Utilisation et Description du Code d'évolution stellaire CESAM

Pierre Morel
OCA Observatoire de Nice, BP. 4229, 06304 Nice Cedex 4
UMR CNRS 6529 et GDR CNRS G131

Version 4.4.3.0, January 2, 2003

Ce qui se conçoit bien s'énonce clairement
Et les mots pour le dire viennent aisément

Contents

1 La version 4 de CESAM **1**

1.1 CESAM4 1
1.2 Généralités 2
1.3 Signification du numéro de version 3
1.4 Contributions 3

2 Mise en œuvre **5**

2.1 Implantation de la source 5
2.1.1 Langage de programmation 5
2.1.2 Structure de la source 6
2.1.3 Création des modules exécutables 6
2.1.3.1 Formation des bibliothèques 7
2.1.3.2 Le nom générique du modèle 8
2.1.3.3 Le fichier mon_modele.don 9
2.1.3.4 Le programme etoile.f 10
2.1.3.5 Création des tables de réactions nucléaires. 11
2.1.4 Test de fonctionnement. 15
2.1.5 Liste des bibliothèques 26
2.1.5.1 Liste de la bibliothèque math.a. 27
2.1.5.2 Liste de la bibliothèque cesam.a 27
2.1.6 Liste des fichiers INCLUDE 28
2.1.7 Liste des programmes et procédures d'exploitation 28
2.1.8 Liste des fichiers de données 28
2.2 Organisation du calcul 29
2.2.1 Initialisation 29
2.2.1.1 Calcul d'un modèle d'âge 0 homogène 29
2.2.1.1.1 Modèle de ZAMS 29
2.2.1.1.2 Modèle de PMS 29
2.2.2 Evolution temporelle 30
2.2.3 Distinctions entre PMS, MS, PtMS, CoHe, CoCa 30
2.3 BUGS connus 31
2.4 Programme Principal 33
2.4.1 Options physiques standard et non standard 34
2.4.2 Exemples de programmes 39
2.4.2.1 Programme pour un calcul d'évolution standard . . . 39
2.4.2.2 Programme avec recherche de précision 40
2.4.2.3 Test d'une routine privée 41

2.5 Fichier des données NAMELISTs 42
2.5.1 Signification des paramètres des NAMELISTs 43
2.5.2 Exemples 50
2.5.2.1 Etoile de $2M_\odot$ 50
2.5.2.2 Etoile de $1.25M_\odot$ 52
2.6 Fichiers INCLUDE, paramètres, COMMONs, *etc...* 53
2.6.1 Fichier cesam.version 53
2.6.2 Fichier cesam.parametres 54
2.6.3 Fichiers COMMONs 55
2.7 Fichiers d'entrées/sorties et de données 61
2.8 Routines, programmes et procédures d'exploitation 66
2.8.1 Routines 66
2.8.2 Programmes 67
2.8.3 Procédures 69
2.8.4 Calibration d'un modèle solaire 73
2.9 Exemple d'application: un diagramme HR 76

3 Aspects numériques 79
3.1 Problème de la structure interne 79
3.1.1 Equations de la structure interne 79
3.1.2 Variables d'intégration 80
3.1.3 Adaptation de la discrétisation 82
3.1.3.1 Modification du nombre total de couches 83
3.1.3.2 Nœud sur une limite zone radiative / zone convective 86
3.2 Intégration numérique 88
3.2.1 Intégration d'un problème aux limites par splines/collocation . 88
3.2.1.1 Les B-splines 88
3.2.1.2 Résolution de problèmes différentiels 89
3.2.1.2.1 Principe 89
3.2.1.2.2 Collocation pour un système non linéaire . . 91
3.2.1.2.3 Choix de la base 92
3.2.2 Intégration temporelle 94
3.2.2.1 Evolution temporelle de la composition chimique . . 94
3.2.2.1.1 Problème raide 95
3.2.2.1.2 Conservation du nombre de nucléons 96
3.2.2.1.3 Résumé des contraintes 96
3.2.2.1.4 Estimation de la précision de l'intégration . 97
3.2.2.2 Evolution temporelle de l'énergie gravifique 97
3.2.2.2.1 L'approximation de Kippenhahn 98
3.2.3 Les limites 98
3.2.3.1 Le centre 98
3.2.3.2 La limite externe 98

4 Description des sous-programmes 99
4.1 Description des routines de physique 99
4.1.1 Règles de programmation 99
4.1.2 Routine interne acc_rad 101

4.1.2.1 Description de acc_rad . . . 101
4.1.2.2 Arguments de acc_rad . . . 102
4.1.3 Routine externe cesam . . . 102
4.1.3.1 Description de cesam . . . 102
4.1.3.2 Estimation de la fréquence de Brunt-Väissälä . . . 103
4.1.3.3 Arguments de cesam . . . 105
4.1.4 Routine interne chim_gram . . . 105
4.1.4.1 Description de chim_gram . . . 106
4.1.4.2 Arguments de chim_gram . . . 106
4.1.5 Routine interne colatm . . . 106
4.1.5.1 Description de colatm . . . 106
4.1.5.2 Arguments de colatm . . . 106
4.1.6 Routine interne collision . . . 107
4.1.6.1 Description de collision . . . 107
4.1.6.2 Arguments de collision . . . 107
4.1.7 Routine externe de type conv . . . 107
4.1.7.1 Routines conv_jmj et conv_a0 . . . 107
4.1.7.2 Routine conv_cm . . . 108
4.1.7.3 Routines conv_cm_reza, conv_cgm_reza . . . 109
4.1.7.4 Pression turbulente . . . 109
4.1.7.5 Critères de convection . . . 110
4.1.7.6 Localisation des limites des zones convectives . . . 110
4.1.7.7 Extension des zones convectives . . . 111
4.1.7.8 Arguments génériques des routines de type conv . . . 111
4.1.8 Routine interne coulomb_d . . . 112
4.1.8.1 Arguments de coulomb_d . . . 112
4.1.9 Routine externe de type ctes . . . 112
4.1.9.1 Quelques routines de type ctes . . . 113
4.1.10 Routine externe de type des . . . 113
4.1.10.1 Description des routines de type des . . . 113
4.1.10.2 Arguments génériques des routines de type des . . . 114
4.1.10.3 Quelques routines de type des . . . 114
4.1.11 Fonction interne dgrad . . . 114
4.1.11.1 Description de dgrad . . . 114
4.1.11.2 Arguments de dgrad . . . 114
4.1.12 Routine externe de types diffm et difft . . . 115
4.1.12.1 Vecteur de composition chimique généralisée . . . 115
4.1.12.2 Equation de diffusion des espèces chimiques . . . 115
4.1.12.3 Formalisme de Michaud & Proffit. . . . 116
4.1.12.4 Formalisme de Burgers. . . . 116
4.1.12.4.1 Charge moyenne des ions . . . 118
4.1.12.4.2 L'équation de diffusion . . . 120
4.1.12.4.3 Accélérations. . . . 121
4.1.12.4.4 Intégrales de collision . . . 122
4.1.12.4.5 Equations de Burgers pour les x_i et μ. . . . 122
4.1.12.4.6 Jacobien. . . . 127
4.1.12.5 Equation de diffusion du moment angulaire . . . 128

4.1.12.6 Arguments génériques des routines de type diffm . . 128
4.1.12.7 Quelques routines de type diffm 128
4.1.12.8 Arguments génériques des routines de type difft . . . 129
4.1.12.9 Quelques routines de type difft 129
4.1.13 Routine interne diffus 130
4.1.13.1 Principe de la résolution 130
4.1.13.2 Formulation utilisée pour la résolution numérique . . 131
4.1.13.3 Bases de B-splines pour la méthode de Petrov-Galerkin 132
4.1.13.4 Description de diffus 133
4.1.13.5 Arguments de diffus 134
4.1.14 Routine interne dnunl 135
4.1.14.1 Description de dnunl 135
4.1.14.2 Arguments de dnunl 135
4.1.15 Routine interne eqatm 135
4.1.15.1 Description de eqatm 135
4.1.15.2 Arguments de eqatm 135
4.1.16 Routine interne eq_diffus 136
4.1.16.1 Description de eq_diffus 136
4.1.16.2 Arguments de eq_diffus 136
4.1.17 Routine externe de type etat 137
4.1.17.1 Quelques routine de type etat 137
4.1.17.2 etat_gong1 137
4.1.17.3 etat_gong2 137
4.1.17.4 etat_eff 138
4.1.17.5 etat_ceff 138
4.1.17.6 etat_mhd 138
4.1.17.7 etat_opal 138
4.1.17.8 Arguments génériques des routines de type etat . . . 138
4.1.18 Routine interne evol 139
4.1.18.1 Description de evol 139
4.1.18.1.1 Renormalisation de la composition chimique 140
4.1.18.2 Arguments de evol 141
4.1.19 Routine interne fich_osc 142
4.1.19.1 Description de fich_osc 142
4.1.19.2 Arguments de fich_osc 142
4.1.20 Routine interne iben 143
4.1.21 Routine interne inter 143
4.1.21.1 Arguments de inter 144
4.1.22 Routine interne intertot 144
4.1.22.1 Description de intertot 144
4.1.22.2 Arguments de intertot 145
4.1.23 Routine externe de type lim 145
4.1.23.1 Arguments génériques des routines de type lim 146
4.1.23.2 L'approximation monocouche lim_tau1 146
4.1.23.3 Reconstitution d'une atmosphère lim_atm 147
4.1.23.4 Artifices numériques utilisés pour le raccord de ∇ . . 149
4.1.23.4.1 Loi $T(\tau)$ purement radiative 150

4.1.23.4.2 Loi $T(\tau)$ avec convection 151
4.1.23.5 Résolution numérique 151
4.1.24 Routine interne lim_zc 153
4.1.24.1 Description de lim_zc 153
4.1.24.2 Arguments de lim_zc 154
4.1.25 Routine interne list 154
4.1.25.1 Description de list 154
4.1.25.2 Arguments de list 155
4.1.26 Routine interne lit_nl 156
4.1.27 Routine externe de type nuc 156
4.1.27.1 Description des routines de type nuc 157
4.1.27.2 Arguments génériques des routines de type nuc . . . 157
4.1.27.3 Quelques routines de type nuc 158
4.1.27.3.1 Cycle PP simplifié 158
4.1.27.3.2 Cycles PP et CNO 158
4.1.27.3.3 Au delà de la séquence principale 159
4.1.27.3.4 Utilisation de la compilation NACRE 160
4.1.27.4 Construction des routines du type nuc 160
4.1.27.4.1 Ordre des éléments 160
4.1.27.4.2 Abondances initiales 160
4.1.27.4.3 Cycles PP, CNO et 3α 161
4.1.27.4.4 Eléments à l'équilibre 162
4.1.27.4.5 Effet d'écran 162
4.1.27.4.6 Nombre d'électrons libres 162
4.1.27.4.7 Energie thermonucléaire 163
4.1.27.4.8 Neutrinos 163
4.1.27.4.9 Equations d'évolution 163
4.1.27.4.10 Jacobien 164
4.1.28 Routine externe de type opa 165
4.1.28.1 Arguments génériques des routines de type opa . . . 165
4.1.28.2 Opacités simplifiées 165
4.1.28.3 Opacités tabulées 165
4.1.28.3.1 opa_int_zsx 166
4.1.28.3.2 opa_houdek 166
4.1.28.3.3 opa_yveline 166
4.1.28.4 Opacités conductives 166
4.1.29 Routine externe de type perte 166
4.1.29.1 Arguments génériques des routines de type perte . . 167
4.1.29.2 Routines de type perte 167
4.1.30 Routine interne read_osc 167
4.1.30.1 Description de read_osc 167
4.1.30.2 Arguments de read_osc 167
4.1.31 Routine interne resout 168
4.1.31.1 Description de resout 168
4.1.31.2 Paramètres numériques 170
4.1.31.3 Arguments de resout 171
4.1.32 Routine interne rk_imps 171

4.1.32.1 Intégration avec les formules IRK Lobatto IIIC. . . . 172
4.1.32.1.1 Mélange d'une zone convective 174
4.1.32.1.2 Conservation des baryons et de la charge . . 175
4.1.32.1.3 Choix du pas temporel 175
4.1.32.2 Description de rk_imps 175
4.1.32.3 Arguments de rk_imps 176
4.1.33 Routine interne rq_reac 176
4.1.33.1 Description de rq_reac 177
4.1.33.2 Arguments de rq_reac 177
4.1.34 Routine interne saha 177
4.1.34.1 Description de saha 177
4.1.34.2 Arguments de saha 178
4.1.35 Routines internes static_m et static_r 178
4.1.35.1 Dissipation locale du moment angulaire 178
4.1.35.2 Conservation globale du moment angulaire 179
4.1.35.3 Description de static_m et static_r 180
4.1.35.4 Arguments de static_m et static_r 181
4.1.36 Routine interne taueff 181
4.1.36.1 Description de taueff 182
4.1.36.2 Arguments de taueff 182
4.1.37 Routine externe de type t_detau 182
4.1.37.1 Arguments génériques des routines de type t_tau . . . 182
4.1.37.2 Routines de type t_tau 183
4.1.38 Routine interne thermo 183
4.1.38.1 Description de thermo 184
4.1.38.2 Arguments de thermo 184
4.1.39 Routine interne thermo_atm 185
4.1.39.1 Arguments de thermo_atm 185
4.1.40 Routine interne update 186
4.1.40.1 Description de update 186
4.1.40.2 Arguments de update 186
4.1.41 Routine interne zone 187
4.1.41.1 Arguments de zone 187
4.2 Packages externes 187
4.2.1 Package équation d'état EFF 188
4.2.2 Package équation d'état CEFF 188
4.2.3 Package équation d'état MHD 188
4.2.4 Package équation d'état OPAL 188
4.2.5 Package opacité HOUDEK 189
4.2.6 Package opacité YVELINE 189
4.3 Routines purement numériques 189
4.3.1 Description de difdiv 190
4.3.2 Description de gausdp_g 190
4.3.3 Description de gausdn 190
4.3.4 Description de horner 190
4.3.5 Description de intgauss 190
4.3.6 Description de long 190

4.3.7 Description de neuville 190
4.3.8 Description de newton 190
4.3.9 Description de pminmax 190
4.3.10 Description de polyder 191
4.3.11 Description de simq 191
4.3.12 Description de shell 191
4.4 Routines spécifiques aux B-splines 191
4.4.1 Description de bspint 191
4.4.2 Description de bval 191
4.4.3 Description de bvald 191
4.4.4 Description de colloc 191
4.4.5 Description de colpnt 191
4.4.6 Description de newsp1 192
4.4.7 Description de newspn 192
4.4.8 Description de noedif 192
4.4.9 Description de noeu_dis 192
4.4.10 Description de sbsp1d 192
4.4.11 Description de sbsp1dn 192
4.4.12 Description de sbsp1ddn 192
4.4.13 Description de sbsp_dis 192
4.4.14 Description de sbval 193
4.4.15 Description de schu58 193
4.4.16 Description de schu58_n 193
4.4.17 Description de sgauss 193
4.4.18 Description de slinf 193
4.4.19 Description de snoein 193
4.4.20 Description de sum_n 193

List of Tables

2.1 Valeurs des paramètres numériques suivant les diverses options de précision prévues. Les valeurs de ces paramètres doivent être adaptées au type d'évolution requis, pour ce faire il convient d'intervenir dans la routine resout *cf.* § 4.1.31.2 (Page 170). Les dénominations peuvent s'interpréter de la façon suivante : `sp`: super précision, `sr`: super précision eulérien, `co`: pour modèles de COROT, `lm`: pour petites masses (low mass), `ds`: pour modèles de δ scuti, `sa`: pour modèles avec précision solaire (solar accuracy). 43

2.2 Suite et fin de la Table 2.1 (Page 43). Les dénominations peuvent s'interpréter de la façon suivante : `hp`: hyper précision, `cp`: pour modèles de cephéides de grande précision, `c1`: pour modèles de cephéides, `cr`: pour modèles de cephéides avec les variables eulériennes, `nr`: pour modèles de précision normale avec les variables eulériennes, `np`: pour modèles de précision normale. Avec la précision `hp` et avec une perte de masse alors `ordre=(2)`. 44

2.3 Valeurs de Z_κ pour l'opacité et de la vitesse angulaire Ω utilisées suivant les options retenues. 50

4.1 Coefficients de Eq. 4.41 (Page 173) pour les formules IRK Lobatto IIIC d'ordre $p = 1, 2, 4$ avec $s = 1, 2, 3$ étapes. On utilise la notation usuelle, les c_i, $i = 1, \ldots, s$ sont éléments de la première colonne, les b_i ceux de la dernière ligne, les autres coefficients sont les a_{ij} de la matrice caractérisant la formule de Runge-Kutta. 173

Index

A-stable, 95
abondances, 94, 96
abondances initiales, 160
acc_rad, 101
acceleration effective, 121
acceleration radiative, 121
acceleration totale, 121
accelerations radiatives, 38
adaptation de la grille, 82
agemax, 47
alpha, 49
AlphaServer, 5
approximation de Kippenhahn, 98
approximation monocouche, 147
arrêt de l'évolution, 33
atmosphère, 33, 146
atmosphere.common, 55

B-splines, 29, 88
base, 92
bibliothèque, 7, 26
Brunt-Väissälä, 33, 65, 103, 110
bspint, 191
bugs, 31
bval, 191
bvald, 191

c1, 46
calib, 67
calib_pms, 69
calib_vis, 67
calib_zams, 71
calibration solaire, 73
CESAM, 6
cesam, 102
cesam.a, 7, 26, 27
cesam.parametres, 54
cesam.version, 53
chim_gram, 105
co, 46
CoCa, 30, 47
CoHe, 30, 47
colatm, 106
collision, 107
colloc, 191
colpnt, 191
COMMON, 7, 28, 34, 99
COMMONs, 53, 55
compilation NACRE, 160
compilef, 7
compilef_list, 7
conditions limites, 80, 84
conditions limites au centre, 98
conditions limites externes, 98
conservation, 96
constante de contraction, 29
contraintes, 96
conv, 36
conv_a0, 107
conv_cgm_reza, 109
conv_cm, 36, 108
conv_cm_reza, 109
conv_jmj, 36, 107
convection, 107
convection pénétrative, 111
convection.common, 56
convergence, 95
convergence forcée, 33
CONVEX, 5
coulomb_d, 112
cp, 46
cpturb, 49
cr, 46
ctephy.common, 56
ctes, 39, 113
ctes_98, 113
cycle 3α, 161
cycle CNO, 161
cycle PP, 158, 161

d_grav, 32
d_turb, 48, 115
DATA, 6
der_num, 46
des, 39
des_abon_m, 68
des_abon_r, 68
des_hr, 68
des_m, 39, 114
des_osc, 68
des_r, 39, 114
des_ZCm, 68
des_ZCr, 68
dessin, 39, 66
dgrad, 114
difdiv, 190
difficultés, 31
diffm, 38
diffm_0, 38, 128
diffm_br, 38, 48, 102, 128
diffm_mp, 38, 116, 128
difft, 38
difft_cte, 38, 48, 129
difft_g, 38, 129
difft_mp, 129
difft_wt, 38, 129
diffus, 130
diffusion, 48, 130
diffusion des espèces chimiques, 115
diffusion microscopique, 97
discon, 133
divergence, 32
dnunl, 135
double precision, 6
ds, 46
dtlist, 47

ecran faible, 59, 162
edding, 36, 183
effet d'écran, 162
eléments à l'équilibre, 162
element trace, 116
else, 47
energie gravifique, 97
energie thermonucléaire, 163
eq_diffus, 136
eqatm, 135
equation d'état, 34
equations d'évolution, 80, 84, 163
equations de Burgers, 116
equations de la structure interne, 79
etat_ceff, 35, 138
etat_eff, 35, 137, 138
etat_gong1, 35, 137
etat_gong2, 35, 137
etat_mhd, 35, 69, 138
etat_opal, 35, 67, 138
etoile.f, 10
evol, 139
evol_chim.common, 58
evolution temporelle, 30, 94
exe, 11
exemple d'évolution standard, 39
exemple de recherche de précision, 40
exemples de fichiers *.don, 50
exemples de programmes, 39
EXPLOIT, 6, 7
extension des zones convectives, 111

f_rad, 48, 101
facteurs de répartition, 85
fich_osc, 67, 142
fichier binaire, 29
fichier de données, 62
fichier de réactions nucléaires, 63
fichier de rayons, 67
fichier f_eos, 63
fichier f_nuc, 63
fichier f_opa, 63
fichier mon_modele.**, 8
fichier mon_modele.don, 9, 42, 61, 63
fichier mon_modele.HR, 62, 63
fichier mon_modele.lis, 62, 63
fichier mon_modele.osc, 62, 64
fichier mon_modele_B.atm, 62
fichier mon_modele_B.coca, 62
fichier mon_modele_B.cohe, 62
fichier mon_modele_B.dat, 62
fichier mon_modele_B.hom, 62
fichier mon_modele_B.pms, 61, 143
fichier mon_modele_B.post, 62
fichier mon_modele_B.rep, 62
fichier mon_modele_B.zams, 30, 61
fichier nacre***.data, 63

fichier pms.dat, 61
fichier ppcno***.data, 63
fichiers d'entrée, 61
fichiers d'entrée/sortie, 61
fichiers de données, 28
fichiers de sortie, 62
fmttob, 69
fmttobin, 68
fonction d'espacement, 84
fonction de répartition, 85
for037, 67
forces radiatives, 38, 101, 121
format des fichiers ASCII, 63
FORTRAN 77, 5
FORTRAN 90, 5

gain_lm, 167
gausdn, 190
gausdp_g, 190
gestion du pas temporel, 102
gravité, 121
grille équidistante, 83
grille adaptative, 85

hopf, 36, 183
horner, 190
hp, 46
HP9000, 5
hsra, 36, 183

iben, 143
ihe4, 58, 100
implantation, 5
implantation sur PC, 6
IMPLICIT NONE, 6
INCLUDE, 7, 28, 53
indices spécifiques, 100
initialisation, 29
Intégrales de collision, 107
intégrales de collision, 122
intégration numérique, 88
inter, 143
intertot, 66, 144
intgauss, 190
IRK Lobatto IIIC, 172
iw, 49, 100
iz, 58, 100

jacobien, 164
jpz, 49, 111

k5750, 36, 183
k5770, 36
k5777, 183

Ledoux, 110, 114, 153, 183
ledoux, 49
lim, 36
lim_atm, 36, 147
lim_gong1, 36
lim_ro, 47
lim_tau1, 36, 146
lim_zc, 153
limite externe, 146
limites zones convective/radiatives, 32
list, 154
liste_cesam, 7, 27
liste_math, 7, 27
lit_nl, 156
lit_osc, 33, 68
lm, 47
log_teff, 47
loi $T(\tau)$, 182
long, 190
longueur de mélange, 107

m010.dat, 61, 63
m020.dat, 63
mélange des zones convectives, 30
méthode de collocation, 90
méthode de Galerkin, 90
méthode de Petrov-Galerkin, 131
méthode de résolution, 79
MAKEFILE, 6
MATH, 6
math.a, 7, 26, 27
mdot, 46
Mitler, 59, 162
modèle d'âge 0, 29
modèle de PMS, 29, 143
modèle de ZAMS, 29, 32
modele.common, 59
module exécutable, 6, 15
moment angulaire, 48, 100, 115, 128, 178, 179
MS, 30
mtot, 46

nœud sur une limite ZR/ZC, 86
NACRE, 37, 160
nacre12e, 37, 160
nacre12FeMg, 160
nacre13e, 37, 160
nacre9, 37, 160
nacre9_gt, 37, 160
nacre9FeMg, 160
NAMELIST, 9, 42
NAMELIST nl_chim, 42, 47, 160, 162
NAMELIST nl_conv, 33, 42, 49, 109–111
NAMELIST nl_espace, 42, 46, 148, 151, 153
NAMELIST nl_etat, 42, 49
NAMELIST nl_nuc, 43, 50
NAMELIST nl_opa, 42, 50
NAMELIST nl_rot, 42, 48
NAMELIST nl_temps, 29, 33, 42, 47, 166
neutrinos, 163
neuville, 190
newsp, 192
newsp1, 192
newton, 190
nl_conv, 111
no_des, 39, 114
noedif, 192
noeu_dis, 192
nom générique, 8
nombre électrons libres, 162
nombre total de couches, 83
notations, 80
np, 32, 46
nuc, 37
nuc_gong, 37, 158
numéro de version, 3

opa, 35
opa_gong, 35
opa_houdek, 35, 166
opa_houdek9, 189
opa_int_zsx, 35
opa_yveline, 36, 68, 166, 189
opacités, 165
opal_ascii_bin, 67
optimisation, 8, 33
options, 34
ordre des éléments, 160
overshooting, 111
ovshti, 49, 111
ovshts, 49, 111

pénétration convective, 111
package, 26, 187
paramètres, 53
PARAMETER, 7
pararamètres, 170
pas temporel, 96
perte, 38
perte_ext, 38, 167
perte_rapid, 167
perte_tot, 38, 167
Petrov-Galerkin, 132
PGPLOT, 7, 39
pgplot, 27
pminmax, 190
PMS, 30, 143
pms.dat, 61, 63
poids moléculaire moyen, 65
point de collocation, 29, 93
polyder, 191
post, 47
ppcno10Fe, 37, 159
ppcno12e, 37
ppcno12en, 159
ppcno13e, 37, 159
ppcno13en, 159
ppcno3a9e, 37
ppcno3ac10, 37, 159
ppcno9e, 37, 158
ppcno9e_gt, 37, 159
ppcno9en, 158
ppcnoLi, 159
précision de l'intégration, 97
precision, 46
pression turbulente, 33, 94, 109
problème raide, 95
procédures, 7, 69
procédures d'exploitation, 28, 66
programme d'exploitation, 28, 66
programme principal, 33
PtMS, 30

réactions thermonucléaires, 161

résolution de problèmes différentiels, 89
règles de programmation, 99
raccord des ∇, 149
ranlib, 7
read_osc, 67, 167
REAL*8, 6
reconstitution de l'atmosphère, 147, 151
renormalisation, 105, 139, 140
resout, 168
rk_imps, 171
roger00, 37, 183
roger02, 37, 183
rot_solid, 49, 59
rotation, 48, 55, 169, 178, 179
routine de type conv, 107
routine de type ctes, 112
routine de type des, 113
routine de type diffm, 115
routine de type difft, 115
routine de type etat, 137
routine de type lim, 145
routine de type nuc, 156
routine de type opa, 165
routine de type perte, 166
routine de type t_detau, 182
routine externe, 99
routine interne, 99
routines d'exploitation, 66
routines de physique, 99
rq_reac, 176

sa, 46
saha, 177
sbsp1d, 192
sbsp1ddn, 192
sbsp1dn, 192
sbsp_dis, 192
sbval, 193
schu58, 193
schu58_n, 193
Schwarzschild, 110, 114, 153, 183
semi convection, 32
sgauss, 193
shell, 191
simq, 191
singularité des gradients, 81
slinf, 193
snoein, 193
source, 6
sp, 46
sr, 46
stabilité, 95
static_m, 178
static_r, 178
sum_n, 193
SUN 4-60, 5
superconvergence, 92

t_detau, 36, 182
t_stop, 47
tab_reac, 11, 63, 68
tables de réactions, 11
tabulation des réactions nucléaires, 68
tau_max, 47
taueff, 181
TdS varie trop, 32
test d'une routine privée, 41
test de fonctionnement, 15
test_nuc, 68
thermo, 183
thermo_atm, 185

ULTRIX, 5
UNIX, 11
update, 186

variable eulérienne, 85
variable indépendante, 80
variable lagrangienne, 80
variables, 92
variables d'intégration, 80
vecteur de composition chimique, 115
vecteur nodal, 93
vitesse angulaire, 48, 100, 115, 178, 179
vt, VT, 100

x0, 47
x_stop, 47

y0, 47

z_cte, 48
ZAMS, 20, 30

zams, 47
zone, 187
zsx0, 47

Chapter 1

La version 4 de CESAM

On n'exécute pas tout ce qui se propose

Et le chemin est long du projet à la chose.

Le Tartuffe.

1.1 CESAM4

C'est principalement une exploitation différente de l'équation d'état, qui tient compte des tabulations désormais classiques des grandeurs dérivées *e.g.* $c_{\rm P}$, $\Gamma 1$, *etc...* , qui a nécessité la mise en œuvre de cette nouvelle version de CESAM. Pour l'intervalle de masse $[0.6 M_\odot, 10 M_\odot]$, CESAM4 permet le calcul de l'évolution quasi-statique depuis la pré-séquence principale jusqu'au début du cycle 3α *i.e.*, jusqu'à une température centrale $\sim 10^8 K$. Il n'est pas possible de poursuivre au delà car:

1. les tables d'opacité disponibles ne permettent pas de dépasser une température $T > 100\,{\rm MK}$,

2. les tables d'opacité disponibles ne permettent pas de dépasser une abondance en métaux $Z > 0.1$.

A titre d'essais, *i.e.* en utilisant une physique très approximative, la combustion totale de l'hélium dans le cœur a été atteinte, et des modèles de masses aussi faibles que $0.001 M_\odot$ ont été obtenus.

Dans la limite des approximations classiques de la structure interne *i.e.*, une dimension radiale, équilibre quasi-statique, il est possible de tenir compte de la rotation, de la diffusion:

- des éléments chimiques,
- du moment angulaire,
- de Z,

ainsi que de variations positives ou négatives de la masse et du moment angulaire. Toutefois, pour certains de ces processus la physique n'est pas encore disponible, quand elle n'est pas à imaginer ou à construire. Il est possible de tenir compte de la variation de masse due au défaut de masse, qui pour le soleil est du même ordre de grandeur que la perte de masse par le vent $\sim 10^{-14} M_\odot$/an. Pour l'extension des zones convectives, diverses possibilités sont prévues, on peut aussi tenir compte de la pression turbulente et deux formulations de la convection sont disponibles. Pour les modèles solaires, des procédures UNIX permettent d'effectuer des calibrations dans différentes situations. Des programmes de dessin, utilisant le logiciel PGPLOT permettent d'exploiter les résultats et de visualiser l'évolution *"on line"*. Certaines données, car trop lourdes *e.g.* , les tables d'équation d'état OPAL, ne sont pas toutes incluses dans la source.

Dans la présente version de CESAM les paramètres numériques libres: nombre *variable* de couches, ordre des splines *etc...* , sont fixés de façon interne *i.e.*, dans les algorithmes. En intervenant dans le sous-programme resout il est possible de modifier les options retenues si elles apparaissent mal adaptées au problème à résoudre.

PB `Les difficultés connues sont signalées par l'indication` **PB** `placée en marge du texte. Les plus critiques sont décrites, avec des suggestions de remède, au` § 2.3 (Page 31).

1.2 Généralités

Cette notice a été rédigée pour un utilisateur dont la motivation première est de "*faire un modèle*", puis ensuite de modifier les données et enfin, éventuellement, de "*voir comment ça marche*" afin de personaliser le code et créer ses propres extensions. De cette ambition résulte le plan du document:

1. Mise en œuvre:
   (a) installation de la source § 2.1.5 (Page 26) à test de fonctionnement § 2.1.4 (Page 15),
   (b) organisation du calcul § 2.2 (Page 29),
   (c) des bugs identifiés § 2.3 (Page 31),
   (d) détails et exemples d'utilisation § 2.4 (Page 33) à § 2.8 (Page 66).
2. Description des sous-programmes de physique et numériques. Les méthodes numériques, parfois techniques, sont décrites en préambule des sous-programmes qui en font usage. Elles sont détaillées dans l'article de A&AS [1997], dont on trouve le postscript dans la source, fichier: AA.article.ps ce qui permet d'avoir accès aux points les plus importants pour l'utilisateur mais qu'A&A a honte de publier en clair.

CESAM[1] a été crée dans le cadre du Groupe de Recherche Structure Interne des Etoiles et des Planètes Géantes (GDR 131); le but recherché est d'aboutir à

[1]Code d'Evolution Stellaire Adaptatif et Modulaire.

un outil numérique facilement adaptable et transportable. CESAM est conçu de façon modulaire, surtout en ce qui concerne la physique (équation d'état, opacités, conditions limites, réactions thermonucléaires, etc...) qui est modifiable de façon externe avec un minimum d'investissement au niveau numérique.

De par sa conception CESAM est destiné à être utilisé de façon interactive; pour une exploitation intensive, comme par exemple une calibration solaire, il est pratique d'utiliser, en "batch", des procédures UNIX.

1.3 Signification du numéro de version

Le numéro de version comprend 4 chiffres (Exemple 4.2.1.4) :

1. le premier chiffre 4, correspond au numéro de version, Il est augmenté d'une unité lorsque les fichiers binaires (avec les extensions _B.**) de la version précédente ne sont plus utilisables, la plupart du temps à cause d'une modification de dimensions, une recompilation générale de la source est alors nécessaire,

2. le second chiffre 2, est augmenté d'une unité lorsque une(des) modification(s) importante(s) est(sont) introduite(s), un nouveau processus physique par exemple, qui nécessite la modification de la liste des arguments d'un ou plusieurs sous-programmes, ou encore le format d'un fichier d'entrée.

3. le troisième chiffre 1, est augmenté d'une unité lorsque qu'un bug important a été corrigé,

4. le quatrième chiffre 4, est augmenté d'une unité lorsque une(des) modification(s) mineure(s) est(sont) introduite(s), modification d'une liste ou d'un paramètre de calcul par exemple, ou qu'un bug mineur est corrigé *e.g.* , une faute d'orthographe dans un commentaire.

1.4 Contributions

C'est à Evry Schatzman et à Annie Baglin que revient l'initiative de la mise en œuvre de ce code, ils n'ont cessé de s'y intéresser et d'y apporter de nombreuses contributions. La construction de CESAM a aussi bénéficié de nombreuses autres collaborations d'abord de la part de mes plus proches collègues, J. Provost et G. Berthomieu et des membres du "groupe Code" du GDR131 Y. Lebreton, M-J. Goupil, C. van't Veer, B. Pichon, M. Auvergne, S. Turck-Chièze, R. Cayrel, J-P. Zahn, G. Alécian, L. Léon, sans oublier les contributions significatives d'étudiants J. Matias, S. Brun, N. Audard, T. Guillot, J. Fernandes, D. Cordier, ni celles des collègues liégeois M. Gabriel et A. Noels. Des apports très importants sont dus à J. Christensen-Dalsgaard, G. Houdek et W. Däppen sans oublier J. Reiter, J. Gaches et R. Amiel. Dans la source de CESAM chacune de ces contributions est mentionnée, et s'il y a quelque omission elle est bien involontaire.

Ces dernières années ce travail a été réalisé en partie grâce aux moyens de calcul du programme "Simulations Interactives et Visualisation en Astronomie et Mécanique (SIVAM)".

Chapter 2

Mise en œuvre

2.1 Implantation de la source

2.1.1 Langage de programmation

Le langage utilisé a surtout pour but d'être pratique, lisible et sûr pour l'utilisateur. CESAM, à l'origine, a été écrit en VAX–11 FORTRAN V5.0 *i.e.* FORTRAN VMS dont les extensions ont été très largement utilisées. Il devrait être accepté par FORTRAN 90 ce dernier incluant, en principe, le FORTRAN 77 VMS. Cette version utilise quelques extensions "courantes" du FORTRAN 77.

PB Avec le compilateur f77 l'utilisation de l'option "tous FORTRANs" est nécessaire, pour certaines installations cette option est "-xl".

PB Avec un compilateur qui suit *"perinde ac cadaver"* la norme F77[1], les variables initialisées dans une routine ne sont pas conservées d'un appel à l'autre a moins d'indiquer, dans une instruction SAVE, les noms des variables initialisées localement et dont on désire réutiliser la valeur dans les appels ultérieurs;
certains compilateurs *e.g.* HP, DEC, ont une option de compilation qui permettent, même en l'absence de SAVE, de conserver les valeurs des variables locales; d'autres les préservent systématiquement (VAX, SUN, ULTRIX, ainsi que les anciens IBM
1620, 1130, 7040, 360, *etc...*) ou parfois c'est l'option "par défaut" retenue. Si le SAVE n'est suivi d'aucun nom toutes les variables initialisées localement sont conservées. Une instruction SAVE existe dans tous les sous programmes de CESAM, d'origine non externe.

CESAM a été implanté, sur VAX sous VMS et, sous UNIX, sur SUN 4-60 version 4.0, 4.1, 4.2, ULTRIX et sur CONVEX, HP9000, AlphaServer 1000/300 EV5 et 8200. Dans tous ces cas le Cshell a été utilisé; dans ce qui suit les instructions UNIX sont en Cshell. Dans le cas d'utilisation d'un autre shell (Bourne shell, Kshell, Zshell, Bourne Again shell *etc... etc...*) les commandes d'installation décrites ci-après ne sont peut-être pas toutes valables et doivent être adaptées; il en est de même pour ce qui change avec l'installation: les commandes et les arguments de compilation, les noms et les chemins d'accès aux bibliothèques etc... il en va ainsi d'UNIX!

[1] Certains CRAYs par exemple.

PB Dans ce qui suit on trouve diverses procédures UNIX permettant de faciliter la création des modules exécutables et l'exploitation de CESAM, il serait bien évidemment naif de croire que celles-ci pourront être reprises, transcrites et utilisées sans de pénibles et fréquentes sollicitations aux gestionnaires de la machine utilisée.

CESAM a été adapté sur PC indépendemment par J. Matias et D. Cordier ce dernier utilise le système d'exploitation Linux (noyaux version 1.2.13), la fabrication des bibliothèques de routines ayant été faites à partir du traducteur 'f2c' puis grâce à une compilation C (compilateur GNU version 2.7.0). Plus récemment la présente version de CESAM a été implantée sur PC par B.Pichon du DARC de l'Observatoire de Paris section Meudon.

PB Sur PC peu de compilateurs FORTRAN ont les options qui permettent d'accepter les tabulations de début de ligne et le dépassement de la colonne 72.

PB Suivant les compilateurs, les instructions permettant l'accès à la date, à l'heure de l'exécution diffèrent, si une modification est nécessaire il faut intervenir dans les routines cesam et resout, pour celà faire rechercher la chaine de caractères "date"; pour SUN, ULTRIX et HP les intructions nécessaires existent dans la source.
Les réels utilisés sont REAL*8 *i.e.* **double précision**, et les variables sont toutes déclarées (IMPLICIT NONE) sauf pour quelques routines de provenance externe.

2.1.2 Structure de la source

La source se compose des 4 sous-directory:

1. CESAM rassemble les routines spécifiques du code décrites au § 4.1 (Page 99), on en donne la liste au § 2.1.5 (Page 26) et dans le fichier `liste_cesam`.

2. MATH rassemble les routines de mathématiques décrites au § 4.3 (Page 189), on en donne la liste au § 2.1.5 (Page 26) et dans le fichier `liste_math`.

3. EXPLOIT rassemble des procédures et des programmes d'exploitation, décrites au § 2.8 (Page 66), on en donne la liste au § 2.1.7 (Page 28).

4. DATA regroupe des données dont on donne la liste au § 2.1.8 (Page 28).

2.1.3 Création des modules exécutables

Il faut d'abord décompresser la source:

```
gunzip SOURCE_CESAM.tar.gz,
```

puis la "détarer":

```
tar -xvf SOURCE_CESAM.tar,
```

enfin, décompresser chaque sous-directory:

```
gunzip *.
```

CESAM comportant différentes options, il est intéressant de l'exploiter à l'aide de bibliothèques qui devraient être gérées de façon "plus UNIX"par MAKEFILE.

PB Prendre garde avec MAKEFILE que les COMMONs et les PARAMETERs sont introduits dans les routines par des INCLUDEs.

Il est apparu pratique d'utiliser deux bibliothèques, appelées respectivement math.a et cesam.a. On a rassemblé dans la première les routines de mathématique du sous-directory MATH *e.g.* interpolation, calcul de B-splines, *etc...* dans la seconde les routines propres à CESAM *i.e.* celles du sous-directory CESAM. Pour faciliter la constitution de ces bibliothèques, les fichiers liste_math du sous-directory MATH et liste_cesam du sous-directory CESAM contiennent les noms des routines correspondants à ces deux catégories; on en trouvera la liste au § 2.1.5 (Page 26).

PB Au cas où le logiciel[2] de dessin PGPLOT ne serait pas disponible, dans le sous programme cesam mettre, avant compilation, un "c" de commentaire devant l'instruction call pgend.

2.1.3.1 Formation des bibliothèques

La procédure UNIX suivante du sous-directory EXPLOIT, permet de compiler les routines dont les noms apparaissent dans le fichier liste et de placer les modules ***.o dans la bibliothèque biblio.a, celle-ci étant crée, si elle n'existe pas déjà.

```
# compilef_list biblio liste
#
# i) ce script compile les sous programmes dont les noms *** figurent dans
# le fichier de nom: liste (les sources ***.f se trouvant dans l'environnement)
# ii) insere dans la bibliotheque de nom: biblio.a, celle-ci étant cree si elle n'existe pas deja
#
# suppression d'alias
#
unalias rm
#
foreach i (`cat $argv[2]`) #* compilation et mise dans la bibliotheque
echo 'compilation de' $i.f
compilef $i
echo 'on met le module ' $i'.o dans '$1'.a'
ar rv $argv[1].a $i.o
rm $i.o
end
echo ' '
echo 'liste de la bibliotheque' $argv[1].a
ar t $argv[1].a
ranlib $argv[1].a
#
```

Exemples d'utilisation:

```
compilef_list cesam list_cesam
compilef_list math list_math
```

[2] PGPLOT est distribué gratuitement par GNU.

PB Certaines versions d'UNIX protestent si on tente de "ranliber" une bibliothèque, d'autres versions, manifestent si on ne le fait pas...

La procédure précédente fait appel à la procédure compilef du sous-directory EXPLOIT dont la codification des options dépend du compilateur FORTRAN dont on dispose (faire man f77 pour en obtenir la liste) et ne peut donc être universelle.

```
# compilef programme1 programme2 ... programme8
#
# compilation fortran 77 des programmes programme1.f, programme2.f, ... programme8.f
# et formation des modules objet de noms programme1.o ... programme8.o
#
# -c, compilation seule
# -extend_source, utilisation des colonnes au delà de 72
# -I/users/user2/morel/CESAM4, localisation des INCLUDES
# -o $i.o nom du module de sortie
# -O5 optimiseur niveau 5
# -u verification des declarations de variables
# $i.f nom du programme
#
echo 'compilation du/des programme/s:'
foreach i ($*)
echo $i.f
f77 -c -extend_source -I/users/user2/morel/CESAM4 -o $i.o -O5 -u $i.f end
#
```

Il est conseillé d'utiliser un niveau élevé d'optimisation *e.g.* 5 avec la procédure précédente. Il est pratique de placer ces procédures assez près de la racine de façon à ce qu'elles soint accessibles à partir de tous les niveaux de la hiérachie des sous-directory.

