     '${deltalam}'
'INTENSITY/FLUX:'  'Intensity'      *** 選択する
'COS(THETA)       :' '1.0'
'ABFIND           :' '.false.'
'MODELOPAC:'       'contopac/${MODEL}opac'      *** opacity をここに
'RESULTFILE:'      'syntspec/${result}'         *** 計算結果がここに
'METALLICITY:'     '${METALLIC}'
'ALPHA/Fe         :' '0.00'
'HELIUM           :' '0.00'
'R-PROCESS        :' '0.00'
'S-PROCESS        :' '0.00'
'INDIVIDUAL ABUNDANCES:' '1'
3 1.05
'ISOTOPES:'        '2'
3.006 0.075
3.007 0.925
'NFILES           :' '2'
DATA/Hlinedata
linelists/vald-6700-6720.list          *** 線データ、ここに FeH も（下参照）
'SPHERICAL:'       'T'
  30
  300.00
  15
  1.30
EOF
```

```
#####
date
end
```

<結果> 上の例を flux にしたもの

```
#csh script-5000-flux.com の場合
script-5000-intens.com 中の intensity を flux に
```

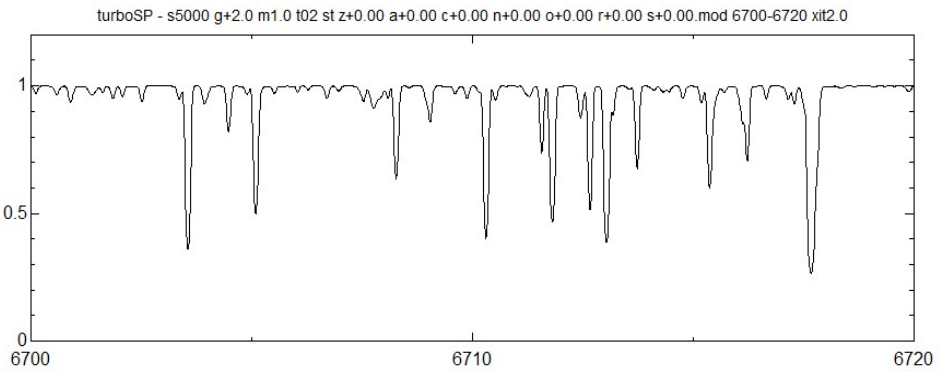
```
COM- v
19.1/synspec/s5000_g+2.0_m1.0_t02_st_z+0.00_a+0.00_c+0.00_n+0.00_o+0.00_r+0.00_s+0.00.m
od_6700-6720_xit2.0
```

下のとおりで、素気ないが。

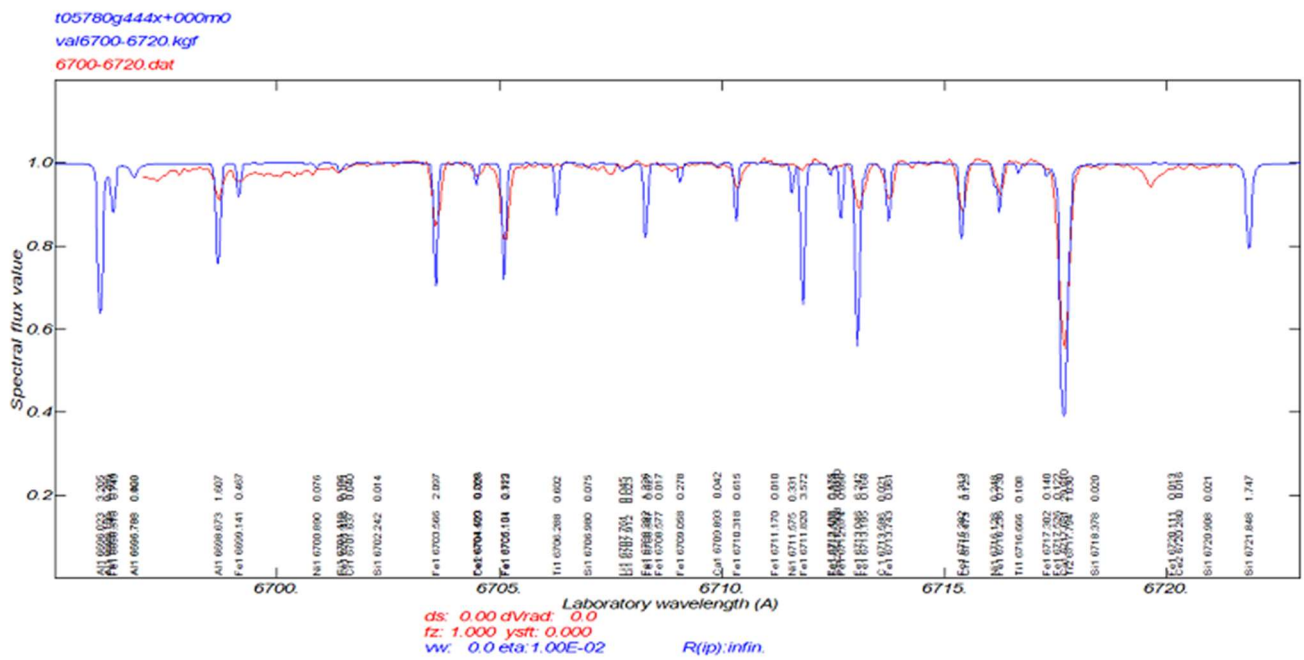
```
6700.000 0.99951 4.11856E+06