PB On se trouve parfois confronté à un refus incompréhensible du compilateur d'utiliser un niveau élevé d'optimisation pour compiler quelques routines, mais il accepte très bien de le faire avec un niveau moins élevé. Les routines en cause ne seront évidemment pas les mêmes avec un autre compilateur capricieux.

2.1.3.2 Le nom générique du modèle

Chaque modèle calculé par CESAM est identifié par un *nom générique*, par exemple soleil, ou encore etoile, *etc...* qu'il est pratique de choisir afin de caractériser, succintement, le calcul effectué: soleil_standard, star_020 *etc...* c'est ce nom générique qui sert de préfixe aux noms des fichiers issus du calcul; ainsi le fichier soleil_standard.list contiendra des indications sur les options physiques et numériques retenues, les valeurs des constantes utilisées, le déroulement du calcul, le listing du modèle initial, du modèle final[3] et ceux de quelques modèles intermédiaires (de ZAMS par exemple), enfin, la liste des fichiers d'exploitation (Exemple:soleil_standard.osc; *cf.* § 2.7 (Page 61) pour plus d'informations.

[3]Si le calcul de l'évolution a été poursuivi jusqu'à son terme

Pour fixer les idées, on utilise pour la suite mon_modele comme nom générique.

2.1.3.3 Le fichier mon_modele.don

Il faut créer d'abord un fichier de nom mon_modèle.don dans lequel on indique, par l'intermédiaire de NAMELISTs, les paramètres physiques du modèle que l'on désire calculer:

```
$NL_ESPACE
MTOT    =   1.000000000     ,
MDOT    =  0.000000000000000E+000,
DER_NUM = F,
PRECISION       = 'np',
TAU_MAX =   20.0000000000000     ,
LIM_RO  = F
$END
$NL_TEMPS
AGEMAX  =   1.d3    ,
DTLIST  =   100000000.000000     ,
X_STOP  =  -1.00000000000000     ,
LOG_TEFF        =   10.0000000000000     ,
T_STOP  =   100000000.000000     ,
ARRET   = 'else'
$END
$NL_CHIM
X0      =  0.7     ,
Y0      =  0.28     ,
ZSX0    =  0.               ,
Z_CTE   = F,
D_TURB=10.,
DIFFUSION       = f,
F_RAD=f,
MITLER  = F
$END
$NL_ROT
W_ROT   =  0.000000000000000E+000,
ROT_SOLID       = T
$END
$NL_CONV
ALPHA   =   1.95     ,
CPTURB  =  0.000000000000000E+000,
OVSHTS  =  0.000000000000000E+000,
OVSHTI  =  0.000000000000000E+000,
JPZ     = F,
LEDOUX  = f
$END
$NL_ETAT
F_EOS   = '/users/user2/morel/OPAL_EOS/eos_330.bin          ', 7*'
```

```
$END
$NL_OPA
F_OPA   = '/users/user2/morel/STAR_DATA/opa_yveline.dat', 7*'
$END
$NL_NUC
F_NUC   = '/users/user2/morel/SUN_DATA/nacre9.data          '
$END
```

PB La codification des NAMELISTs varie, évidemment, suivant le compilateur FORTRAN utilisé, et la machine. FORTRAN90 fait, lui aussi, des caprices.

On détaille § 2.5.1 (Page 43) la signification des paramètres utilisés.

2.1.3.4 Le programme etoile.f

Il faut ensuite créer un programme dans lequel on indique les options physiques retenues. Pour ce faire on codera l'appel à CESAM, dans un fichier que l'on appelle, par exemple, etoile.f:

```
      program etoile

c     etat_eff: equation d'etat
c     opa_int_zsx: opacites
c     conv_jmj: convection
c     ppcno9e: reac. thermo. cycles PP+CNO
c     lim_atm: reconstitution de l'atmosphere
c     hopf: loi t(tau)
c     diffm_mp: diffusion microscopique
c     difft_wt: diffusion turbulente
c     perte_ext: perte de masse
c     ctes: constantes physiques
c     des_r: dessin en cours d'execution

      include 'modele.common'

      external etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e,
     1         lim_atm,hopf,diffm_mp,difft_wt,perte_ext,ctes,des_r

      sub_phys(1)='etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e'
      sub_phys(2)='lim_atm,hopf,diffm_mp,difft_wt,perte_ext,ctes,des_r'

      call cesam(etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e,
     1         lim_atm,hopf,diffm_mp,difft_wt,perte_ext,ctes,des_r)

      stop

      end
```

Les options physiques disponibles dans la source sont répertoriées § 2.4.1 (Page 34).

PB Au cas où le logiciel de dessin PGPLOT n'est pas disponible, utiliser l'argument no_des..

Sous UNIX pour créer le module exécutable, on pourra utiliser le script exe suivant dont il conviendra d'adapter les noms des bibliothèques et les options au cas particulier de chaque installation:

```
# exe program
#
#compilation/execution du programme en fortran program.f
#
# compilation avec formation d'un module executable de nom program.out,
# link avec les bibliotheques
# +O5 : optimiseur 3,
# +es : accepte les lignes de plus de 72 caracteres
# -u : verification que toutes les variables sont bien definies
# -K : SAVE pour toutes les variables
#

f77 +e +es -K -o $1.out +O5 -u $1.f\
  ~/math.a ~/cesam.a\    # bibliotheques
  -lpgplot -lX11 -lm       # biblio. PGPLOT et mathematique (machine)

if ( $status != 0 )exit # on sort s'il y a eu Pb
# execution
$1.out
#
```

Exemple d'utilisation: `exe etoile`

2.1.3.5 Création des tables de réactions nucléaires.

Dans le module exécutable de l'exemple précédent, les éléments chimiques utilisés, leurs abondances initiales, les reactions thermonucleaires *etc...* sont calculés dans le sous-programme ppcno9e à partir de tabulations de réactions nucléaires qui doivent être initialisées. Pour ce faire exécuter le programme tab_reac du sous-directory `EXPLOIT` de la source: `exe tab_reac`

PB Le programme tab_reac utilise des extensions de F77 qui ne sont pas toujours admises par les compilateurs. Si tel est le cas, il y a lieu de remplacer les instructions select case(choix) / case(1)/.../case(18)/ END SELECT par IF(choix .eq.0)then / elseif(choix .eq. 1)then.../... elseif(choix .eq. 18)then/ endif.

Dès le début de l'exécution un menu est proposé:

```
differents choix
0 - PP+CNO pour le Soleil 12 elements D, Li7, Be7 anciens taux
1 - PP+CNO pour le Soleil 9 elements anciens taux
2 - PP+CNO T < 50MK seq.-pple. + branche des geantes
3 - PP+CNO+3a
4 - PP+CNO+3a+CNO chaud (D. Cordier)
```

```
 5 - PP+CNO pour le Soleil 13 elements D, Li7, Be7, Be9
 6 - PP+CNO pour le Soleil 9 elements nouveaux taux
 7 - PP+CNO pour le Soleil 13 elements D, Li7, Be7 nouveaux taux
 8 - PP+CNO  T < 50MK seq.-pple. 13 elements D, Li6, Li7, Be7
 9 - PP+CNO+3a+C
 10 - PP+CNO pour le Soleil 9 elements taux de NACRE
 11 - PP+CNO pour le Soleil 13 elements taux de NACRE
 12 - PP+CNO pour le Soleil 12 elements taux de NACRE
 13 - PP+CNO pour le Soleil 12 elements  nouveaux taux
 14 - PP+CNO  T < 50MK seq.-pple. 9 elements taux de NACRE
 15 - PP+CNO pour T < 50MK 9 elements +Fe56+Ex taux de NACRE
 16 - PP+CNO pour le Soleil 12 elements + Fe56 + Ex taux de NACRE
 17 - PP+CNO pour T < 50MK 12 elements + Fe56 + Ex taux de NACRE
 18 - PP+CNO pour T < 20MK ou T < 50MK 11 elements + Ex taux de NACRE

 entrer l'indice du choix 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 .. 18
```

Pour ppcno9e, entrer: 1.

Les réactions thermonucléaires disponibles apparaissent sur l'écran avec leurs numéro d'ordre, les énergies libérées en MeV, les charges de la cible et de l'élément de recul:

```
 choix = 1
 PP+CNO pour le Soleil 9 elements
 reaction  1 H1(p,e+ nu)H2        1.179070D+00 1.000D+00 1.000D+00
 reaction  2 H2(p,g)He3           5.493560D+00 1.000D+00 1.000D+00
 reaction  3 He3(He3,2p)He4       1.285995D+01 2.000D+00 2.000D+00
 reaction  4 He3(a,g)Be7          1.587190D+00 2.000D+00 2.000D+00
 reaction  5 Li7(p,a)He4          1.734679D+01 3.000D+00 1.000D+00
 reaction  6 Be7(e-,nu g)Li7      4.970000D-02 0.000D+00 0.000D+00
 reaction  7 Be7(p,a)He4          1.149839D+01 4.000D+00 1.000D+00
 reaction  8 C12(p,g)C13          3.451390D+00 6.000D+00 1.000D+00
 reaction  9 C13(p,g)N14          7.549860D+00 6.000D+00 1.000D+00
 reaction 10 N14(p,g)N15          9.055320D+00 7.000D+00 1.000D+00
 reaction 11 N15(p,g)O16          1.212594D+01 7.000D+00 1.000D+00
 reaction 12 N15(p,a)C12          4.964640D+00 7.000D+00 1.000D+00
 reaction 13 O16(p,g)O17          2.359140D+00 8.000D+00 1.000D+00
 reaction 14 O17(p,a)N14          1.192810D+00 8.000D+00 1.000D+00
 reaction 15 He4(2a,g)C12         7.274250D+00 2.000D+00 2.000D+00
 reaction 16 C12(a,g)O16          7.161300D+00 6.000D+00 2.000D+00
 reaction 17 O16(a,g)Ne20         4.729700D+00 8.000D+00 2.000D+00
 reaction 18 C12(C12,g)Mg24       1.393330D+01 6.000D+00 6.000D+00
 reaction 19 C12(C12,n)Mg23      -2.599040D+00 6.000D+00 6.000D+00
 reaction 20 C12(C12,p)Na23       2.239310D+00 6.000D+00 6.000D+00
 reaction 21 C12(C12,a)Ne20       4.616750D+00 6.000D+00 6.000D+00
 reaction 22 C12(C12,2a)O16      -1.129500D-01 6.000D+00 6.000D+00
 reaction 23 N13(p,g)N14          8.733460D+00 7.000D+00 1.000D+00
```

```
 reaction 24 O17(p,g)O18          6.867230D+00 8.000D+00 1.000D+00
 reaction 25 O18(p,g)F19          7.992560D+00 8.000D+00 1.000D+00
 reaction 26 F19(p,a)O16          8.114790D+00 9.000D+00 1.000D+00
 reaction 27 F19(p,g)Ne20         1.284449D+01 9.000D+00 1.000D+00
 reaction 28 O18(p,a)N15          3.981410D+00 8.000D+00 1.000D+00
 reaction 29 Ne20(a,g)Mg24        9.316550D+00 1.600D+01 4.000D+00
 reaction 30 C13(a,n)O16          2.214460D+00 1.000D+01 2.000D+00
 reaction 31 O17(a,n)Ne20         5.871100D-01 8.000D+00 2.000D+00
 reaction 32 N14(a,g)O18          5.674420D+00 7.000D+00 2.000D+00
 reaction 33 O18(a,g)Ne22         9.667220D+00 8.000D+00 2.000D+00
 reaction 34 Ne22(a,n)Mg25       -4.808900D-01 1.000D+01 2.000D+00
 reaction 35 Ne22(a,g)Mg26        1.061405D+01 1.000D+01 2.000D+00
 reaction 36 C12(a,n)N15         -6.744090D+00 6.000D+00 2.000D+00
 reaction 37 Ne21(a,n)Mg24        2.556710D+00 1.000D+01 2.000D+00
 reaction 38 He4(an,g)Be9         1.570440D+00 2.000D+00 2.000D+00
 reaction 39 Be9(p,d)2He4         6.540800D-01 4.000D+00 1.000D+00
 reaction 40 Be9(a,n)C12          5.703810D+00 4.000D+00 2.000D+00
 reaction 41 Li6(p,He3)He4        4.021300D+00 3.000D+00 1.000D+00
 anciennes reactions PP+CNO
PAUSE
To resume execution, type 'go'.
```

entrer: go.

PB Suivant les installations et le FORTRAN utilisé, l'ordre pour poursuivre une exécution peut ne pas être "go", mais "c", par exemple.

Le nombre et les réactions thermonucléaires retenues apparaissent sur l'écran avec leurs numéro d'ordre, les énergies libérées en MeV et les charges de la cible et de l'élément de recul, l'intervalle de température et le nombre de points de la tabulation et pour chaque réaction les masses et les charges réduites.

```
 nombre de reactions tabulees : 14

 indices et ordre des reactions tabulees :
 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14

 q0 des reactions :
  1.179D+00 5.494D+00 1.286D+01 1.587D+00 1.735D+01 4.970D-02 1.150D+01
  3.451D+00 7.550D+00 9.055D+00 1.213D+01 4.965D+00 2.359D+00 1.193D+00

 intervalle de temperature : 5.000D+05 2.000D+07

 nombre de points :  201

 reaction :  1 indice dans reac_c :  1 A= 5.039D-01 H1(p,e+ nu)H2
 iz1  1 iz2  1
```

```
 reaction :  2 indice dans reac_c :  2 A= 6.717D-01 H2(p,g)He3
 iz1  1 iz2  1
 reaction :  3 indice dans reac_c :  3 A= 1.508D+00 He3(He3,2p)He4
 iz1  2 iz2  2
 reaction :  4 indice dans reac_c :  4 A= 1.720D+00 He3(a,g)Be7
 iz1  2 iz2  2
 reaction :  5 indice dans reac_c :  5 A= 8.812D-01 Li7(p,a)He4
 iz1  3 iz2  1
 reaction :  6 indice dans reac_c :  6 A= 8.813D-01 Be7(e-,nu g)Li7
 iz1  0 iz2  0
 reaction :  7 indice dans reac_c :  7 A= 8.813D-01 Be7(p,a)He4
 iz1  4 iz2  1
 reaction :  8 indice dans reac_c :  8 A= 9.297D-01 C12(p,g)C13
 iz1  6 iz2  1
 reaction :  9 indice dans reac_c :  9 A= 9.353D-01 C13(p,g)N14
 iz1  6 iz2  1
 reaction : 10 indice dans reac_c : 10 A= 9.402D-01 N14(p,g)N15
 iz1  7 iz2  1
 reaction : 11 indice dans reac_c : 11 A= 9.444D-01 N15(p,g)O16
 iz1  7 iz2  1
 reaction : 12 indice dans reac_c : 12 A= 9.444D-01 N15(p,a)C12
 iz1  7 iz2  1
 reaction : 13 indice dans reac_c : 13 A= 9.481D-01 O16(p,g)O17
 iz1  8 iz2  1
 reaction : 14 indice dans reac_c : 14 A= 9.514D-01 O17(p,a)N14
 iz1  8 iz2  1
```

Enfin les éléments pris en compte sont listés avec leurs masses atomiques. Le nom du fichier de la tabulation est donné à la dernière ligne.

```
 element :  1 indice dans reac_c :  1  H1   1.008D+00 1.000D+00
 element :  2 indice dans reac_c :  3 He3   3.016D+00 2.000D+00
 element :  3 indice dans reac_c :  4 He4   4.003D+00 2.000D+00
 element :  4 indice dans reac_c :  7 C12   1.200D+01 6.000D+00
 element :  5 indice dans reac_c :  8 C13   1.301D+01 6.000D+00
 element :  6 indice dans reac_c : 10 N14   1.400D+01 7.000D+00
 element :  7 indice dans reac_c : 11 N15   1.500D+01 7.000D+00
 element :  8 indice dans reac_c : 12 O16   1.599D+01 8.000D+00
 element :  9 indice dans reac_c : 13 O17   1.700D+01 8.000D+00

 nom du fichier ppcno9.data

PAUSE
To resume execution, type 'go'.
```

Enfin les éléments pris en compte sont listés avec leurs masses atomiques. Le nom du fichier de la tabulation est donné à la dernière ligne.

Après une éventuelle vérification, entrer: `go`.

`verification? (1/2!, ou 1/3! dans le taux), entrer t/f`

Il y a alors la possibilité, pour certaines températures, de comparer les taux tabulés avec ceux des tables de Caughlan & Fowler [1988]. Pour ce faire entrer: `t`, sinon entrer: `f`.

PB `Pour les réactions dont la cible et l'élément de recul sont identiques` *e.g.* `la réaction C12(C12,2a)O16, le facteur 1/2! est introduit dans le taux de la réaction, idem pour les réactions à 3 éléments.`

Le fichier des tabulation ppcno9.data est écrit dans l'environnement, l'y laisser ou bien le placer dans un directory de son choix et indiquer dans le sous-programme ppcno9e le chemin d'accès choisi, puis recompiler et réintroduire ppcno9e dans la bibliothèque cesam.a. **Exemple:** `nom='/home/morel/SUN_DATA/ppcno9.data'`

Il est recommandé de modifier dans le fichier ppcno9e l'instruction (*ancienne disposition*):

`100 nom=' /SUN_DATA/ppcno9.data'`

par: `100 nom=f_nuc`

et d'indiquer le chemin d'accès dans le fichier sf mon_modele.don

`F_NUC = '/users/user2/morel/SUN_DATA/ppcno9.data` la recompilation de la routine ppcno9e n'est plus nécessaire.

2.1.4 Test de fonctionnement.

Placer le fichier `m010.dat` du directory EXPLOIT de la source dans l'environnement. Si le module exécutable *i.e.* etoile.out n'a pas encore été formé, entrer: `exe etoile`, s'il existe et n'a pas été modifié, entrer: `etoile.out`.

PB `Le dialogue qui suit a été légèrement modifié depuis la rédaction originale de la notice de CESAM, toutefois, son esprit et ses grandes lignes en sont inchangées.`

Dès le début de l'exécution CESAM propose un menu[4]:

```
 CESAM, version: 4.2.0.0
 Si on poursuit une evolution : taper 1 puis RETURN
 Si on initialise un modele de ZAMS : taper 2 puis RETURN
 Si on initialise un modele de PMS : taper 3 puis RETURN
```

entrer: 2.
CESAM demande ensuite:

```
 le modele initial de ZAMS est-il donne en binaire ? o/n
```

entrer: `n`
CESAM demande le nom du modèle d'initialisation:

[4]Dans le dialogue qui suit des lignes ont été repliées pour tenir dans la largeur de cette page.

```
entrer le nom du fichier ASCII du modele pris pour modele initial
```

entrer: `m010.dat`
Le dialogue se poursuit:

```
CESAM utilise le modele
m010.dat
```

CESAM demande ensuite le nom générique du modèle à calculer:

```
entrer l'identificateur du modele
exemple: soleil_evolue
```

entrer: `mon_modele`
PB ce nom servira de préfixe à tous les fichiers de résultats.

CESAM confirme:

```
identificateur des fichiers du modele : mon_modele
```

puis liste le fichier `mon_modele.don`:

```
              ************************************************

               MODELE DE STRUCTURE INTERNE calcule par cesam

              ************************************************


          Arguments de CESAM:

    etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e
    lim_tau1,hopf,diff_der,gain_1m,ctes,des_r_sol

          DONNEES des NAMELISTS

         donnees luees dans :

       mon_modele.don

 $NL_ESPACE
 MTOT   = 1.0
 MDOT   = 0.0
 DER_NUM        = F
 PRECISION      ='np'
 TAU_MAX        = 10.0
 LIM_RO = F
 $END
```

```
$NL_TEMPS
AGEMAX = 4550.0
DTLIST = 100000000.0
X_STOP = 0.1
LOG_TEFF       = 3.87
T_STOP = 50000000.0
ARRET  ='else'
$END
$NL_CHIM
X0     = 0.7
Y0     = 0.28
ZSX0   = 0.
Z_CTE  = T
D_TURB= 0.
DIFFUSION      = F
F_RAD= F
MITLER = F
$END
$NL_ROT
W_ROT  = 0.0
ROT_SOLID      = T
$END
$NL_CONV
ALPHA  = 1.8
CPTURB = 0.0
OVSHTS = 0.0
OVSHTI = 0.0
JPZ    = F
LEDOUX = F
$END
$NL_ETAT
F_EOS  ='1                                                    ',
'2                                                  ',
'3                                                  ',
'4                                                  ',
'5                                                  ',
'6                                                  ',
'7                                                  ',
'8                                                  '
$END
$NL_OPA
F_OPA  ='1                                                    ',
'2                                                  ',
'3                                                  ',
'4                                                  ',
'5                                                  ',
'6                                                  ',
```

```
 '7                                                    ',
 '8                                                    '
 $END
 $NL_NUC
 F_NUC   = '                                  '
 $END
```

CESAM indique ensuite les paramètres numériques qu'il utilise pour le calcul et donne un ensemble d'informations concernant les calculs à effectuer:

```
 ----------parametres numeriques utilises-----------

 modele calcule en precision normale

 m_qs= 1, m_ch= 2, ordre= 1, precix= 5.0D-03, loc_zc= 1.0D-04
 precit= 2.0D-01, ro_test= 1.0D-01, psi0= 1.1D-01, d_grav= 2.0D-01 mvt_dis= F

 utilisation des variables lagrangiennes

 --------------identification du modele-----------------

 Modele de SI: m 100X700a180.col du  3-Jun-98 - CESAM (P. Morel, OCA)

 ---------- REACTIONS NUCLEAIRES -------------

 reactions nucleaires et elements chimiques du fichier
 /home/morel/SUN_DATA/ppcno9.data

 elements chimiques utilises:
  H1
 He3
 He4
 C12
 C13
 N14
 N15
 O16
 O17

 reactions nucleaires utilisees:
 H1(p,e+ nu)H2
 H2(p,g)He3
 He3(He3,2p)He4
 He3(a,g)Be7
 Li7(p,a)He4
 Be7(e-,nu g)Li7
 Be7(p,a)He4
```

```
C12(p,g)C13
C13(p,g)N14
N14(p,g)N15
N15(p,g)O16
N15(p,a)C12
O16(p,g)O17
O17(p,a)N14

ecrantage faible

Temperature d'amorcage des reactions nucleaires: 5.000D+05
Temperature maximale pour les reactions nucleaires: 2.000D+07

nombre de reactions :  14
nombre d'elements chimiques :  9

les abondances initiales sont deduites de X0, Y0
H1=X0, H2+He3+He4=Y0
Z0 = 1-X0-Y0 = C12+C13+N14+N15+O16+O17+Ex
C/Z, N/Z, O/Z, Ex/Z suivant Grevesse & Noels
rapports isotopiques suivant Anders & Grevesse sauf
He3/He4= 4.185D-04 (Gautier & Morel) sur la ZAMS He3 contient H2

  H1 :  7.000D-01    He3 :  8.827D-05    He4 :  2.799D-01
  C12 :  3.425D-03    C13 :  4.125D-05   N14 :  1.059D-03
  N15 :  4.182D-06    O16 :  9.641D-03   O17 :  3.908D-06

rapports en nombre, C/Z : 2.455D-01, N/Z : 6.458D-02, O/Z : 5.130D-01,
 Ex/Z 1.770D-01

abondances negligeables:
  H1 :  1.000D-03    He3 :  5.000D-07    He4 :  1.000D-03
  C12 :  5.000D-06    C13 :  1.000D-07   N14 :  1.000D-06
  N15 :  5.000D-09    O16 :  1.000D-05    O17 :  5.000D-09

H2, Li7, Be7 sont pris a l'equilibre
on utilise une table

pour l'evolution temporelle, test de precision sur H et He4

Z initial : somme abon. elem. masse atomique A > 4
 Z initial 2.000D-02, Z / X initial: 2.857D-02

-----------ROTATION et ELEMENTS LOURDS (Z) ------------

Rotation solide, vitesse angulaire = 0.000D+00 rd/sec
 pour l'opacite Z = Z0 est garde constant
```

```
 ------ Evolution de la composition chimique  ---------

 Modele sans diffusion

 -----------perte de masse----------------

 modele sans perte de masse

 ------ Integration du modele quasi statique ---------

 Calcul du Jacobien par derivees analytiques

coefficient pour Newton-Raphson modifie, nrm= 1.500D-01

acc. de la fonction de repar. par couche = 1.100D-01

 Utilisation de la methode de collocation

 ------------------------------------------------

 on utilise le modele de FOR004, nombre de couches 197

 ----------------REPARTITION et OVERSHOOTING------------

 Constantes de repartition utilisees
  ctep=-1.00D+00 ctem= 1.50D+01

 ecart des limites ZR/ZC au plus proche noeud 1.000D-04

 modele sans overshooting
```

Le calcul du modèle initial de ZAMS commence alors; CESAM donne des informations permettant de suivre le déroulement des calculs:

```
 ------------- La Convection (debut) -----------------

 dans Z, masse elem. chim. invariants : 5.825D-03

 equation d'etat EFF

 opacites a Z variable des tables OPAL prolongees Kurucz:
 klgx..z..., X=0.70, 0.35, 0.00; Z= 0.010, 0.019, 0.030
 extrapolation lineaire en X= 0.80
 compilation de Y. Lebreton et J. Fernandez
 extrapolation et approximation par B-splines 4D de P. Morel
```

```
ordre des splines: mr, mt, mx, mz: 2 2 2 2
 Z0= 2.000D-02

fin de ZC localisee a 17% entre les couches 25 et 26 limite ZR/ZC 1
debut de ZC localisee a 68% entre les couches 154 et 155 limite ZR/ZC 2
fin de ZC localisee a 63% entre les couches 296 et 297 limite ZR/ZC 3

suppression d'une limite ZR/ZC trop externe 3

Limites ZR/ZC retenues apres affinement de la localisation:
 pour limite ZR/ZC 1 a  17% entre couches 25 et 26, fin de ZC
  R_zc/Rtot= 1.381D-01, M_zc/Mstar= 9.255D-02 1-M_zc/Mstar= 9.074D-01
 pour limite ZR/ZC 2 a  70% entre couches  154 et  155, debut de ZC
  R_zc/Rtot= 7.364D-01, M_zc/Mstar= 9.776D-01 1-M_zc/Mstar= 2.243D-02

------------- La Convection (fin) -----------------

modif. nb. couches pour var. quasi-stat. de 300 a 397 psi= 1.458D-01,
psi0= 1.100D-01

------------- La Convection (debut) -----------------

fin de ZC localisee a  0% entre les couches 33 et 34 limite ZR/ZC 1
debut de ZC localisee a 54% entre les couches 204 et 205 limite ZR/ZC 2
fin de ZC localisee a 50% entre les couches 392 et 393 limite ZR/ZC 3

suppression d'une limite ZR/ZC trop externe 3

Limites ZR/ZC retenues apres affinement de la localisation:
 pour limite ZR/ZC 1 a   0% entre couches 33 et 34, fin de ZC
  R_zc/Rtot= 1.381D-01, M_zc/Mstar= 9.249D-02 1-M_zc/Mstar= 9.075D-01
 pour limite ZR/ZC 2 a  56% entre couches  204 et  205, debut de ZC
  R_zc/Rtot= 7.365D-01, M_zc/Mstar= 9.776D-01 1-M_zc/Mstar= 2.243D-02

------------- La Convection (fin) -----------------

Approximation de Kippenhahn pour le calcul du TdS

---------THERMO----------

convection: critere de SCHWARZSCHILD

sans pression turbulente

gradient convectif calcule par MLT :
formulation tenant compte de l'ep. op. de la bulle
 V/Al=  2.222D-01 ksi0= 6.173D-03 phi0= 2.250D+00
```

```
 LIMITE EXTERNE sans calcul d'atmosphere dP/dtau=Pext=gravite/kappa
  en tau= 1.000D+00 : m=Mstar, r=Rstar, t=Teff

 iter. globale 1 err. max 4.0D-02, variable 7, couche 198, corr 1.0D+00
 variables Ptot, T, R, L, M, Pgaz 1.675D+14 2.739D+06 6.017D-01 6.556D-01
 9.623D-01 1.675D+14
 ab. 6 1-iers elem. 7.000D-01 8.827D-05 2.799D-01 3.425D-03 4.125D-05
 1.059D-03

 ------------ La Convection (debut) -----------------

 fin de ZC localisee a 13% entre les couches 33 et 34 limite ZR/ZC 1
 debut de ZC localisee a 57% entre les couches 202 et 203 limite ZR/ZC 2
 fin de ZC localisee a 50% entre les couches 393 et 394 limite ZR/ZC 3

 suppression d'une limite ZR/ZC trop externe 3

 Limites ZR/ZC retenues apres affinement de la localisation:
  pour limite ZR/ZC 1 a  13% entre couches 33 et 34, fin de ZC
   R_zc/Rtot= 1.434D-01, M_zc/Mstar= 9.144D-02 1-M_zc/Mstar= 9.086D-01
  pour limite ZR/ZC 2 a  59% entre couches  202 et  203, debut de ZC
   R_zc/Rtot= 7.308D-01, M_zc/Mstar= 9.715D-01 1-M_zc/Mstar= 2.851D-02

 ------------ La Convection (fin) -----------------

 iter. globale:  2 err. max 1.5D-02, variable: 3, couche 198, corr: 1.0D+00
 variables Ptot, T, R, L, M, Pgaz 1.637D+14 2.716D+06 6.063D-01 6.462D-01
 9.617D-01 1.637D+14

.....................................................

 iter. globale:  3 err. max 3.0D-03, variable 3, couche: 101, corr: 1.0D+00
 variables Ptot, T, R, L, M, Pgaz 2.259D+16 7.550D+06 2.554D-01
 6.385D-01 4.660D-01 2.259D+16
 ab. 6 1-iers elem. 7.000D-01 8.827D-05 2.799D-01 3.425D-03 4.125D-05
 1.059D-03

 modele converge
```

Le modèle de ZAMS, ajusté avec les paramètres de `mon_modele.don`, ayant été obtenu, CESAM demande alors des informations concernant la suite de son calcul:

```
 dessin du modele en cours de l'evolution ? o/n
```

répondre: n

```
 utilise-t-on dt0= 1.000D+01 pour le pas temporel? o/n
```

PB Il est possible de modifier la valeur de ce premier pas temporel si elle n'est pas satisfaisante.

répondre: o

CESAM donne quelques indications sur le modèle initial qu'il vient d'obtenir puis poursuit le calcul de l'évolution jusqu'à l'âge désiré de 4.45G ans:

```
 debut d'evolution avec le pas temporel 1.000D+01 10**6 ans

 *********
 age= 0.000D+00 log Teff= 3.744D+00 log L/Lsol=-1.902D-01
 log R/Rsol=-5.945D-02
 Log10 g= 4.557D+00 Pc= 1.419D+17 Tc= 1.355D+07 Roc= 7.702D+01 Xc= 7.000D-01
 en. PP= 95%, en. CNO=  5%, en. 3 alpha=  0%, en. grav=  0% Yc= 2.799D-01
 Var. rel. de masse : 0.000D+00, M*= 1.000D+00Msol, modele de
 la serie principale
 *********

 no modif. nb. couches pour var. quasi-stat., n=  392 psi= 1.099D-01,
 psi0= 1.100D-01

 avec gain de masse tant que M* < 1 Msol

 ------------- La Convection (debut) -----------------

 fin de ZC localisee a 99% entre les couches 32 et 33 limite ZR/ZC 1
 debut de ZC localisee a 99% entre les couches 199 et 200 limite ZR/ZC 2
 fin de ZC localisee a 57% entre les couches 388 et 389 limite ZR/ZC 3

 suppression d'une limite ZR/ZC trop externe 3

 Limites ZR/ZC retenues apres affinement de la localisation:
  pour limite ZR/ZC 1 a  99% entre couches 32 et  33, fin de ZC
   R_zc/Rtot= 1.446D-01, M_zc/Mstar= 9.341D-02 1-M_zc/Mstar= 9.066D-01
  pour limite ZR/ZC 2 a  99% entre couches 199 et 200, debut de ZC
   R_zc/Rtot= 7.263D-01, M_zc/Mstar= 9.703D-01 1-M_zc/Mstar= 2.969D-02

 ------------- La Convection (fin) -----------------

 nombre de couches pour la comp. chim. 290

 integration par Euler implicite d'ordre 1

 EVOL couche   1 variation maximale pour H ou He4: 4.553D-03
```

```
dt= 1.000D+01 dt optimal= 1.200D+01 abondance // variation/scale //
masse // couche:
 7.0D-01 2.0D-04 2.8D-01 2.9D-03 3.8D-04 1.3D-03 3.2D-07 9.6D-03 3.9D-06
 4.6D-03 2.2D+00 4.0D-03 1.1D+00 3.4D+01 2.7D+00 7.7D+00 3.0D-05 7.2D-02
 0.0D+00 1.9D-01 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00
     1      55       1       1       1       1       1       1       1

iter. globale:  1 err. max 3.6D-02, variable 4, couche 16, corr: 1.0D+00
variables Ptot, T, R, L, M, Pgaz 1.175D+17 1.251D+07 8.353D-02
2.458D-01 3.002D-02 1.175D+17
ab. 6 1-iers elem. : 6.995D-01 7.742D-05 2.803D-01 2.877D-03
3.848D-04 1.332D-03

------------ La Convection (debut) -----------------

fin de ZC localisee a 57% entre les couches 27 et 28 limite ZR/ZC 1
debut de ZC localisee a 15% entre les couches 200 et 201 limite ZR/ZC 2
fin de ZC localisee a 59% entre les couches 388 et 389 limite ZR/ZC 3

suppression d'une limite ZR/ZC trop externe 3

Limites ZR/ZC retenues apres affinement de la localisation:
 pour limite ZR/ZC 1 a  57% entre couches 27 et 28, fin de ZC
  R_zc/Rtot= 1.294D-01, M_zc/Mstar= 7.022D-02 1-M_zc/Mstar= 9.298D-01
 pour limite ZR/ZC 2 a  16% entre couches 200 et 201, debut de ZC
  R_zc/Rtot= 7.264D-01, M_zc/Mstar= 9.706D-01 1-M_zc/Mstar= 2.942D-02

------------ La Convection (fin) -----------------

nombre de couches pour la comp. chim. 292

EVOL couche   1 variation maximale pour H ou He4: 5.171D-03
dt= 1.000D+01 dt optimal= 1.200D+01 abondance // variation/scale
// masse // couche:
 7.0D-01 2.0D-04 2.8D-01 2.8D-03 4.2D-04 1.4D-03 2.7D-07 9.6D-03 4.0D-06
 5.2D-03 2.2D+00 4.5D-03 1.3D+00 3.8D+01 3.8D+00 7.8D+00 4.0D-05 9.4D-02
 0.0D+00 1.9D-01 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00 0.0D+00
     1      56       1       1       1       1       1       1       1

iter. globale:  2 err. max: 2.1D-02, variable: 4, couche: 14, corr: 1.0D+00
variables Ptot, T, R, L, M, Pgaz : 1.210D+17 1.263D+07 7.745D-02
2.023D-01 2.424D-02 1.210D+17
ab. 6 1-iers elem. : 6.995D-01 7.292D-05 2.804D-01 2.756D-03
4.184D-04 1.437D-03

------------ La Convection (debut) -----------------
```

```
. . . . . .

 EVOL couche   1 variation maximale pour H ou He4: 4.869D-02
 dt= 6.416D+01 dt optimal= 7.699D+01 abondance // variation/scale
 // masse // couche:
  3.8D-01 2.7D-03 6.0D-01 1.1D-03 3.3D-04 3.6D-03 1.4D-06 9.3D-03 3.6D-04
  4.9D-02 6.7D-01 4.8D-02 7.9D-02 1.4D+00 6.0D-01 9.1D-02 1.4D-02 3.0D+01
  0.0D+00 5.9D-01 0.0D+00 2.1D-01 2.0D-01 2.1D-01 3.5D-01 0.0D+00 0.0D+00
      1     122       1      59      57      58      83       1       1

 iter. globale:  2 err. max: 1.2D-03, variable 4, couche 99, corr 1.0D+00
 variables Ptot, T, R, L, M, Pgaz : 2.567D+16 8.146D+06 2.403D-01
 8.901D-01 4.486D-01 2.567D+16
 ab. 6 1-iers elem. : 6.917D-01 1.516D-03 2.868D-01 3.416D-03
 5.088D-05 1.060D-03

 modele converge

 *********
 age= 4.550D+03 log Teff= 3.756D+00 log L/Lsol=-4.185D-02
 log R/Rsol=-9.693D-03
 Log10 g= 4.457D+00 Pc= 2.168D+17 Tc= 1.510D+07 Roc= 1.388D+02
 Xc= 3.829D-01
 en. PP= 99%, en. CNO=  1%, en. 3 alpha=  0%, en. grav=  0%
 Yc= 5.964D-01
 Var. rel. de masse : 0.000D+00, M*= 1.000D+00Msol, modele de
 la serie principale
 *********
```

Le calcul de l'évolution demandée est terminé, CESAM rappelle les noms des fichiers:

```
 nom du modele : m 100X700a180.col

 nom du fichier des NAMELISTs des donnees : mon_modele.don

 nom du fichier du listing des resultats en ASCII : mon_modele.lis

 nom du fichier du modele d'age 0 PMS en binaire : mon_modele_B.pms

 nom du fichier du modele d'age 0 homogene en binaire :
 mon_modele_B.hom

 nom du fichier du modele de ZAMS en binaire : mon_modele_B.zams

 nom du fichier du modele de POST en binaire : mon_modele_B.post

 nom du fichier du modele de COHE en binaire : mon_modele_B.cohe
```

```
 nom du fichier du modele de COCA en binaire : mon_modele_B.coca

 nom du fichier du modele final en binaire : mon_modele_B.dat

 nom des fichiers des modeles intermediaires en binaire :
 mon_modele_B.rep

 nom du fichier pour trace du diag. HR et ZC : mon_modele.HR
```

puis demande s'il doit former le fichier pour le calcul des oscillations:

```
 formation du fichier pour oscillations ? o/n
```

répondre: `o`
CESAM termine alors sa prestation:

```
 **********************************

  Sortie de CESAM version: 4.0.0.0

 Ce code d'evolution stellaire a ete elabore
 dans le cadre du Groupement de Recherche Structure Interne
 des Etoiles et des Planetes Geantes.

   Si son utilisation vous a donne satisfaction, le but
 poursuivi par tous ceux qui ont y ont contribue aura ete atteint.

 P. Morel, ON. Decembre 1989, V 1
 P. Morel, OCA. Octobre 1991, V 2
 P. Morel, OCA. Avril 1993, V 3
 P. Morel, OCA. Decembre 1997, V 4

 **********************************
```

Le test de fonctionnement est terminé.

2.1.5 Liste des bibliothèques

On donne la liste des sous-programmes des deux bibliothèques. Dans la source de chacun d'eux[5] on trouve une explication succinte de sa fonction et des arguments d'entrée/sortie. La description détaillée de ces sous-programmes fait l'objet du Chapitre 4 (Page 99). Les routines de physique d'origine externe sont regroupées dans les "packages": etat_eff, etat_ceff, etat_mhd, etat_opal, opa_houdek, opa_yveline, ils sont décrits au § 4.2 (Page 187).

PB `Les extensions .f sont implicites.`

[5]Sauf pour des routines de provenance externe.

2.1.5.1 Liste de la bibliothèque math.a.

On donne § 4.3 (Page 189) et § 4.4 (Page 191) une description sommaire de la fonction de chacun des sous-programmes de cette bibliothèque.

```
bspint bval bvald
colloc colpnt
difdiv
gausdn gausdp_g
horner
intgauss
long
minv
neuville newsp1 newspn newton noedif noeud noeu_dis
pminmax polyder
sbsp1d sbsp1ddn sbsp1dn sbsp_dis sbval schu58 schu58_n sgauss
shell simq slinf snoein sum_n
```

2.1.5.2 Liste de la bibliothèque cesam.a

Sauf pour les packages, on donne au § 4.1 (Page 99) une description détaillée de la fonction de chacun des sous-programmes de cette bibliothèque.

```
acc_rad
cesam chim_gram colatm collision conv_a0 conv_cm conv_jmj
coulomb_d ctes
des_m des_r dgrad diffm_0 diffm_br diffm_mp difft_cte difft_g
difft_wt diffus dnunl
edding eq_diffus eqatm etat_ceff etat_eff etat_gong1 etat_gong2 etat_mhd
etat_opal evol
ferdir fich_osc
gain_1m gmass
hopf hsra
iben inter intertot
k5750 k5777 kappa_cond
lim_atm lim_gong1 lim_tau1 lim_zc list lit_nl
nacre12e nacre12FeMg nacre13e nacre9 nacre9FeMg nacre9_gt no_des nuc_gong
opa_gong opa_houdek opa_int_zsx opa_yveline
perte_ext perte_msol perte_tot ppcno10Fe ppcnoLi ppcno12e ppcno12en ppcno13e ppcno1
ppcno3a9e ppcno3ac10 ppcno9e ppcno9e_gt ppcno9en
quadr2 quadr3
resout rk_imps roger00 roger02 roger_05 roger_10a rq_reac
saha static_m static_r
taueff thermo thermo_atm trho
update
zone
```

PB Au cas où la bibliothèque PGPLOT n'est pas disponible éliminer des_r et des_m de cette liste.

PB Dans des routines de provenance externe e.g. etat_ceff, etat_eff, ferdir, les variables sont déclarées de façon implicite. Ces routines ne peuvent être compilées avec l'option -u.