6700.010 0.99914 4.11702E+06
```

6700.020	0.99849	4.11436E+06
6700.030	0.99744	4.11002E+06
6700.040	0.99583	4.10338E+06
6700.050	0.99353	4.09389E+06
6700.060	0.99049	4.08134E+06
6700.070	0.98677	4.06604E+06

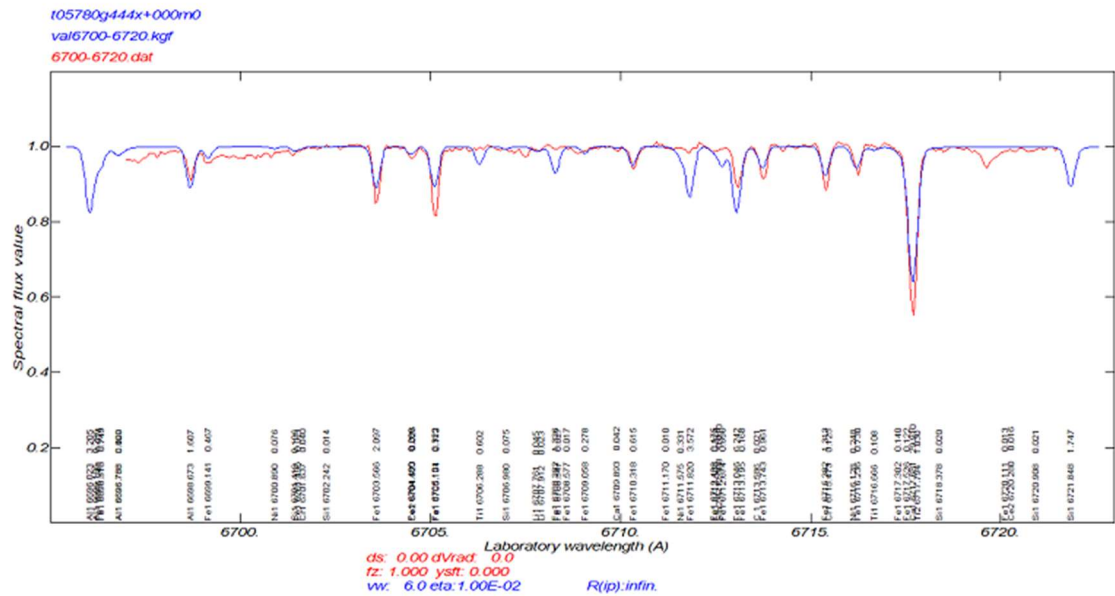
下は、script-sun-flux.com の結果。フラックスしか出ないので、線同定は別途。表示では spshow に劣る



Turbo-SP Sun, spshow と少し違うか……。だいが深い。Broadening がないことも



Spshow - $v_t = 2.0$ km/s, $v \sin i = 0.0$ km/s



Spschow - $v_t = 0.75$ km/s, $v \sin i = 6.0$ km/s

■ 分子線 FeH を入れたい場合

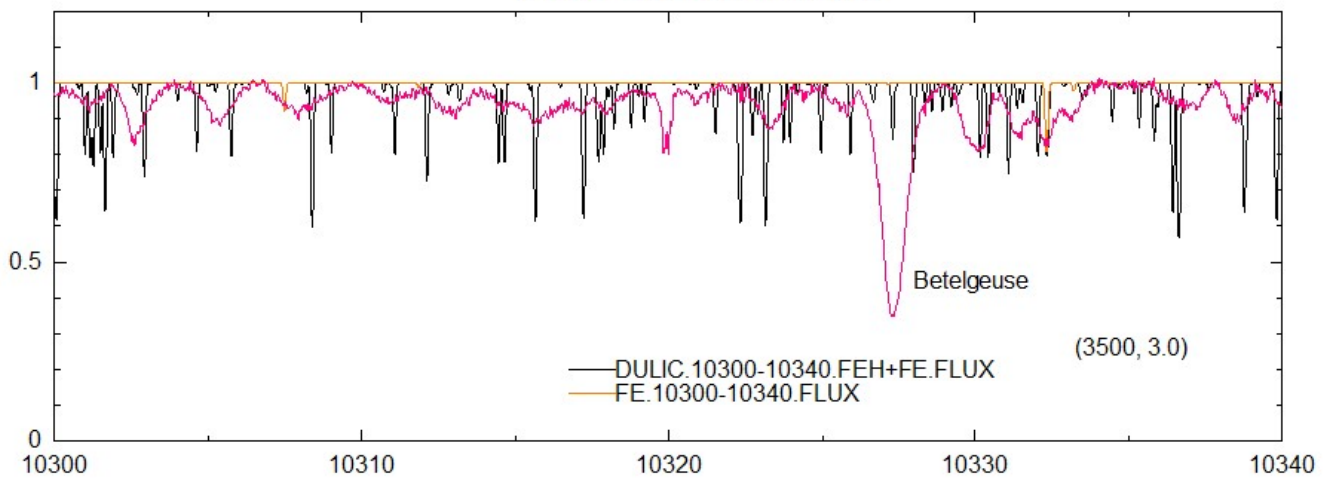
• linelists/vald-6700-6720.list

*** 線データ、ここに FeH も (下参照)

下のように原子線データと同形式になるように変換し、並べる :

```
'TiO I '
6700.167 0.364 0.350 2.500 145.0 9.86E+06 'X' 'X' 0.0 1.0
6700.167 1.422 0.516 2.500 255.0 8.49E+06 'X' 'X' 0.0 1.0
' 126.000056 ' 1 82
'FeH I '
6700.599 0.619 -7.375 2.500 56.0 0.00E+00 'X' 'X' 0.0 1.0
6700.927 0.160 -5.834 2.500 18.0 0.00E+00 'X' 'X' 0.0 1.0
```

Turbo-SP : Dulick FeH + Kurucz Fe



Dulick の FeH データに Kurucz の Fe I を加えた。

FeH 線が強すぎ？