2.1.6 Liste des fichiers INCLUDE

Les COMMONs et les paramètres sont introduits sous la forme de fichiers INCLUDE, la liste en est la suivante:

atmosphere.common convection.common ctephy.common evol_chim.common modele.common cesam.version cesam.parametres

2.1.7 Liste des programmes et procédures d'exploitation

Un certain nombre de programmes et procédures d'exploitation sont inclus dans la source de CESAM, leurs fonctions sont décrites aux § 2.1.3.4 (Page 10), § 3.2.1.2.2 (Page 91) et § 2.8.3 (Page 69) la liste des programmes est la suivante:

boite calib des_ZCm des_ZCr des_abon_m des_abon_r des_diff_osc des_grad des_hr des_osc des_pturb fmttob fmttobin for037_13 for037_9 opal_ascii_bin read_osc tab_reac

et celle des procédures:

Calib_13 Calib_9 compilef compilef_list exe lib_del lib_del_repl

2.1.8 Liste des fichiers de données

Les fichiers de données de la source sont les suivants:

- eos_195.data: table d'équation d'état OPAL pour la composition solaire et $Z = 0.0195$ du package etat_opal décrit au § 4.2.4 (Page 188),
- m010.dat m020.dat m050.dat: modèles d'initialisation en ASCII de ZAMS pour 1, 2 et $5 M_\odot$,
- pms.dat modèle d'initialisation en ASCII pour modèles de pré-séquence principale de toute masse,
- opa_yveline_ASCII.dat: table d'opacité pour le mélange solaire du package opa_yveline décrit au § 4.2.6 (Page 189).
- mhd1.tab...mhd8.tab: tables d'équation d'état MHD *cf.* § 4.2.3 (Page 188), distribuées par W. Däppen sur le serveur anonyme usc.edu, répertoire pub/astro-physics/mhd-oc-tau/wd-evo.
- fesh00.data, fesh02.data : tables de lois $T(\tau)$ pour des métallicités [Fe/H]=0.0 et [Fe/H]=0.2 respectivement, calculées par R. Cayrel avec le code d'atmosphère ATLAS12 de Kurucz *cf.* § 4.1.37.2 (Page 183).
- phi_psi2_100.dat....phi_psi2_200.dat: tables calculées par G. Alécian pour le calcul des accélèrations radiatives, *cf.* § 4.1.2 (Page 101).

2.2 Organisation du calcul

2.2.1 Initialisation

Pour initialiser l'évolution il est nécessaire de connaître un modèle d'âge zéro. Celui-ci doit vérifier exactement les algorithmes sous peine de difficultés ultérieures. Pour l'obtenir il est naturel d'utiliser le code d'évolution lui même. CESAM distingue deux cas: le **modèle de ZAMS** dans lequel l'énergie est d'origine thermonucléaire et le **modèle de PMS** dont l'énergie est d'origine gravitationnelle.

PB CESAM `ne calcule que des modèles d'initialisation chimiquement homogènes.`

2.2.1.1 Calcul d'un modèle d'âge 0 homogène

2.2.1.1.1 Modèle de ZAMS On utilise un modèle d'initialisation de caractéristiques *i.e.* masse, composition chimique et longueur de mélange, voisines de celles du modèle que l'on désire calculer. Ce modèle peut être, soit sous forme binaire, soit sous forme ASCII. On trouve dans la source de CESAM, sous-directory `DATA`, des fichiers ASCII de modèles de 1, 2 et 5 $M_\odot$ permettant ces initialisations *cf.* § 1 (Page 61). Un modèle en binaire quelconque peut être utilisé pour une initialisation. Pour éviter des difficutés de convergence, ne pas tenter de calculer des modèles trop éloignés du modèle d'initialisation; pour atteindre le modèle initial souhaité, procéder par étapes en utilisant d'abord la physique la plus robuste possible, ensuite affiner; *e.g.* il faudra légitimement s'attendre à des difficultés si on tente de calculer un modèle initial de $30M_\odot$ en utilisant un modèle initial de $0.5M_\odot$. Une fois le modèle initial obtenu, il n'est pas inutile de l'affiner en le recalculant à partir du fichier binaire obtenu (extension _B.hom). Pour ce calcul on codera agemax=0 dans la NAMELIST nl_temps du fichier d'extension .don.

Le calcul se déroule de la façon suivante: le modèle initial est d'abord interpolé pour construire une répartition des n noeuds en masse pour obtenir des incréments constants pour une fonction de répartition *cf.* § 3.1.3 (Page 82), dans laquelle la pression et la masse ont des contributions relatives fixées. La variable indépendante est l'indice de couche. Les variables dépendantes sont ensuite écrites sous forme de combinaisons linéaires des éléments d'une base de B–splines sur les points $1, 2, \ldots, n$. A cette étape du calcul un grand nombre de quantités relatives aux splines sont évaluées une fois pour toutes.

On entre ensuite dans le calcul effectif du modèle. La méthode consiste à écrire qu'aux points de collocation le système différentiel est vérifié par les projections des variables dépendantes sur la base des B-splines. On obtient un système d'équations non linéaires. Il est résolu par la méthode de Newton–Raphson. Pour le calcul du modèle d'âge zéro un incrément temporel nul est utilisé.

2.2.1.1.2 Modèle de PMS Le fichier ASCII pms.dat de la source de CESAM, directory `DATA`, permet de créer un modèle initial de PMS de $1\,M_\odot$ en utilisant $c = 0.02$ pour la constante de contraction[6] comme il est suggéré par le prompteur.

[6] Le modèle initial de pré-séquence principale , totalement convectif, est voisin d'un polytrope d'indice 3, il est donc possible de prendre ce modèle initial pour toute masse.

On a alors la disposition d'un fichier binaire d'initialisation de PMS (d'extension _B.pms) qu'il convient ensuite d'ajuster par étapes aux conditions recherchées. Le modèle avec la masse, la longueur de mélange et la composition chimique désirées ayant été obtenu, en ajustant la constante de contraction on peut déplacer, dans certaines limites, le modèle initial le long de la ligne d'Hayashi; pour ce faire il suffit de répondre: `n`, à la question: `ok?`, le prompteur demande une nouvelle valeur pour la constante de contraction et le calcul est repris; là encore, il est conseillé de procéder par petites étapes. Pour un modèle de $1\,M_\odot$, avec $c \sim 0.02$ la température centrale du modèle initial obtenu est de l'ordre de 150 000 K, avec $c \sim 0.0005$ elle est de l'ordre de 500 000 K ce qui correspond à l'amorçage de la combustion du deutérium. Le trajet évolutif, le long du "Hayashi track", décrit en initialisant avec $c \sim 0.02$ recouvre celui obtenu en initialisant avec $c \sim 0.0001$.

2.2.2 Evolution temporelle

Les équations de l'évolution temporelle de la composition chimique sont ensuite résolues. Le pas temporel est déterminé par l'algorithme d'intégration lui-même de façon à assurer la précision désirée. Pour éviter des calculs inutiles il est souhaitable d'initialiser le premier pas temporel à une valeur proche de celle qui sera effectivement utilisée. De même il est préférable d'en fixer une limite supérieure réaliste. Ces quantités sont définies *cf.* § 2.5.1 (Page 43), dans la routine resout suivant la précision requise *i.e.* déterminée par le paramètre de précision *e.g.* np, sp *etc...* du fichier de données mon_modele.don; dans un second temps, dans un souci d'optimisation des performances, il conviendra d'adapter ces paramètres au type de calcul à effectuer.

Le mélange des zones convectives est effectué de façon couplée avec l'évolution de la composition chimique. Le problème aux limites est ensuite résolu avec la nouvelle composition chimique, si on tient compte de la rotation la vitesse angulaire est réévaluée; le processus est repris itérativement jusqu'à convergence. Toutefois après un nombre d'itérations, variant selon le niveau de précision requis *e.g.* 4 pour le niveau np, la composition chimique, la vitesse angulaire ainsi que les limites entre zones radiatives et convectives, ne sont plus modifiées.

Une fois la convergence acquise, le modèle obtenu est utilisé comme condition initiale pour le pas temporel suivant et le calcul est ainsi poursuivi jusqu'à l'âge désiré.

2.2.3 Distinctions entre PMS, MS, PtMS, CoHe, CoCa

Les critères suivants sont utilisés pour distinguer les modèles de pré-séquence principale (**PMS**), séquence principale (**MS**), post-séquence principale (**PtMS**), combution de l'hélium (**CoHe**), combution du carbone (**CoCa**). Le modèle est dit[7]:

- **PMS** tant que la contribution des sources nucléaires n'atteint pas 50% de l'énergie totale, dès que ce critère est satisfait une liste détaillée du modèle est effectuée à la fois en ASCII dans le fichier mon_modele.lis et en binaire

[7] Ces dénominations sont évidemment discutables, il convient de ne pas leur attribuer un sens physique trop strict.

dans le fichier mon_modele_B.zams; La proportion de 50% peut être adaptée en modifiant l'instruction `if(i_pp+i_cno+i_3a .ge. 50)then` de la routine cesam; par exemple changer 50 par 90 porterea la proportion a 90%.

- **MS** dès que la contribution des sources nucléaires atteint 50% de l'énergie totale;
- **PtMS** dès que l'abondance centrale en hydrogène est inférieure à 0.001;
- **CoHe** dès que la température centrale atteint 10^8K;
- **CoCa** dès que la température centrale atteint $6\,10^8$K.

PB `Avec une initialisation du type séquence principale d'âge zéro homogène, les premiers pas temporels sont utilisés à la mise en équilibre des chaines de réactions thermonucléaires. Il arrive parfois qu'au cours de cette relaxation le modèle soit identifié comme de pré-séquence principale . Il convient d'ignorer ce diagnostic qui n'est qu'une conséquence des conditions initiales non-physiques.`

2.3 BUGS connus

1. Erreur à la compilation. Dans des routines de provenance externe e.g. etat_ceff, etat_eff, ferdir, les variables ne sont pas déclarées ou encore sont déclarées de façon implicite. Il y a risque d'erreur ou de "warning" lors de la compilation avec l'option -u, qu'il convient de supprimer.

2. Refus de compilation. CESAM utilise des extensions (DEC) de la norme F77 refusés par certains compilateurs. Les extensions les plus courantes sont:

   `select case` , remplacer par `if(..)then..elseif(..)then..endif`.

   `date_and_time` , remplacer par la routine fournissant la date et l'heure.

   tabulations , remplacer les tabulations par 5, ou 6 espaces.

   Certains compilateurs F90 ou F95 acceptent CESAM4.

3. Mauvaise convergence, le processus itératif "tourne en rond": la convergence s'amorce puis les corrections ne diminuent plus ou oscillent autour d'une valeur fixe. **Cause possible**: interpolation non dérivable de l'opacité *e.g.* avec des opacités interpolées linéairement. **Remède**: si l'augmentation de l'ordre d'interpolation des opacités est la solution théorique, elle est souvent impraticable et il y a risque d'oscillations à cause de pas d'interpolation trop grands ou de raccords pas assez lisses entre tables; pratiquement il faut se contenter d'une précision moins grande pour passer le point difficile. Ce type de difficulté se produit assez souvent dans l'atmosphère à cause du raccord entre tables d'opacités d'origines différentes. Dans certaines conditions, CESAM *"force la convergence"*.

4. Mauvais fonctionnement du contrôle de la variation de temporelle de l'entropie spécifique (TdS), on obtient le message: "TdS varie trop... diminution du pas temporel", le pas temporel diminue sans que pour autant le problème disparaisse. **Cause possible**: discontinuité temporelle de la composition chimique avec un cœur convectif. **Remède**: parfois, bien que celà semble paradoxal et que l'on n'en comprenne pas la raison, il suffit de reprendre l'évolution avec un pas temporel plus grand pour que le point délicat soit passé; on peut aussi tenter de modifier la valeur du paramètre de contrôle de la variation admise du TdS, augmenter sa valeur, diminue la précision mais augmente la robustesse; à la limite on peut éliminer le contrôle en donnant une valeur très grande à ce paramètre de contrôle `d_grav`; il est initialisé dans la routine resout suivant le type de précision requis. On contourne parfois la difficulté en utilisant l'approximation de Kippenhahn *cf.* § 3.2.2.2.1 (Page 98).

5. Pour une évolution avec PMS, en précision normale `np`, une fois le modèle initial obtenu, il n'y a pas convergence pour le premier pas temporel. **Cause possible**: La cause de cette difficulté mineure, n'a pas été trouvée. **Remède**: CESAM divise le pas temporel par 2 et la convergence est obtenue sans difficulté.

6. Divergence au premier pas temporel. **Cause possible**: pas temporel trop élevé. **Remède**: diminuer le `dt0` initialisé dans la routine resout suivant le type de précision requis.

7. La localisation des limites zones convective/radiatives sur un point de grille ne fonctionne pas. **Cause possible**: les gradients $\nabla_{\rm rad}$ et $\nabla_{\rm ad}$ ne se croisent pas franchement ou encore la limite se déplace notablement *i.e.*, lors de la disparition d'un cœur convectif. **Remède**: quand les gradients sont voisins la limite zone radiative / zone convective est mal définie, y vouloir forcer un point de grille exactement est illusoire et inutile, CESAM s'accomode de la situation en imposant la position obtenue après le nombre d'itérations fixé dans la routine resout suivant le type de précision requis.

8. Impossibilité de construire un modèle de séquence principale d'âge zéro. **Cause possible**: utilisation d'une composition chimique trop éloignée de l'équilibre *e.g.* celle utilisée pour les modèles de pré-séquence principale avec les abondance cosmiques de H2 et Li7. **Remède**: adapter la composition chimique initiale. Une autre possibilité est d'annuler l'énergie nucléaire crée par l'abondance irréaliste du Li7 ainsi qu'il est réalisé dans la routine ppcnoLi, voir § 4.1.27.4.9 (Page 163). Quant au deutérium comme il a pratiquement disparu sur la ZAMS, on peut le mettre à l'équilibre (en introduisant son abondance initiale dans He3, voir § 4.1.27.4.2 (Page 160)) ou lui donner une abondance initiale très petite, mais non nulle 10^{-25} par exemple.

9. Pour des masses élevées $\sim 10 M_\odot$ et plus, après la disparition de l'hydrogène central, des ZC apparaissent, disparaissent nuisant à la convergence. **Cause possible**: présence de zones semi-convectives. **Remède**: difficulté chronique, CESAM ne prévoit pas de traitement de la semi-convection.

10. Convergence impossible en utilisant le terme correctif de pression turbulente $\frac{d \ln P_{\rm gaz}}{d \ln P}$ *i.e.* avec une valeur strictement négative pour l'argument `cpturb` de la NAMELIST `nl_conv`. **Cause possible**: Ce problème résulte vraisemblablement d'une incohérence de la MLT. **Remède**: néant en l'état actuel.

11. Le programme lit_osc du sous-directory `EXPLOIT` de la source refuse de lire un fichier d'extension .osc. **Cause possible**: Pour une raison inconnue, la première ligne du fichier mon_modele.osc est "repliée" et le fichier est alors illisible. **Remède**: "déplier" cette ligne de façon à ce que la date se trouve à la fin de cette première ligne.

12. Le compilateur refuse de compiler une routine avec un niveau élevé d'optimisation. **Cause possible**: Caprice du compilateur. **Remède**: utiliser un niveau de compilation moins élevé.

13. Très mauvaise convergence du calcul d'atmosphère. **Cause possible**: passage d'un point anguleux de la table d'opacité, ou modification de l'indice de grille du point d'indice $n_\star$. **Remède**: Souvent, après quelques pas temporels on s'écarte des points anguleux et ces difficultés disparaissent. Utiliser des fonctions d'interpolation dérivables pour les tables d'opacité.

14. Très mauvaise convergence du calcul d'atmosphère. **Cause possible**: condition limite sur la pression qui ne peut être satisfaite au niveau de pécision élevé requis par l'intégration de l'atmosphère. **Remède**: utiliser la condition limite sur la densité.

15. L'évolution s'arrête *"normalement"* avant que l'âge requis ne soit atteint. **Cause possible**: signe erronné (*respt.* valeur trop forte, faible) du paramètre log_teff (*respt.* x_stop, t_stop) de la NAMELIST nl_temps du fichier mon_modele.don. **Remède**: modifier ces paramètres suivant les indications du § 2 (Page 47) précédent.

16. Mauvaise convergence de l'algorithme d'intégration temporelle pour ^{2}H, se produit vers la fin de la pré-séquence principale , se produit parfois conjointement des sorties de table d'opacité . **Cause possible**: oscillations au moment de la mise à l'équilibre du deutérium. **Remède**: CESAM "force la convergence" qui, souvent au niveau de quelques 10^{-5}, n'est pas mauvaise.

17. Oscillations violentes de la quantité $A = \frac{1}{\Gamma_1}\frac{\partial \ln P}{\partial \ln R} - \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln R}$ d'un fichier mon_modele.osc de calcul des oscillations *cf.* § 2.7 (Page 61). Ces oscillations ont plusieurs causes décrites § 4.1.3.2 (Page 103). Bien que beaucoup d'efforts aient été consacrés à cette difficulté, jusqu'à présent, le moins mauvais remède consiste à supprimer "à la main" les couches incriminées.

2.4 Programme Principal

Le programme principal se compose des instructions FORTRAN:

```
program star

implicit none

include 'modele.common'

external etat,opa,conv,nuc,
1 lim,t_tau,diffm,difft,perte,ctes,des

sub_phys(1)='etat,opa,conv,nuc'
sub_phys(2)='lim,t_tau,diffm,difft,perte,ctes,des'

call cesam(etat,opa,conv,nuc,
1 lim,t_tau,diffm,difft,perte,ctes,des)

stop

end
```

PB L'ordre des arguments doit être respecté; un nom pour chacune des routines doit nécessairement figurer, même si le modèle à calculer ne les utilise pas toutes effectivement.

2.4.1 Options physiques standard et non standard

Pour chacun des sous-programmes *externes* de physique, arguments de la routine cesam,on donne le nom de l'**option standard**; c'est une routine qui assure, du point de vue *numérique*, un déroulement satisfaisant des calculs; du point de vue physique l'option standard n'est pas, hélas, nécessairement la plus pertinente. On décrit aussi les fonctions d'un certain nombre de sous programmes correspondants à des options physiques non standards qui se trouvent dans la source. La description détaillée des routines de la source de CESAM fait l'objet du Chap. 4 (Page 99).

PB Au cours d'une évolution les échanges d'informations entre le noyau de CESAM et les routines d'options ne se font qu'à travers les arguments des routines. Dans les COMMONs ne figurent que des quantités **fixes** au cours de l'évolution *i.e.* les paramètres du modèle. Il est donc possible de construire et tester des routines d'option indépendamment du noyau de CESAM.

PB Les arguments des COMMONs peuvent être modifiés lors de l'initialisation du calcul. Dans le fichier INCLUDE de chaque COMMON, la signification de chaque variable est succintement décrite. Les sous programmes ou elles sont initialisées sont identifiés.

PB Par la suite, les extensions ".f" des noms de routines ne seront plus indiquées.

1. etat: option standard etat_eff, équation d'état.

- etat_eff: équation d'état EFF, Eggleton *et al.* [1973], **option standard**, *robuste, usage conseillé*, constitue un package *cf.* § 4.2 (Page 187).
- etat_ceff: équation d'état CEFF, physiquement plus complet que etat_eff, *peu robuste, usage délicat, peu conseillé*, constitue un package *cf.* § 4.2 (Page 187).
- etat_gong1: équation d'état complètement ionisé sans dégénérescence ni pression de radiation, très utile pour tests ou essais d'algorithmes, *usage conseillé.*
- etat_gong2: équation d'état avec ionisation partielle sans dégénérescence ni pression de radiation, *usage conseillé pour mises au point.*
- etat_opal: équation d'état tabulée OPAL96 pour modèles avec composition solaire, Iglesias & Rogers [1991], utilise une table à Z donné calculée par interpolation en utilisant le package de Livermore eosplus *cf.* § 4.1.17.7 (Page 138), *usage nécessaire*, constitue un package *cf.* § 4.2 (Page 187). Les tables d'équation d'état sont disponibles sur le site WEB `ftp://www-phys.llnl.gov/pub/opal/eos/`.

PB Dans la source de CESAM, certaines routines originelles de Livermore ont été modifiées sans changer leur nom.

PB En cas de difficultés, *e.g.* sortie de table, l'équation d'état MHD est utilisée; un message signale, mais seulement la première fois, que cette nécessité a été rencontrée.

- etat_mhd: équation d'état tabulée MHD, pour modèles avec composition solaire *cf.* § 4.1.17.6 (Page 138), *usage nécessaire*, constitue un package *cf.* § 4.2 (Page 187).

PB En cas de difficulté, *e.g.* sortie de table, l'équation d'état EFF est utilisée; un message indique que cette nécessité a été rencontrée.

2. opa: option standard opa_int_zsx, calcule l'opacité.

- opa_gong: formule type Kramers améliorée, *très utile pour des tests ou des essais d'algorithmes.*
- opa_int_zsx: interpolation des tables d'opacité OPAL 1991, et pour les basses temperatures Kurucz 1991, (raccord de Y. Lebreton et J. Fernandez) par spline 4×1 D, suivant les quatre directions $T6, A, X, Z$, **option standard**, *très pratique pour des essais, données obsolètes.*
- opa_houdek9: interpolation de tables d'opacité OPAL 1995, Iglesias & Rogers [1991], avec raccord aux opacités de Kurucz ou d'Alexander pour les basses températures, par splines birationnelles suivant la version 9 *cf.* § 4.2.5 (Page 189) du package de Houdek & Rogl [1996], *usage conseillé, limité aux valeurs de* $Z \leq 0.04$, constitue un package *cf.* § 4.2 (Page 187). Il est possible, en modifiant des paramètres internes à la routine opa_houdek de modifier la technique d'interpolation et la source des opacités à basse température. Opacités très voisines de celles de opa_yveline dans leur recouvrement.

- opa_yveline: interpolation de tables d'opacité OPAL 1995, Iglesias & Rogers [1991], avec raccord aux opacités de Kurucz pour les basses températures, routines d'interpolation de Y. Lebreton *usage conseillé, limité aux valeurs de* $Z \leq 0.1$, constitue un package *cf.* § 4.2 (Page 187). Opacités très voisines de celles de opa_houdek dans leur recouvrement.

3. conv: option standard conv_jmj, calcule le gradient de température dans une zone convective.

   - conv_jmj: gradient calculé par la longueur de mélange, formulation tenant compte de l'épaisseur optique de l'élément convectif, **option standard**, *usage conseillé.*
   - conv_cm: gradient calculé par la prescription de Canuto & Mazitelli [1991], *usage conseillé.*

4. lim: option standard lim_tau1, calcule les conditions limites.

   - lim_gong1: conditions limites externes monocouche à n'utiliser qu'avec la routine etat_gong1, n'utilise pas de loi $T(\tau)$ pour tests ou essais des algorithmes, *robuste, usage conseillé.*
   - lim_atm: reconstitution d'une atmosphere en assurant assure la continuité des gradients à la limite avec l'enveloppe *cf.* § 4.1.23.4 (Page 149), *usage conseillé.*
   - lim_tau1: conditions limites externes monocouche à $\tau = 1$, n'utilise pas de loi $T(\tau)$, **option standard**, *robuste, usage conseillé.*

5. t_detau: option standard hopf, calcule la température en fonction de la profondeur optique pour reconstituer une atmosphère, initialisation de la densité à la limite externe du modèle.

   - hsra: atmosphère du H.S.R.A. interpolée, loi non purement radiative, *robuste, gradient de température non lissé dans la partie transparente, usage limité.*
   - edding: loi $T(\tau)$ purement radiative d'Eddington, *très robuste, usage conseillé.*
   - hopf: loi $T(\tau)$ purement radiative de Hopf, **option standard**, *très robuste, usage conseillé.*
   - k5750: loi $T(\tau)$ non purement radiative déduite du modèle d'atmosphère solaire calculé par C. van't Veer avec le programme ATLAS9 de Kurucz pour$T_{\rm eff} = 5750$K, *robuste, usage conseillé.*
   - k5770: loi $T(\tau)$ non purement radiative déduite du modèle d'atmosphère solaire calculé par C. van't Veer avec le programme ATLAS12 de Kurucz pour $T_{\rm eff} = 5770$K, *robuste, usage conseillé pour modèles solaires.*
   - roger00: loi $T(\tau)$ non purement radiative déduite de modèles d'atmosphère de métallicité [Fe/H]=0.0 calculés par R. Cayrel avec le programme ATLAS12 de Kurucz. Interpolation en température effective

$3500K < T_{\rm eff} < 6500K$, et gravité $1 < \log_{10}(g) < 5$. *robuste, usage conseillé..*

- roger02: loi $T(\tau)$ non purement radiative déduite de modèles d'atmosphère de métallicité [Fe/H]=0.2 calculés par R. Cayrel avec le programme ATLAS12 de Kurucz. Interpolation en température effective $4000K < T_{\rm eff} < 6500K$, et gravité $1 < \log_{10}(g) < 5$. *robuste, usage conseillé.*

6. nuc: option standard ppcno9e, calcule les taux des réactions thermonucléaires, le débit d'énergie thermonucléaire et le nombre de neutrinos. Les routines de réactions thermonucléaires sont robustes.

   - nuc_gong: cycle PP simplifié, sans le calcul du neutrino: *très robuste, pour essais, usage conseillé.*
   - ppcno9e: réactions des cycles PP, CNO avec ^{2}D, ^{7}Li, ^{7}Be à l'équilibre, pour des températures inférieures à 20MK, *robuste, usage conseillé.*
   - nacre9: similaire à la précédente avec les taux de la compilation NACRE (Angulo *et al.* [1999], Morel *et al.* [1999]); *robuste, usage conseillé.*
   - ppcno9e_gt: similaire à ppcno9e mais permettant d'atteindre la branche des géantes *i.e.* pour des températures inférieures à 50MK, *robuste, usage conseillé.*
   - ppcno10Fe: Cette routine est principalement destinée à suivre l'évolution de l'abondance du lithium à partir d'un modèle de ZAMS homogène en utilisant l'abondance météoritique du lithium. "Fe" correspond à un élément moyen représentant les isotopes de masse supérieure à celle du potassium. *robuste, usage conseillé.*
   - nacre9_gt: similaire à la précédente avec les réactions de la compilation NACRE (Angulo *et al.* [1999], Morel *et al.* [1999]; *robuste, usage conseillé.*
   - ppcno3a9e: similaire à ppcno9e avec des réactions du cycle 3α et pour des températures inférieures à 200MK, *robuste, usage conseillé.*
   - ppcno3ac10: similaire à ppcno3a9e avec des réactions des cycles du carbone pour des températures inférieures à 300MK, *semble robuste, peu testé.*
   - ppcno12e: similaire à ppcno9e mais sans élément à l'équilibre, pour évolutions avec pré-séquence principale , *robuste, usage conseillé.*
   - ppcno13e: similaire à ppcno9e mais sans élément à l'équilibre et avec l'isotope ^{9}Be, pour évolutions avec pré-séquence principale , *robuste, usage conseillé.*
   - ppcno12en, ppcno13en: similaires aux deux précédentes avec les nouveaux taux de réactions de Adelberger *et al.* [1998].
   - nacre12e, nacre13e: similaires aux précédentes avec les nouveaux taux de réactions de la compilation européenne NACRE (Angulo *et al.* [1999], Morel *et al.* [1999]). ,

PB Chaque routine de ce type *e.g.* nacre12e, utilise une table crée par le programme tab_reac, dont il convient, pour quelques unes, d'indiquer le chemin d'accès dans la routine elle même *cf.* § 2.1.3.5 (Page 11).

7. diffm: option standard diffm_mp, calcul du coefficient de diffusion turbulente. *Robuste, usage nécessaire.*

   - diffm_0: Routine fictive à utiliser quand on ne tient compte que de la diffusion microscopique.
   - diffm_mp: Calcul des coefficients de diffusion microscopique suivant le formalisme de Michaud & Proffit ([1993]) les éléments lourds sont éléments traces, les coefficients de diffusion sont déduits du nombre de protons. *Robuste, pour les étoiles de la séquence principale.*
   - diffm_br: Calcul des coefficients de diffusion microscopique suivant le formalisme de Burgers *cf.* § 4.1.12.4 (Page 116). Lorsque la variable logique f_rad de la NAMELIST nl_chim est vraie, les forces radiatives sont calculées suivant le formalisme simplifié de G. Alécian *cf.* § 4.1.2 (Page 101); On utilise alors les tables phi_psi2_100.dat....phi_psi2_200.dat du directory DATA de la source de CESAM. Tous les éléments sont diffusés. *Robuste, demande beaucoup de ressources.*

8. difft: option standard difft_cte, calcul du coefficient de diffusion turbulente et de mélange.

   - difft_cte: Calcul du coefficient de mélange turbulent pour les zones mélangées et, dans les zones radiatives, du coefficient de mélange turbulent d_turb de la NAMELIST nl_chim. *Robuste, usage conseillé.*
   - difft_nu: Calcul du coefficient de mélange turbulent pour les zones mélangées et, dans les zones radiatives, du coefficient de mélange turbulent dû à la viscosité radiative selon Morel & Thévenin [2002] et au paramètre d_turb de la NAMELIST nl_chim. *Robuste, usage conseillé.*
   - difft_g: En plus du coefficient de mélange turbulent dans les zones convectives, calcul du coeffficient de mélange sous la zone convective solaire suivant le formalime de Gabriel [1997]. *Robuste, usage spécifique.*
   - difft_wt: En plus du coefficient de mélange turbulent dans les zones convectives, calcul d'un coeffficient de mélange dans les couches externes et coefficient de diffusion infini (rotation solide) pour le moment angulaire. *Robuste, usage spécifique.*

9. perte: option standard perte_ext, calcule la perte de masse.

   - perte_ext: perte de masse due à une perte externe constante, **option standard**, *Robuste, usage conseillé.*
   - perte_tot: perte de masse externe due à une perte constante et au défaut de masse, *Robuste, usage conseillé.*

10. ctes: option standard ctes, initialisation des constantes de physique.

    - ctes: valeurs des constantes le plus souvent utilisées, **option standard**, *Robuste.*

    PB Certaines données atomiques ne sont pas définies dans ctes, mais dans le programme tab_reac, elles n'apparaissent donc pas dans le COMMON ctephy.common.

11. des: option standard des_m, dessin, *on line*, des variables globales, de la composition chimique, du diagramme HR et de la localisation des zones convectives.

    - des_r: les dessins sont effectués en fonction du rayon, *Très robuste, usage conseillé.*
    - des_m: les dessins sont effectués en fonction de la masse. **Option standard**, *très robuste, usage conseillé.*
    - no_des: évite de faire le dessin. *Très robuste, usage conseillé.*

    PB Les routines de cette section utilisent le logiciel PGPLOT s'il n'est pas disponible, utiliser no_des. Pour ne pas compiler des_r et des_m, il convient aussi d'enlever les noms de ces deux routines de la liste de compilation.

2.4.2 Exemples de programmes

2.4.2.1 Programme pour un calcul d'évolution standard

```
      program star

c     etat_eff : equation d'etat

c     opa_int_zsx : opacites

c     conv_jmj : convection

c     ppcno3a9e : reac. thermo. cycles PPCNO et 3 alpha

c     lim_tau1 : cond. lim. externes atmosphere monocouche

c     hopf : loi t(tau)

c     diffm_0 : diffusion microscopique nulle

c     difft_cte : diffusion turbulente dans ZC et ZR

c     perte_ext : perte de masse

c     ctes : constantes
```

```
c       des_m : dessin

        implicit none

        include 'modele.common'

        external etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno3a9e,
        1       lim_tau1,hopf,diffm_0,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m

        sub_phys(1)='etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno3a9e'
        sub_phys(2)='lim_tau1,hopf,diffm_0,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m'

        call cesam(etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno3a9e,
        1        lim_tau1,hopf,diffm_0,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m)

        stop

        end
```

2.4.2.2 Programme avec recherche de précision

```
        program soleil

c       etat_opal : equation d'etat

c       opa_houdek : opacites

c       conv_jmj : convection

c       ppcno9e : reac. thermo. cycles PPCNO

c       lim_atm : cond. lim. externes atmosphere monocouche

c       k5777 : loi t(tau)

c       diffm_mp : diffusion microscopique selom Michaud & Proffit

c       difft_cte : diffusion turbulente constante dans les ZC et ZR

c       perte_ext : perte de masse

c       ctes : constantes

c       des_m : dessin

        implicit none
```

```
      include 'modele.common'

      external etat_opal,opa_houdek,conv_jmj,ppcno9e,
     1       lim_atm,k5777,diffm_mp,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m

      sub_phys(1)='etat_opal,opa_houdek9,conv_jmj,ppcno9e'
      sub_phys(2)='lim_atm,k5777,diffm_mp,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m'

      call cesam(etat_opal,opa_houdek9,conv_jmj,ppcno9e,
     1        lim_atm,k5777,diffm_mp,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m)

      stop

      end
```

2.4.2.3 Test d'une routine privée

Pour tester la routine privée de réactions nucléaires mes_reac on utilisera le programme:

```
      program essai

c     etat_gong2 : equation d'etat

c     opa_gong : opacites

c     conv_jmj : convection

c     mes_reac : nouvelles reactions

c     lim_tau1 : cond. lim. externes atmosphere monocouche

c     hopf : loi t(tau)

c     diffm_0 : sans diffusion microscopique

c     difft_cte : diffusion turbulente dans les ZC et ZR

c     perte_ext : perte de masse

c     ctes : constantes

c     des_m : dessin

      implicit none

      include 'modele.common'
```

```
      external etat_gong2,opa_gong,conv_jmj,mes_reac,
      1       lim_tau1,hopf,diffm_0,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m

      sub_phys(1)='etat_gong2,opa_gong,conv_jmj,mes_reac'
      sub_phys(2)='lim_tau1,hopf,diffm_0,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m'

      call cesam(etat_gong2,opa_gong,conv_jmj,mes_reac,
      1        lim_tau1,hopf,diffm_0,difft_cte,perte_ext,ctes,des_m)

      stop

      end

c***************************************************************

      subroutine mes_reac(t,ro,comp,dcomp,jac,deriv,fait,
      1      epsilon,et,ero,ex,hhe,be7e,b8e,n13e,o15e,f17e)

.....................

      end
```

Les réactions thermonucléaires seront calculées par la routine privée mes_reac; pour tester cet algorithme on utilisera, pour les autres options physiques les options standards qui permettront d'effectuer des calculs robustes et rapides.

2.5 Fichier des données NAMELISTs

Les paramètres externes *e.g.* longueur de mélange, masse, *etc...* du modèle sont introduits par sept NAMELISTs qui doivent être placées dans un fichier dont le nom est **nécessairement** mon_modele.don, étant entendu que le nom générique des modèles à calculer est "mon_modele":

1. `nl_espace`: regroupe les paramètres physiques relatifs à la variable spatiale,
2. `nl_temps`: regroupe les paramètres physiques relatifs à la variable temporelle,
3. `nl_chim`: regroupe les paramètres physiques relatifs à la composition chimique,
4. `nl_rot`: regroupe les paramètres physiques relatifs à la rotation,
5. `nl_conv`: regroupe les paramètres physiques relatifs à la convection,
6. `nl_etat`: regroupe les noms des fichiers, *d'accès externe*, éventuellement nécessaires au calcul de l'équation d'état,
7. `nl_opa`: regroupe les noms des fichiers, *d'accès externe*, éventuellement nécessaires au calcul de l'opacité.

Table 2.1: Valeurs des paramètres numériques suivant les diverses options de précision prévues. Les valeurs de ces paramètres doivent être adaptées au type d'évolution requis, pour ce faire il convient d'intervenir dans la routine resout *cf.* § 4.1.31.2 (Page 170). Les dénominations peuvent s'interpréter de la façon suivante : sp: super précision, sr: super précision eulérien, co: pour modèles de COROT, lm: pour petites masses (low mass), ds: pour modèles de δ scuti, sa: pour modèles avec précision solaire (solar accuracy).

	sp	sr	co	lm	ds	sa
m_qs	2	1	2	2	2	2
m_ch	3	3	3	3	2	3
ordre	2	2	2	2	2	2
precix	10^{-4}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-5}
precit	0.2	0.2	0.2	1.0	0.2	0.1
ro_test	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
psi0	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.08
d_grav	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
loc_zc	10^{-2}	10^{-2}	10^{-1}	10^{-1}	10^{-1}	10^{-2}
dtmax	200	200	200	300	100	200
dt0	10	10	10	10	10	10
ini0	6	6	6	6	5	6
n_atm	3/4	3/4	3/4	3/4	1/2	1/1
kipp	.false.	.false.	.true.	.true.	.true.	.false.
en_masse	.true.	.false.	.true.	.true.	.true.	.true.
ctem	15.		15.	15.	15.	15.
cter		20.				
mvt_dis	.true.	.true.	.false.	.false.	.false.	.true.

8. nl_nuc: regroupe le nom du fichier, *d'accès externe*, éventuellement nécessaires à l'interpolation des taux de réactions thermonucléaires.

2.5.1 Signification des paramètres des NAMELISTs

```
$NL_ESPACE
MTOT = 0.9
MDOT = 0.0
DER_NUM = F
PRECISION ='lm'
TAU_MAX = 10.0
LIM_RO = T
$END
$NL_TEMPS
AGEMAX = 1054.
DTLIST = 100000000.0
X_STOP = 0.1
```

Table 2.2: Suite et fin de la Table 2.1 (Page 43). Les dénominations peuvent s'interpréter de la façon suivante : `hp`: hyper précision, `cp`: pour modèles de cephéides de grande précision, `c1`: pour modèles de cephéides, `cr`: pour modèles de cephéides avec les variables eulériennes, `nr`: pour modèles de précision normale avec les variables eulériennes, `np`: pour modèles de précision normale. Avec la précision `hp` et avec une perte de masse alors `ordre=(2)`.

	hp	cp	c1	cr	nr	np
m_qs	2	2	1	1	1	1
m_ch	4	2	2	2	2	2
ordre	4 (2)	2	1	2	1	1
precix	10^{-6}	0.0005	0.005	0.0005	0.005	0.005
precit	0.1	0.3	1.0	0.3	0.2	0.2
ro_test	0.01	0.001	0.01	0.001	0.1	0.1
psi0	0.09	0.07	0.1	0.07	0.1	0.1
d_grav	0.1	0.5	2.0	0.5	0.5	0.5
loc_zc	10^{-6}	10^{-1}	10^{-1}	10^{-1}	10^{-1}	10^{-1}
dtmax	200	10	10	10	300	300
dt0	10	0.05	0.1	0.05	10	10
ini0	6	6	5	5	4	4
n_atm	1/1	3/4	1/2	3/4	1/3	1/3
kipp	.false.	.false.	.true.	.false.	.true.	.true.
en_masse	.true.	.true.	.true.	.false.	.false.	.true.
ctem	15.	15.	15.			15.
cter				15.	15.	
mvt_dis	.true.	.false.	.false.	.false.	.false.	.false.

```
LOG_TEFF = 10.0
T_STOP = 100000000.0
ARRET ='post'
$END
$NL_CHIM
X0 = 0.7594
Y0 = 0.24
ZSX0   = 0.
Z_CTE = F
D_TURB=0.
DIFFUSION = t
F_RAD=F
MITLER=f
$END
$NL_ROT
W_ROT = 0.0
ROT_SOLID = T
$END
$NL_CONV
ALPHA = 1.7
CPTURB = 0.0
OVSHTS = 0.0
OVSHTI = 0.0
JPZ = F
LEDOUX = F
$END
$NL_ETAT
F_EOS ='../LAOL_EOS/eos_190.bin                  ',
'2                                               ',
'3                                               ',
'4                                               ',
'5                                               ',
'6                                               ',
'7                                               ',
'8                                               '
$END
$NL_OPA
F_OPA ='/home/morel/OPACITE/opa_yveline.dat      ',
'2                                               ',
'3                                               ',
'4                                               ',
'5                                               ',
'6                                               ',
'7                                               ',
'8                                               '
$END
$NL_NUC
```

```
F_NUC   = '~/SUN_DATA/nacre12e.data                                    '
$END
```

avec T et F pour .true. et .false. respectivement.

PB La codification des NAMELIST dépend du compilateur utilisé.

1. NAMELIST `nl_espace`

   - mtot=0.9: masse totale en $M_\odot$,
   - mdot=0: gain de masse en $M_\odot$ par an, mdot≤ 0 correspond à une **perte** externe de masse, mdot≥ 0 correspond à un **accroissement** externe de la masse,
   - der_num=f: calcul du jacobien par dérivées analytiques, der_num=t calcul du jacobien par dérivées numériques; des dérivées numériques sont nécessaires, par exemple, si les dérivées des fonctions thermodynamiques ne sont pas *numériquement* cohérentes,
   - precision='lm': niveau de précision requis. CESAM fixe lui même ses paramètres numériques, nombre de couches, précision de l'intégration *etc...* , suivant le niveau de précision requis; il y a trois niveaux standards de précision *i.e.* `np`, `sp`, `sa`, et des niveaux plus personalisés pour des applications spécifiques[8]. Il est possible de modifier le choix des paramètres, ou de créer d'autres options en intervenant dans la routine resout. Les paramètres retenus pour les différentes options sont rassemblés dans la Table 2.1 (Page 43) et la Table 2.2 (Page 44). Les options sont les suivantes:

     `np` : "normale précision", à utiliser pour une évolution standard,

     `sp` : "super précision", à utiliser si une précision supérieure est requise, par exemple, pour la calibration de modèles solaires,

     `sr` : super précision avec les variables eulériennes,

     `ds` : "précision pour δ scuti", à utiliser pour une l'évolution d'une étoile avec cœur convectif sur la séquence principale,

     `cp` : "précision pour céphéides", à utiliser pour une l'évolution avec haute précision d'une étoile au delà de la combustion de l'hydrogène,

     `c1` : "précision réduite pour céphéides", plus robuste que `cp`,

     `cr` : "précision pour céphéides" avec variables eulériennes,

     `co` : "précision pour COROT" adapté aux modèles d'étoiles *solar like*,

     `hp` : "hyper précision" à n'utiliser que de façon limitée, la demande en ressources étant importante,

     `sa` : "solar accuracy", à utiliser, par exemple, pour la calibration de modèles solaires se voulant très précis. Pour le calcul du modèle d'âge agemax le nombre de couches est augmenté jusqu'à la valeur maximale prévue par le paramètre `pn(=2000)` du common `cesam.parametres`.

[8] Un calcul exige d'autant plus de ressources et est d'autant plus capricieux qu'il se veut plus précis.

`lm` : "low mass", à utiliser pour l'évolution de modèles de masse $M < 1M_\odot$, avec une précision moyenne,

- tau_max=10: profondeur optique Rosseland du fond de l'atmosphère reconstituée.
- lim_ro=t: la condition limite externe de l'atmosphère porte sur la densité et non sur la pression *cf.* § 4.1.23.4 (Page 149).

2. NAMELIST `nl_temps`

- agemax=1054.: âge maximal à atteindre en million d'années,
- dtlist=1.d8: intervalle de temps minimum, en million d'années, séparant deux listes détaillées du modèle dans le fichier mon_modele.lis *e.g.* avec dtlist=1.d8 seuls le modèle initial, le modèle de ZAMS, le modèle de post main sequence et le modèle d'âge agemax, s'il sont calculés, seront listés.
- x_stop=0.1: lorsque pour un âge inférieur à agemax, l'abondance centrale en hydrogène devient inférieure à 0.1 ± 0.01 le pas temporel est ajusté de façon à obtenir une valeur à l'intérieur de ces limites et le calcul de l'évolution est arrêté.
- log_teff=3.87: le calcul de l'évolution est arrêté dès que la température effective devient *supérieure* à 3.87, en codant log_teff=-3.87 le calcul de l'évolution est arrêté dès que la température effective devient *inférieure* à 3.87,
- t_stop=5.d7: le calcul de l'évolution est arrêté dès que la température centrale devient supérieure à 50 000 000K,
- arret='else': le calcul s'arrêtera dès que l'un des critères précédents sera satisfait. En codant:

  arret='zams' le calcul est arrêté dès que le modèle devient un modèle de séquence principale *i.e.* dès que 50% de l'énergie est d'origine thermonucléaire,

  arret='post' le calcul est arrêté dès que le modèle devient un modèle post séquence principale *i.e.* dès que ^{1}H a disparu au centre de l'étoile.

  arret='cohe' le calcul est arrêté dès que la combustion de l'hélium est amorcée au centre ($T_c \geq 100MK$),

  arret='coca' le calcul est arrêté dès que la combustion du carbone est amorcée au centre ($T_c \geq 250MK$)

3. NAMELIST `nl_chim`

- x0=0.7594: abondance initiale, par unité de masse, de ^{1}H,
- y0=0.24: abondance initiale, par unité de masse, de ^{4}He,
- zsx0=0.: valeur initiale de Z/X, si zsx0 $\leq$ 0. l'abondance initiale d'hydrogène est initialisée à x0 sinon, zsx0 $>$ 0. l'abondance initiale d'hydrogène est déduite de y0 et zsx0 et la valeur indiquée pour x0 est ignorée.

- z_cte=f: l'abondance initiale en éléments lourds est z0=1-x0-y0. Au cours de l'évolution les variations des éléments qui composent le "Z" *e.g.* Fe, Si, *etc...* ne sont pas calculées si bien que la valeur[9] $Z = 1 - X - Y$ traduit mal l'incidence des métaux sur l'opacité; pour la détermination de l'opacité il semble parfois moins inexact, *e.g.* si les opacités sont connues pour $Z = cte$, de conserver l'abondance en éléments lourds constante; par contre, pour l'équation d'état il semble plus réaliste de prendre[10] $Z = 1 - X - Y$ bien que parfois l'équation d'étatne soit connue que pour Z fixée, *e.g.* etat_opal. CESAM prévoit une alternative: avec z_cte=t, pour le calcul de l'opacité l'abondance en éléments lourds utilisée, Z_κ, prend la valeur initiale z0 par contre, avec z_cte=f, on prendra $Z_\kappa = 1 - X - Y$; avec z_cte=f et diffusion des dispositions particulières sont prévues (*cf.* Table 2.3 (Page 50)) Z_κ ou partie de Z_κ est considéré comme un élément chimique à part entière pouvant être diffusé, mélangé dans les zones convectives *etc...* , auquel cas Z_κ est une des composantes du vecteur de composition chimique généralisée et sa valeur, pour le calcul de l'opacité, est déterminée de façon similaire à celle des autres éléments chimiques.

  NB - Ces dispositions sont devenues caduques avec la disponibilité de tables d'opacité avec Z variable.

PB `Avec diffusion, il n'est pas prévu d'avoir` $Z_\kappa = 1 - X - Y$, `pour ce faire, dans la routine de calcul de l'opacité utilisée, calculer explicitement cette quantité et l'affecter à la variable z dans la suite d'instructions "determination de X et de Z".`

PB $Z = 1 - X - Y$ `n'est pas nécessairement une constante au cours de l'évolution, si la valeur initiale de` Z `est voisine de 0, il y a lieu de prendre des dispositions particulières.`

- d_turb=0.: valeur du coefficient de diffusion turbulente à utiliser dans la routine de diffusion difft_cte.
- diffusion=f: on ne tient pas compte des processus de diffusion.
- f_rad=.true.: on tient compte des accélérations radiatives dans le calcul des coefficients de diffusion effectués avec la routine diffm_br. f_rad *n'est opérant qu'avec* la routine diffm_br.

4. NAMELIST `nl_rot`

- w_rot=0. période de rotation initiale ou bien en:
  - **jours** *e.g.* `w_rot=28` pour le soleil actuel,
  - **radian par seconde** *e.g.* `w_rot= 2.6d-6` pour le soleil actuel.

  Une valeur de la période de rotation `w_rot` < 1 jour est donc considérée comme donnée en radian par seconde, avec cette convention, w_rot=0

[9] Y doit inclure ^{3}He et ^{4}He.

[10] On trouve, Table 2.3 (Page 50), la valeur adoptée pour Z suivant l'option retenue.

correspondant à une vitesse angulaire nulle *i.e.* une période infinie. On peut modifier ces conventions en intervenant dans la routine interne resout *cf.* § 4.1.31 (Page 168).

- rot_solid=t on suppose la vitesse angulaire constante *i.e.* rotation solide. Dans ce cas 0 ou -1 est affecté à l'indice `iw` – voir ci-dessous. Avec rot_solid=f et w_rot ≥ 0, le moment angulaire est diffusé; dans la version actuelle de CESAM, la seule possibilité offerte est celle d'un coefficient de diffusion constant pour le moment angulaire. Ce coefficient est introduit dans les routines externes du type difft *cf.* § 4.1.12 (Page 115), § 4.1.12.9 (Page 129). La vitesse angulaire est traitée comme un élément chimique particulier, *cf.* § 4.1.12.1 (Page 115), d'indice `iw`. Alors ou bien:
  - w_rot ≥ 0, le moment angulaire est conservé point par point dans les zones radiatives, la variation locale de moment angulaire étant transformée en énergie interne[11]. Dans les zones convectives le moment angulaire est globalement conservé et il y a rotation solide *cf.* Table 2.3 (Page 50) et § 4.1.35.1 (Page 178), dans ce cas `iw=-1`.
  - w_rot < 0, le moment angulaire est globalement conservé, la vitesse angulaire, rigide, variant au cours du temps *cf.* § 4.1.35.2 (Page 179), dans ce cas `iw=0`.

5. NAMELIST `nl_conv`

   - alpha=1.8: longueur de mélange,
   - cpturb=0.0: paramètre de pression turbulente nul *i.e.* on ne tient pas compte de la pression turbulente; on en tient compte avec `cpturb > 0`, sa valeur varie avec les auteurs, toutefois, cpturb ~ 1. Avec une valeur strictement négative `cpturb < 0`, le terme correctif de pression turbulente est introduit *cf.* § 4.1.7.4 (Page 109) toutefois des difficultés liées à la raideur du problème en rendent son utilisation très incertaine *cf.* § 2.3 (Page 31).
   - ovshts, ovshti: overshooting supérieur et inférieur, en échelle de hauteur de pression, avec une limite supérieure égale à ovshts fois leur rayon, pour les noyaux convectifs,
   - jpz=t: on utilise la formulation de Zahn [1991] pour la convection pénétrative, le paramètre ζ est alors pris égal à ovshti.
   - ledoux=f: utilisation du critère de Schwarzschild pour la convection, de celui de Ledoux avec ledoux=t.

6. NAMELIST `nl_etat`

   Indique les noms des fichiers, au plus 8, éventuellement utilisés pour le calcul de l'équation d'état tabulée et dont le chemin d'accès est transmis de façon externe, *e.g.* etat_opal.

PB `Cette instruction est nécessaire, même si la détermination de l'équation d'état ne nécessite pas de table, auquel cas, cette`

[11] La physique restant à imaginer, ces options de CESAM ne peuvent être totalement banalisées.

Table 2.3: Valeurs de Z_κ pour l'opacité et de la vitesse angulaire Ω utilisées suivant les options retenues.

rot_solid	z_cte	diffusion	Diffusion de Z	Z_κ	Ω
.true.	.true.	.true.	non	Z_0	$\Omega = \Omega_0$
.false.	.false.	.true.	oui	$Z_{\rm diff}$	$\Omega = \Omega_{\rm diff}$
.true.	.true.	.false.	non	Z_0	$\Omega = \Omega_0$
.false.	.false.	.false.	non	1-^{1}H-^{4}He-^{3}He	$\Omega = \Omega_{\rm mel}$

`NAMELIST peut servir à transmettre des noms de fichiers sans rapport avec l'équation d'état.`

7. NAMELIST `nl_opa`

   Indique les noms des fichiers, au plus 8, éventuellement utilisés pour le calcul de l'opacité tabulée et dont le chemin d'accès est transmis de façon externe, *e.g.* opa_yveline.

PB `Cette instruction est nécessaire, même si la détermination des opacité ne nécessite pas de table, auquel cas cette NAMELIST peut servir à transmettre des noms de fichiers sans rapport avec l'opacité.`

8. NAMELIST `nl_nuc`

   Indique le nom du fichier, éventuellement utilisé pour l'interpolation des réactions thermonucléaires *e.g.* /SUN_DATA/nacre12e.data.

PB `Cette instruction est nécessaire, même si la détermination des taux des réactions thermonucléaires ne nécessite pas de table, auquel cas cette NAMELIST peut servir à transmettre des noms de fichiers sans rapport avec les réactions thermonucléaires.`

2.5.2 Exemples

2.5.2.1 Etoile de $2M_\odot$

Données pour une évolution d'une étoile de $2M_\odot$ jusqu'à l'âge de 750 Ma sans recherche de précision:

```
$NL_ESPACE
MTOT = 2.
MDOT = 0.0
DER_NUM = F
PRECISION ='np'
TAU_MAX = 10.0
LIM_RO = T
$END
```

```
$NL_TEMPS
AGEMAX = 750.
DTLIST = 100000000.0
X_STOP = -1.
LOG_TEFF = 10.0
T_STOP = 100000000.0
ARRET ='else'
$END
$NL_CHIM
X0 = 0.71
Y0 = 0.27
ZSX0   = 0.
Z_CTE = T
D_TURB=0.
DIFFUSION = F
F_RAD=F
MITLER=f
$END
$NL_ROT
W_ROT = 0.0
ROT_SOLID = T
$END
$NL_CONV
ALPHA = 1.7
CPTURB = 0.0
OVSHTS = 0.0
OVSHTI = 0.0
JPZ = F
LEDOUX = F
$END
$NL_ETAT
F_EOS ='../LAOL_EOS/eos_190.bin                ',
'2                                              ',
'3                                              ',
'4                                              ',
'5                                              ',
'6                                              ',
'7                                              ',
'8                                              '
$END
$NL_OPA
F_OPA ='/home/morel/OPACITE/opa_yveline.dat    ',
'2                                              ',
'3                                              ',
'4                                              ',
'5                                              ',
'6                                              ',
```

```
 '7                                                              ',
 '8                                                              '
 $END
 $NL_NUC
 F_NUC   = '~/STAR_DATA/nacre9_gt.data                                  '
 $END
```

2.5.2.2 Etoile de $1.25M_\odot$

Données pour une évolution d'une étoile de $1.25M_\odot$ jusqu'à une abondance de 0.1 en hydrogène au centre avec recherche de précision, overshooting du cœur, perte de masse de $1.10^{-12}M_\odot$ par an, diffusion et détermination de l'opacité tenant compte des variations en éléments lourds:

```
 $NL_ESPACE
 MTOT = 1.25
 MDOT = -1.d-12
 DER_NUM = F
 PRECISION ='sp'
 TAU_MAX = 10.0
 LIM_RO = T
 $END
 $NL_TEMPS
 AGEMAX = 15.d3
 DTLIST = 100000000.0
 X_STOP = 0.1
 LOG_TEFF = 10.0
 T_STOP = 100000000.0
 ARRET ='else'
 $END
 $NL_CHIM
 X0 = 0.71
 Y0 = 0.27
 ZSX0   = 0.
 Z_CTE = F
 D_TURB=0.
 DIFFUSION = T
 F_RAD=F
 MITLER=f
 $END
 $NL_ROT
 W_ROT = 0.0
 ROT_SOLID = T
 $END
 $NL_CONV
 ALPHA = 1.7
 CPTURB = 0.0
 OVSHTS = 1.5
```

```
OVSHTI = 0.0
JPZ = F
LEDOUX = T
$END
$NL_ETAT
F_EOS ='../LAOL_EOS/eos_190.bin                    ',
'2                                                  ',
'3                                                  ',
'4                                                  ',
'5                                                  ',
'6                                                  ',
'7                                                  ',
'8                                                  '
$END
$NL_OPA
F_OPA ='/home/morel/OPACITE/opa_yveline.dat        ',
'2                                                  ',
'3                                                  ',
'4                                                  ',
'5                                                  ',
'6                                                  ',
'7                                                  ',
'8                                                  '
$END
$NL_NUC
F_NUC   = '~/SUN_DATA/nacre12e.data                                 '
$END
```

2.6 Fichiers INCLUDE, paramètres, COMMONs, *etc...*

Dans CESAM les dimensions des tableaux sont calculées à partir de PARAMETERs qu'il est possible de modifier. Pour éviter un trop grand nombre de paramètres certains tableaux se trouvent un peu surdimensionnés.

PB Il convient de reconstituer la bibliothèque cesam.a si l'un des fichiers INCLUDE est modifié.

2.6.1 Fichier cesam.version

Ce fichier permet d'identifier la version de CESAM utilisée *e.g.* :

```
character*7 version
data version/'4.0.0.0'/ !janvier 98

c 3.1     : masses en (m/Msol)**2/3
c 3.1.1   : limites ZC/ZC precisees a 1.e-6
```

```
c 3.1.1.1 : corrections et amenagements divers
c 3.2.0.0 : augmentation du nombre d'elements, de reactions + details
c 3.2.0.1 : amenagements divers
c 3.2.2.0 : approximation de Kippenhahn pour TdS/dt
c3 .2.2.1 : quelques petits bugs
c 3.3.0.0 : addition d'elements chimiques, modif noms elem chim
c 4.0.0.0 : variable supplementaire la pression turbulente
c    vitesse angulaire, reactions thermonucleaires
c 4.1.1.0 : adjonction de la NAMELIST nl_nuc et de la chaine de carateres
c     f_nuc pour identifier eventuellement le fichier de
c     reactions nucleaires
c 4.1.2.0 : correction d'un signe dans list.f, adjonction
c    correction d'un bug dans lim_zc / fevrier 2000
c 4.2.0.0 : separation de la routine externe de diffusion entre diffusion
c     microscopique et turbulente, reamenagements de CEFF et de EFF
c 4.3.0.0 : adjonction de Z/X, d_turb, f_rad dans le fichier *.don,
c           modification du formalisme de calcul de la frequence
c     de Brunt-Vaissala, modification de la presentation du listing
c 4.3.1.0 : Correction d'un bug (initialisation de it) dans evol.f
c     Introduction des indices de premiere spline non
c     nulles spic et spid dans diffus
c 4.3.2.0 : Correction d'un bug dans tab_reac.f, quelques amenagements
c     dans evol.f, cesam.f, opa_yveline.f, changement de signe
c     de grav dans acc_rad.f et diffm_br.f
c 4.3.3.0 : Quelques corrections ou ajustements divers. Renormalisation
c     de la composition chimique dans la base des B-Splines,
c     addition de nacre11, correction d'un bug et extension
c   de opa_yveline.f
c 4.4.0.0 : addition de la possibilite d'une rotation rigide avec
c     conservation globale du moment angulaire, i.e. la vitesse
c     de rotation rigide varie au cours du temps
c 4.4.1.0 : correction de quelques bugs, addition de routines de convection
c 4.4.2.0 : amelioration de lim_zc, addition de ppcno10Fe
c 4.4.2.1 : correction d'un bug sans consequence dans etat_opal, etat_opal_eff
```

2.6.2 Fichier cesam.parametres

Les paramètres sont regroupés dans le fichier cesam.parametres, les quantités qui y figurent s'entendent en *valeurs maximales*, des tests sont prévus de façon à ce qu'elles ne puissent pas être dépassées:

```
c pn : nombre de points
c pnch : nombre de couches pour la comp. chim.
c pm_qs : ordre des splines pour la collocation modele statique
c pnchim : nombre d'elements chimiques + MA + Z
c pzi : nombre maximum de niveaux d'ionisation
c pne: nombre d'equa. diff. modele statique
```

```
c pn_atm : nombre de couches pour l'atmosphere
c pnzc : nombre de zones melangees
c pm_ch : ordre des splines d'interpolation de la comp. chim.
c pnreac : nombre de reactions thermonucleaires
c pne_atm : nombre d'equations de l'atmosphere

integer pn,pm_qs,pnchim,pzi,pnelem,pne,pn_atm,pnzc,pm_ch,pnreac,
1 pne_atm,pnch

integer pqt, pbp, pchimt, pchim

parameter (pn=1000, pnch=pn+pn/10, pm_qs=2, pnchim=22, pzi=26,
1  pnelem=pnchim+2,pne=7, pn_atm=100)
parameter (pnzc=4, pm_ch=4, pnreac=30, pne_atm=8)

c dimensions generales
c pqt : dimension du vecteur nodal pour l'integration
c des equation de l'equilibre quasi statique (vecteur qt)
c pbp : dimension de la base des vecteurs des variables dependantes
c soit ln Ptot, ln T, R**2, L**23, M**23, psi, ln Pgaz (vecteur bp)
c ou   ln Ptot, ln T, R   , L    , M    , psi, ln Pgaz (vecteur bp)
c pchimt : dimension du vecteur nodal pour l'interpolation
c de la composition chimique (vecteur chimt)
c pchim : dimension de la base des vecteurs de composition
c chimique generalisee (vecteur chim)

c REMARQUE: pour simplifier, pbp et pchim sont surdimensionnes

parameter (pqt=pn*pm_qs+2, pbp=pne*pqt,
     1 pchimt=pnch+2*(pnzc+1)*(pm_ch-1), pchim=pchimt*pnelem)
```

MA désigne le moment angulaire et Z l'abondance par unité de masse des éléments lourds; dans certains cas, ces deux quantités sont traitées comme des éléments chimiques et sont, à cette fin, considérées comme composantes du vecteur de composition chimique généralisée.

PB Modifier l'un de ces paramètres a pour conséquence un changement de dimensions; les fichiers binaires mon_modele_B.hom, mon_modele_B.rep, mon_modele_B.dat *etc...* , obtenus avant ces modification ne sont donc plus exploitables avec les nouveaux modules executables.

PB En cas de rotation solide, wrot est mis dans les dernières mémoires des tableaux surdimentionnés chim(pchim) au temps $t + dt$ et, chim_t(pchim)au temps t.

2.6.3 Fichiers COMMONs

1. atmosphere.common: ce COMMON regroupe les paramètres nécessaires pour la restitution de l'atmosphère.

```
c n_atm
: nb. couches dans atmosphere, initialise dans resout
c n23           : indice de la couche n*, initialise dans resout
c nea
: nb. equation dans atmosphere, initialise dans eqatm
c tau_min         : ep. opt. derniere couche de l'atm, init. dans tdetau
c tau_max         : ep. opt. 1-iere couche de l'atm, init. dans lit_nl
c rad=.true.      : loi t(tau) totalement radiative, init. dans tdetau
c beta_g,lambda_g : parametres pour la comparaison du SMC,
c     initialise dans lim_gong1

c COMMON /atmosphere/ pour CESAM

integer n_atm,n23,nea
real*8 tau_min,tau_max,beta_g,lambda_g
logical rad
common/atmosphere/tau_min,tau_max,beta_g,lambda_g,n_atm,n23,nea,rad
```

2. convection.common: ce COMMON regroupe les constantes nécessaire à la gestion des zones convectives.

```
c COMMON /convection/ pour CESAM

c loc_zc : precision sur localisation des ZC, init. dans resout
c alpha : l/H longueur de melange, lu dans lit_nl
c pturb=.true. : calcul avec press turbulente, init. dans resout
c mvt_dis=.true. : ajustement de la comp. chim. dans ZR selon le
c deplacement des  discon. aux limites ZR/ZC, init. dans resout
c ledoux=.true. : critere de Ledoux pour la convection, sinon
c Schwarzschild, lu dans lit_nl
c jpz=.true. : penetration convective de JpZh, lu dans lit_nl
c ovshts, ovshti : overshoot, undershoot, lu dans lit_nl
c cpturb : constante de la pression turbulente, lue dans lit_nl

real*8 loc_zc,alpha,ovshts,ovshti,cpturb
logical pturb,mvt_dis,ledoux,jpz
common/convection/loc_zc,alpha,ovshts,ovshti,cpturb,
1 pturb,mvt_dis,ledoux,jpz
```

3. ctephy.common: ce COMMON regroupe les constantes de physique *en cgs* et quelques constantes mathématiques, il est initialisé par l'appel, dans resout, à la routine ctes, argument de l'appel à cesam.

```
c COMMON/ctephy/ pour CESAM

c constantes physiques
```

```
c common initialise par la routine ctes ou on trouvera
c la signification des notations

real*8 pi,echarg,kbol,hpl,clight,eve,kih,kihe,kihe1,amu,me,
1 g,aradia,msol,lsol,rsol,secon6,ah,ah2,ahe3,ahe4,ali7,
2 abe7,ac12,ac13,an13,an14,an15,ao16,ao17,ao18,af19,ane20,
3 ane22,amg24,amg25,amg26,an,af18,ane21,ana23,
4 amg23,abe9,ali6,afe56
common /ctephy/
pi,echarg,kbol,hpl,clight,eve,kih,kihe,kihe1,amu,me,
1 g,aradia,msol,lsol,rsol,secon6,ah,ah2,ahe3,ahe4,ali7,
2 abe7,ac12,ac13,an13,an14,an15,ao16,ao17,ao18,af19,ane20,
3 ane22,amg24,amg25,amg26,an,af18,ane21,
4 ana23,amg23,abe9,ali6,afe56
```

pi : π,

echarg : charge de l'électron,

kbol : constante de Boltzman,

hpl : constante de Planck,

clight : célérité de la lumière,

eve : charge de l'électron,

kih : potentiel d'ionisation de l'hydrogène,

kihe : premier potentiel d'ionisation de l'hélium,

kihe1 : second potentiel d'ionisation de l'hélium,

amu : masse atomique unité,

me : masse de l'électron,

g : constante de la gravitation,

aradia : constante de la radiation,

msol : masse du soleil,

rsol : rayon du soleil,

lsol : luminosité du soleil,

secon6 : nombre de secondes dans 10^6 années tropiques,

ah : masse atomique de l'atome d'hydrogène,

ah2 : masse atomique de l'atome de deutérium,

ahe3 : masse atomique de l'atome d'hélium 3

ahe4 : masse atomique de l'atome d'hélium 4

ali7 : masse atomique de l'atome de lithium 7

abe7 : masse atomique de l'atome de béryllium 7

ac12 : masse atomique de l'atome de carbone 12

ac13 : masse atomique de l'atome de carbone 13

an14 : masse atomique de l'atome d'azote 14

an15 : masse atomique de l'atome d'azote 15

ao16 : masse atomique de l'atome d'oxygène 16 ($\equiv$ 16)

ao17 : masse atomique de l'atome d'oxygène 17

ao18 : masse atomique de l'atome d'oxygène 18

af19 : masse atomique de l'atome de fluor 19

ane20 : masse atomique de l'atome du néon 20

ane22 : masse atomique de l'atome de néon 22

amg24 : masse atomique de l'atome de magnésium 24

amg25 : masse atomique de l'atome de magnésium 25

amg26 : masse atomique de l'atome de magnésium 26

an : masse atomique du neutron

af18 : masse atomique de l'atome de fluor 18

ane21 : masse atomique de l'atome de néon 21

ana23 : masse atomique de l'atome de sodium 23

amg23 : masse atomique de l'atome de magnésium 23

abe9 : masse atomique de l'atome de béryllium 9

PB D'autres données atomiques sont initialisées dans le programme tab_reac.

4. evol_chim.common: indexiw ce COMMON regroupe des quantités relatives à l'intégration de la composition chimique:

```
c COMMON /evol_chim/ pour CESAM

c nucleo : masses atomiques des elements chimiques utilises,
c lues dans reac_tab, initialisees par tab_reac
c eventuellement modifie dans nuc (Ex), puis resout (Z et W)
c zi : charges des elements chimiques utilises,
c lues dans reac_tab, initialisees par tab_reac
c eventuellement modifie dans nuc (Ex), puis resout (Z et W)
c ab_min : abon. en dessous desquelles on ne contr\^ole plus
c la precision de l'integration temporelle, init. dans la
c routine utilisee pour les reactions nucleaires
c ab_ini : abondances initiales, initialise dans la
c routine utilisee pour les reactions nucleaires
c t_inf : temp. en dessous de laquelle les reaction nucleaires
c ne sont plus integrees, lues dans reac_tab, initialisees
c par tab_reac --> rq_reac
```

```
c x0,y0,z0 : abon./masse initiales en H, He et elements
c lourds, lus dans lit_nl (x0,y0), calcule dans resout (z0)
c precit : precision pour int. temporelle, init. dans resout
c nbelem : nombre d'elements chimiques, initialise dans resout
c nreac : nb. de reactions thermonucleaires, lu dans reac_tab,
c initialisees par tab_reac --> rq_reac
c nchim : nombre d'elements chimiques, lu dans reac_tab,
c initialisees par tab_reac --> rq_reac
c iw : indice de la vitesse angulaire, initialise dans resout
c iz : indice de l'element Z, initialise dans resout
c ihe4 : indice de He4 (celui de He3 est ihe4-1),
c initialise par tab_reac --> rq_reac
c ordre : ordre du schema d'integration des reactions thermo.,
c initialise dans resout
c d_turb : coefficient de diffusion turbulente, lu dans lit_nl
c diffusion=.true. : on tient compte de la diff. des elements
c chimiques, lu dans lit_nl
c f_rad=.true. : on tient compte des accelerations radiatives,
c lu dans lit_nl
c mitler=.true. : on utilise l'ecrantage de Mitler, sinon ecran
c faible, lu dans lit_nl
c nom_elem : noms des elements chimiques,lu dans reac_tab,
c initialisees par tab_reac --> rq_reac
c f_nuc : nom du fichier de reactions nucleaires eventuellement
 utilise par la routine nuc

real*8 nucleo(pnelem),zi(pnelem),ab_min(pnelem),ab_ini(pnelem),
1 t_inf,x0,y0,z0,precit
integer  nbelem,nreac,nchim,iw,iz,ihe4,ordre
character*4 nom_elem(pnelem)
character*50 f_nuc
logical diffusion,mitler
common/evol_chim/nucleo,zi,ab_min,ab_ini,t_inf,x0,y0,z0,precit,
1 nbelem,nreac,nchim,iw,iz,ihe4,ordre,diffusion,mitler,
2 nom_elem,f_nuc
```

5. modele.common: ce COMMON regroupe les paramètres généraux de l'évolution:

```
c COMMON /modele/ CESAM4

c mtot : masse initiale, lu dans lit_nl
c mdot : taux de perte de masse, lu en Msol/an dans lit_nl,
c mis en cgs dans resout
c dtmax : pas temporel maximal, initialise dans resout
c dtmin : pas temporel minimal, initialise dans resout
```

```
c dtlist : inter. de temps entre deux listes completes,
c lu dans lit_nl
c agemax : temps d'evolution, lu dans lit_nl
c dt0 : pas temporel initial, initialise dans resout
c precix : precision pour les var. d'espace, init. dans resout
c d_grav : variation maximale du TdS, initialise dans resout
c w_rot : vitesse angulaire initiale, lu dans lit_nl
c ctep,ctem,cter : constantes pour la fonction de repartition,
c initialise dans resout
c log_teff > 0 : arret si log Teff > log_teff, lu dans lit_nl
c x_stop : arret des que Xcentre < x_stop, lu dans lit_nl
c t_stop : arret des que Tcentre > t_stop, lu dans lit_nl
c ro_test : la variation maximale du TdS n'est controlee que si
c ro > ro_test, initialise dans resout
c c_iben : cste. de contraction PMS, lu sur clavier dans cesam
c ne : nombre d'equations pour l'equilibre quasi-statique,
c initialise dans resout
c m_qs : ordre des splines pour l'equilibre quasi-statique,
c initialise dans resout
c m_ch : ordre des splines pour la composition chimique,
c initialise dans resout
c mpr : m_qs + 1 , initialise dans resout
c der_num=.true. : jacobien numerique pour l'equi. quasi-stat.,
c lu dans lit_nl
c rot_solid=.true. : rotation solide, lu dans lit_nl
c z_cte=.true. : Z = cste. pour la determination de l'opacite,
c lu dans lit_nl
c kipp=.true. : approximation de Kippenhahn pour le calcul
c de l'energie gravifique, lu dans lit_nl
c en_masse=.true. : calcul en lagrangien, initialise dans resout
c lim_ro=.true. : limite externe sur la densite / la gravite,
c lu dans lit_nl
c modele : nom du modele, initialise dans resout
c f_opa(1).......f_opa(8) : noms de fich. d'opa, lu dans lit_nl
c f_eos(1).......f_eos(8) : noms de fich. d'EOS, lu dans lit_nl
c sub_phys(1), sub_phys(2) : noms des routines externes
c appelles par cesam, init. dans le programme d'appel
c nom_fich2 : nom generique des fich. init. dans resout
c arret : arret de l'evol. sur ZAMS, POST, etc.., lu dans lit_nl
c precision : type de modele, lu dans lit_nl

real*8 mtot,mdot,dtmax,dtmin,dtlist,agemax,dt0,ro_test,c_iben,
1 precix,d_grav,w_rot,ctep,ctem,cter,log_teff,x_stop,t_stop
integer ne,m_qs,m_ch,mpr
character*2  precision
character*4 arret
character*31 nom_fich2
```

```
character*50 model,f_opa(8),f_eos(8)
character*70 sub_phys(2)
logical der_num,rot_solid,z_cte,kipp,en_masse,lim_ro
common/modele/mtot,mdot,dtmax,dtmin,dtlist,agemax,dt0,ro_test,c_iben,
1 precix,d_grav,w_rot,ctep,ctem,cter,log_teff,x_stop,t_stop,
2 ne,m_qs,m_ch,mpr,
3 der_num,rot_solid,z_cte,kipp,en_masse,lim_ro,
4 sub_phys,model,f_opa,f_eos,nom_fich2,
5 arret,precision
```

PB D'autres COMMONs, non décrits, sont utilisés dans des routines d'origine externe *e.g.* calcul de l'équation d'état OPAL.

2.7 Fichiers d'entrées/sorties et de données

Comme précédemment, on utilise le nom générique "mon_modele" pour identifier les fichiers relatifs au modèle calculé.

PB Un fichier dont le nom comporte "_B" avant l'extension est un fichier **binaire**.

1. Fichiers d'entrée:

   - mon_modele.don: fichier ASCII des paramètres du modèle à calculer.
   - m010.dat, m020.dat *etc...* , pms.dat: fichiers ASCII du sous-directory DATA de la source contenant des modèles initiaux de séquence principale d'âge zéro homogène et pré-séquence principale pour diverses masses. Ces fichiers servent à l'initialisation du calcul *cf.* § 2.2.1.1 (Page 29). De tels fichiers ASCII peuvent être obtenus sur l'écran pour chaque pas temporel, pour ce faire changer dans cesam la valeur de la variable logique llist de llist=.false. en llist=.true.

2. Fichiers d'entrée et/ou de sortie: chacun de ces fichiers peut servir pour reprendre ou réinitialiser une évolution:

   - mon_modele_B.pms: fichier BINAIRE du modèle initial de pré-sequence principale. Il est conseillé de créer et conserver un modèle initial de PMS de $1M_{\odot}$, fichier qui servira par la suite à initialiser des PMS pour toute masse.

   PB Le fichier ASCII pms.dat sert à obtenir un modèle homogène de pré-séquence principale. Il est proche d'un polytrope totalement convectif d'indice 3; il est utilisable pour toute masse.

   - mon_modele_B.zams: fichier BINAIRE du modèle de ZAMS non homogène; il est formé au cours d'une évolution PMS dès que 50% de l'énergie libérée est d'origine thermonucléaire.

PB `Les conditions de formation d'un tel fichier peuvent parfois se trouver satisfaites lorsque l'évolution est initialisée sur la ZAMS, dans ce cas il conviendra d'interpréter le sens physique du modèle avec précautions.`

- mon_modele_B.hom: fichier BINAIRE du modèle d'âge 0 homogène.
- mon_modele_B.rep: fichier BINAIRE du point de reprise; ce fichier contient le dernier modèle calculé, l'avant dernier lorsque l'évolution a été poursuivie jusqu'à l'âge agemax prévu. En changeant dans cesam la valeur de la variable logique `statut` de `statut=.false.` en `statut=.true.`, il est possible de conserver jusqu'à 90 fichiers de reprise dont les noms seront:

mon_modele_10_B.rep, mon_modele_11_B.rep ... mon_modele_99_B.rep

- mon_modele_B.post: fichier BINAIRE du modèle au début de l'évolution post-séquence principale; il est formé au cours d'une évolution dès que l'hydrogène a disparu du centre.
- mon_modele_B.cohe: fichier BINAIRE du modèle au début de la combustion de l'helium; il est formé au cours d'une évolution dès que la température au centre dépasse 10^8 K.
- mon_modele_B.coca: fichier BINAIRE du modèle au début de la combustion du carbone; il est formé au cours d'une évolution dès que la température au centre dépasse $2.6\,10^8$ K.
- mon_modele_B.dat: fichier BINAIRE du modèle formé lorsque l'évolution a été poursuivie jusqu'à ce que soit atteint ou bien (pour plus de détail voir § 2 (Page 47):
  (a) l'âge agemax prévu dans le fichier mon_modele.don;
  (b) la température effective prévue dans le fichier mon_modele.don;
  (c) l'abondance centrale en hydrogène prévue dans le fichier mon_modele.don;
  (d) la ZAMS, la fin de la séquence principale, l'amorçage de la combustion de l'hélium, du carbone suivant la valeur du paramètre d'entrée `arret` ZAMS, POST, COHE, COCA de la NAMELIST `nl_temps` du fichier de données mon_modèle.don.

3. Fichiers de sortie:

- mon_modele.lis: fichier ASCII du listing.
- mon_modele.HR: fichier ASCII pour le tracé d'un diagramme HR, de l'évolution des zones convectives et de la composition chimique.
- mon_modele.osc: fichier ASCII pour calcul des oscillations.
- mon_modele_B.atm: fichier BINAIRE de l'atmosphère reconstituée correspondant au dernier modèle calculé.

4. Fichiers de données:

- f_eos: tableau de 8 chaines d'au plus 50 caractères, *cf.* § 5 (Page 59), pour les noms de fichiers de données pour l'équation d'état.
- f_opa: tableau de 8 chaines d'au plus 50 caractères, *cf.* § 5 (Page 59), pour des fichiers de données pour les opacité .
- f_nuc: chaine d'au plus 50 caractères, *cf.* § 5 (Page 59), pour des fichiers de données pour les réactions thermonucléaires.
- ppcno***.data, nacre***.data: fichiers BINAIREs de réactions thermonucléaires crées par le programme tab_reac.

5. FORMATs des fichiers en ASCII:

- mon_modele.don: Le format du fichier ASCII des paramètres du modèle à calculer est décrit au § 2.5.1 (Page 43).
- m010.dat, m020.dat *etc...* , pms.dat: Dans ces fichiers ASCII de modèles d'initialisation chaque ligne correspond à une couche, on trouve en format libre: $1 - m/M_\star$, P, T, $r/R_\odot$, $l/L_\odot$. La première couche est la surface, la dernière le centre; lors de la lecture, CESAM détecte le nombre total de couches qu'il contient.
- mon_modele.lis: Le fichier ASCII du listing n'a pas la vocation d'être relu son format n'est donc pas décrit.

PB `Dans ce fichier certaines quantités prévues ne sont pas calculées si les routines qui sont supposées le faire font défaut` *e.g.* `le calcul de la dégénerescence avec l'équation d'état OPAL.`

- mon_modele.HR: Fichier ASCII pour le tracé d'un diagramme HR et des zones convectives. Pour chaque modèle, sur une première ligne est indiqué: l'âge en 10^6 ans, le nombre d'éléments du vecteur de composition chimique généralisé, *cf.* § 4.1.12.1 (Page 115), le nombre de limites ZR/ZC et, pour chacune d'entre elles, la mention "T" ou "F" s'il s'agit, ou non, du début d'une ZC; suivant le nombre de limites une ou plusieurs lignes sont nécessaires pour indiquer $\log T_{eff}$, $\log L/L_\odot$, $\log R/R_\odot$ et, pour chaque limite, $M_\star/M_\odot$, $(M_\star - m)/M_\odot$, $r/R_\odot$, $r_{\rm ov}/R_\odot$, $r_{\rm ov}$ étant le rayon de la limite étendue par overshooting. Dans les cas particuliers on utilise les conventions *arbitraires* suivantes:

  - modèle totalement convectif: 1 (seule) limite "F" placée au centre ($r/R_\odot = 0$),
  - modèle totalement radiatif: 0 (aucune) limite "F" placée en -100 ($r/R_\odot = -100$).

  Viennent ensuite les noms de éléments chimiques et leur abondances, par unité de masse, au centre et à la surface. S'il n'est pas imposé d'overshoot les valeurs $r_{\rm ov}$ des rayons des limites étendues sont fixées à -100.

  Exemple:

```
 0.000000000000000D+00 11  1 F
 3.626444D+00 2.279405D+00 1.409565D+00 2.000000D+00 0.000000D+00 2.567810D+01
-1.000000D+02
```

```
 H1  6.96708D-01 6.96708D-01
He3  8.94149D-05 8.94149D-05
He4  2.83545D-01 2.83545D-01
C12  3.38588D-03 3.38588D-03
C13  4.07665D-05 4.07665D-05
N14  1.04699D-03 1.04699D-03
N15  4.13415D-06 4.13415D-06
O16  9.53040D-03 9.53040D-03
O17  3.86346D-06 3.86346D-06
Fe56 1.24539D-03 1.24539D-03
 Ex  4.40002D-03 4.40002D-03
 1.01082751514930 4D-03 11  1 F
 3.630708D+00 2.217612D+00 1.370192D+00 2.000000D+00 0.000000D+00 2.345272D+01
-1.000000D+02
 H1  6.96708D-01 6.96708D-01
He3  8.94149D-05 8.94149D-05
He4  2.83545D-01 2.83545D-01
C12  3.38588D-03 3.38588D-03

.........................

O17  4.19556D-06 1.95567D-07
Fe56 1.24540D-03 9.35997D-05
 Ex  4.40008D-03 3.31192D-04
 5.878369894837250D+00 11  3 F T F
 3.917085D+00 1.200736D+00 2.896275D-01 2.000000D+00 1.695133D+00 2.300742D-01
-1.000000D+02 6.767105D-09 1.928841D+00-1.000000D+02 2.394701D-09 1.934984D+00
-1.000000D+02
 H1  6.96343D-01 9.81140D-01
He3  1.48941D-05 3.39057D-03
He4  2.83682D-01 1.06574D-04
C12  1.40677D-03 2.81623D-05
C13  4.03647D-04 3.17284D-06
N14  2.96953D-03 5.18858D-06
N15  1.28274D-07 1.59295D-08
O16  9.53005D-03 1.60057D-29
O17  4.43811D-06 1.70106D-29


.........................
```

- mon_modele.osc: Fichier ASCII pour le calcul des oscillations, les unités sont en c.g.s. Pour son exploitation, le fichier mon_modele.osc peut être lu par le programme lit_osc du sous-directory `EXPLOIT` de la source. Ce fichier est créer à l'issue d'une évolution, par cesam ou par le programme for037 du sous-directory `EXPLOIT` de la source *cf.* § 2.8.2 (Page 67). Pour l'exemple ci-dessous:
  - ligne 1: nom et date du modèle,

    PB `Pour une raison inconnue, il arrive parfois que cette ligne soit "repliée" la date apparaissant alors à la ligne suivante, le fichier est alors illisible avec lit_osc; il convient de "déplier" cette ligne ''à la main'' en remettant la date à la fin de la première ligne.`
  - lignes 2 – 4: identifications diverses,
  - ligne 5: nombre et noms des éléments du vecteur de composition chimique généralisée *cf.* § 4.1.12.1 (Page 115),
  - ligne 6: nombre de couches: 618, nombre de constantes: 15, nombre de variables: 22, numéro de version: 4, dimension du vecteur de

composition chimique généralisée: 10, indices du moment angulaire: -100, de l'abondance en éléments lourds: -100 dans le vecteur de composition chimique généralisée (la valeur de -100 indique que ces composantes ne sont pas utilisées),

Les quantités qui figurent ensuite sont celles à l'issue de l'évolution; elles sont écrites avec le format 1P5D16.9. Viennent d'abord 3 lignes où sont regroupés des paramètres globaux:

- ligne 7: masse totale $M_\star$, rayon $R_\star$, luminosité $L_\star$, abondance initiale en éléments lourds Z, abondance initiale en hydrogène X,
- ligne 8: longueur de mélange α, premier paramètre convection φ, second paramètre de convection ξ, abondance en surface de ^{1}H, abondance en surface de ^{4}He,
- ligne 9: $\frac{R^2}{P}\frac{\partial^2 P}{\partial r^2}$ au centre, $\frac{R^2}{\rho}\frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2}$ au centre, temps d'évolution en million d'années, rapport du volume de l'élément convectif à sa surface, vitesse angulaire initiale.

Le modèle est ensuite écrit de la surface vers le centre, en incluant l'atmosphère, chaque couche utilisant un nombre de lignes qui est fonction de la dimension du vecteur de composition chimique généralisée:

- ligne $n+0$: rayon r, logarithme de la masse $\ln m/M_\star$ (-10^{+38} au centre), température T, pression P, densité ρ,
- ligne $n+1$: gradient réel ∇, luminosité L, opacité Rosseland κ, énergie thermonucléaire ϵ, grand gamma Γ_1,
- ligne $n+2$: gradient adiabatique ∇_{ad}, δ, c_p, μ poids moléculaire moyen, $\frac{1}{\Gamma_1}\frac{\partial \ln P}{\partial \ln r} - \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln r}$,
- ligne $n+3$: vitesse angulaire Ω, $\frac{\partial \ln \kappa}{\partial \ln T}$, $\frac{\partial \ln \kappa}{\partial \ln \rho}$, $\frac{\partial \epsilon}{\partial \ln T}$, $\frac{\partial \epsilon}{\partial \ln \rho}$.
- lignes $n+4$, $n+5$, éventuellement $n+6$: $1 + P_{\rm tur}/P$, $\nabla_{\rm rad}$, valeurs des composantes du vecteur de composition chimique généralisée, *par unité de masse pour les espèces chimiques.*

Exemple:

```
m  90X759a170_B.dat du 21-May-98 - P. Morel, Observatoire de Nice
fichier pour le calcul des oscillations
 fichier: M15d.osc
methode: CESAM 4.0.0.0 lagr colloc 2 3 lm diffus
10  H1  He3  He4  C12  C13  N14  N15  O16  O17   Ex
      618        15        22         4        10      -100      -100
1.790190000000D+33 9.510553184567D+10 1.295012760741D+34 6.000000000000D-04 7.594000000000D-01
1.700000000000D+00 2.250000000000D+00 6.172839552164D-03 8.785726963789D-01 1.210103115956D-01
-1.819597480481D+03-1.807218271461D+03 8.231863460047D+03 2.222222238779D-01 0.000000000000D+00
9.527905458596D+10 2.189446401717D-10 5.431286613381D+03 1.906770773801D+02 4.622298811888D-10
1.002326479679D-04 1.295012760741D+34 6.926016524251D-03 0.000000000000D+00 1.523125747975D+00
3.349849865949D-01 1.061467075115D+00 2.406683232688D+08 9.534635039506D-04 1.080332801618D+03
0.000000000000D+00 1.332518232961D+01 3.692882129516D-01 0.000000000000D+00 0.000000000000D+00
1.000000000000D+00 4.329332993635D-05 8.785726963789D-01 4.740985508326D-05 1.210103115956D-01
6.137828835531D-05 7.074889633166D-07 1.934262434015D-05 7.375138669293D-08 1.787656987704D-04
7.037617406949D-08 1.092439424674D-04
9.526234664913D+10 2.182922731226D-10 5.431717232048D+03 3.254012480903D+02 7.927351405092D-10
2.102024682005D-04 1.295012760741D+34 8.531469921014D-03 0.000000000000D+00 1.551470610531D+00
3.491594072419D-01 1.038504647088D+00 2.247701564675D+08 7.534697844817D-04 1.107010766197D+03
0.000000000000D+00 1.322714165483D+01 3.972822986427D-01 0.000000000000D+00 0.000000000000D+00
1.000000000000D+00 9.097966493889D-05 8.785726963789D-01 4.740985508326D-05 1.210103115956D-01
6.137828835531D-05 7.074889633166D-07 1.934262434015D-05 7.375138669293D-08 1.787656987704D-04
7.037617406949D-08 1.092439424674D-04
```

```
9.524753667386D+10 2.173334845187D-10 5.432487961842D+03 5.235913384646D+02 1.278849283106D-09
4.086209309729D-04 1.295012760741D+34 1.034774944260D-02 0.000000000000D+00 1.573017652704D+00

.....................................

3.977782049935D-01 8.494420189573D-01 1.426440140847D+08 1.998615819144D+00 1.426105227671D-02
0.000000000000D+00-1.996708772841D+00 4.763851070241D-01 2.856818921067D+01 2.219388038805D+00
1.000000000000D+00 2.693102675767D-02 4.478642159247D-04 5.025728492220D-12 9.989279246923D-01
3.357351532506D-06 1.042108126043D-06 4.106887272086D-04 1.610088490397D-08 2.086910780522D-05
8.374781139507D-07 1.874002131068D-04
0.000000000000D+00-1.000000000000D+38 2.306447535184D+07 1.712232322815D+18 1.110124546544D+03
2.435661261014D-02 0.000000000000D+00 6.801957195041D-01 1.523551215428D+00 1.661307893233D+00
3.977851290586D-01 8.468629086314D-01 1.423678655556D+08 1.998706886125D+00 0.000000000000D+00
0.000000000000D+00-2.005415312183D+00 4.782738001619D-01 2.361874562203D+01 1.839379968546D+00
1.000000000000D+00 2.435661261014D-02 3.567771430869D-04 5.025733366307D-12 9.990189983710D-01
3.366186934023D-06 1.044831528246D-06 4.107172655577D-04 1.609754565635D-08 2.083864694455D-05
8.240338498350D-07 1.874174185624D-04
```

PB Il faut intervenir dans la routine cesam pour écrire soit le poids moléculaire moyen par particule libre soit le poids moléculaire moyen par électron libre.

PB Les taux d'ionisation sont recalculés par la subroutine saha *cf.* § 4.1.12.4.1 (Page 118), independemment de l'équation d'état utilisée. Ils ne sont donc qu'approximatifs.

PB La quantité $A = \frac{1}{\Gamma_1}\frac{\partial \ln P}{\partial \ln r} - \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln r}$ est parfois sujette à de fortes oscillations, voir § 4.1.3.2 (Page 103) la façon dont CESAM calcule cette quantité.

PB Il est fortement conseillé de vérifier dans le sous-programme cesam que les quantités écrites dans le fichier mon_modele.osc correspondent bien à ce qui est décrit ci-dessus.

2.8 Routines, programmes et procédures d'exploitation

Les programmes de tabulation de données, comme d'ailleurs les routines de lecture et d'interpolation sont *data dependent*, ils ne peuvent pas être universels. L'utilisateur désirant utiliser d'autres données que celles de la version standard de CESAM devra créer ses propres programmes ou routines, par exemple en adaptant à ses conditions particulières celles de la source.

PB Les programmes de dessin utilisent le logiciel PGPLOT, au cas où ce logiciel ne serait pas disponible, utiliser l'argument no_des au lieu de des dans l'appel à cesam et, avant compilation, dans le sous programme cesam, mettre un "c" de commentaire devant l'instruction call pgend.

2.8.1 Routines

On trouvera ces routines dans le directory CESAM de la source de CESAM.

- intertot: reconstitution en position, ou en masse, ou en rayon, de la solution.

- fich_osc: constitution d'un fichier de même structure que mon_modele.osc pour des points intérieurs au modèle, incluant éventuellement l'atmosphère reconstituée, points définis soit en en position, en masse, ou en rayon. L'exécution se déroule de façon interactive; les points en masse, $m/M_\star$, ou en rayon, $r/R_\star$ que l'on désire introduire, sont lus dans un fichier ASCII dont on s'inquiert du nom au cours de l'exécution du programme for037 décrit au § 2.8.2 (Page 67).

PB Dans le sous-programme fich_osc on s'efforce de localiser chaque limite entre zone convective et zone radiative avec une définition de l'ordre de quelques 10^{-7}, et 2 points séparés par une distance de l'ordre du mètre *sic!*, sont disposés de part et d'autre de chaque limite; dans les cas où ces limites sont le siège de discontinuités assez marquées il arrive que des quantités faisant intervenir des valeurs équivalentes à des dérivées *e.g.* dérivée seconde pour la fréquence de Brunt Väissälä, de fonctions discontinues *e.g.* la composition chimique aux limites zone radiative / zone convective, soient déterminées de façon inexploitable; dans le fichier ***.osc ainsi créé, il convient alors de retirer ''à la main'' les points jugés défectueux, *cf.* § 2.3 (Page 31).

- read_osc: relecture des fichiers du type mon_modele.osc.

2.8.2 Programmes

On trouvera ces programmes dans le sous-directory EXPLOIT de la source de CESAM.

- opal_ascii_bin: transformation d'une table ASCII calculée avec le package OPAL en une table en binaire pour la routine d'équation d'état etat_opal. Fait partie du package etat_opal *cf.* § 4.2 (Page 187).

- calib_zsxpr: calibration pour modèles solaires: lit les fichiers mon_modele.osc et mon_modele.don, détermine les nouvelles valeurs des paramètres solaires en vue de la calibration et reforme le nouveau fichier mon_modele.don. calib ajuste les paramètres libres de façon à ce que le rayon de l'étoile *i.e.* le rayon au niveau où la température égale la température effective, soit égal à $1R_\odot$.

- calib_vis: calibration pour modèles solaires: lit les fichiers mon_modele.osc et mon_modele.don, détermine les nouvelles valeurs des paramètres solaires en vue de la calibration et reforme le nouveau fichier mon_modele.don. calib_vis ajuste les paramètres libres de façon à ce que le rayon observable de l'étoile *i.e.* le rayon au niveau où l'épaisseur optique sur la ligne de visée est $\tau_{\rm v} = 2/3$ ou $\tau_{\rm v} = 1$, soit égal à $1R_\odot$.

- for037: construction d'un fichier de type mon_modele.osc et de nom mon_modele_nnnn.osc, avec reconstitution de la solution en position, masse, ou rayon, pour un modèle avec ou sans atmosphère; nnnn est le nombre de couches du fichier.

  Exemple de fichier de rayons:

```
   1   1.00074282092846
   2   1.00071280564769
   3   1.00068270425525
   4   1.00065236577711
   5   1.00062178411801
   6   1.00059095928822
   7   1.00055989115625
   8   1.00052857909087

. . . . . .

2435  2.448944943064284E-003
2436  2.372408543451675E-003
2437  2.295878215301406E-003
```

PB `Les extensions obtenues à l'aide de ce programme sont versatiles, en particulier la fréquence de Brunt-Väissälä. Dans la mesure du possible il est préférable de calculer le modèle destiné à être exploité avec le nombre de couches désiré,` *cf.* § 2.3 (Page 31), § 1 (Page 46).

- tab_reac: tabulation des réactions thermonucléaires.
- test_nuc: programme pouvant servir de cannevas pour tester une routine de réactions nucléaires de type nuc *cf.* § 4.1.27.4.10 (Page 164).
- des_osc: dessin, avec possibilité de zoom, des principales variables d'un modèle à partir d'un fichier du type mon_modele.osc.
- des_abon_r: dessine la composition chimique en fonction du rayon à partir d'un fichier du type mon_modele.osc.
- des_abon_m: dessine la composition chimique en fonction de la masse à partir d'un fichier du type mon_modele.osc.
- des_hr: dessine un diagramme HR à partir de fichiers mon_modele.HR.
- des_ZCr: dessine un diagramme de Kippenhahn pour le rayon à partir d'un fichier mon_modele.HR.
- des_ZCm: dessine un diagramme de Kippenhahn pour la masse à partir d'un fichier mon_modele.HR.
- lit_osc: lecture d'un fichier du type mon_modele.osc.
- fmttobin: permet de transformer en binaire la table `opa_yveline_ASCII.dat`, utilisée par la routine opa_yveline.

- fmttob: permet de transformer en binaire les tables d'équation d'état en ASCII mhd1.tab...mhd8.tab utilisées par la routine etat_mhd. Ces tables, distribuées par W. Däppen sur le serveur anonyme usc.edu, répertoire `pub/astro-physics/mhd-oc-tau/wd-evo` *cf.* § 4.2.3 (Page 188), ont été reproduites dans le sous directory `DATA` de la source de CESAM.

PB `Certains des programmes de test et d'exploitation peuvent ne pas avoir été mis à jour des dernières modifications apportées à la source. Il convient à l'utilisateur d'effectuer ces mises à jour.`

2.8.3 Procédures

On trouvera ces procédures dans le directory `EXPLOIT` de la source de CESAM.

PB `Le formalisme des procédures dépend du shell d'UNIX utilisé.`

- Calib_pms: permet de calibrer, en incluant l'évolution pré-séquence principale, un modèle solaire sans manipulation explicite des fichiers et programmes, puis de former un fichier d'oscillation où 3 points intermédiaires sont insérés entre deux points de la grille:

```
#* Calib_pms mon_modele
#* script pour calibrer en zsx=.0245 le modele de nom : mon_modele
#* en incluant la pre sequence principale
#* puis d'etendre le modele par le programme for037.f
#* le fichier de donnee mon_modele.don doit etre dans l'environnement
#* le Z/X=0.0245 est defini dans le programme calib.f
#* les modules executables soleil.out calib.out et for037.out
#* doivent se trouver dans l'environnement

#* Auteur: P. Morel, Departement J.D. Cassini, O.C.A.,
Observatoire de Nice

#* on place 1 dans le fichier .tempo
#* on calcule une evolution
#* on calibre on remet 0/1 si calibre oui/non
#* on continue tant qu'il y a 1 dans .tempo

unalias cp
unalias mv
unalias rm

echo 'calibration du modele' $1

rm $1.tempo
rm $1.calib

echo 'creation du fichier' $1'.tempo'
```

```
cat << mark > $1.tempo
1
mark

echo 'creation du fichier' $1'.calib'
cat << mark > $1.calib
mark

while (`cat $1.tempo` != 0)
#* tant qu'il n'y a pas 0 dans .tempo

echo 'execution de soleil.out'
soleil.out << mark
3 #modele de PMS
o
soleil_B.pms
2.d-2
$1
n #dessin
o #ok?
o #ok?
o #fichier .osc
mark

if ( $status != 0 )exit #* on sort s'il y a eu Pb

calib.out << mark >> $1.calib #* calibration
$1
mark

end

if ( $status != 0 )exit #* on sort s'il y a eu Pb

echo 'execution de for037'
for037.out << mark
$1
o
o
o
o
o
3
o
mark

if ( $status != 0 )exit #* on sort s'il y a eu Pb
```

```
rm $1.tempo
rm $1_B.zams
rm $1_B.rep
rm $1_B.pms
rm $1.HR
rm $1.osc
#*
```

- Calib_zams: permet de calibrer, à partir de la ZAMS homogène, un modèle solaire sans manipulation explicite des fichiers et programmes, puis de former un fichier d'oscillation où 3 points sont insérés entre deux points de la grille, avec un point double aux limites de chaque zone convective, éventuellement étendue:

```
#* Calib_zams mon_modele
#* script pour calibrer en zsx=.0245 le modele de nom : mon_modele
#* en partant de la ZAMS
#* le fichier de donnee mon_modele.don doit etre dans l'environnement
#* le Z/X=0.0245 est defini dans le programme calib.f
#* les modules executables soleil.out calib.out et for037.out
#* doivent se trouver dans l'environnement

#* Auteur: P. Morel, Departement J.D. Cassini, O.C.A.,
Observatoire de Nice

#* on place 1 dans le fichier .tempo
#* on calcule une evolution
#* on calibre on remet 0/1 si calibre oui/non
#* on continue tant qu'il y a 1 dans .tempo

unalias cp
unalias mv
unalias rm

echo 'calibration du modele' $1

rm $1.tempo
rm $1.calib

echo 'creation du fichier' $1'.tempo'
cat << mark > $1.tempo
1
mark

echo 'creation du fichier' $1'.calib'
```

```
cat << mark > $1.calib
mark

while (`cat $1.tempo` != 0)
#* tant qu'il n'y a pas 0 dans .tempo

echo 'execution de soleil.out'
soleil.out << mark
2 #modele repris
o
$1_B.hom
$1
n #dessin
o #pas temporel
o #fichier .osc
mark

if ( $status != 0 )exit #* on sort s'il y a eu Pb

calib.out << mark >> $1.calib #* calibration
$1
mark

end

if ( $status != 0 )exit #* on sort s'il y a eu Pb

echo 'execution de for037'
for037.out << mark
$1
o
o
o
o
o
3
o
mark

if ( $status != 0 )exit #* on sort s'il y a eu Pb

rm $1.tempo
rm $1_B.zams
rm $1_B.rep
rm $1_B.pms
rm $1.HR
rm $1.osc
```

```
#*
```

2.8.4 Calibration d'un modèle solaire

On décrit l'utilisation de la procédure Calib_zams qui permet d'effectuer la calibration d'un soleil puis de créer un fichier pour oscillations en incorporant 3 points intermédiaires entre deux points de la grille. En prenant pour nom générique des fichiers mon_soleil, on procède aux opérations suivantes:

1. Créer un fichier de données de nom: mon_soleil.don:

```
$NL_ESPACE
MTOT = 1.
MDOT = 0.0
DER_NUM = F
PRECISION ='sa'
TAU_MAX = 10.0
lim_ro=t
$END
$NL_TEMPS
AGEMAX = 4520.
DTLIST = 100000000.0
X_STOP = -1.0
LOG_TEFF = 10.0
T_STOP = 260000000.0
ARRET ='else'
$END
$NL_CHIM
X0 = 0.707
Y0 = 0.275
ZSX0   = 0.
Z_CTE = F
D_TURB=0.
DIFFUSION = f
F_RAD=F
MITLER=t
$END
$NL_ROT
W_ROT = 0.0
ROT_SOLID = T
$END
$NL_CONV
ALPHA = 1.7
CPTURB = 0.0
OVSHTS = 0.0
OVSHTI = 0.0
JPZ = F
```

```
 LEDOUX = F
 $END
 $NL_ETAT
 F_EOS ='                                                ',
 '2                                                      ',
 '3                                                      ',
 '4                                                      ',
 '5                                                      ',
 '6                                                      ',
 '7                                                      ',
 '8                                                      '
 $END
 $NL_OPA
 F_OPA ='                                                ',
 '2                                                      ',
 '3                                                      ',
 '4                                                      ',
 '5                                                      ',
 '6                                                      ',
 '7                                                      ',
 '8                                                      '
 $END
 $END
 $NL_NUC
 F_NUC   = '~/SUN_DATA/nacre12e.data                                '
 $END
```

ce fichier sera modifié au cours du processus de calibration.

2. Créer le programme d'appel à cesam dans un fichier de nom libre, par exemple: soleil.f:

```
program soleil

implicit none

include 'modele.common'

external etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e,
1 lim_atm,hopf,diffm_mp,difft_cte,perte_ext,ctes,des_r

sub_phys(1)='etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e'
sub_phys(2)='lim_atm,hopf,diffm_mp,difft_cte,perte_ext,ctes,des_r'

call cesam(etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e,
1 lim_atm,hopf,diffm_mp,difft_cte,perte_ext,ctes,des_r)
```

```
stop

end
```

PB Au cas où le logiciel de dessin PGPLOT n'est pas disponible, utiliser l'argument no_des, au lieu de des_r, et, avant compilation, dans le sous programme cesam, mettre un "c" de commentaire devant l'instruction call pgend.

PB En partant de la ZAMS homogène il faut bien se garder d'utiliser une routine de réactions nucléaires *e.g.* ppcno13e, avec les abondances cosmiques de ^{7}Li et ^{7}Be qui sont incompatibles avec le modèle de séquence principale d'âge zéro homogène.

3. Former le module exécutable en utilisant la procédure exe: `exe soleil`. En profiter pour construire à partir, ou bien du modèle d'initialisation du fichier ASCII m010.dat, ou bien d'un modèle en binaire déjà existant, le modèle séquence principale d'âge zéro homogène: mon_soleil.hom qui sera utilisé par la suite dans la procédure.

PB Penser à rendre les procédures exécutables.

4. Créer[12] le programme d'extension des modèles: for037_soleil:

```
program for037_soleil

c formation du fichier pour le calcul des oscillations
c fait appel a une routine fich_osc dont
c les arguments sont les noms des routines utilisees
c pour le calcul du modele. Ils doivent etre adaptes
c pour chaque cas en sortie on obtient le fichier
c pour le calcul des oscillations

c il y a trois possibilites:
c 1 - insertion d'un nombre fixe de couches entre
c     deux couches du modele
c 2 - interpolation en masse/Mtot
c 3 - interpolation en rayon/Rsol

c pour les cas 2 et 3 les points d'interpolation doivent
c se trouver en real*8 dans un fichier ASCII en
c valeurs decroissantes i.e. surface-->centre
c en format libre, pour chaque point : indice, R/Rsol ou M/Mtot
```

[12] Il n'est pas nécessaire d'étendre les modèles quand on utilise le niveau de précision "sa", *cf.* § 2.5.1 (Page 43).

```
c lors de l'execution, le programme
c demande qu'on lui fixe les parametres dont il a besoin
c en principe, il faut utiliser la physique qui a servi, dans
c cesam, pour construire le modele

c Auteur: P. Morel, Departement J.D. Cassini, O.C.A.,
c Observatoire de Nice
c CESAM4

implicit none

external etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e,
1 lim_atm,hopf,ctes
call fich_osc(etat_eff,opa_int_zsx,conv_jmj,ppcno9e,
1 lim_atm,hopf,ctes)

stop

end
```

5. former le module exécutable en utilisant la procédure exe: exe for037_soleil.

6. Enfin, lancer la calibration par Calib_zams mon_soleil. Le déroulement de la calibration peut être contrôlé dans le fichier ASCII mon_soleil.calib.

   On obtient un fichier de nom mon_soleil_nnnn.osc, le nombre nnnn est le nombre total de couches du modèle étendu.

2.9 Exemple d'application: un diagramme HR

Le diagramme HR a été tracé avec le programme des_hr en utilisant les anciennes opacités LAOL[13] qui permettent de dépasser 10^8K; il ne faut pas attacher de sens physique aux phases ultimes atteintes où l'hélium brûle en couches, le cycle du carbone n'étant pas implanté.

[13] non disponibles dans la version standard.

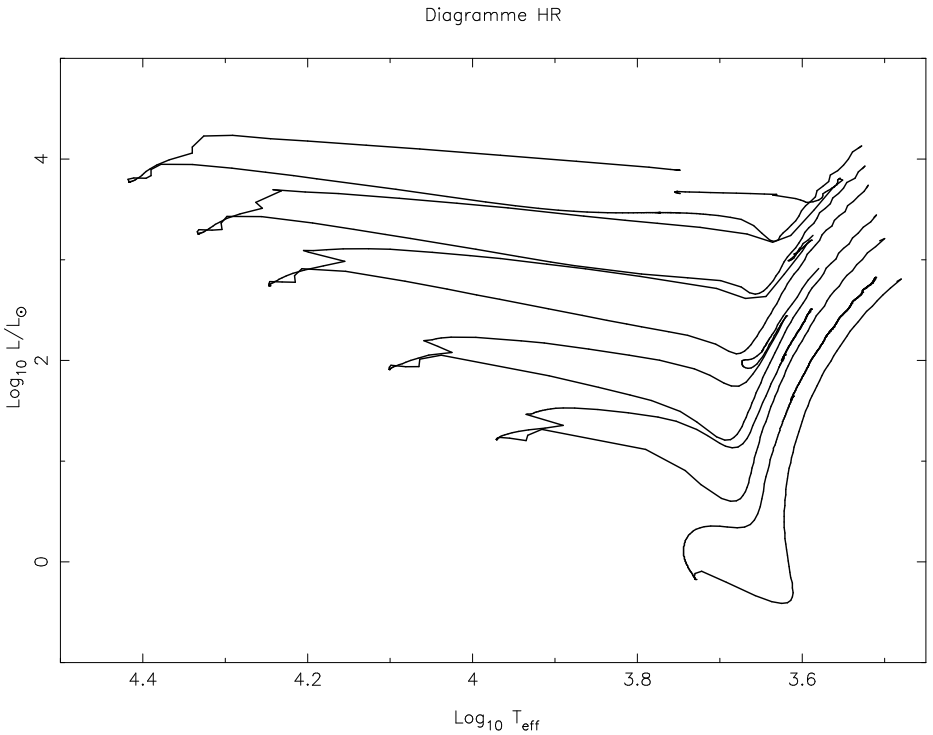


Figure 2.1: Diagramme HR. Ces tracés évolutifs pour des étoiles de masses 1, 2, 3, 5, 7, 10 $M\odot$ ont été obtenus par le programme décrit § 2.4.2.1 (Page 39) et § 2.5.2.1 (Page 50). On remarque que les séquences principales et les branches horizontales sont bien décrites, la faible précision requise est à l'origine des hésitations observées pour les PMS et les branches des géantes. Les évolutions ont été poursuivies au delà du début du cycle 3α bien que les réactions du carbone soient incomplètes, il ne faut donc pas donner de sens physique aux diagrammes obtenus à partir du milieu des branches des géantes. Ce diagramme illustre la robustesse du code qui, avec de grands pas temporels, permet de sauter des parties entières du tracé, avec la super précision le tracé est plus lisse ainsi qu'il est illustré Fig. 2.2 (Page 78).

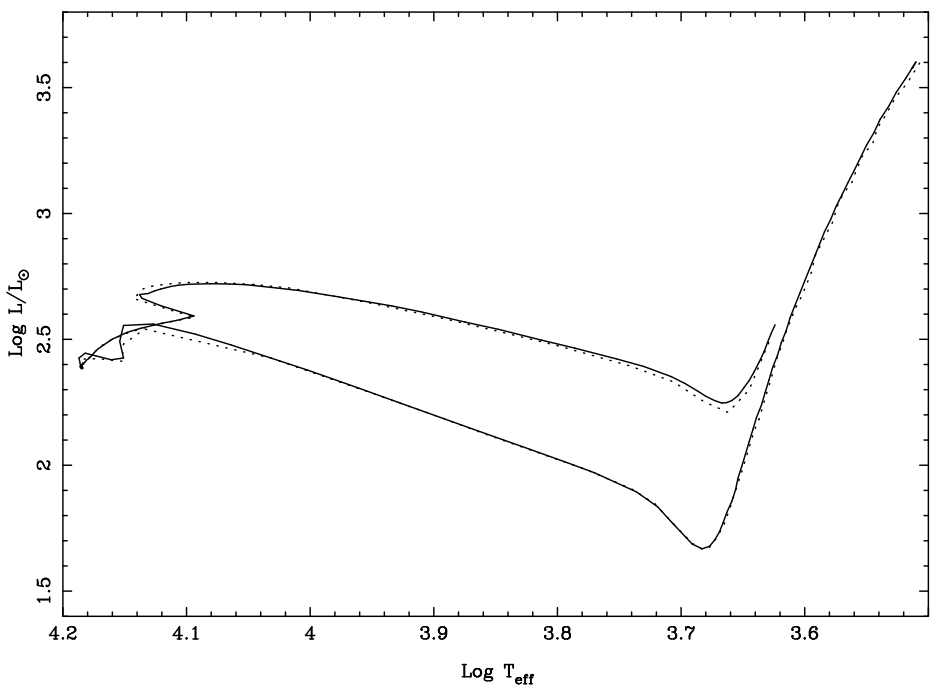


Figure 2.2: Tracés évolutifs pour une étoile de $4M_\odot$ obtenus avec la précision normale (pointillé) et la super précision (trait plein). On remarquera que les séquences principales sont confondues.

Chapter 3

Aspects numériques

Dans ce paragraphe on décrit les méthodes numériques mises en œuvre. Les équations de l'évolution stellaire constituent un problème intégro-différentiel non linéaire aux dérivées partielles: problème aux limites de conditions initiales. Une seule dimension spatiale est prise en compte dans CESAM.

La méthode de résolution retenue, la méthode des "lignes" est classique voir *e.g.* Henrici [1962]: elle consiste, pour chaque pas temporel, à résoudre itérativement et de façon découplée, le problème de conditions initiales (problème de Cauchy) puis le problème aux limites (problème de Dirichlet) – une résolution couplée n'est envisageable que si le nombre d'espèces chimiques dont on doit suivre l'évolution temporelle est réduit, ce qui n'est pas le cas en général.

Une difficulté numérique est le mélange des abondances des diverses espèces chimiques par la convection qui détruit la dérivabilité, sinon la continuité, de certaines des fonctions inconnues.

Le problème aux limites, non linéaire, est résolu par itération Newton-Raphson: méthode d'Henyey *et al.* [1959].

Le problème de valeurs initiales est un problème raide car les diverses échelles de temps en présence diffèrent par plusieurs décades.

3.1 Problème de la structure interne

CESAM résout les équations de la structure interne sous une forme assez éloignée de leur expression classique. Dans ce paragraphe on établit les relations utilisées puis on donne le changement de variable permettant d'adapter automatiquement le réseau à l'évolution des variations des inconnues, enfin on décrit la méthode utilisée pour fixer un point de la grille de discrétisation à chaque limite entre une zone radiative et une zone convective.

3.1.1 Equations de la structure interne

Bien que le triplet de variables thermodynamiques (température, densité,composition chimique) soit, dans l'ensemble, bien plus pratique que le triplet (température, pression,composition chimique), ce dernier a été retenu car il est mieux adapté à la méthode numérique utilisée par CESAM, *cf.* § 3.2.1.2.2 (Page 91).

Avec, comme variable indépendante lagrangienne, la masse M contenue à l'intérieur d'une sphère de rayon R, les équations de l'évolution stellaire sont *e.g.* (Kippenhahn *et al.* [1991]):

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{\partial P}{\partial M} = -\frac{GM}{4\pi R^4} + \frac{\Omega^2}{6\pi R} \\ \frac{\partial T}{\partial M} = \frac{\partial P}{\partial M}\frac{T}{P}\nabla \\ \frac{\partial R}{\partial M} = \frac{1}{4\pi R^2 \rho} \\ \frac{\partial L}{\partial M} = \epsilon - \epsilon_{\rm G} = \epsilon - \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{P}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial t} \\ P = P_{\rm gaz} + P_{\rm tur} \\ \frac{\partial X_i}{\partial t} = -\frac{\partial F_i}{\partial M} + \Psi_i(P_{\rm gaz}, T; \mathcal{X}) \\ 1 \leq i \leq n_{\rm elem}. \end{array}\right. \quad \left\{\begin{array}{l} \text{conditions limites :} \\ R(0,t) = 0,\ L(0,t) = 0, \\ P(M_{\rm b},t) = P_{\rm b}(L,R), \\ P_{\rm gaz}(M_{\rm b},t) = P_{\rm gaz\ b}(L,R), \\ T(M_{\rm b},t) = T_{\rm b}(L,R), \\ \text{conditions initiales :} \\ X_i(M,0) = X_{i,0}, \\ i = 1,\ldots,n_{\rm elem}, \\ P(M,0) = P_0(M), \\ P_{\rm gaz}(M,0) = P_{\rm gaz\ 0}(M), \\ T(M,0) = T_0(M), \\ R(M,0) = R_0(M), \\ L(M,0) = L_0(M), \\ 0 \leq M \leq M_{\rm b}. \end{array}\right. \tag{3.1}$$

les notations classiques ont été utilisées R: rayon (distance au centre de l'étoile), $P \equiv P_{\rm tot}$: pression totale, $P_{\rm gaz}$: pression gazeuse, $P_{\rm tur}$: pression turbulente, ρ: densité, Ω: vitesse angulaire, G: constante de la gravitation, T: température, $\nabla \equiv \left(\frac{\partial \ln T}{\partial \ln P}\right)_t$: gradient, L: luminosité, $\epsilon = \epsilon_{\rm nu} + \epsilon_\Omega - \epsilon_\nu$: débit d'énergie résultant des réactions nucléaires, de la dissipation locale du moment angulaire *cf.* § 4.1.35.1 (Page 178), et des pertes par neutrinos, $\epsilon_{\rm G}$ est l'énergie gravifique, Eq. 3.2.2.2 (Page 97), M: masse incluse dans la sphère de rayon R, t: temps, X_i: abondance de l'élément chimique i, F_i: flux diffusif pour l'élément chimique i *cf.* § 4.1.12.2 (Page 115), $\mathcal{X}$: vecteur de composition chimique généralisé *cf.* § 4.1.12.1 (Page 115), Ψ_i: taux de variation de l'abondance de l'élément chimique i par les réactions thermonucléaires, $n_{\rm elem}$: nombre d'espèces chimiques considérées. $M_{\rm b}(R,L)$, $P_{\rm b}(L,R)$, $P_{\rm gaz_b}(L,R)$ et $T_{\rm b}(L,R)$ sont quatre fonctions décrivant respectivement les variations de la masse, de la pression totale, de la pression gazeuse et de la température en fonction du rayon et de la luminosité à la limite extérieure de l'enveloppe qui coïncide avec la base de l'atmosphère. Les quatre fonctions: $P_0(M)$, $P_{\rm gaz\ 0}(M)$, $T_0(M)$, $R_0(M)$ et $L_0(M)$ décrivent en fonction de la masse respectivement la pression totale, la pression gazeuse, la température, le rayon et la luminosité du modèle d'âge zéro.

Cette formulation suppose la symétrie sphérique et ne tient pas compte du champ magnétique et la rotation n'y intervient que par la gravité effective.

3.1.2 Variables d'intégration

Les variables naturelles par rapport auxquelles sont écrites les équations (3.1) ne sont pas bien adaptées au calcul numérique. En particulier, les dérivées de la pression et du rayon ont des singularités en $M \equiv 0$ *i.e.* au centre.

Ces singularités disparaissent en utilisant le rayon R comme variable indépendante. La condition limite externe devient alors une condition de limite libre puisque le rayon total n'est pas fixe. Bien que cette limite libre ne soit pas une difficulté

pour la méthode numérique utilisée dans CESAM, le rayon n'est pas, pour autant, le meilleur choix pour la variable indépendante; on peut en effet montrer (Morel [1997]) que les singularités sont levées et qu'une utilisation optimale de l'approximation numérique est obtenue lorsqu'on utilise respectivement pour la masse, le rayon et la luminosité les variables suivantes: $M^{2/3}$, R^2 et $L^{2/3}$. Il est apparu pratique d'utiliser des variables normalisées aux valeurs solaires:

$$\xi = \ln P,\ \xi_g = \ln P_{\rm gaz},\ \eta = \ln T,\ \mu = \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{2}{3}},\ \zeta = \left(\frac{R}{R_\odot}\right)^2,\ \lambda = \left(\frac{L}{L_\odot}\right)^{\frac{2}{3}},$$

Avec ces nouvelles variables le système (3.1) devient:

$$\left\{\begin{array}{l}
\frac{\partial \xi}{\partial \mu} = \left[-\frac{3G}{8\pi}\left(\frac{M_\odot}{R_\odot^2}\right)^2 + \frac{M_\odot}{4\pi R_\odot}\sqrt{\frac{\mu}{\zeta}}\Omega^2\right]\exp(-\xi)\left(\frac{\mu}{\zeta}\right)^2 \\
\frac{\partial \eta}{\partial \mu} = \frac{\partial \xi_t}{\partial \mu}\nabla \\
\frac{\partial \zeta}{\partial \mu} = \frac{3}{4\pi}\frac{M_\odot}{R_\odot^3}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\mu}{\zeta}\right)^{\frac{1}{2}} \\
\exp(\xi) = \exp(\xi_g) + P_{\rm tur} \\
\frac{\partial \lambda}{\partial \mu} = \frac{M_\odot}{L_\odot}\left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\epsilon - \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{P}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial t}\right] \\
\frac{\partial X_i}{\partial t} = -\frac{2}{3M_\odot\sqrt{\mu}}\frac{\partial F_i}{\partial \mu} + \Psi_i(\xi_t, \eta; \mathcal{X}),\ 1 \le i \le n_{\rm elem}
\end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\text{conditions limites} \\
\zeta(1,t) = 1,\ \lambda(1,t) = 1 \\
\xi(\mu_{\rm ext}, t) = \ln\left(P_{\rm ext}\left(\sqrt{\lambda}^3 L_\odot, \sqrt{\zeta} R_\odot\right)\right) \\
\xi_{\rm g}(\mu_{\rm ext}, t) = \xi(\mu_{\rm ext}, t) \\
\eta(\mu_{\rm ext}, t) = \ln\left(T_{\rm ext}\left(\sqrt{\lambda}^3 L_\odot, \sqrt{\zeta} R_\odot\right)\right) \\
\text{conditions initiales} \\
X_i(\mu, 0) = X_{i,0},\ i = 1, \ldots, n_{\rm elem} \\
\xi(\mu, 0) = \xi_0(\mu),\ \xi_{\rm g}(\mu, 0) = \xi_{\rm g\,0}(\mu), \\
\eta(\mu, 0) = \eta_0(\mu), \\
\zeta(\mu, 0) = \zeta_0(\mu),\ \lambda(\mu, 0) = \lambda_0(\mu), \\
1 \le \mu \le \mu_{\rm ext}
\end{array}\right.$$

Au centre la singularité des gradients est levée:

$$\lim_{\mu\to 0}\left|\frac{\partial \xi}{\partial \mu}\right| = \frac{G}{2}\left(\frac{4\pi M_\odot^2}{3}\right)^{\frac{1}{3}}\exp\left(-\xi(0,t)\right)\rho(0,t)^{\frac{4}{3}} < \infty,$$
$$\lim_{\mu\to 0}\left|\frac{\partial \zeta}{\partial \mu}\right| = \left(\frac{3M_\odot}{4\pi R_\odot^3}\right)^{\frac{2}{3}}\rho^{-\frac{2}{3}}(0,t) < \infty,$$

et, de plus:

$$\lim_{\mu\to 0}\left|\frac{\mu}{\lambda}\right| = \lim_{\mu\to 0}\left|\frac{\partial \lambda}{\partial \mu}\right| = \frac{M_\odot}{L_\odot}\left[\epsilon - T\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_\mu\right],$$
$$\lim_{\mu\to 0}\frac{\mu}{\zeta} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{R_\odot^2}{M_\odot}\right)^{\frac{2}{3}}\rho^{\frac{2}{3}},$$

quantités dérivables une fois au moins. Sans l'exposant 2/3 qui affecte la luminosité, le second membre de l'équation d'énergie eut été:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \mu} = \frac{M_\odot}{L_\odot} \mu^{\frac{1}{2}} \left[\epsilon - \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{P}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial t} \right]$$

la racine carrée, mal représentée par un polynôme, au voisinage de $\mu = 1$, entrainant une instabilité numérique. L'exposant 2/3 permet donc une meilleure représentation numérique de la luminosité au voisinage du centre mais interdit à cette variable dépendante de devenir négative ce qui, dans certaines phases de l'évolution, peut devenir rédhibitoire. Lorsque cette éventualité peut se présenter, bien que moins satisfaisant numériquement, il est nécessaire d'utiliser le rayon comme variable indépendante eulérienne et, dans ce cas, l'ensemble de variables utilisé par CESAM est:

$$\xi = \ln P,\ \xi_{\rm g} = \ln P_{\rm gaz},\ \eta = \ln T,\ \mu = \left(\frac{M}{M_\odot} \right),\ \zeta = \left(\frac{R}{R_\odot} \right),\ \lambda = \left(\frac{L}{L_\odot} \right).$$

Les variables eulériennes sont utilisées dans certains cas *cf.* § 2.5.1 (Page 43)

3.1.3 Adaptation de la discrétisation

Les zones dans lesquelles les solutions ont une variation rapide se déplacent au cours de l'évolution si bien que le réseau initial devient plus ou moins rapidement inadapté. Pour ne pas dégrader la précision il faut alors resserrer les nœuds dans les régions à variations fortes, les relacher sur les plateaux. Deux solutions peuvent être apportées à ce problème numérique difficile:

1. on ajoute/retire une ou plusieurs couches lorsque l'incrément d'une variable est trop/pas assez important (Kippenhahn *et al.* [1968]).

2. on dispose les nœuds automatiquement de façon à satisfaire certains critères (Eggleton [1971], Press *et al.* [1986]).

CESAM utilise la seconde solution. L'idée consiste à effectuer un changement de variable. On utilise comme variable dépendante une fonction, à définir, des variables dépendantes dont on désire contrôler les variations, fonction à laquelle on impose une variation constante d'un nœud de la grille au suivant. Dans un premier temps le nombre total de nœuds est fixé. Ceux–ci sont disposés automatiquement par le calcul aux abscisses *ad–hoc*. La masse, variable indépendante devient une variable dépendante dont la valeur n'est connue qu'à l'issue de l'intégration. A cette fin on définit la fonction d'espacement $Q(\mu, t)$ à partir de la connaissance que l'on a, à *priori*, de la solution. Par exemple, pour la structure interne, on pourrait[1] prendre: $Q(\mu, t) = \ln P$. On cherche à l'instant t une répartition des abscisses $\mu_i, i = 1, \ldots, n$ telle que l'incrément de la fonction d'espacement soit constant d'un nœud à l'autre de la grille. On cherchera donc à réaliser:

$$Q(\mu_i, t) - Q(\mu_{i+1}, t) = Cte(t), \quad i = 1, \ldots, n-1 \tag{3.2}$$

[1]Ce qui équivaudrait alors à prendre la pression comme variable indépendante.

Celà impose une monotonie stricte à la fonction d'espacement $Q(\mu,t)$. Le nombre de couches n étant donné, pour t fixé, on introduit la fonction "indice" $q(\mu,t)$ appliquant l'intervalle de variation de μ: $[0,\mu_{\text{ext}}]$ sur $[1,n] \subset \mathbf{R}$. La condition Eq. 3.2 (Page 82) s'écrit alors de façon équivalente:

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_t = Cte(t) = \psi(t) \Longleftrightarrow \left(\frac{\partial^2 Q}{\partial q^2}\right)_t = \left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_t = 0$$

et, pour les conditions limites: $\mu = 0$ à $q = n$ et $\mu = \mu_{\text{ext}}$ à $q = n$, puisque la couche d'indice 1 correspond au centre et celle d'indice n à la surface.

Pour t fixé, le changement de variable: $\mu \rightarrow q(\mu,t)$ permet d'écrire:

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_t = \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu}\right)_t \left(\frac{\partial \mu}{\partial q}\right)_t = \theta \left(\frac{\partial \mu}{\partial q}\right)_t$$

où $\theta(\mu,t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu}\right)_t$ est calculé à partir de l'expression de la fonction d'espacement $Q(\mu,t)$. Il y a donc deux fonctions inconnues supplémentaires: $\psi(t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_t$ et $\mu(q,t)$, solutions du système différentiel du premier ordre avec conditions limites:

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial q}\right)_t = \frac{\psi}{\theta}, \qquad \left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_t = 0, \text{ avec : } \begin{cases} q = 1, \ \mu = 1 \\ q = n, \ \mu = \mu_{\text{ext}} \end{cases}$$

Ces équations sont résolues simultanément avec le système des équations (3.1) écrites par rapport aux variables q et t; pour ce faire, on dispose des relations suivantes, où $f(\mu,\ t)$ désigne une variable dépendante quelconque:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_\mu = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_q - \left(\frac{\partial f}{\partial \mu}\right)_t \left(\frac{\partial \mu}{\partial t}\right)_q, \qquad \left(\frac{\partial f}{\partial \mu}\right)_t = \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_t \Big/ \left(\frac{\partial \mu}{\partial q}\right)_t.$$

Les abscisses utilisées sont 1, 2, ... , n, on dispose donc d'une **grille équidistante**.

3.1.3.1 Modification du nombre total de couches

On a supposé jusqu'à présent que le nombre total de couches était fixé une fois pour toutes, ce qui constitue évidemment une contrainte puisque pour une phase donnée de l'évolution il y le risque de travailler avec une discrétisation trop fine (*respt.* grossière) avec comme conséquence des calculs inutiles (*respt.* imprécis). Avec une augmentation (*respt.* diminution) du nombre de couches, le saut[2] $\psi(t)$ de la fonction de répartition d'une couche à la suivante diminue (*respt.* augmente), si bien que d'un pas temporel au suivant, il est possible d'ajuster le nombre de couches afin de maintenir $\psi(t)$ dans un intervalle fixé. Cette disposition correspond exactement au sens physique que l'on peut attribuer à la fonction de répartition qui est de maintenir dans un intervalle donné les variations de certaines grandeurs physiques.

Alors $\psi(t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_\mu$ et $\theta(\mu,t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu}\right)_t$, $\Rightarrow \frac{\psi}{\theta} = (\frac{\partial \mu}{\partial q})_t$ et les équations (3.1)

[2] $\psi(t)$ est soit positif, soit négatif, ici il est supposé positif.

deviennent:

$$\left\{\begin{array}{l}
\frac{\partial \xi}{\partial q} = \left[\frac{3G}{8\pi}\left(\frac{M_\odot}{R_\odot^2}\right)^2\left(\frac{\mu}{\zeta}\right)^2 + \frac{M_\odot}{4\pi R_\odot}\sqrt{\frac{\mu}{\zeta}}\Omega^2\right]\exp(-\xi)\frac{\psi}{\theta} \\
\frac{\partial \eta}{\partial q} = \frac{\partial \xi}{\partial q}\nabla \\
\frac{\partial \zeta}{\partial q} = \frac{3}{4\pi}\frac{M_\odot}{R_\odot^3}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\mu}{\zeta}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\psi}{\theta} \\
\exp(\xi) = \exp(\xi_g) + P_{\text{tur}} \\
\frac{\partial l}{\partial q} = \frac{M_\odot}{L_\odot}\left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\epsilon - \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{P}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial t}\right]\frac{\psi}{\theta} \\
\frac{\partial \mu}{\partial q} = \frac{\psi}{\theta} \\
\frac{\partial \psi}{\partial q} = 0 \\
\frac{\partial X_i}{\partial t} = -\frac{2}{3M_\odot\sqrt{\mu}}\frac{\partial F_i}{\partial \mu} + \Psi_i(\xi_t, \eta; \mathcal{X}),\ 1 \le i \le n_{\text{elem}} \\
i = 1, \ldots, n_{\text{elem}}
\end{array}\right. \tag{3.3}$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\text{conditions limites} \\
\mu(n,t) = \mu_{\text{ext}}\left(\sqrt{\lambda}^3(n,t)L_\odot, \sqrt{\zeta(n,t)}R_\odot\right), \\
\xi(n,t) = \ln\left(P_{\text{ext}}\left(\sqrt{\lambda}^3(n,t)L_\odot, \sqrt{\zeta(n,t)}R_\odot\right)\right), \\
\xi_{\text{g}}(n,t) = \xi(n,t), \\
\eta(n,t) = \ln\left(T_{\text{ext}}\left(\sqrt{\lambda}^3(n,t)L_\odot, \sqrt{\zeta(n,t)}R_\odot\right)\right), \\
\zeta(1,t) = 0,\ \lambda(1,t) = 0,\ \mu(1,t) = 0. \\
\text{conditions initiales} \\
X_i(q,0) = X_{i,0},\ i = 1, \ldots, n_{\text{elem}} \\
\xi(q,0) = \xi_0(q),\ \xi_{\text{g}}(q,0) = \xi_{\text{g }0}(q),\ \eta(q,0) = \eta_0(q), \\
\zeta(q,0) = \zeta_0(q),\ \lambda(q,0) = \lambda_0(q), \\
1 \le q \le n.
\end{array}\right.$$

Les contraintes imposées au choix de la fonction d'espacement Q est la stricte monotonie et qu'elle permette le changement de variable; il faut donc qu'elle ne soit composée que de fonctions variant dans le même sens. Il va de soi que son expression doit être la plus simple possible et qu'il n'y a pas nécessaire obligation de la contraindre avec des "variables secondaires" telle que P_{gaz} ou Ω. Puisque ξ et η varient en sens inverse de ζ, λ et μ, quand il n'y a aucune raison de favoriser une variable plutôt qu'une autre, formellement, il conviendrait d'utiliser:

$$Q(\mu,t) = \frac{\xi}{\Delta\xi} + \frac{\eta}{\Delta\eta} - \frac{\zeta}{\Delta\zeta} - \frac{\lambda}{\Delta\lambda} - \frac{\mu}{\Delta\mu},\ \Delta\xi = \xi(n) - \xi(1),$$
$$\Delta\eta = \eta(n) - \eta(1),\ \Delta\zeta = \zeta(n) - \zeta(1),\ \Delta\lambda = \lambda(n) - \lambda(1),\ \Delta\mu = \mu(n) - \mu(1).$$

On aurait donc:

$$\begin{array}{l}
\theta(\mu,t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu}\right)_t = \frac{1}{\Delta\xi}\frac{3G}{8\pi}\left(\frac{M_\odot}{R_\odot^2}\right)^2\exp(-\xi)\left(\frac{\mu}{\zeta}\right)^2\left(1 + \nabla\frac{\Delta\xi}{\Delta\eta}\right) - \\
-\frac{1}{\Delta\zeta}\frac{3}{4\pi}\frac{M_\odot}{R_\odot^3}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\mu}{\zeta}\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{\Delta\lambda}\frac{M_\odot}{L_\odot}\left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\epsilon - 1.
\end{array} \tag{3.4}$$

et des relations similaires lorsque le rayon est utilisé comme variable indépendante. Les facteurs de répartition $\Delta\xi$, $\Delta\eta$, $\Delta\zeta$, $\Delta\lambda$ et $\Delta\mu$ peuvent être ou bien, fixés une fois pour toutes ou bien, ajustés à l'issue de chaque pas temporel de façon à suivre l'évolution.

Si cette forme "complète" de la fonction de répartition a été utilisée pour les versions 0, 1 et 2 de CESAM, il s'est avéré par la suite que $Q \equiv a\xi + b\mu$ (*respt.* $Q \equiv a\xi + b\zeta$) avec les variables lagrangiennes (*respt.* eulériennes) semblait être la forme la plus simple, la plus robuste et de fait, la plus efficace. Les valeurs $a = -1$ et $b \sim 15$ des facteurs de répartition, définies dans la routine resout selon le type de calcul requis, donnent satisfaction.

L'approximation initiale de $\psi(t_0) = \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_t$ s'obtient en dérivant numériquement $Q(\mu, t)$ (obtenu à partir de la solution initiale provisoire) par rapport à la nouvelle variable indépendante: la fonction de discrétisation $q(\mu, t)$.

Avec la variable indépendante eulérienne on a: $\psi(t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_\zeta$ et $\theta(\zeta, t) = \left(\frac{\partial Q}{\partial \zeta}\right)_t$ et le problème différentiel s'écrit:

$$
\begin{cases}
\frac{\partial \xi}{\partial q} = \left[-\frac{GM_\odot}{R_\odot}\frac{\mu}{\zeta^2} + \frac{2R_\odot}{3}\zeta\Omega^2\right]\rho\exp(-\xi)\frac{\psi}{\theta} \\
\frac{\partial \eta}{\partial q} = \frac{\partial \xi}{\partial q}\nabla \\
\frac{\partial \mu}{\partial q} = \frac{4\pi R_\odot^3}{M_\odot}\rho\zeta^2\frac{\psi}{\theta} \\
\exp(\xi) = \exp(\xi_g) + P_{\rm tur} \\
\frac{\partial \lambda}{\partial q} = \frac{\partial \mu}{\partial q}\frac{M_\odot}{L_\odot}\left[\epsilon - \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{P}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial t}\right] \\
\frac{\partial \zeta}{\partial q} = \frac{\psi}{\theta} \\
\frac{\partial \psi}{\partial q} = 0 \\
\frac{\partial X_i}{\partial t} = -\frac{2}{3M_\odot\sqrt{\nu}}\frac{\partial F_i}{\partial \mu} + \Psi_i(\xi_t, \eta; \mathcal{X}),\ 1 \le i \le n_{\rm elem}
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
\text{conditions limites} \\
\mu(n,t) = \mu_{\rm ext}\left(\lambda(n,t)L_\odot, \zeta(n,t)R_\odot\right), \\
\xi(n,t) = \ln\left(P_{\rm ext}\left(\lambda(n,t)L_\odot, \zeta(n,t)R_\odot\right)\right), \\
\eta(n,t) = \ln\left(T_{\rm ext}\left(\lambda(n,t)L_\odot, \zeta(n,t)R_\odot\right)\right), \\
\xi_{\rm g}(n,t) = \xi(n,t), \\
\zeta(1,t) = 0,\ \lambda(1,t) = 0,\ \mu(1,t) = 0. \\
\text{conditions initiales} \\
X_i(q,0) = X_{i,0},\ i = 1, \ldots, n_{\rm elem}, \\
\xi(q,0) = \xi_0(q),\ \eta(q,0) = \eta_0(q), \\
\zeta(q,0) = \zeta_0(q),\ \lambda(q,0) = \lambda_0(q), \\
1 \le q \le n.
\end{cases}
$$

On a utilisé $\nu \equiv \mu^{2/3}$. Ainsi la condition de limite libre est, en fait, déjà incluse dans les équations écrites avec la fonction de répartition et n'entraine aucune modification fondamentale de la structure des équations.

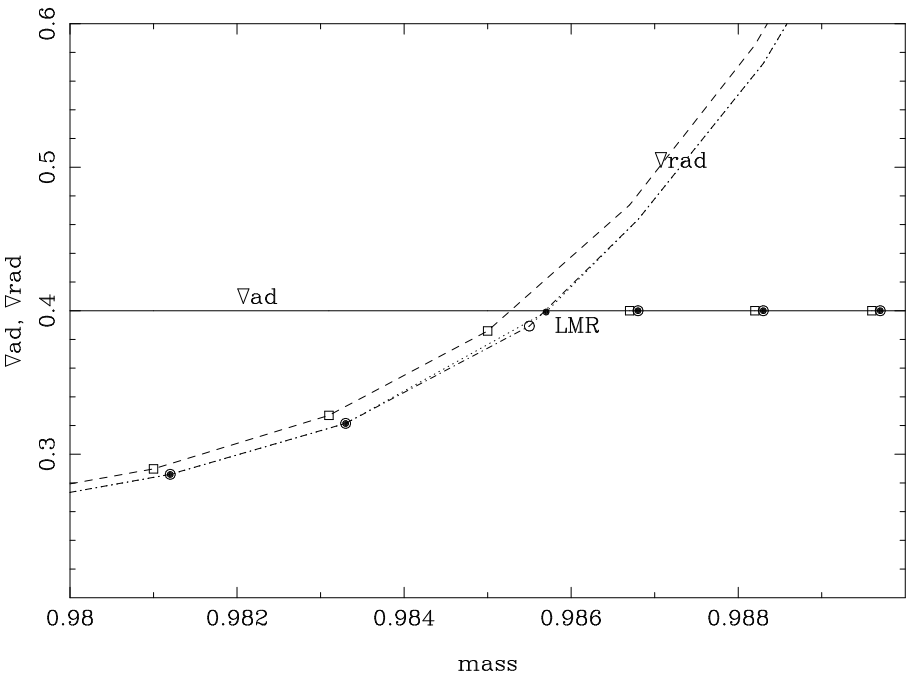


Figure 3.1: Deux itérations ont été nécessaires pour positionner un point de grille sur une limite zone radiative / zone convective. Au cours du processus itératif, le gradient radiatif $\nabla_{\rm rad}$ a légèrement diminué et la limite s'est déplacée vers la droite alors que le gradient adiabatique $\nabla_{\rm ad}$ restait inchangé. Les points de grille se sont successivement déplacés de leurs positions initiales, carrés vides, vers leurs positions finales, cercles vides puis cercles pleins.

3.1.3.2 Nœud sur une limite zone radiative / zone convective

A chaque limite entre une zone convective et une zone radiative le gradient:

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial \ln T}{\partial \ln P}\right)_t$$

n'est pas dérivable. Il en est donc de même de la dérivée première de la température. Entre deux points de la grille d'intégration les inconnues sont représentées par des polynômes par morceaux. Une limite entre une zone radiative et une zone convective doit donc nécessairement se trouver sur une maille du réseau. Avec CESAM il suffit de placer un point de grille à mieux que $\sim 5\%$ de la distance entre les nœuds entourant immédiatement chaque limite entre une zone convective et une zone radiative, il n'y alors pas de risque d'approcher les fonctions inconnues par un morceau de polynôme traversant une discontinuité, les points de collocation étant situés à une distance des points de grille, supérieure à 5% de la largeur de la maille concernée.

Pour assurer cette disposition on utilise un paramètre libre de la fonction de répartition. D'une maille à l'autre la variation de la fonction de répartition $Q(\mu, t)$, est constante. Les facteurs de répartition a et b définissent les poids relatifs des variables à l'intérieur de chaque maille, ces poids sont définis à un facteur multiplicatif près. Jusqu'à présent ce paramètre libre a été, implicitement, posé égal à l'unité. La modification de cette valeur pour les mailles situées au voisinage d'une limites

entre une zone radiative et une zone convective va permettre de rejeter la limites dans un voisinage immédiat des points de grille. On définit la fonction en escalier $\omega(q)$, ajustable d'une maille à l'autre par:

$$Q(\mu,t) = \omega(q)Q_0(\mu,t)$$

$Q_0(\mu,t)$ notant maintenant la fonction de répartition retenue c'est à dire celle définie par la relation (3.4). Tout en respectant la constante du saut de $Q(\mu,t)$ d'une maille à l'autre, $\omega(q)$ permet d'ajuster le saut de Q_0 dans chaque maille, donc le saut de ξ, η, ζ, λ et μ de façon à ce qu'ils correspondent à la quantité nécessaire pour atteindre exactement la limite. Une fois la condition:

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial q^2} = \frac{\partial \psi}{\partial q} = 0$$

satisfaite en tous points du réseau, dans une maille donnée, la variation de la fonction Q étant constante:

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \psi = cte = \frac{\partial \omega Q_0}{\partial q} = \omega \frac{\partial Q_0}{\partial q} \Rightarrow \omega = \psi / \frac{\partial Q_0}{\partial q} \sim \psi / \frac{\Delta Q_0}{\Delta q} = \psi / \Delta Q_0$$

puisque d'une maille à la suivante[3] $\Delta q = 1$. Pour chaque maille $[i, i+1]$, $i = 1, \ldots, n-1$, on détermine ω_i de façon à ce que le saut de Q_0:

$$\Delta Q_0 = a(\xi_{i+1} - \xi_i) + b(\mu_{i+1} - \mu_i)$$

corresponde à ce qu'il est nécessaire pour que chaque limite entre une zone convective et une zone radiative se place sur un point du réseau[4].

Malheureusement il n'y a pas de relation permettant de prévoir le déplacement d'une limite entre une zone convective et une zone radiative en fonction des variations des variables locales, si bien qu'il est nécessaire de procéder par ajustements successifs, il en résulte que la convergence du processus itératif global ne peut être que du premier ordre.

A chaque itération de la méthode de Newton–Raphson la limite entre une zone radiative et une zone convective est localisée par interpolation linéaire en fonction de la variable d'indice q. Suivant la position interpolée pour les limites, les mailles concernées sont agrandies ou resserrées. A l'aide de la valeur obtenue pour la constante $\psi(t)$ et des valeurs de la variable Q_0 des nouvelles valeurs de $\omega(q)$ sont calculées pour chaque maille. Un exemple d'un tel ajustement est illustré Fig. 3.1 (Page 86).

Dans la routine lim_zc, les limites zone radiative / zone convective sont localisées avec précision ce qui permet de déterminer les poids à affecter à chaque maille; l'expérience des calculs montre que le positionnement de la limite s'effectue sur un nœud avec précision supérieure à 1% si la limite est bien définie. Quand la transition zone radiative / zone convective est floue *i.e.* quand les gradients adiabatique et radiatif sont proches au voisinage de la limite, le positionnement n'est pas précis *cf.* § 2.3 (Page 31). Dans ces cas la discontinuité de la dérivée du gradient est *petite* et l'erreur qui en résulte n'est importante ni pour les variables de structure ni pour la composition chimique qui ne peut, avec une limite floue, que présenter une discontimuité peu marquée.

[3] C'est cette dernière relation qui, en fait, définit $\omega(q)$ une fonction en escalier n'étant pas dérivable! Pour faciliter l'exposé on a préféré introduire $w(q)$ par Eq. 3.1.3.2 (Page 87).

[4] Des relations similaires peuvent être obtenues avec les facteurs de répartition $\Delta\xi$, $\Delta\eta$, $\Delta\zeta$, $\Delta\lambda$.

3.2 Intégration numérique

On décrit dans ce paragraphe les méthodes d'intégration numérique utilisées dans CESAM pour résoudre le problème aux limites et le problème de valeurs initiales. Elles utilisent des techniques et des algorithmes qui sont, pour la plupart, peu fréquents en évolution stellaire. Afin d'être accessible sans trop d'investissement en analyse numérique mais avec le risque de plagier les manuels spécialisés, on donne un aperçu de la réflexion qui a conduit aux algorithmes retenus avant de décrire ces derniers.

Le principe de l'intégration des équations de l'évolution stellaire est celui habituellement utilisé: séparation des intégrations temporelle et spatiale, c'est la *méthode des lignes* voir *e.g.* Henrici [1962]. Les équations de la structure interne forment un système intégro-différentiel non linéaire aux dérivées partielles. Pour l'une des variables: le temps, c'est un problème aux valeurs initiales *i.e.* problème de Cauchy. Pour l'autre variable: l'espace, c'est un problème aux limites *i.e.* problème de Dirichlet. Le problème aux valeurs initiales est décomposé en deux parties:

- évolution temporelle de la composition chimique: en raison du mélange convectif on ne peut qu'utiliser une méthode à un pas (voire deux pas) et, en raison des grandes différences entre les échelles de temps d'évolution des différentes espèces chimiques, il faut une formulation pour problème différentiel raide;

- évolution de l'entropie spécifique: on utilise une formule de différences finies implicite et décentrée temporellement.

Le problème aux limites est résolu en développant les fonctions inconnues sur une base de B-splines. L'algorithme obtenu est implicite, il est résolu itérativement. Entre chaque itération le problème aux valeurs initiales peut être réactualisé de façon à améliorer la solution du problème différentiel global.

3.2.1 Intégration d'un problème aux limites par splines/collocation

La méthode retenue pour l'intégration du problème aux limites consiste à développer les fonctions inconnues sur une base de polynômes par morceaux: les B-splines et à écrire que ces développements satisfont les conditions limites et les équations différentielles en un nombre *ad–hoc* de points.

3.2.1.1 Les B-splines

Etant donnée une partition de $[a,b] \subset$: $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, l'ensemble des polynômes par morceaux d'ordre m (degré $+1$), qui se raccordent en x_1, $x_2, \ldots,$ x_{n-1} est un espace vectoriel de dimension finie M dont une base est celle des B-splines. Elle sera notée par la suite: $\{N_i^m\}_{i=1}^M$. Pour $m = 2$ et $n = 4$ ce sont les "fonctions chapeaux" de la Fig. 3.2 (Page 89) et les courbes en cloche pour $m = 4$ et $n = 7$. Les diverses définitions mathématiques de ces fonctions sont abscondes *e.g.* i-ème différence divisée de la fonction puissance translatée. On les trouve dans De

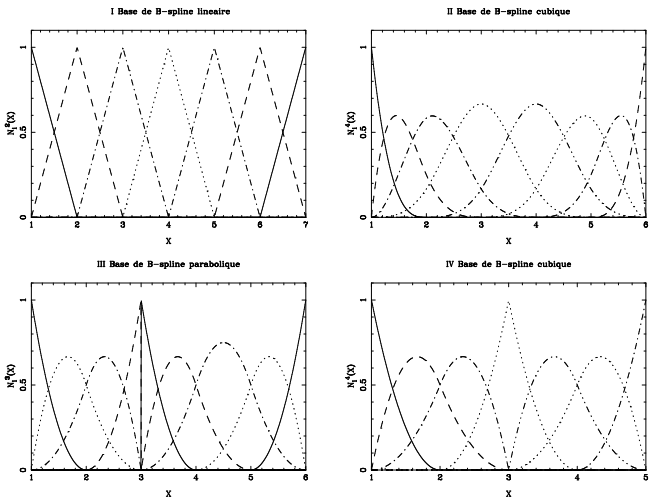


Figure 3.2: B-splines normalisées d'ordre m=2 pour n=4 points de grille équidistants.

Boor [1978], p.108, Schumacker [1981], p.118, Trénoguine [1980], p.341, et dans de nombreux autres ouvrages. Ces fonctions de base, malgré leur algèbre compliquée se prètent très bien au calcul numérique car les calculs sont faciles, stables et efficaces. En particulier:

- les B-splines sont des fonctions à support borné,
- en un point de leur support il existe au plus m B-splines d'ordre m non nulles, une conséquence est la structure bande des systèmes linéaires apparaissant dans les calculs,
- une B-spline est toujours positive ou nulle,
- la dérivée d'une B-spline est une combinaison linéaire de B-splines d'ordre immédiatement inférieur,
- il existe des algorithmes numériques efficaces et stables pour les calculs avec B-splines.

3.2.1.2 Résolution de problèmes différentiels

3.2.1.2.1 Principe Le principe de l'utilisation des B-splines pour résoudre un problème différentiel est celui de toute méthode spectrale: les fonctions inconnues sont développées sur une base finie, en l'occurence celle des B-splines. Pour calculer les coefficients, on écrit que ces développements satisfont les équations différentielles et les conditions limites. Pour ce faire il y a un alternative:

- on satisfait les équations en un nombre *ad–hoc* de points c'est la collocation,
- on impose à la base d'être orthogonale à son image par l'opérateur différentiel (*i.e.* au résidu) c'est la le principe de la méthode de Galerkin et de ses dérivées.

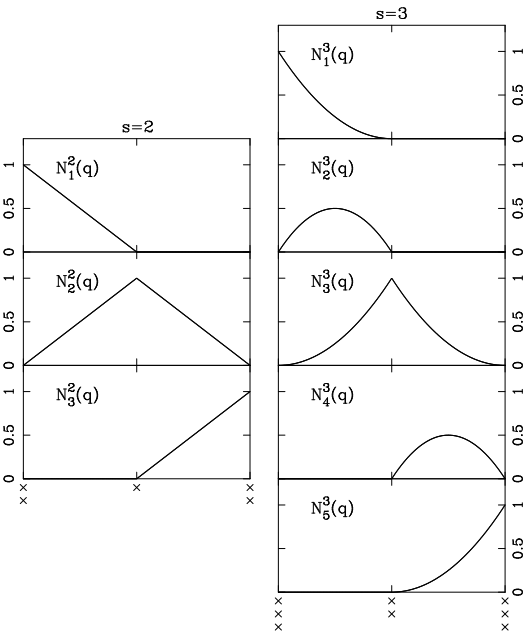


Figure 3.3: B-splines normalisées d'ordre s=2 (gauche) et s=3 (droite) calculées avec la base de de Boor pour n=3 points de grille équidistants. Les vecteurs nodaux sont schématisés par des croix disposées sous chaque graphe.

Ainsi, pour le problème différentiel aux limites:

$$f''(x) = \Phi(x; f, f'), \quad \phi_1(x_1; f, f') = \alpha, \quad \phi_2(x_n; f, f') = \beta, \quad \text{sur } [x_1, x_n] \subset$$

où ϕ_1, ϕ_2 sont des fonctions et α, β des réels donnés. En utilisant la base $\{N_i^m\}_{i=1}^M$ de B-splines d'ordre $m \geq 4$, sur une partition de $[x_1, x_n]$ à préciser, on aura:

$$f(x) \simeq \sum_{i=1}^{M} f_i N_i^m(x), \quad f'(x) \simeq \sum_{i=1}^{M} f_i \frac{dN_i^m(x)}{dx}, \quad f''(x) \simeq \sum_{i=1}^{M} f_i \frac{d^2 N_i^m(x)}{dx^2}$$

Avec la méthode de collocation, les M coefficients f_i sont obtenus en écrivant que le développement de f vérifie les 2 conditions limites et les équations:

$$\sum_{i=1}^{M} f_i \frac{d^2 N_i^m(z_c)}{dx^2} = \Phi(z_c; f, f')$$

en $M-2$ points $z_c \in]x_1, x_n[$.

La solution obtenue est en $O(||\Delta x||^m)$. Si on adopte un choix judicieux pour les points de collocation la solution est en $O(||\Delta x||^{2(m-1)})$: c'est la superconvergence de De Boor [1978], chap. 15.

Avec la méthode de Galerkin les coefficients f_i seraient, par exemple, obtenus en écrivant que le développement de f vérifie les M équations:

$$\sum_{i=1}^{M} f_i < \frac{d^2 N_i^m}{dx^2}.N_l^m > = < \Phi(x_l; f, f').N_l^m >, \quad 1 < l < M$$

où $< g.h >$ représente un produit scalaire à définir. Les conditions limites sont introduites par une intégration par parties, *cf.* Trénoguine [1980]; Marchouk & Agochkov [1985].

Avec les deux méthodes, si Φ est linéaire, on obtient les coefficients f_i par résolution d'un système linéaire, sinon il est nécessaire d'utiliser une méthode itérative *e.g.* point fixe ou méthode de Newton–Raphson.

3.2.1.2.2 Collocation pour un système non linéaire On explicite la méthode spline/collocation pour le système de n_e équations différentielles ordinaires, non linéaires, du premier ordre, avec des conditions limites aux extrémités de l'intervalle de définition *e.g.* les équations de la structure interne. Ces systèmes s'écrivent formellement:

$$\mathcal{F}_j(x;\mathbf{f},\mathbf{f}')=0, \qquad x\in[x_1,x_n], \qquad \mathbf{f}={}^T(f_1,f_2,\ldots,f_{n_e}) \qquad 1\le j\le n_e$$

avec les conditions limites:

$$\alpha_q\left(\mathbf{f}(x_1)\right)=0,\ \forall q\in Q,\ Q\subseteq J=\{1,2,\ldots,n_e\}, \quad \beta_r\left(\mathbf{f}(x_n)\right)=0,\ \forall r\in\mathcal{C}_JQ$$

la notation $\mathcal{C}_JQ$ signifiant le complémentaire de Q dans l'ensemble d'indices J. En remplaçant chaque composante f_j de $\mathbf{f}$, $1\le j\le n_e$, par son développement sur la base des B-Splines:

$$f_j(x)=\sum_{i=1}^{M} f_{i,j}N_i^m(x), \qquad f_j'(x)=\sum_{i=1}^{M} f_{i,j}\frac{dN_i^m(x)}{dx} \tag{3.5}$$

les inconnues sont désormais les réels $f_{i,j}$. Ils vérifient:

$$\left\{\begin{array}{l}
\mathcal{F}_j\Big(x;\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}N_i^m(x),\ldots,\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}N_i^m(x),\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}\frac{dN_i^m(x)}{dx},\ldots,\\
\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}\frac{dN_i^m(x)}{dx}\Big)=0,\\
\forall x\in]x_1,x_n[,\ \forall j\in J\\
\alpha_q\Big(\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}N_i^m(x_1),\ldots\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}N_i^m(x_1)\Big)=0,\ \forall q\in Q\\
\beta_r\Big(\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}N_i^m(x_n),\ldots\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}N_i^m(x_n)\Big)=0,\ \forall r\in\mathcal{C}_JQ
\end{array}\right.$$

Pour un système différentiel linéaire les $f_{i,j}$ se rassemblent. Ils sont évalués en écrivant (3.5) en $M-1$ points de collocation $z_c\in]x_1,x_n[$ et en résolvant le système linéaire obtenu. Les équations de la structure interne ne sont pas linéaires. On utilise la méthode itérative de Newton–Raphson pour résoudre le système (3.3). Ce qui nécessite une solution initiale $\mathbf{f}^0$. En notant $\mathbf{f}^p$ la solution obtenue à l'itération $p\ge 0$, les équations linéarisées sont:

$$\left\{\begin{array}{l}
\mathcal{F}_j\Big(z_c;\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}^pN_i^m(z_c),\ldots,\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}^pN_i^m(z_c),\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}^p\frac{dN_i^m(z_c)}{dx},\ldots,\\
\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}^p\frac{dN_i^m(z_c)}{dx}\Big)=\\
=\sum_{k=1}^{n_e}\sum_{i=1}^{M}\Big(\frac{\partial\mathcal{F}_j}{\partial f_k}N_i^m(z_c)+\frac{\partial\mathcal{F}_j}{\partial f_k'}\frac{dN_i^m(z_c)}{dx}\Big)df_{i,k}^p,\ \forall j\in J,\ 1\le c<M\\
\alpha_q\Big(\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}^pN_i^m(x_1),\ldots\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}^pN_i^m(x_1)\Big)=\\
\sum_{k=1}^{n_e}\frac{\partial\alpha_q}{\partial f_k}\sum_{i=1}^{M} N_i^m(x_1)df_{i,k}^p,\ \forall q\in Q,\\
\beta_r\Big(\sum_{i=1}^{M} f_{i,1}^pN_i^m(x_n),\ldots\sum_{i=1}^{M} f_{i,n_e}^pN_i^m(x_n)\Big)=\\
\sum_{k=1}^{n_e}\frac{\partial\beta_r}{\partial f_k}\sum_{i=1}^{M} N_i^m(x_n)df_{i,k}^p,\ \forall r\in\mathcal{C}_JQ
\end{array}\right. \tag{3.6}$$

Les sommes sur i ne portent, en fait, que sur m indices puisqu'en un point x il y a, au plus, m B–Splines non nulles. Le système (3.6) est linéaire pour les corrections $df^p_{i,k}$. On aura:

$$f^{p+1}_{i,k} = f^p_{i,k} - df^p_{i,k}, \qquad 1 \leq i \leq M, \quad 1 \leq k \leq n_e$$

C'est la nécessité de l'évaluation des dérivées partielles $\partial \mathcal{F}_j / \partial f_k$ qui a conduit au choix de la pression comme variable dépendante au lieu de la densité. Avec la densité il apparaitrait des termes $(\partial P/\partial \rho)_{T,X}$, $(\partial P/\partial T)_{\rho,X}$ et $(\partial P/\partial X)_{T,\rho}$ dans les deux premières équations du système (3.1) et non seulement les dérivées secondes "thermodynamiques":

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_{\rho,X}, \qquad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_{T,X}, \qquad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho \partial T}\right)_{X}, \qquad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho \partial X}\right)_{T}, \qquad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial X}\right)_{\rho}$$

seraient nécessaires au calcul du jacobien mais aussi, pour la méthode de Newton-Raphson, les dérivées secondes par rapport à la masse. Ces complications sont détournées en utilisant la pression plutôt que la densité comme variable dépendante.

3.2.1.2.3 Choix de la base La base et les points de collocation à utiliser pour obtenir la superconvergence sont définis dans De Boor [1978], p. 280. On se donne l'ordre des B-splines m et la grille des points de raccord. Les morceaux de polynôme se raccordent en ces points en assurant la continuité de la B-spline et de ses dérivées jusqu'à un ordre inférieur d'une unité de celui du système différentiel. Dans CESAM on utilise la grille équidistante $\{1, 2, \ldots n\}$, l'ordre des équations différentielles est $r = 1$ et pour l'ordre des B-splines on peut utiliser, sans changer de paramètre interne, $m = 1$ ou $m = 2$. Dans la source l'ordre maximal des B-splines est fixé par le paramètre `pm` des fichiers `cesam.parametres` des directory CESAM et EXPLOIT. Il est donc simple, si besoin, d'en fixer la valeur à une quantité supérieure à 2. Il n'y a pas lieu de faire d'autre intervention[5] toutes les dimensions étant calculées. Entre deux points de la grille les variables indépendantes sont interpolées par des morceaux de polynômes d'ordre $m + r = 2$ *i.e.* droites, ou 3 *i.e.* paraboles, celles-ci y étant raccordées entre elles par continuité. Avec cette base les points de la grille sont les points où se raccordent les polynômes par morceaux. La figure 3 représente cette base pour $n = 3$. Aux n points de la grille la solution est d'ordre $2m = 2$ ou 4 *i.e.* superconvergence. Entre les points de raccord la solution est d'ordre $m + r = 2$ ou 3; la superconvergence ne peut donc être exploitée directement. Il faut souligner que cette précision est relative à la variable indépendante $q = 1, 2, \ldots, n$. S'il est nécessaire de connaître la solution en des points autres que ceux définis par la grille, pour exploiter la superconvergence, il faut faire une interpolation d'ordre $2m$.

Dans ces conditions la dimension de la base de B-splines est $M = (n-1)m + r$. C'est le nombre des coefficients $f_{i,j}$ à calculer pour chaque inconnue non principale (indice j). Il faut rassembler un nombre égal d'équations de conditions et il y autant de conditions limites que d'inconnues non principales. Il faut donc $(n-1)m$ points de collocation c'est à dire m points de collocation entre deux points de raccord. Ces points sont disposés aux abscisses des zéros du polynôme de Legendre de degré 2 ou 1

[5] Si ce n'est toutefois la recompilation de la bibliothèque `cesam.a`.

définis sur chaque intervalle ramené à $[-1,1]$: ± 0.57735 ou 0. La superconvergence résulte de cette disposition. Ces points fixés, on épargne du temps calcul en y déterminant, une fois pour toutes, les valeurs des B-splines et de leurs dérivées premières.

CESAM utilise l'algorithme de De Boor [1978], selon la version de Schumaker [1981], chap. 5, pour calculer la valeur de toutes les B-splines non identiquement nulles en un point. Cet algorithme est basé sur un calcul de différences divisées pour une interpolation de Hermite, c'est l'objet de la routine bvald. Sa disposition pratique repose sur la construction d'une table d'abscisses où certaines sont répétées plusieurs fois ce sont les points de table, ils forment le *vecteur nodal*.

En chaque point de collocation l'ordre d'interpolation étant $m+r=3$ ou $m+r=2$ il y a 3 ou 2 B-splines non nulles. Chacune des Eq. (3.3) fait intervenir 3 ou 2 coefficients non identiquement nuls par inconnue et, selon qu'on utilise $m=1$ ou $m=2$ on dispose 1 ou 2 points de collocation entre deux points de raccord, la structure du jacobien de la méthode de Newton–Raphson est la suivante puisque les fonctions de base ont un support borné:

$$m=1: \quad \begin{pmatrix} \times & \times & & & & & \\ \circ & \circ & & & & & \\ & \times & \times & & & & \\ & & \cdot & & & & \\ & & & \cdot & & & \\ & & & & \cdot & & \\ & & & & \times & \times & \\ & & & & & \times & \times \\ & & & & & \circ & \circ \end{pmatrix}$$

$$m=2: \quad \begin{pmatrix} \times & \times & \times & & & & & & & \\ \times & \times & \times & & & & & & & \\ \circ & \circ & \circ & & & & & & & \\ & & \times & \times & \times & & & & & \\ & & \times & \times & \times & & & & & \\ & & & & \cdot & & & & & \\ & & & & & \cdot & & & & \\ & & & & & & \cdot & & & \\ & & & & & \times & \times & \times & & \\ & & & & & \times & \times & \times & & \\ & & & & & & & \times & \times & \times \\ & & & & & & & \times & \times & \times \\ & & & & & & & \circ & \circ & \circ \end{pmatrix}$$

à chaque point de collocation correspond une ligne de $\times$. Chacun d'eux[6] représente une matrice carrée d'ordre $n_e=6$ à coefficients non dentiquement nuls. Par exemple, avec $m=2$, à chaque intervalle entre deux points de raccord correspond un bloc de $m=2$ lignes de $(m+r)\times = (2+1)\times = 3\times$. Deux blocs consécutifs se raccordant

[6] Si on ne tient pas compte de la pression turbulente.

par $r = 1$ colonne de blocs. Les lignes correspondant aux conditions limites sont représentées par des $\circ$. Ce sont des matrices de format $3 \times n_e = 3 \times 6$ puisqu'il y a trois conditions limites à chaque extrémité de l'intervalle $[1, n]$ d'intégration.

Ce système linéaire est formé et résolu dans le sous–programme resout à partir des équations de la structure interne calculées dans static_m ou static_r. On peut remarquer qu'il suffit de garder en mémoire des lignes de longueur $(m + r)n_e = (2 + 1)6 = 18$ pour résoudre le sytème. Il comporte $n_e((n - 1)m + r) = 6((150 - 1)2 + 1) = 1794$ lignes pour $n = 150$. Cette remarque est exploitée dans la routine gausdp servant à résoudre le système.

S'il n'est pas tenu compte de la pression turbulente une équation est omise.

3.2.2 Intégration temporelle

L'évolution temporelle se décompose en deux problèmes: l'évolution de la composition chimique et l'évolution de l'entropie spécifique. La composition chimique pose des difficultés particulières car, même sur la séquence principale où les termes non linéaires des équations n'ont pas encore de rôle déterminant, les équations d'évolution sont délicates à intégrer. Quant à l'équation d'évolution de l'entropie spécifique, elle ne joue de rôle important que dans la pré ou post séquence principale pour lesquelles la recherche de précision est moins critique.

3.2.2.1 Evolution temporelle de la composition chimique

La méthode de résolution du problème de Dirichlet utilisée par CESAM pouvant-être, si besoin, d'un ordre de précision élevé, pour ne pas dégrader cette précision il faudrait que le schéma utilisé pour le problème de valeurs initiales soit d'ordre aussi élevé que possible. L'analyse montre qu'il est difficile d'utiliser une formule d'intégration d'ordre supérieur à 2 qui satisfasse aux contraintes imposées par la physique de l'évolution stellaire. Ces contraintes sont les suivantes:

- coexistence d'échelles de temps d'évolution très différentes, par exemple: le deutérium a un temps d'évolution caractéristique de l'ordre de l'année, celui de l'hydrogène est de l'ordre d'une centaine de million d'années; un tel problème différentiel est dit "raide",

- présence de zones convectives qui mélangent les espèces chimiques, comme il est souhaitable d'utiliser en tout point du modèle la même formule d'intégration on ne peut, pratiquement n'utiliser que des schémas à un ou deux pas, au delà la logique de l'algorithme gérant le mélange convectif et le mouvement des limites devenant très compliqué,

- conservation de la charge, du nombre de nucléons, la formule d'intégration doit donc conserver toute combinaison linéaire des abondances on dira par la suite qu'elle doit être "conservative",

- les abondances sont des quantités positives.

Le problème de l'évolution temporelle de la composition chimique étant un problème différentiel raide, afin de justifier les choix faits dans CESAM on donne quelques

indications concernant la résolution numérique de ce type de problème, pour plus d'informations consulter Hairer & Wanner [1991].

3.2.2.1.1 Problème raide Pour intégrer numériquement un problème différentiel de Cauchy:

$$y'(x) = f(x, y), \text{ sur } [x_0, x_N], \ y(x_0) = y_0$$

on se donne un pas $h > 0$ et, de proche en proche, à partir de la valeur initiale y_0, on obtient la solution numérique en utilisant une relation de la forme: $y_n = y_{n-1} + h\phi$ dans laquelle la fonction d'incrémentation ϕ dépend de façon plus ou moins compliquée de la solution obtenue aux points $x_i = x_0 + ih$, $0 \leq i \leq n$, $n \geq 1$. Ce faisant, deux notions se dégagent: la *convergence* et la *stabilité*.

On dit que la formule est convergente si, en $x \in [x_0, x_N]$ fixé ($x = x_0 + nh$, $h = (x - x_0)/n$, $n \leq N$), la limite pour $h \to 0$ de la solution numérique coïncide avec la solution exacte du problème différentiel soit:

$$\lim_{n\to\infty}(x_0 + nh) = x_N \Rightarrow \lim_{n\to\infty} y_n = y(x_N)$$

On montre que la plupart des formules classiques sont convergentes.

La stabilité est reliée au comportement à l'infini de la solution numérique. Une formule d'intégration est stable si, le pas h étant fixé:

$$\lim_{n\to\infty}(x_0 + nh) = \infty \Rightarrow \lim_{n\to\infty} y_n = y(\infty)$$

La non stabilité est due à l'accumulation des erreurs de troncature. Si celles-ci augmentent moins vite que la solution la formule est stable, instable sinon.

La stabilité dépend, non seulement de la formule d'intégration, mais aussi du problème différentiel posé. L'étude ne peut en être faite que pour des équations simples. Ainsi est-on obligé d'en restreindre la définition: pour qu'il y ait stabilité il ne faut pas que les erreurs de troncature croissent exponentiellement à l'infini, pour cette raison on ramène l'étude de la stabilité à celle de la solution numérique du problème type: $y'(x) = \lambda y(x)$, $\lambda \in C$. h étant fixé, la formule est stable si la solution numérique tend vers la solution nulle lorsque n tend vers l'infini. On dit alors que la formule est A-stable. De plus on la qualifiera de A–positive si, dans le domaine où elle est A-stable et $\lambda \in$, avec $y_0 > 0$, lorsque n tend vers l'infini, la solution numérique tend vers la solution nulle en restant positive.

De façon assez générale les formules implicites sont A–stables dans de grandes régions du plan complexe mais peu d'entre elles sont A–positives.

Avec un problème différentiel raide dans lequel les échelles de temps d'évolution des diverses variables sont très différentes la difficulté est double:

- obtenir une solution stable pour toutes les variables avec un pas temporel acceptable c'est à dire sans suivre pour autant la plus petite échelle de temps,
- intégrer les variables significatives avec une précision suffisante.

Pour l'évolution stellaire, à moins qu'on ne désire suivre en détail l'évolution de l'espèce chimique dont l'échelle de temps caractéristique est la plus petite, il faudra utiliser une formule pour problème raide. Ce faisant, il faut toutefois avoir conscience que toutes les variables ne seront pas intégrées avec la même précision, le

rôle du schéma pour problème raide est seulement de prévenir contre la croissance exponentielle des erreurs de troncature affectant les variables ayant les plus petites échelles de temps. Par ailleurs, l'analyse du comportement à l'infini du schéma ne peut être faite que sur le problème type à une dimension. Pour un système aussi complexe que celui de l'évolution temporelle de la composition chimique, la théorie n'est pas faite. En transposant à plusieurs dimensions un résultat établi pour une seule dimension il faut s'attendre à ce que, dans certains cas il puisse y avoir des difficultés. Dans ces cas le seul remède simple est de diminuer le pas temporel.

3.2.2.1.2 Conservation du nombre de nucléons Les équations d'évolution de la composition chimique sont de la forme générale:

$$\frac{dX_i}{dt} = \dot{X}_i = \sum_{j=1}^{m} a_j^i X_j + \sum_{\substack{j=1 \\ k \geq j}}^{m} a_{jk}^i X_j X_k + \sum_{\substack{j=1 \\ l \geq k \geq j}}^{m} a_{jkl}^i X_j X_k X_l$$

Les abondances X_i des m différentes espèces chimiques satisfont des relations linéaires de conservation (nombre de nucléons, charges) de la forme:

$$\sum_i^m \gamma_i X_i = cte \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \sum_i^m \gamma_i X_i = 0 = \sum_i^m \gamma_i \dot{X}_i.$$

(Cette dernière relation constitue d'ailleurs un test analytique qui permet de vérifier qu'il n'y a pas d'erreur dans le formalisme des équations d'évolution.)

Un algorithme linéaire d'intégration permet de conserver parfaitement de telles relations. Il est de la forme générale *cf.* Henrici [1962]:

$$y_n = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_{n-i} + h \sum_{i=0}^{k} \beta_i y'_{n-i}, \quad \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1, \ n \geq k$$

où α_i et β_i, $i = 1, \ldots, n$ sont des constantes, h le pas d'intégration, y_n le vecteur des abondances des espèces chimiques à l'intant $t_0 + hn$, t_0 l'instant initial et $k+1$ le nombre de points sur lesquels s'appuie l'algorithme $1 \leq k \sim 7$.

Avec un algorithme linéaire il y a conservation parfaite d'une combinaison linéaire des X_j puisque:

$$\begin{aligned} &\textstyle\sum_{j=1}^m \gamma_j X_{j,n} = \sum_{j=1}^m \gamma_j \sum_{i=1}^k \alpha_i X_{j,n-i} + \sum_{j=1}^m \gamma_j h \sum_{i=0}^k \beta_i \dot{X}_{j,n-i} = \\ &= \textstyle\sum_{i=1}^k \alpha_i \sum_{j=1}^m \gamma_j X_{j,n-i} + \sum_{i=0}^k \beta_i h \sum_{j=1}^m \gamma_j \dot{X}_{j,n-i} = \\ &= cte + 0. \end{aligned}$$

3.2.2.1.3 Résumé des contraintes Pour l'intégration numérique du système d'équations différentielles de l'évolution temporelle de la composition chimique il est nécessaire d'utiliser une formule:

- conservative, i.e. conservant toute combinaison linéaire des abondances $\sum_i \alpha_i X_i^t = cte$,
- stable ou, tout au moins A–stable, *i.e.* que les erreurs de troncature relatives aux variables dont l'échelle de temps d'évolution est la plus courte n'augmentent pas exponentiellement lorsque le pas temporel est grand par rapport à cette échelle de temps,

- positive,
- simple et précise.

La première condition est remplie pour la plupart des schémas classiques: Runge–Kutta ou schémas à pas liés, pour lesquels la fonction d'incrémentation dépend linéairement des dérivées temporelles estimées en divers points. La condition de A-stabilité est remplie si on utilise un schéma implicite. Il est souhaitable, par ailleurs, d'utiliser le même schéma d'intégration en tous les points du modèle.

Le fait que les limites des zones convectives se déplacent en fonction du temps et la nécessité du mélange convectif élimine malheureusement une partie de l'intérêt des schémas à pas liés qui possèdent des propriétés intéressantes de stabilité pour les problèmes raides *e.g.* schémas BDF. De même il ne sera possible d'utiliser des schémas de Runge–Kutta d'ordre supérieur à 1 que si on ne tient pas compte du mélange convectif pour les modèles intermédiaires comme avec la formule de Wagoner [1969].

Lorsque la diffusion microscopique est omise CESAM utilise un schéma d'intégration pour problème raide de type Runge-Kutta implicite de type LobattoIIIc *cf.* § 4.1.32 (Page 171). Avec diffusion microscopique, le schéma est le schéma d'Euler implicite *cf.* § 4.1.13 (Page 130).

3.2.2.1.4 Estimation de la précision de l'intégration Malgré un grand nombre d'essais il n'a pas été possible d'utiliser valablement une méthode numérique d'estimation de la précision de l'intégration, la raison étant principalement un coût excessif en calcul de ces méthodes; dans CESAM la précision est assurée par la limitation de la variation temporelle relative des abondances des éléments que l'utilisateur désire contrôler.

3.2.2.2 Evolution temporelle de l'énergie gravifique

La variation d'énergie gravifique:

$$\epsilon_{\rm G} = \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{\mu} + P\left(\frac{\partial V}{\partial t}\right)_{\mu}$$

où U est énergie interne spécifique, $V = 1/\rho$ le volume spécifique, et μ est la variable d'espace lagrangienne, est approchée par un schéma aux différences finies implicite:

$$\epsilon_{\rm G} \simeq \frac{U^{t+\Delta t} - U^t}{\Delta t} - \frac{P^{t+\Delta t}}{(\rho^{t+\Delta t})^2}\frac{\rho^{t+\Delta t} - \rho^t}{\Delta t} \tag{3.7}$$

où les quantités U^t et ρ^t à l'instant t sont calculées en utilisant l'équation d'état avec des valeurs de la pression et de la température obtenues par interpolation à μ *i.e.* masse constante, de la solution précédente:

$$\mu \hookrightarrow q \hookrightarrow P^t, T^t$$

et, pour la composition chimique X, par une interpolation directe par rapport à μ, d'ordre `mc`, ordre des B-splines d'interpolation de la composition chimique.

3.2.2.2.1 L'approximation de Kippenhahn Bien qu'elle soit formellement incorrecte *cf.* Cox & Guili [1968], Strittmatter *et al.* [1970], à une abscisse lagrangienne où la variation temporelle du nombre de particules libres n'est pas nulle *e.g.* dans un cœur convectif, l'approximation de Kippenhahn [1968]:

$$\epsilon_{\rm G} \sim T\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)$$

ou S est l'entropie spécifique. Cette approximation permet d'exprimer l'énergie gravifique explicitement en fonction des variations de pression et de température:

$$\epsilon_{\rm G} \sim T\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right) = c_{\rm P}\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\delta}{\rho}\frac{\partial P_{\rm gaz}}{\partial t}$$

est d'un emploi facile. Pour les étoiles de masse ($M \geq 1.2 M_\odot$) l'extension du cœur convectif varie au cours de l'évolution, créant ainsi une discontinuité, de la composition chimique donc de la densité suivant l'axe temporel; discontinuités dont il y a lieu de tenir compte dans l'évaluation de la dérivée temporelle de la densité dans Eq. 3.7 (Page 97). L'approximation de Kippenhahn qui n'utilise pas explicitement la dérivée d'une fonction discontinue permet de contourner la difficulté et faire supporter l'erreur par le numérique.

3.2.3 Les limites

3.2.3.1 Le centre

Les singularités centrales des équations de la structure interne écrites sous la forme Eq. 3.1 (Page 80) disparaissent sous la forme Eq. 3.3 (Page 84) utilisée par CESAM. Par ailleurs, le centre n'étant pas un point de collocation, il n'y a pas lieu d'introduire explicitement les formes limites des équations. Au centre les variables ont pour valeurs limites celles, *sans singularité*, des polynômes par morceaux qui approchent la solution, ce qui constitue un des avantages de la méthode.

3.2.3.2 La limite externe

Les fonctions qui dépendent de la physique utilisée: $P_{\rm b}(L,R)$, $P_{\rm gaz\ b}(L,R)$, $T_{\rm b}(L,R)$ et $M_{\rm b}(L,R)$ sont calculées, au point $q=n$ par une des routines de physique externe de la forme lim décrites au § 4.1.23 (Page 145).

Chapter 4

Description des sous-programmes

4.1 Description des routines de physique

Les routines de physique se divisent en deux groupes: les routines de physique "*externes*" qui dépendent de la physique retenue, ce sont les arguments du programme cesam et les routines de physique "*internes*" qui font appel aux précédentes pour calculer, sous une forme *ad-hoc* les grandeurs dont CESAM a besoin. La mise en œuvre de l'ensemble de ces routines a bénéficié de nombreuses collaborations avec, en particulier, J.Provost et G.Berthomieu.

On fait d'abord mention des règles de programmation imposées dans CESAM, puis on décrit les routines de physique dont certaines ne sont que l'application au problème de la structure interne des méthodes numériques dévoloppées au chapitre précédent Chap. 3 (Page 79) et enfin les routines purement numériques. Si nécessaire, la physique utilisée est développée à l'occasion de la description de la routine. Dans le but d'exploiter plus facilement cette notice, les routines sont décrites en suivant l'ordre alphabétique de leur dénomination.

4.1.1 Règles de programmation

Les arguments des routines sont en **unité cgs SAUF**: i) la **masse**, ii) la **luminosité**, iii) le **rayon** qui sont en unités solaires *i.e.* $M_\odot$, $R_\odot$ et $L_\odot$. Si, dans un sous–programme, l'évaluation de certaines variables de sortie fait intervenir des variables d'entrée dont les unités sont dans des systèmes différents, la cohérence entre les unités des variables d'entrée et de sortie est respectée. Par exemple, dans le sous programme thermo qui calcule les diverses grandeurs à partir des variables thermodynamiques et de leurs dérivées premières, la variable gradient ($\nabla = \partial \ln T / \partial \ln P$) est sans dimension. Le calcul de la variable dgradm=$(\partial \nabla / \partial m)$ nécessite la variable d'entrée m (masse) qui est sans dimension: $[m/M_\odot]$ ainsi dgradm est sans dimension et non pas en g^{-1}. La même règle est utilisée si l'un des paramètres du calcul est introduit par COMMON ou directement initialisé dans le sous–programme.

Les noms des variables sont choisis de façon à être facilement identifiables; toutefois, pour limiter l'espace mémoire utilisé, la place affectée à une variable ou à un tableau peut, au besoin et si elle est disponible, être utilisée pour une variable ou un tableau temporaire, dans ces cas cette utilisation est signalée par un commentaire indiquant que la variable/tableau est "vt"/"VT" c'est à dire utilisé temporairement

et que les quantités qu'il contient ne sont pas celles qui correspondent à son identification habituelle

Comme il a été justifié au § 3.2.1.2.2 (Page 91), bien que le triplet de variables thermodynamiques (température, densité,composition chimique) soit, dans l'ensemble, plus pratique que le triplet (température, pression,composition chimique), ce dernier est utilisé car il est mieux adapté à la méthode numérique utilisée par CESAM.

La composition chimique est un argument d'entrée de divers sous-programmes. Les proportions par mole – proportion par gramme / masse atomique – des divers éléments sont les coordonnées d'un vecteur très souvent appelé: xchim où les éléments chimiques **effectivement utilisés** sont souvent rangés dans l'ordre des masses atomiques croissantes[1], ordre qui est défini dans le programme tab_reac lors de la création des tables de réactions nucléaires *cf.* § 3.2.1.2.2 (Page 91). En cas de modification cet ordre n'est pas impératif sauf en ce qui concerne:

1. ^{1}H qui doit conserver l'indice 1
2. ^{3}He qui doit conserver l'indice `ihe4-1`, `ihe4` étant l'indice retenu pour ^{4}He.

Des indices spécifiques sont utilisés pour

1. l'abondance de ^{4}He: `ihe4`,
2. la vitesse angulaire Ω: `iw` *cf.* § 2.5.1 (Page 43),
3. l'abondance des éléments lourds Z: `iz`.

Le moment angulaire $\mathcal{M}_\Omega$ par unité de masse et l'abondance en éléments lourds par unité de masse Z ayant, dans certaines applications, des équations d'évolution similaires à celles de la composition chimique: mélange convectif, diffusion *etc...* , pour ces applications on utilise un "vecteur de composition chimique généralisée" *cf.* § 4.1.12.1 (Page 115), qui contient comme coordonnées, en plus des éléments chimiques proprement dits, le moment angulaire et l'abondance en éléments lourds. Le vecteur de composition chimique généralisée est crée dans la routine externe de type nuc de l'appel à cesam et, suivant l'utilisation retenue, il est ensuite "généralisé" au début du programme resout.

Les variables sont toutes de **type déclaré** sauf pour certains programmes de source externe. De façon stricte, ne transitent par les COMMONs, que des quantités fixes au cours de l'évolution[2].

Les constantes physiques fondamentales utilisées par CESAM sont réunies dans le common /ctephy/. Il est initialisé au début de chaque exécution par un appel au sous-programme ctes au début du programme resout. Il est possible d'utiliser des valeurs différentes pour les constantes physiques fondamentales en modifiant les données dans la routine ctes. Les constantes propres à chaque routine sont initialisées ou, si possible, recalculées à l'aide des constantes fondamentales au premier appel de cette routine, elles y sont conservées par l'utilisation de l'instruction FORTRAN `save`.

[1] Bien que ce ne soit pas une nécessité.

[2] Cette règle n'est pas respectée dans les routines de provenance externe.

Les paramètres fixes du modèle: masse totale, longueur de mélange, teneur initiale en hydrogène et en éléments lourds, etc... sont passés dans les divers sous-programmes par des `common` ainsi qu'il est décrit § 2.6.3 (Page 55).

Des commentaires et références permettent de suivre et de vérifier les algorithmes. Dans chaque sous programme les quantités entrantes et sortantes de la liste d'arguments sont répertoriées, parfois un peu trop succintement il est vrai.

Les notations utilisées pour les variables sont aussi explicites que possible, compte tenu d'une nécessaire concision *e.g.* on utilise gradad pour le gradient adiabatique $\nabla_{\rm ad}$; de même pour les dérivées *e.g.* les dérivées par rapport à $P_{\rm gaz} \equiv$ p ont un préfixe "d" et une extension[3] "p", exemple: dgradadp$\equiv \frac{\partial \nabla_{\rm ad}}{\partial P_{\rm gaz}}$.

4.1.2 Routine interne acc_rad

La routine interne acc_rad effectue le calcul des accélérations radiatives. Elle utilise le formalisme et les tables de G. Alécian décrits au § 4.1.12.4.3 (Page 121). Il convient de placer les tables: phi_psi2_100.dat ... phi_psi2_200.dat dans le directory figurant dans l'ordre OPEN de lecture des fichiers `list(j),j=1,8`. Chaque fichier correspond à une valeur de la masse clairement identifiée. On trouvera ces fichiers dans le directory DATA de la source. Cette routine est le regroupement et l'adaptation à CESAM des données calculées par les sous-programmes modul_ppxi et modul_grad de G.Alécian. La routine acc_rad est appelée par diffm_br, les forces radiatives ne sont calculées que si la variable logique `f_rad=.true.` de la NAMELIST nl_chim du fichier de données mon_modele.don est vraie. *cf.* § 2.5.1 (Page 43)

4.1.2.1 Description de acc_rad

1 Lors du premier appel: lecture des options, des données et préparation des tableaux nécessaires au calcul des accélérations. Les éléments utilisés par CESAM sont identifiés et les isotopes sont regroupés. L'accélération radiative de chaque élément non identifié peut, soit être mise à 0, soit être fixée égale à $-g_{\rm e}$ (gravité) l'élément ne subit alors aucune force externe. Pour chaque élément identifié, bien que le calcul de l'accélération radiative puisse être effectué, chacune des deux possibilités décrites précédemment peut être éventuellement utilisée. Pour ce faire, il convient de suivre, *avant compilation*, les intructions données en commentaires.

PB `Dans la présente version de CESAM, les seuls éléments identifiables sont: C, N, O, Ne, Na, Mg, Al, Si, S, Ar, Ca, et Fe. Il n'est pas possible de calculer des accélérations radiatives pour H, He, Li, Be par exemple.`

2 Puis, pour chaque appel: calcul des accélérations radiatives et calcul de la gravité effective sur chaque ion.

[3] Cette règle est souvent transgressée pour raison de concision.

4.1.2.2 Arguments de acc_rad

```
subroutine acc_rad(mstar,lum,ray,t,kap,dkapx,nel,ychim,ioni,grav,g_rad,dg_rad)
```

entrées mstar, lum, ray, t, kap, dkapx: masse totale, luminosité, rayon, température, opacité, dérivée/X (mole).

nel, ychim, ioni, grav: nombre d'électrons libres par volume, composition chimique par mole, taux d'ionisation, gravité.

in/out g_rad(i): vecteur des accélérations radiatives, la gravite est grav+g_rad sur l'élément d'indice i

sorties g_rad(i,j): matrice des dérivées des accélérations radiatives sur l'élément i / abondance par mole de l'élément j.

APPEL: Le sous-programme acc_rad est appelé par diffm_br.

4.1.3 Routine externe cesam

La routine externe cesam est, en fait, le programme principal, qui gère l'ensemble des calculs. Cette routine est appelée par le programme principal, *cf.* § 2.4 (Page 33).

4.1.3.1 Description de cesam

1 Saisie des informations du menu d'entrée;

2 lecture du fichier binaire d'initialisation ou de reprise;

3 premier appel à resout pour initialisation et, éventuellement, calcul d'un modèle initial de pré-séquence principale ou de séquence principale d'âge zéro homogène;

4 gestion du pas temporel, projection des variables de l'espace des B-splines à l'espace physique, tabulation de l'énergie gravifique et détermination des proportions d'énergie libérée par les différents cycles nucléaires et par la contraction gravitationnelle, calcul des quantités du fichier mon_modele.lis écriture du fichier de reprise, des fichiers caractéristiques de phases d'évolution, *e.g.* mon_modele_B.post, éventuellement formation du fichier mon_modele.osc, implémentation du fichier mon_modele.lis, fin du calcul ou bien:

5 appel à resout pour le calcul du pas temporel suivant éventuellement, gestion de l'initialisation de la pré-séquence principale , retour au point **4**.

4.1.3.2 Estimation de la fréquence de Brunt-Väissälä

Dans le fichier mon_modele.osc CESAM donne la valeur de la quantité:

$$A = \frac{1}{\Gamma_1}\frac{\partial \ln P}{\partial \ln R} - \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln R} \tag{4.1}$$

pour chaque couche du modèle. A permet l'estimation de la fréquence de Brunt-Väissälä, *cf.* § 2.7 (Page 61). Comme la dérivée de la densité par rapport à l'espace n'est pas directement accessible, dans les version précédentes de CESAM on utilisait:

$$A = \frac{R\delta}{H_{\rm p}}\left(\nabla_{\rm ad} - \nabla\right) - 4\pi R^3 \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial X_i}\frac{\partial X_i}{\partial M}. \tag{4.2}$$

Cette formulation présente l'inconvénient de nécessiter les dérivées de la densité par rapport aux différentes espèces chimiques, quantités inaccessibles avec les équations d'état tabulées si bien que la somme sur les espèces chimiques était réduite au seul élément H (*i.e.* $i \equiv 1$). Un autre inconvénient résulte de la non dérivabilité de la densité aux limites zone radiative/zone convective. Comme d'une part, ces limites ne peuvent coïncider *parfaitement* avec les points de grille et que, d'autre part, les équations d'évolution de la composition chimique ne sont pas résolues simultanément avec les équations de la structure, il se produit nécessairement un petit décalage entre la discontinuité de la composition chimique donc de la densité (ou seulement de leurs gradients) et le point limite où l'égalité des gradients est réalisée. De ces inconsistences résulte des oscillations, parfois violentes des valeurs de A obtenues par Eq. 4.1 (Page 103) et, de là, de la fréquence de Brunt-Väissälä. Le gradient de composition chimique étant supposé nul dans l'atmosphère restituée, ces difficultés ne s'y présentent pas et Eq. 4.2 (Page 103) peut être utilisée.

Dans la formulation numérique retenue dans CESAM *cf.* § 3.1.2 (Page 80), la pression P, le rayon, la masse, sont approchés par une spline en fonction de la variable d'indice q. On a donc accès à leurs dérivées premières et secondes[4]. L'idée est d'en déduire le gradient de densité puisque:

$$\rho = -\frac{1}{g}\frac{\partial P}{\partial R},\ g = \frac{\mathcal{G}M}{R^2}.$$

Ainsi on tiendra compte *implicitement* et de façon cohérente, à travers la formulation numérique, des détails de l'équation d'état et des discontinuités. On a:

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln R} = \frac{R}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial R} = \frac{R}{\rho g}\left(\frac{1}{g}\frac{\partial g}{\partial R}\frac{\partial P}{\partial R} - \frac{\partial^2 P}{\partial R^2}\right), \tag{4.3}$$

$$\frac{\partial g}{\partial R} = \frac{\mathcal{G}}{R^2}\frac{\partial M}{\partial R} - \frac{2g}{R} = 4\pi\rho\mathcal{G} - \frac{2g}{R}. \tag{4.4}$$

A des fins de référence et sous une forme adaptée à la programmation, on donne ci-après les expressions des deux termes de A (Eq. 4.1 (Page 103)) en fonction des quantités ξ, ζ et μ et de leurs dérivées par rapport à la variable d'espacement q.

[4] Si toutefois l'ordre d'approximation est suffisant; si tel n'est pas le cas, la forme Eq. 4.2 (Page 103) est utilisée.

- Avec les variables $\xi = \ln P$, $\zeta = \left(\frac{R}{R_\odot}\right)^2$ et $\mu = \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{2/3}$:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial R} = \frac{2R}{R_\odot^2} = \frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}, \quad \frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial \zeta}{\partial R}\frac{\partial}{\partial q} = \frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial}{\partial q},$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial R} = \frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial \zeta}{\partial R} = \frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}\frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta},$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial \ln R} = R\frac{\partial \ln P}{\partial R} = 2\zeta\left[\frac{\partial \xi}{\partial q}\Big/\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right]. \tag{4.5}$$

$$\frac{\partial P}{\partial R} = P\frac{\partial \ln P}{\partial R} = \frac{2RP}{R_\odot^2}\frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta}, \tag{4.6}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial q}{\partial \zeta} &= \frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-1} = -\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-2}\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial \zeta}{\partial q} \\ &= -\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-2}\frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial \zeta}{\partial q} = -\frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-3}\frac{\partial^2 \zeta}{\partial q^2},\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial \ln P}{\partial q} = \frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial \ln P}{\partial q} = \frac{2\sqrt{\zeta}}{R_\odot}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-1}\frac{\partial^2 \ln P}{\partial q^2},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 P}{\partial R^2} &= \frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial P}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R}\left\{\frac{2RP}{R_\odot^2}\frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\right\} \\ &= \frac{1}{R}\frac{\partial P}{\partial R} + \frac{1}{P}\left(\frac{\partial P}{\partial R}\right)^2 + \left[\frac{\partial P}{\partial R}\Big/\frac{\partial q}{\partial \zeta}\right]\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial q}{\partial \zeta} + \left[\frac{\partial P}{\partial R}\Big/\frac{\partial \ln P}{\partial q}\right]\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial \ln P}{\partial q} \\ &= \frac{\partial P}{\partial R}\left\{\frac{1}{R} + \frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial R} + \frac{2R}{R_\odot^2}\left[\frac{\partial^2 \xi}{\partial q^2}\Big/\frac{\partial \xi}{\partial q} - \frac{\partial^2 \zeta}{\partial q^2}\Big/\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right]\Big/\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right\}\end{aligned} \tag{4.7}$$

L'expression de A donnée par Eq. 4.1 (Page 103) est obtenue par Eq. 4.5 (Page 104) et Eq. 4.3 (Page 103) calculée à l'aide de Eq. 4.4 (Page 103), Eq. 4.6 (Page 104) et Eq. 4.7 (Page 104).

- Avec les variables $\xi = \ln P$, $\zeta = \frac{R}{R_\odot}$ et $\mu = \frac{M}{M_\odot}$:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial R} = \frac{1}{R_\odot}, \quad \frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial \zeta}{\partial R}\frac{\partial}{\partial q} = \frac{1}{R_\odot}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial}{\partial q},$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial R} = \frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial \zeta}{\partial R} = \frac{1}{R_\odot}\frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta},$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial \ln R} = R\frac{\partial \ln P}{\partial R} = \frac{R}{R_\odot}\left[\frac{\partial \xi}{\partial q}\Big/\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right]. \tag{4.8}$$

$$\frac{\partial P}{\partial R} = P\frac{\partial \ln P}{\partial R} = \frac{P}{R_\odot}\frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta}, \tag{4.9}$$

$$\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial q}{\partial \zeta} = \frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-1} = -\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-2}\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial \zeta}{\partial q}$$
$$= -\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-2}\frac{1}{R_\odot}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial \zeta}{\partial q} = -\frac{1}{R_\odot}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-3}\frac{\partial^2 \zeta}{\partial q^2},$$

$$\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial \ln P}{\partial q} = \frac{1}{R_\odot}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial \ln P}{\partial q} = \frac{1}{R_\odot}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right)^{-1}\frac{\partial^2 \ln P}{\partial q^2},$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial R^2} = \frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial P}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R}\left\{\frac{P}{R_\odot}\frac{\partial \ln P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \zeta}\right\}$$
$$= \frac{1}{P}\left(\frac{\partial P}{\partial R}\right)^2 + \left[\frac{\partial P}{\partial R}\Big/\frac{\partial q}{\partial \zeta}\right]\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial q}{\partial \zeta} + \left[\frac{\partial P}{\partial R}\Big/\frac{\partial \ln P}{\partial q}\right]\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial \ln P}{\partial q}$$
$$= \frac{\partial P}{\partial R}\left\{\frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial R} + \frac{1}{R_\odot}\left[\frac{\partial^2 \xi}{\partial q^2}\Big/\frac{\partial \xi}{\partial q} - \frac{\partial^2 \zeta}{\partial q^2}\Big/\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right]\Big/\frac{\partial \zeta}{\partial q}\right\}. \qquad (4.10)$$

L'expression de A donnée par Eq. 4.1 (Page 103) est obtenue par Eq. 4.8 (Page 104) et Eq. 4.3 (Page 103) calculée à l'aide de Eq. 4.4 (Page 103), Eq. 4.9 (Page 104) et Eq. 4.10 (Page 105).

PB `Ces dernières relations doivent être adaptées si on tient compte de la rotation.`

PB `Des tests héliosismologiques ont mis en évidence que ces relations, bien que formellement plus cohérentes, faisaient ressortir les incohérences entre équation d'état et opacités. Il convient de ne les utiliser qu'avec prudence. Dans la routine cesam ces relations sont programmées mais non utilisées.`

4.1.3.3 Arguments de cesam

Les arguments de cesam sont les noms les routines externes de physique et de dessin utilisées pour l'évolution.

```
subroutine cesam(etat,opa,conv,nuc,lim,t_tau,diffm,difft,perte,ctes,des)
```

entrées etat, opa, conv, nuc, lim: équation d'état, opacités, convection, réactions thermonucléaires, limite externe;

t_tau, diffm, difft, perte, ctes, des: loi $T(\tau)$, coefficients de diffusion, perte de masse, constantes, dessin de l'évolution.

APPEL: cesam est appelé par le programme principal.

4.1.4 Routine interne chim_gram

La fonction de cette routine est la transformation des valeurs des rapports d'abondances par mole en rapports d'abondances par masse en effectuant une renormalisation, au niveau de quelques 10^{-13}, de façon à ce que $X + Y + Z \equiv 1$. Une renormalisation, sur les abondances par mole est effectuée dans la routine evol, *cf.* § 4.1.18 (Page 139).

4.1.4.1 Description de chim_gram

1 Au premier appel, détermination de la masse des éléments hors réseau nucléaire, quantité quasi nulle si l'élément fictif `Ex` est explicitement considéré, *cf.* § 4.1.27 (Page 156),

2 détermination de la masse totale, normalisation.

PB `Des routines de réactions thermonucléaires ne faisant pas explicitement état de un, ou plusieurs éléments fictifs subsistent dans la source de CESAM pour des raisons historiques, il y a lieu d'en éviter l'usage.`

4.1.4.2 Arguments de chim_gram

```
subroutine chim_gram(xchim,dxchim,nuc_m)
```

in/out xchim, dxchim: composition chimique et dérivée par mole $\longrightarrow$ par gramme.

sorties nuc_m: masse atomique par gramme.

APPEL: chim_gram est appelé de divers endroits, depuis cesam particulièrement.

4.1.5 Routine interne colatm

La fonction de cette routine est la résolution, dans l'espace des B-splines, du sytème des équations de la restitution de l'atmosphère Eq. 4.36 (Page 152).

4.1.5.1 Description de colatm

1 Lors du premier appel : initialisation de la solution et des limites par appel à eqatm, initialisations diverses,

2 pour chaque point de collocation et chaque point limite, formation par appels à eqatm des Eq. 4.36 (Page 152) dans l'espace des B-splines,

3 résolution du sytème et évaluation des corrections de la méthode itérative, retour à lim_atm ou poursuite des itérations.

4.1.5.2 Arguments de colatm

```
subroutine colatm(ray,lum,xchim,bp,x,xt,knot,mstar,wrot,tdetau,etat,opa,conv)
```

entrées ray, lum, xchim, mstar, wrot: rayon luminosité composition chimique au raccord avec l'enveloppe, masse totale à l'instant t, vitesse angulaire en cas de rotation solide.

in/out bp, x, xt, knot: éléments pour la description de l'atmosphère.

externes tdetau, etat, opa, conv: noms des routines de loi $T(\tau)$, d'équation d'état, d'opacité, du calcul de la convection et des réactions thermonucléaires.

APPEL: colatm est appelé par la routine externe lim_atm de type lim.

4.1.6 Routine interne collision

Cette routine calcule les intégrales de collision $\Omega_{ij}^{(kl)}$, $k,l = 1,2$ en utilisant les tabulations de Paquette *et al.* [1986]. Ces tables ont été scannées de l'ApJS. Les quantités qui figurent dans les `data` sont les valeurs des intégrales de collision calculées par les formules d'interpolation pour les $\psi_{st}(n)$ (notations de Paquette *et al.* [1986]), et prolongées jusqu'à $\psi_{st} = 4$; au delà de $\psi_{st} = 4$, on utilise les approximations analytiques.

4.1.6.1 Description de collision

Au premier appel de la routine, on calcule les coefficients d'interpolation par un appel à sbsp1dn et on effectue quelques autres initialisations. De λ, la longueur de Debye, on déduit les valeurs des ψ_{ij} d'où l'interpolation des intégrales de collision et le calcul de leurs dérivées par rapport à chacune des abondances; distinction est faite entre potentiels attractifs et répulsifs. On économise des ressources de temps calcul en exploitant les symétries.

4.1.6.2 Arguments de collision

```
subroutine collision(nb,zb,mij,xi,ro,drox,t,omega11,zij,zpij,zsij,
1 domega11,dzij,dzpij,dzsij)
```

entrées — nb, zb, mij, xi: nombre de particules (1: indice de ^{1}H, nb: indice pour les électrons), charges, masses réduites, abondances par mole,

ro, drox, t: densité, dérivée logarithmique par mole, température.

sorties — omega11, zij, zpij, zsij: tables des intégrales de collision,

domega11, dzij, dzpij, dzsij: tables des dérivées des intégrales de collision.

APPEL: collision est appelé par la routine externe diffm_br de type diffm.

4.1.7 Routine externe de type conv

Cette routine calcule le gradient de température $\nabla \equiv \frac{\partial \ln T}{\partial \ln P}$ dans une zone convective et ses dérivées partielles par rapport aux variables locales.

4.1.7.1 Routines conv_jmj et conv_a0

La formulation utilisée dans les routines conv_jmj et conv_a0 est celle de la théorie de la longueur de mélange. CESAM utilise un formalisme proche de celui de Henyey *et al.* [1965]:

$$\nabla - \nabla^*_{\rm ad} = \frac{\Gamma(\Gamma+1)}{B},\ \nabla^*_{\rm ad} = \frac{\Gamma_2-1}{\Gamma_2}\frac{d\ln P_{\rm gaz}}{d\ln P},\ B = \xi\frac{l^4 g\delta(\rho c_{\rm p})^2}{H_{\rm p}K^2},$$
$$K = \frac{4acT^3}{3\kappa\rho},\ g = \frac{\mathcal{G}M}{R^2},\ \xi = \frac{1}{72}\left(3\frac{V}{Al}\right)^2\left(1+\frac{2Al}{3V\tau^2}\right)^2,$$

$P_{\rm gaz}$ est la pression gazeuse *i.e.* thermodynamique et radiative et P est la pression totale *i.e.* gazeuse + turbulente *cf.* § 4.1.7.4 (Page 109) $P = P_{\rm gaz} + P_{\rm tur}$, τ est l'épaisseur optique Rosseland de l'élément convectif:

$$\tau = \kappa\rho l = \kappa\rho\alpha H_{\rm p},$$

$l = \alpha H_{\rm p}$ est la longueur de mélange, $H_{\rm p} = -\frac{dR}{d\ln P} = P/\rho g$ est l'échelle de hauteur de pression. Γ est l'efficacité de la convection, zéro réel de la cubique:

$$\begin{array}{l} \Phi\Gamma^3 + \Gamma(\Gamma+1) = B(\nabla_{\rm rad} - \nabla^*_{\rm ad}), \\ \Phi = \varphi\left(1 + \frac{2Al}{3V\tau^2}\right)^{-1},\ \varphi = \frac{3}{2}\left(3\frac{V}{Al}\right)^{-1},\ \nabla_{\rm rad} = \frac{3}{16\pi acG}\frac{\kappa LP}{mT^4}. \end{array} \qquad (4.11)$$

La quantité V/A est le rapport du volume/surface de élément convectif. Le terme correctif $\frac{\partial \ln P_{\rm gaz}}{\partial \ln P}$ qui affecte le gradient adiabatique $\nabla_{\rm ad} \equiv \frac{\Gamma_2 - 1}{\Gamma_2}$ est introduit pour pour avoir une estimation du gradient de température lors d'une transformation adiabatique avec pression turbulente, ce qui est très approximatif et physiquement mal établi.

Dans conv_jmj et conv_a0 ces équations sont résolues avec $\xi = 1/162$, $\Phi = 9/4$ et $V/Al = 2/9$. La recherche du zéro de la cubique est faite à l'aide de l'algorithme de déflation.

La mise en œuvre de conv_jmj a bénéficié de la collaboration de J.Provost et de MJ.Goupil.

En un point d'une zone convective, il semble irréaliste que la longeur de mélange puisse être supérieure à la distance qui sépare ce point de la plus proche limite de la zone convective. Ainsi qu'Eggleton [1972] l'a proposé, dans la routine conv_a0 la longueur de mélange est prise égale à $l = \alpha_0 H_{\rm p}$ avec $\alpha_0 \equiv \alpha(1 - \nabla^*_{\rm ad}/\nabla_{\rm rad})$, la longueur de mélange utilisée devenant nulle à chaque limite zone radiative / zone convective. Cette approximation est justifiée par le fait que les grandes incertitudes inhérentes à la théorie ne justifient pas d'introduire une trop grande rigueur dans les détails, *cf.* Cox & Guili [1968]; par ailleurs, l'introduction de la distance exacte change la nature du problème qui devient intégro-différentiel ce qui complique considérablement la résolution numérique car introduire la distance à la plus proche limite n'est pas immédiat, du moins algorithmiquement, car le problème est implicite.

4.1.7.2 Routine conv_cm

Dans cette routine le gradient de température dans une zone convective est calculé selon les prescriptions de Canuto & Mazitelli [1991]; l'expression (63) de ces auteurs, mise sous la forme implicite équivalente:

$$0 = \nabla + \Phi(\nabla - \nabla^*_{\rm ad}) - \nabla_{\rm rad}$$

est résolue itérativement. Φ est donné par l'expression(32) de Canuto & Mazitelli [1991]:

$$\Phi = a_1\Sigma^m[(1 + a_2\Sigma)^n - 1]^p,\ \Sigma = 4A^2(\nabla - \nabla^*_{\rm ad}),\ A = \frac{l^2}{9\chi}\sqrt{\frac{g}{2H_{\rm p}}},\ \chi = \frac{K}{\rho c_{\rm p}}$$

ainsi que (5) et (6) avec $a_1 = 24.868$, $a_2 = 9.7666 \times 10^{-2}$, $m = 0.14972$, $n = 0.18931$ et $p = 1.8503$. Comme définie précédemment, la longueur de mélange est prise égale à $l = \alpha H_{\rm p}$. L'efficacité de la convection est alors l'expression (8):

$$\Gamma = \frac{\sqrt{\Sigma + 1} - 1}{2}.$$

4.1.7.3 Routines conv_cm_reza, conv_cgm_reza

Dans la routine conv_cm_reza, similaire à conv_cm, il est tenu compte de la quantité thermodynamique $\delta = (\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T})_P$. Dans la routine conv_cgm_reza, le calcul du gradient convectif est effectué selon les prescriptions de Canuto et al. [1996] avec la prescription de Bernkopf (Heiter et al. [2002]) Ces deux routines ont été mises en œuvre et mises à la disposition des utilisateurs de CESAM par Reza Samadi, LESIA , Observatoire de Paris

4.1.7.4 Pression turbulente

La théorie de la pression turbulente est très approximative; son expression est donnée par la relation phénoménologique:

$$P_{\rm turb} = \rho < v^2 >= a\rho v^2, \; v^2 = \frac{\Gamma}{1+\Gamma}\frac{\delta \alpha^2 P}{8\rho}(\nabla - \nabla^*_{\rm ad}),$$

où v est la "vitesse" des éléments convectifs; la valeur du coefficient phénoménologique a est mal déterminée, et varie suivant les auteurs, $a \sim 0.21$ pour Canuto & Mazitelli [1991], $a \sim 0.50$ chez Henyey *et al.* [1965] ou encore, $a = \pi/2$.

Dans les conditions de la zone convective solaire, ce n'est que lorsque la température est inférieure à 50 000K que le rapport $P_{\rm turb}/P$ dépasse 1/10 000; ce rapport présente un maximum, de l'ordre de 16%, vers 8 000K, *i.e.* à l'intérieur de l'atmosphère. Cette correction de pression turbulente n'est supérieure à 1% que dans une zone localisée sous la surface où les températures se situent dans l'intervalle 6 500K, 15 500K; ce qui correspond au début de la zone d'ionisation de l'hydrogène.

En tenant compte de la pression turbulente le problème devient totalement implicite; en effet, lorsque la pression totale, la température et la composition chimique sont connues, le calcul des grandeurs thermodynamiques nécessite la connaissance de la vitesse de convection, déduite elle même des grandeurs thermodynamiques calculées à partir de la pression gazeuse donc de la pression totale et de la pression turbulente. Dans CESAM ce problème implicite est résolu en considérant la pression totale et la pression gazeuse comme deux variables dépendantes.

La mise en place de la pression turbulente a bénéficié de la collaboration de S. Brun.

PB La correction empirique $\frac{d \ln P_{\rm gaz}}{d \ln P}$ affectant le gradient adiabatique rend le problème extrèmement instable. Dans CESAM cette correction est ignorée si la donnée CPTURB de la NAMELIST nl_conv est positive ou nulle.

PB CESAM permet d'abandonner (*respt.* de réintroduire) la pression turbulente en cours et à *fortiori* au début d'une évolution, le nombre d'équation de structure effectivement résolues est alors 6, (*respt.* 7).

4.1.7.5 Critères de convection

L'énergie est transportée par convection lorsqu'est vérifié *cf.* Cox & Guili [1968] p. 276 ou encore Kippenhahn & Weigert [1991] p. 39:

- soit le critère de Ledoux, qui tient compte du gradient de composition chimique:

$$\nabla_{\rm rad} < \nabla_{\rm ad} + \frac{\varphi}{\delta}\nabla_\mu \sim \frac{4-3\beta}{\beta}(\nabla^*_{\rm ad} - \nabla_{\rm rad}) + \nabla_\mu < 0, \ (\varphi \equiv \frac{d\ln\rho}{d\ln\mu}, \ \nabla_\mu \equiv \frac{d\ln\mu}{d\ln P})$$

  ici $\beta = P_r/P$, P_r est la pression de radiation, et:

$$\mu^{-1} = \mu_i^{-1} + \mu_e^{-1} \sim 2X + \frac{3}{4}Y + \frac{Z}{2} = \frac{3+5X-Z}{4}, \ \nabla_\mu = \frac{4\pi R^4}{\mathcal{G}M}\frac{P}{\mu}\frac{\partial\mu}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial M},$$

- soit le critère de Schwarzchild:

$$\nabla^*_{\rm ad} - \nabla_{\rm rad} < 0.$$

Le calcul de $\frac{\varphi}{\delta}\nabla_\mu$ nécessite la connaissance des taux d'ionisation partielle des divers éléments. Ces quantités ne sont pas explicitement accessibles avec les équations d'état tabulées dont on dispose. Pour le critère de Ledoux et pour le calcul de la fréquence de Brunt-Väissälä *cf.* § 2.7 (Page 61), § 4.1.3.2 (Page 103), on utilise:

$$\frac{\varphi}{\delta}\nabla_\mu = -\frac{4\pi R^2 H_{\rm p}}{\delta}\sum_{i=1,{\rm nelem}}\frac{\partial X_i}{\partial M}$$

dans les routines thermo, dgrad et cesam.

PB `Dans la présente version de` CESAM`, la somme ne porte que sur l'hydrogène.`

Suivant la valeur .true. ou .false., de la variable logique ledoux de la NAMELIST nl_conv, l'un ou l'autre de ces deux critères est utilisé. Le critère de convection est formulé dans les routines thermo et dgrad. Dans la restitution de la partie convective de l'atmosphère, le gradient radiatif sera modifié afin d'assurer la continuité du gradient de température, *cf.* § 4.1.23.4 (Page 149).

PB `C'est par soucis de cohérence avec ce qui précède que` $\nabla^*_{\rm ad}$ `a été utilisé dans la formulation des deux critères.`

PB `Dans les cas où le critère de Ledoux est utilisé, dans le calcul du gradient par la routine externe conv, le gradient` $\nabla^*_{\rm ad}$ `est remplacé par` $\nabla^\star_{\rm ad} \equiv \nabla^*_{\rm ad} + \frac{\varphi}{\delta}\nabla_\mu$ `afin de tenir compte de la correction due au gradient de composition chimique,` *cf.* § 4.1.7.5 (Page 110).

4.1.7.6 Localisation des limites des zones convectives

Hors atmosphère, cette localisation a pour but essentiel de fixer les limites de la zone à mélanger *i.e.* par mélange convectif, afin de localiser avec précision les discontinuités qui en résultent. Dans l'atmosphère cette localisation est sans objet puisque la composition chimique y est supposée constante.

Les limites des zones convectives sont déterminées dans la routine lim_zc. Dans un premier temps on localise en indice de couche, à l'aide du sous-programme dgrad, les intervalles où se produisent un changement de signe de la quantité $\nabla_{\rm rad} - \nabla^*_{\rm ad}$. Dans une seconde étape, la localisation de chaque changement de signe est affinée, par dichotomie, jusqu'à la précision définie par la variable loc_zc. Celle-ci ayant été initialisée dans la routine resout suivant le type de précision requis.Ainsi, avec la précision sa *cf.* Table 2.1 (Page 43), la limite de la zone convective solaire sera déterminée à mieux que loc_zc=10^{-10} de la largeur de l'intervalle la contenant *e.g.* $\sim \pm 0.1$ cm. C'est cette localisation améliorée qui sert de référence pour d'éventuelles extensions.

4.1.7.7 Extension des zones convectives

L'extension des zones convectives (jpz=.false. dans la NAMELIST nl_conv) et la pénétration convective (jpz=.true.) ont pour effet d'étendre la zone de mélange et de fixer le gradient de température égal au gradient adiabatique dans les zones d'extension. Dans CESAM on distingue undershooting[5] *i.e.* extension de la limite vers le centre, et overshooting *i.e.* extension de la limite vers la surface; leur importance est fixée, respectivement, par les paramètres ovshts et ovshti de la NAMELIST nl_conv; les zones convectives sont respectivement étendues de ovshts$\times H_{\rm p}$ et de ovshti$\times H_{\rm p}$. En ce qui concerne l'overshoot d'un cœur convectif de rayon $R_{\rm c}$, l'extension de la zone mélangée est limitée à min(ovshts$\times H_{\rm p}$, $R_{\rm c}\times$ ovshts) si jpz=.false.; elle a pour valeur $R_{\rm c}$, si jpz=.true.. Pour la pénétration convective, obtenue avec jpz=.true., l'extension de la zone mélangée $L_{\rm p}$ et du gradient adiabatiaque est déterminée par Zahn, [1991]:

$$L_{\rm p} = \frac{\zeta H_{\rm p}}{K_{\rm p}},\ K_{\rm p} = \frac{\partial \ln K}{\partial \ln P},$$

$\zeta \sim 0.5$=ovshti, étant un paramètre ajustable.

Les dispositions suivantes sont prévues:

- La pénétration convective n'a d'action que sur les limites inférieures des zones convectives.
- La pénétration convective et les overshooting n'ont d'effet que si la température est supérieure[6] à 500 000K, cette disposition a pour but d'éviter "d'overshooter" les zones convectives superficielles.
- Avec la présente version de CESAM on ne peut donc pas étendre une limite zone radiative / zone convective située dans l'atmosphère.

4.1.7.8 Arguments génériques des routines de type conv

```
subroutine conv(krad,grav,delta,cp,ro,hp,taur,gradrad,gradad,der,
1 grad,dgradk,dgradgr,dgradel,dgradcp,dgradro,
```

[5] Au sens d'Oxford, undershooting et overshooting sont utilisés de façon incorrecte, ce qui provoque des réactions épidermiques, parfois violentes, de collègues de pure expression anglo-saxonne; ici, en franglais, ils ont le sens, imagé, d'extension inférieure et supérieure.

[6] Pour modifier cette valeur il faut intervenir dans la routine lim_zc.

```
2 dgradhp,dgradtaur,dgradrad,dgradad,
3 gam,dgamk,dgamgr,dgamdel,dgamcp,dgamro,
4 dgamhp,dgamtaur,dgamrad,dgamad)
```

entrées krad, grav, delta, cp: conductivité radiative, gravité, δ, $c_{\rm p}$;

ro ,hp, taur, gradrad, gradad: densité, échelle de hauteur de pression, épaisseur optique de la bulle convective, gradient radiatif (éventuellement corrigé, *cf.* § 4.1.23.4 (Page 149)), gradient adiabatique – éventuellement corrigé du terme $\frac{d\ln P_{\rm gaz}}{d\ln P}$, *cf.* § 4.1.7.1 (Page 107);

der: der=.true., calcul des dérivées requis.

sorties grad, dgradk, dgradgr, dgradel, dgradcp, dgradro, dgradhp, dgradtaur, dgradrad, dgradad: gradient de température et dérivées;

gam, dgamk, dgamgr, dgamdel, dgamcp, dgamro, dgamhp, dgamtaur, dgamrad, dgamad: efficacité de la convection et dérivées.

APPEL: conv est appelé de divers endroits, en particulier de thermo, thermo_atm.

4.1.8 Routine interne coulomb_d

Cette routine effectue le calcul du logarithme de Coulomb et de ses dérivées par rapport à la densité et à l'abondance en ^{1}H ou ^{4}He, suivant le formalime simplifié de Michaux & Proffit [1993], p.250.

4.1.8.1 Arguments de coulomb_d

```
subroutine coulomb_d(zi,zj,thetae,ro,x,t,lnlambij,
1 lnlambijr,lnlambijx,cij,cijr,cijx)
```

entrées zi, zj, thetae: charges des éléments `i` et `j`, `thetae`=1 pour un mélange hélium/hydrogène;

ro, x, t: densité, abondance par volume de ^{1}H ou ^{4}He, température.

sorties lnlambij, lnlambijr, lnlambijx, cij, cijr, cijx: logarithmes de Coulomb et dérivées par rapport à ρ et ^{1}H ou ^{4}He.

APPEL: coulomb_d est appelé par la routine externe diffm_mp.

4.1.9 Routine externe de type ctes

Cette routine sans argument est appelée au début de la première exécution du sous-programme `resout` pour initialiser le COMMON/`ctephy`/ qui regroupe les principales constantes physiques *cf.* § 2.6.3 (Page 55).

4.1.9.1 Quelques routines de type ctes

- ctes: routine de référence dont la source principale des données de physique est le CRC Handbook of chemistry and physics 75th edition 1994, D.R. Lide et al. CRC press Boka Raton, Ann Arbor, London, Tokyo.

- ctes_98: identique à ctes avec des valeurs plus récentes pour quelques constantes.

APPEL: ctes est appelé par resout.

4.1.10 Routine externe de type des

Cette routine qui n'a que des arguments d'entrée utilise le logiciel de dessin PGPLOT[7], pour tracer au fur et à mesure du calcul le diagramme HR, la répartition en zone radiative / zone convective, les variables de structure et des abondances en fonction de la masse ou du rayon.

Le rayon total d'une étoile change au cours de son évolution et il arrive que les graphes de la représentation des variables de structure en fonction du rayon utilisent mal le domaine spatial de l'épure. Lorsque le rayon total devient, soit supérieur aux 9/10, soit inférieur aux 3/4, du domaine on effectue un changement d'échelle qui a pour effet de ramener la surface aux 3/4 du domaine. Tant que l'échelle en rayon reste fixée, un tiret vertical – aux 3/4 du domaine – matérialise la valeur antérieure du rayon qui a servi à définir l'échelle, celà permet de se rendre compte de l'évolution du rayon total en fonction du temps.

4.1.10.1 Description des routines de type des

1 Initialisations diverses relatives au logiciel PGPLOT,

2 tracé des abondances par unité de masse, ^{1}H et ^{4}He sont dessinées en valeurs réelles, les abondances des autres éléments sont normalisées sur [0,1], les coefficients de normalisation sont indiqués sur l'écran pour chaque variable,

3 tracé des variables de structure normalisées, pression, température, rayon ou masse et luminosité, les coefficients de normalisation sont indiqués sur l'écran pour chaque variable,

4 tracé du diagramme HR, sur les deux axes, les échelle sont déterminées lors du premier appel en fonction de la valeur de la masse initiale la masse initiale,

5 tracé des zones convectives, à l'issue de chaque pas temporel un trait plein indique les intervalles de masse affectées par la convection.

[7] Distribué gratuitement par GNU.

4.1.10.2 Arguments génériques des routines de type des

```
subroutine des(bp,q,n,qt,knot,chim,mc,nc,mct,knotc,teff,
1 r2,m23,age,lim,lconv,m_zc,mstar)
```

bp, q, n, qt, knot, chim, mc, nc, mct, knotc, r2, m23: éléments pour la détermination des variables de structure, la composition chimique, et l'interpolation inverse;

age, lim, lconv, m_zc, mstar: âge, nombre, nature masses aux limites zone radiative / zone convective, masse totale.

4.1.10.3 Quelques routines de type des

des_r: dessin en fraction de rayon solaire pour les abondances et les variables de structure,

des_m: dessin en fraction de masse solaire pour les abondances et les variables de structure,

no_des: évite, non seulement, d'effectuer le dessin, mais surtout de faire appel à la librairie PGPLOT lorsqu'elle fait défaut dans le système; dans cette éventualité, il convient aussi de supprimer l'instruction `call pgend` dans la routine cesam.

APPEL: des est appelé par cesam.

4.1.11 Fonction interne dgrad

Cette fonction forme le critère de convection de Schwarzschild ou de Ledoux suivant les prescriptions décrites au § 4.1.7.5 (Page 110).

4.1.11.1 Description de dgrad

1 Après quelques initialisations, appel à l'équation d'état et calcul de l'opacité ,

2 calcul du gradient radiatif avec le cas particulier du centre,

3 formation du critère de convection de Schwarzschild ou Ledoux.

4.1.11.2 Arguments de dgrad

```
function dgrad(pt,p,t,dlpp,xchim,m,l,r,dxchim,w,etat,opa,nuc)
```

entrées pt, p, t, dlpp, xchim, dxchim: Pression totale et gazeuse, température, $\frac{\partial \ln P_{\rm gaz}}{\partial \ln P}$, composition chimique et dérivée;

m, l, r, w: masse, luminosité, rayon, vitesse angulaire.

externes etat, opa, nuc: noms des routines externes d'équation d'état, d'opacité , de réactions thermonucléaires.

APPEL: dgrad est appelé de lim_zc.

4.1.12 Routine externe de types diffm et difft

Pour chaque élément du vecteur de composition chimique généralisée, l'équation de diffusion, avec les termes nucléaires, est formulée dans la routine interne eq_diffus à l'aide des coefficients de diffusion microscopique calculés dans la routine externe diffm, et des coefficients de diffusion turbulente et de mélange (moment angulaire inclus) sont introduits par l'intermédiaire de la routine externe difft; en particulier le coefficient de diffusion turbulente de mélange pour les parties mélangées et, pour les zones radiatives, le coefficient de diffusion turbulente d_turb de la NAMELIST nl_chim du fichier de données mon_modele.don.

4.1.12.1 Vecteur de composition chimique généralisée

La diffusion de Z, *i.e.* des métaux pris dans leur ensemble et celle du moment angulaire, vérifient des équations de diffusion similaires à celles des espèces chimiques proprement dites. Il est pratique de généraliser le vecteur de composition chimique en lui adjoignant une ou plusieurs composantes, l'intégration des équations d'évolution se faisant alors à l'aide du même algorithme formel. Selon la physique utilisée, le vecteur de composition chimique généralisée comportera jusqu'à $n_{\rm elem} \equiv n_{\rm chim} + 2$ éléments:

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}(m,t) \equiv (x_1, \ldots, x_{n_{\rm chim}}, Z, \Omega)^T.$$

Dans les zones mélangées *i.e.* les zone convective et leurs extension par pénétration convective, le vecteur de composition chimique généralisée est homogénisé en utilisant un coefficient de diffusion de mélange typiquement, $d_M = 10^{13}$, ordre de grandeur du coefficient de diffusion turbulente obtenu comme le produit de valeurs typiques de la vitesse de convection et de l'échelle de hauteur de pression. En l'absence de diffusion, le mélange est effectué par moyenne spatiale couplée avec les réactions thermonucléaires *i.e.* par résolution numérique du problème intégro-différentiel *cf.* § 4.1.32 (Page 171). L'introduction de la vitesse angulaire dans CESAM a bénéficié de collaborations avec MJ.Goupil.

4.1.12.2 Equation de diffusion des espèces chimiques

L'équation d'évolution temporelle des espèces chimiques:

$$\frac{Dx_i}{Dt} = -\frac{\partial F_i}{\partial m} + \Psi_i, \ 1 \leq i \leq n_{\rm elem} \tag{4.12}$$

contient une partie diffusive, $-\frac{\partial F_i}{\partial m}$, et une partie nucléaire, Ψ_i. Cette dernière est calculée par la routine externe de type nuc utilisée, *cf.* § 4.1.27 (Page 156). La partie diffusive a pour expression:

$$F_i = -4\pi R^2 \rho \left(4\pi R^2 \rho D_i \bullet \nabla_{\rm m} \mathcal{X} - v_i x_i \right), \tag{4.13}$$

les composantes $d_{i,j}, \ i \neq j$, du vecteur:

$$D_i(m,t) \equiv (d_{i,1}, \ldots, d_{i,n_{\rm elem}})^T,$$

sont les coefficients, $d_{i,j} = d^\star_{i,j}$, de diffusion microscopique de l'élément d'indice i par rapport à l'élément d'indice j; la (i,i)-ième composante:

$$d_{i,i} \equiv d^\star_{i,i} + d_{\rm T} + d_{\rm M}$$

inclue les coefficients de diffusion turbulente $d_{\rm T}$ et de mélange $d_{\rm M}$; $v_i(m,t)$ est la vitesse de sédimentation; on a noté à l'aide du symbole "$\bullet$" le produit scalaire:

$$D_i \bullet \nabla_{\rm m}\mathcal{X} \equiv \sum_j d_{i,j}\frac{\partial x_j}{\partial m}. \tag{4.14}$$

Pour un élément chimique d'indice i fixé, les coefficients de l'équation de diffusion sont de deux sortes:

1. les coefficients v_i de x_i, dans Eq. 4.13 (Page 115), codés `v(i)`,
2. les coefficients de diffuusion microscopique $d^\star_{i,j}$, de $\frac{\partial x_j}{\partial m}$, dans Eq. 4.14 (Page 116), codés `d(i,j) = d(nbelem(j-1)+i)` et calculésdans les routines de type diffm,
3. les coefficients $d_{i,i}$, de $\frac{\partial x_j}{\partial m}$, dans Eq. 4.14 (Page 116) sont ajoutésés à `d(i,i) = d(nbelem(i-1)+i)` dans les routines de type difft,

les dérivées par rapport à x_k, $k = 1, n_{\rm elem}$ sont respectivement notées `dv(i,k) = dv(nbelem(k-1)+i)` et `dd(i,j,k) = dd(nbelem(nbelem(k-1)+j-1)+i)`.

4.1.12.3 Formalisme de Michaud & Proffit.

La formulation simplifiée[8] de Michaud & Proffit [1993] du calcul des coefficients de diffusion microscopique suppose que les éléments lourds sont éléments traces, *i.e.*un élément autre que ^{1}H et ^{4}He ne diffuse que par rapport aux protons. Cette formulation, qui est une simplification de celle de Burgers décrite au § suivant, est implémentée dans la routine externe diff_mp, *cf.* § 4.1.12.7 (Page 128).

4.1.12.4 Formalisme de Burgers.

La routine diffm_br, *cf.* § 4.1.12.7 (Page 128), permet de calculer les coefficients de diffusion microscopique en résolvant les équations de transport en tenant compte, éventuellement, des accélérations radiatives. On tient compte, de façon approximative, de l'ionisation partielle des éléments chimiques et de la dégénérescence des électrons. Comme Proffitt & Michaud [1991], CESAM utilise une formulation reposant sur le poids moléculaire moyen μ plutôt que sur les concentrations. Avec CESAM les inconnues sont les abondances par mole, *i.e.*$x_i \equiv X_i/\nu_i$. On reformule ci-après le système des équations de Burgers pour les x_i et μ. Le principe de la méthode numérique, dû à Burgers [1969], Iben & MacDonald [1985], consiste à remarquer que la résolution d'un système linéaire permet d'écrire la vitesse de diffusion w_i de la particule i sous la forme:

$$w_i = v_i + \sum_j b_{ij}\frac{dx_j}{dx}.$$

Iben & MacDonald [1985] n'ont pas tenu compte des "residual heat flow vector" qui furent introduits par la suite par Cox *et al.* [1989] et repris par Thoul *et al.* [1994].

On utilise les notations suivantes:

[8] Valable tant qu'il existe des protons.

- c nombre d'ions, il y a $c+1$ espèces de particules, *i.e.* ions+ électrons,
- E champ électrique,
- e charge de l'électron, en unité électrostatique, et indice de la particule "électron",
- $g_{\rm G}$ accélération due à la gravité,
- g_Ω accélération centrifuge,
- $g_{\rm e}$ accélération effective,
- $g_{\rm Ri}$ accélération radiative sur la particule i,
- g_i accélération due à la gravité effective et aux forces radiatives sur i,
- $g_{\rm t}$ accélération totale,
- $g_{j,i}$ poids statistique du fondamental du niveau d'ionisation j de l'élément chimique i,
- $m_e = \nu_e m_u$ masse de l'électron,
- $m_i \equiv \nu_i m_u$ masse de l'élément chimique i,
- $m_{ij} \equiv \frac{m_i m_j}{m_i+m_j}$ masse réduite des particules d'indices$i$ et j,
- $m_u = 1/N_0$ masse atomique unité, inverse du nombre d'Avogadro,
- n_e nombre d'électrons par unité de volume,
- n_i nombre d'ions de l'élément chimique $i \neq e$ par unité de volume,
- $n_{j,i}$ nombre d'ions de l'élément chimique i par unité de volume, dans l'état d'ionisation $j = 0, \ldots, Z_i$,
- r rayon, variable d'espace eulérienne,
- T, P, ρ température, pression gaz parfait, densité,
- t temps,
- $\mathcal{V} = \frac{\partial r}{\partial t}$ vitesse d'entrainement du fluide, $\mathcal{V} \sim 0$ (hypothèse de l'équilibre quasi-statique),
- w_i vitesse de diffusion de la particule i par rapport à la vitesse moyenne du fluide,
- X_i proportion en masse de l'abondance de l'élément chimique i, $\sum_i X_i \equiv 1$,
- $x_i \equiv X_i/\nu_i$ proportion par mole de l'abondance de l'élément chimique i,
- $x_{j,i}$ taux d'ionisation du niveau d'ionisation j de l'ion i,

- Z_i charge de la particule i, $Z_e = -1$,
- $\bar{Z}_i$ charge moyenne de l'élément i avec ionisation,
- η paramètre de dégénérescence,
- μ poids moléculaire moyen,
- ν_e "masse atomique" de l'électron, $\nu_e = m_e/m_u$,
- ν_i masse atomique de l'élément chimique i,
- $\chi_{j,i}$ potentiel d'ionisation du niveau d'ionisation j de l'élément i.

PB `Les notations ne sont pas totalement cohérentes en ce qui concerne les électrons.`

4.1.12.4.1 Charge moyenne des ions On utilise l'équation de Saha (Cox & Guili [1968], formule 15-30) dans laquelle on limite les fonctions de partition aux poids statistiques des niveaux fondamentaux:

$$\frac{n_{j-1,i}}{n_{j,i}} = \frac{g_{j-1,i}}{g_{j,i}} \exp\left(\eta - \Delta\mu + \frac{\chi_{j,i}}{kT}\right) \equiv \varphi_{j,i},\ j = 1, \ldots, Z_i. \tag{4.15}$$

Le taux de dégénérescence η vérifie:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{n_e}{4\pi}\left(\frac{h^2}{2m_e kT}\right)^{\frac{3}{2}},$$

$F_{\frac{1}{2}}(\eta)$ est la fonction de Fermi-Dirac (Clayton [1968], formule 2-57). $\Delta\mu$ est une correction numérique introduite par Eggleton *et al.* [1973] pour simuler l'ionisation de pression et éviter la recombinaison à haute température (Kippenhahn & Weigert [1991] §14.6):

$$\Delta\mu = n_e c_F \left(\frac{a_0}{\bar{Z}}\right)^3 (1+\frac{20\chi_0}{kT}),\ a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e e^2},\ \bar{Z} = X+2Y+8Z,\ c_F = 15,\ \chi_0 = 13.6.$$

Cette correction est utilisée dans la routine saha_eff.

PB μ `n'est pas, dans ce paragraphe, le poids moléculaire moyen.`

L'expérience des calculs a montré que le formalisme d'Eggleton *et al.* [1973], même avec la modification de Proffit & Michaud [1991] formule (4), donnait des taux d'ionisation moyens avec des paliers et des gradients beaucoup plus marqués que ceux obtenus avec une meilleure prise en compte de l'ionisation de pression. Ainsi, au centre du Soleil, le formalisme d'Eggleton *et al.* [1973] donne un taux d'ionisation de 100% pour Fe XXV alors que le calcul plus précis de Gabriel [1997] ne donne que 85%.

Pour tenir compte de l'ionisation de pression et d'éviter la recombinaison, la routine saha de CESAM utilise une correction numérique dérivée de l'analyse de

Clayton [1968] p. 140-145. Le potentiel d'ionisation est réduit lorsque la distance moyenne entre les ions devient de l'ordre de grandeur de la longueur de Debye:

$$R_{\rm D} = \sqrt{\frac{kT}{4\pi e^2 \rho N_0 \zeta}}, \quad \zeta = \sum_{i \neq e} \bar{Z}_i(\bar{Z}_i + 1)x_i$$

et se réduit[9] à:

$$\chi'_{j,i} = \max(0, \chi_{i,j} - \chi^{\rm C}_{i,j}), \quad \chi^{\rm C}_{i,j} = \frac{je^2}{R_{\rm D}}.$$

Cette correction appliquée seulement sur le potentiel d'ionisation s'est avérée insuffisante pour éviter la recombinaison à haute température, en particulier, de l'ion HII. La routine saha utilise un ajustement *numérique* agissant à la fois sur le potentiel d'ionisation et le quotient des fonctions de partition celles-ci devant être tronquées de façon cohérente avec la diminution des potentiels d'ionisation (*cf.* Clayton [1968] figure 2-16, p. 146) ce qui n'est pas possible dans la présente situation puisque les fonctions de partition sont limitées aux poids statistiques des niveaux fondamentaux. L'artifice consiste en une diminution progressive de 1 à 0 du rapport des poids statistiques des niveaux fondamentaux $g_{j-1,i}/g_{j,i}$, dès que, pour le niveau d'ionisation $j = 1, \ldots, Z_i$ de l'élément chimique i, la quantité:

$$x = \frac{\chi_{i,j}}{\chi'_{j,i}} - 1$$

devient inférieure à une valeur p fixée. L'expérience des calculs a montré que la valeur $p = 4$ permettait de retrouver, pour des modèles d'étoiles de la séquence principale de $1M_\odot$ et $1.4M_\odot$ respectivement, des taux d'ionisation voisins de ceux obtenus avec un calcul plus exact, mais beaucoup plus lourd, de la correction de pression d'ionisation. La fonction de raccordement $f(x)$ utilisée est un morceau de cubique sur $[0, p]$, de pente nulle en $x = 0$ et $x = p$:

$$f(x) = 0 \text{ si } x \leq 0, \ \left(\frac{x}{p}\right)^2 \left[-2\left(\frac{x}{p}\right) + 3\right] \text{ si } x \in [0, p], \ f(x) = 1, \text{ si } x \geq p.$$

L'équation de Saha 4.15 devient:

$$\frac{n_{j-1,i}}{n_{j,i}} = \frac{g_{j-1,i}}{g_{j,i}} f(x) \exp\left(\eta + \frac{\chi_{j,i}}{kT}\right) \equiv \varphi_{j,i}, \ j = 1, \ldots, Z_i. \tag{4.16}$$

On obtient ainsi l'ionisation totale du niveau $j-1$ lorsque $g_{j-1,i}/g_{j,i} f(x) = 0$ *i.e.* dès que $\chi_{i,j} \leq \chi^{\rm C}_{i,j}$.

Le nombre de particules $n_i, \ i \neq e$ est:

$$\begin{aligned}
n_i &= \sum_{j=0}^{Z_i} n_{j,i} = n_{Z_i,i}\left(1 + \sum_{j=0}^{Z_i-1} \frac{n_{j,i}}{n_{Z_i,i}}\right) = n_{Z_i,i}\left(1 + \sum_{j=0}^{Z_i-1} \prod_{k=j+1}^{Z_i} \varphi_{k,i}\right) \\
&= n_{Z_i,i}\left(1 + \frac{n_{0,i}}{n_{Z_i,i}} + \frac{n_{1,i}}{n_{Z_i,i}} + \ \ldots \ + \frac{n_{Z_i-1,i}}{n_{Z_i,i}}\right) \\
&= n_{Z_i,i}\left(1 + \varphi_{1,i}\varphi_{2,i}\varphi_{3,i} \ \ldots \ \varphi_{Z_i,i} + \varphi_{2,i}\varphi_{3,i} \ \ldots \ \varphi_{Z_i,i} + \ \ldots \ + \varphi_{Z_i,i}\right) \\
&= n_{Z_i,i}\left(1 + \varphi_{Z_i,i}\left(1 + \varphi_{Z_i-1,i}\left(1 + \varphi_{Z_i-2,i}\left(1 + \ldots \varphi_{1,i}\right)\right)\right)\right)
\end{aligned}$$

[9] je est la charge de l'ion.

et comme:

$$\varphi_{j+1,i} = \frac{n_{j,i}}{n_{j+1,i}} = \frac{n_{j,i}}{n_i}\frac{n_i}{n_{j+1,i}} = \frac{x_{j,i}}{x_{j+1,i}},$$

on a:

$$\begin{aligned} x_{Z_i,i} \equiv \frac{n_{Z_i,i}}{n_i} &= \frac{1}{(1+\varphi_{Z_i,i}\,(1+\varphi_{Z_i-1,i}\,(1+\varphi_{Z_i-2,i}\,(1+\ldots\varphi_{1,i}))))}, \\ x_{j,i} &= \varphi_{j+1,i}\,x_{j+1,i},\ j = Z_i-1,\ldots,0. \end{aligned}$$

La charge moyenne de l'élément chimique i et le nombre d'électrons par mole et par unité de volume s'écrivent respectivement:

$$\bar{Z}_i \equiv \sum_{j=1}^{Z_i} j x_{j,i},\ x_e = \sum_{j\neq e} \bar{Z}_i x_i,\ n_e = \rho N_0 x_e = \rho N_0 \sum_{j\neq e} \bar{Z}_i x_i.$$

On a aussi:

$$X_i = \frac{n_i \nu_i m_u}{\sum_j n_j \nu_j m_u} = \frac{n_i \nu_i}{\rho N_0},\ x_i = \frac{X_i}{\nu_i} = \frac{n_i}{\rho N_0}.$$

4.1.12.4.2 L'équation de diffusion Pour la particule i l'équation de diffusion s'écrit (Iben & Mc Donald [1985]):

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 n_i w_i) + \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{\text{nucl.}}$$

et les équations de Burgers [1969] Eq. (18.4) et (18.5), voir aussi Cox *et al.* [1989], Thoul *et al.* [1994]:

$$\frac{dP_i}{dr} - \frac{\rho_i}{\rho}\frac{dP}{dr} - n_i \bar{Z}_i e E = \sum_j K_{ij}(w_j - w_i) + \sum_j K_{ij} z_{ij} \frac{m_j r_i - m_i r_j}{m_i + m_j} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{5}{2} n_i k \frac{dT}{dr} = &- \frac{5}{2}\sum_j K_{ij} z_{ij} \frac{m_j(w_j - w_i)}{m_i + m_j} - \frac{2}{5} K_{ii} z''_{ii} r_i \\ &- r_i \sum_{j\neq i} K_{ij} \frac{3m_i^2 + m_j^2 z'_{ij} + \frac{4}{5} m_i m_j z''_{ij}}{(m_i + m_j)^2} \\ &+ \sum_{j\neq i} K_{ij} \frac{m_i m_j (3 + z'_{ij} - \frac{4}{5} z''_{ij})}{(m_i + m_j)^2} r_j. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Les équations de conservation dynamique et statique de la masse et de la charge ont respectivement pour expression:

$$\sum_i \nu_i n_i w_i = 0,\ e\sum_i \bar{Z}_i n_i w_i = 0,\ \sum_i \bar{Z}_i n_i = 0,\ \sum_i X_i = \sum_i \nu_i x_i = 1. \quad (4.19)$$

La densité partielle ρ_i de la particule i est définie par:

$$\rho_i = \rho X_i = \rho x_i \nu_i = n_i \nu_i m_u,\ \sum_i \rho_i = \rho = \sum_i n_i \nu_i m_u, \quad (4.20)$$

et:

$$n_i = \rho N_0 \frac{X_i}{\nu_i} = \rho N_0 x_i.$$

Le second terme du membre de gauche de l'équation (4.17) correspond à la force externe qui s'exerce sur la particule i, à savoir, la gravité corrigée de l'accélération radiative.

4.1.12.4.3 Accélérations. m étant la masse à l'intérieur de la sphère de rayon r, la gravité effective $g_{\rm e}$ qui compense le gradient de pression dans l'équilibre quasi-statique, est somme de la partie purement gravitationnelle $g_{\rm G} = -\mathcal{G}m/r^2$, de l'accélération centrifuge moyenne $g_\Omega = \frac{2}{3}r\Omega^2$ et d'une partie radiative $g_{\rm R}$. On postule que $g_{\rm R}$ est la somme, pondérée par les masses partielles des particules ($\sum_{i\neq e} n_i m_i$) des accélérations radiatives $g_{{\rm R}i}$:

$$g_{\rm R} = \frac{\sum_{i\neq e} n_i m_i g_{{\rm R}i}}{\sum_{i\neq e} n_i m_i} = \frac{\sum_{i\neq e} \rho N_0 X_i g_{{\rm R}i}}{\sum_{i\neq e} \rho N_0 X_i} = \frac{\sum_{i\neq e} X_i g_{{\rm R}i}}{\sum_{i\neq e} X_i} = \sum_{i\neq e} x_i \nu_i g_{{\rm R}i}, \qquad (4.21)$$

Sur la particule $i \neq e$, l'accélération g_i est somme de la gravité effective $g_{\rm e}$ et de la partie radiative $g_{{\rm R}i}$:

$$g_i = g_{\rm e} + g_{{\rm R}i}.$$

Pour faciliter les algorithmes on pose, pour les électrons, $g_{{\rm R}e} \equiv 0$. On notera la gravité totale par:

$$g_{\rm t} \equiv g_{\rm e} + g_i = g_{\rm e} + \sum_i x_i \nu_i g_{{\rm R}i}, \ \frac{\partial g_{\rm t}}{\partial x_i} = \nu_j g_{{\rm R}j} + \sum_i x_i \nu_i \frac{\partial g_{{\rm R}i}}{\partial x_j}.$$

Le calcul des accélérations radiatives[10] est effectuée dans le cadre de l'approximation proposée par Alécian [1985] et Alécian & Artru [1990]. Sont seuls pris en compte les effets des transitions lié-lié. C'est une approximation semi analytique où la dépendance de l'accélération radiative à la concentration apparaît dans un terme séparé de celui contenant les propriétés atomiques des ions. Cette approximation permet donc de ne calculer qu'un nombre réduit de quantités lorsque la concentration locale évolue au cours du temps. Pour l'élément $i \neq e$ l'accélération radiative est obtenue par une somme pondérée des accélérations radiatives de chaque ion j:

$$g_{{\rm R}i} = \sum_{j=0}^{Z_i} x_{j,i} g_{{\rm R}i,j}, \ g_{{\rm R}i,j} = g_{{\rm R}_0 i,j}\sqrt{1+\frac{C_{j,i}}{C_{{\rm S}j,i}}}, \ C_{{\rm S}j,i} = b\Psi^2_{j,i}, \ g_{{\rm R}_0 i,j} = q_i \Phi_{j,i},$$

où $C_{j,i} = n_{j,i}/n_{\rm H}$ est la concentration, par rapport à l'hydrogène, de l'ion j de l'élément chimique i, $C_{{\rm S}j,i}$ sa concentration de saturation et $g_{{\rm R}_0 i,j}$ l'accélération radiative à la limite de concentration nulle. On remarquera que:

$$\frac{C_{j,i}}{C_{{\rm S}j,i}} = \frac{x_{j,i}}{x_{{\rm S}j,i}}.$$

Les quantités b et q_i sont données par:

$$b = \frac{m_e m_p \mathcal{C}}{2e^2\nu_{\rm H}}\frac{n_e\kappa}{\sqrt{T}}, \ q_i = \frac{\pi k^3 e^2}{2a\,\mathcal{C}^5 m_e m_u}\frac{l}{Tr^2\nu_i},$$

$\mathcal{C}$ est la célérité de la lumière, m_p la masse du proton, κ l'opacité moyenne de Rosseland, h la constante de Plank, a la constante de la radiation, k la constante de

[10] Ce paragraphe a été rédigé en grande partie par G. Alécian.

Boltzman, r le rayon local et l la luminosité locale. Les quantités $\Psi^2_{j,i}$ et $\Phi_{j,i}$ sont tabulées dans le cas de l'approximation #2 décrite dans Alécian *et al.* [1990] et ce, pour des masses stellaires de $1M_\odot$ à $2M_\odot$. Les données de la base Topbase sont utilisées. Ces tables, qui correspondent à des masses différentes, sont lues au premier appel de la routine acc_rad décrite au § 4.1.2 (Page 101). Les transitions radiatives des isotopes d'un même élément se produisent à des fréquences très proches (d'un isotope à l'autre). De ce fait, du point de vue des opacités monochromatiques, l'ensemble des isotopes d'un même élément s'additionnent. Dans CESAM, les isotopes apparaissent comme des éléments séparés. Pour le calcul des accélérations radiatives, les isotopes d'un même élément sont identifiés et leurs abondances sont additionnées de façon à traiter correctement l'effet de saturation des transitions lié-lié. Les accélérations radiatives sont ensuite restituées isotope par isotope.

4.1.12.4.4 Intégrales de collision Les coefficients de résistance du flux de chaleur $z_{ij}, z'_{ij}, z''_{ij}$ sont définis à partir des intégrales de collision $\Omega^{(kl)}_{ij}$, *cf.* Paquette *et al.* [1986] Eq. (23) – (25):

$$z_{ij} = 1 - \frac{2}{5}\frac{\Omega^{(12)}_{ij}}{\Omega^{(11)}_{ij}},\ z'_{ij} = 2.5 - \frac{2}{5}\frac{5\Omega^{(12)}_{ij} - \Omega^{(13)}_{ij}}{\Omega^{(11)}_{ij}},\ z''_{ij} = \frac{\Omega^{(22)}_{ij}}{\Omega^{(11)}_{ij}},$$

qui sont déterminées à partir de tabulations. Paquette *et al.* [1986] ont écrit $\Omega^{(kl)}_{ij}$ sous la forme, Eq. (65):

$$\Omega^{(kl)}_{ij} \equiv F^{(kl)}_{ij}\epsilon_{ij},\ \epsilon_{ij} \equiv \frac{e^4}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2k^3}}\ \frac{\bar{Z}_i{}^2\bar{Z}_j{}^2}{\sqrt{m_{ij}}}\ \frac{1}{\sqrt{T^3}}.$$

Pour $(kl) = (11),\ (12),\ (13),\ (22)$ et selon qu'il s'agit d'un potentiel attractif, *i.e.* électron/ion, ou répulsif, *i.e.* ion/ion ou électron/électron, Paquette *et al.* [1986] ont calculé et tabulé les coefficients d'interpolation par splines naturelles de $\ln F^{(kl)}_{ij}$ en fonction de la variable $\psi_{ij} \equiv \ln\left[\ln\left(1+\gamma^2_{ij}\right)\right]$ avec:

$$\gamma_{ij} \equiv \frac{4kT\lambda}{\bar{Z}_i\bar{Z}_j e^2},\ \lambda \equiv \max\left\{\left(\frac{kT}{4\pi e^2\sum_i n_i\bar{Z}_i}\right)^{\frac{1}{2}}, \left(\frac{3}{4\pi\sum_{\text{ions}} n_i}\right)^{\frac{1}{3}}\right\}.$$

Les quantités K_{ij} sont les coefficients de résistance, ils représentent les effets des collisions entre les particules de types i et j, ils ont pour expression *cf.* Michaud & Proffitt [1993]:

$$K_{ij} = \frac{16}{3}n_i n_j m_{ij}\Omega^{(11)}_{ij}. \tag{4.22}$$

4.1.12.4.5 Equations de Burgers pour les x_i et μ. En remplaçant la charge de chaque ion par sa charge moyenne tenant compte de son taux d'ionisation, le poids moléculaire moyen est:

$$\mu^{-1} = \sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)\frac{X_j}{\nu_j} = \sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)x_j.$$

Pour les dérivations on utilisera:

$$d\mu = -\mu^2 \sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)dx_j,\ \frac{\partial \mu}{\partial x_k} = -\mu^2(1+\bar{Z}_k),\ k \neq e.$$

Avec l'hypothèse du gaz parfait, pour chaque espèce i, les pressions totale et partielles s'écrivent:

$$P = \frac{\rho \mathcal{R} T}{\mu} + P_{\rm R} = \sum_i P_i,$$

$$P_i = n_i kT + P_{i\rm R} = \rho x_i N_0 kT + P_{i\rm R} = \frac{P\mu}{\mathcal{R}T} x_i N_0 kT + P_{i\rm R} = P\mu x_i + P_{i\rm R},$$

puisque la constante des gaz parfaits vérifie $\mathcal{R} \equiv kN_0$. On a donc:

$$n_i k = \frac{P}{T}\mu x_i.$$

En posant, pour les électrons:

$$x_e \equiv \frac{n_e}{\rho N_0} = \frac{\sum_{i\neq e} \bar{Z}_i n_i}{\rho N_0} = \sum_{i\neq e} \bar{Z}_i x_i,\ \frac{\partial x_e}{\partial x_k} = \bar{Z}_k,\ k \neq e,$$

comme $P_{e\rm R} = 0$, on retrouve bien la pression électronique:

$$P\mu x_e = \frac{\rho \mathcal{R} T}{\mu}\mu \frac{n_e}{\rho N_0} = n_e kT = P_e.$$

L'hypothèse d'équilibre quasi-statique et $\rho_i = \rho \nu_i x_i$ (Eq. 4.20) entrainent:

$$\frac{\rho_i}{\rho}\frac{dP}{dr} = x_i \nu_i \rho g_{\rm t},$$

et:

$$n_i k \frac{dT}{dr} = \frac{P}{T}\mu x_i \frac{T}{P}\frac{\partial \ln T}{\partial \ln P}\frac{dP}{dr} = \mu x_i \nabla \rho g_{\rm t},$$

d'où:

$$\begin{aligned}
\frac{dP_i}{dr} &= \frac{d}{dr}P\mu x_i + \frac{dP_{i\rm R}}{dr} = \mu x_i \frac{dP}{dr} + \frac{dP_{i\rm R}}{dr} + \mu P \frac{dx_i}{dr} + P x_i \frac{d\mu}{dr} \\
&= x_i \rho \mu g_{\rm t} + \rho_i g_{{\rm R}i} + \mu P \frac{dx_i}{dr} - P x_i \mu^2 \sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)\frac{dx_j}{dr} \\
&= x_i \rho(\mu g_{\rm t} + \nu_i g_{{\rm R}i}) + P\mu\left(\frac{dx_i}{dr} - x_i \mu \sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)\frac{dx_j}{dr}\right)
\end{aligned}$$

On a par ailleurs:

$$n_i \bar{Z}_i eE = \rho N_0 x_i \bar{Z}_i eE,\ \sum_i \nu_i x_i w_i = 0,\ \sum_i \bar{Z}_i x_i w_i = 0.$$

On introduit les relations précédentes dans les équations de Burgers Eq. 4.17 (Page 120), Eq. 4.18 (Page 120) et de conservation Eq. 4.19 (Page 120). Les coefficients de résistance K_{ij} sont de la forme:

$$K_{ij} = \frac{16}{3} n_i n_j m_{ij} \Omega_{ij}^{(11)} = \frac{16}{3}(\rho N_0)^2 x_i x_j m_{ij} \Omega_{ij}^{(11)} = k_{ij} x_i x_j \rho^2,\ k_{ij} \equiv \frac{16 N_0^2}{3} m_{ij} \Omega_{ij}^{(11)}.$$

En fonction des x_i et de μ les équations de Burgers s'écrivent:

$$x_i\rho\left(\mu g_{\rm t}-\nu_i\left(g_{\rm t}-g_{{\rm R}i}\right)\right)+P\mu\left(\frac{dx_i}{dr}-x_i\mu\sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)\frac{dx_j}{dr}\right)-\rho N_0 x_i\bar{Z}_i eE$$
$$=\rho^2\left\{x_i\sum_j k_{ij}x_j(w_j-w_i)-x_i\sum_j k_{ij}x_j z_{ij}\frac{m_i r_j-m_j r_i}{m_i+m_j}\right\},\ i=1,\ldots,c,$$
$$-x_i\rho\nabla\mu g_{\rm t}=\rho^2\left\{x_i\sum_j k_{ij}x_j z_{ij}\frac{m_j(w_j-w_i)}{m_i+m_j}+x_i\frac{4}{25}k_{ii}x_i z''_{ii}r_i\right.$$
$$+\frac{2}{5}r_i x_i\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j\frac{3m_i^2+m_j^2z'_{ij}+\frac{4}{5}m_i m_j z''_{ij}}{(m_i+m_j)^2}$$
$$\left.-\frac{2}{5}x_i\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j r_j\frac{m_i m_j(3+z'_{ij}-\frac{4}{5}z''_{ij})}{(m_i+m_j)^2}\right\},\ i=1,\ldots,c,e,$$

ou encore, en posant:

$$\nu_{i{\rm R}}\equiv\nu_i\left(1-\frac{g_{{\rm R}i}}{g_{\rm t}}\right),\ \frac{\partial\nu_{i{\rm R}}}{\partial x_i}=-\frac{\nu_i}{g_{\rm t}}\left(\frac{\partial g_{{\rm R}i}}{\partial x_j}-\frac{g_{{\rm R}i}}{g_{\rm t}}\frac{\partial g_{\rm t}}{\partial x_j}\right)$$

puis arrangements et division de chaque membre par $x_i\rho^2$:

$$\frac{g_{\rm t}}{\rho}(\mu-\nu_{i{\rm R}})+\frac{\mathcal{R}T}{\rho}\left(\frac{1}{x_i}\frac{dx_i}{dr}-\mu\sum_{j\neq e}(1+\bar{Z}_j)\frac{dx_j}{dr}\right)=\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j(w_j-w_i)$$
$$-\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j z_{ij}\frac{m_i r_j-m_j r_i}{m_i+m_j}+\frac{\bar{Z}_i eN_0E}{\rho},\ i=1,\ldots,c, \tag{4.23}$$
$$-\frac{\mu\nabla g_{\rm t}}{\rho}=\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j z_{ij}\frac{m_j(w_j-w_i)}{m_i+m_j}+$$
$$+r_i\left(\frac{4}{25}k_{ii}x_i z''_{ii}+\frac{2}{5}\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j\frac{3m_i^2+m_j^2z'_{ij}+\frac{4}{5}m_i m_j z''_{ij}}{(m_i+m_j)^2}\right)-$$
$$-\frac{2}{5}\sum_{j\neq i}k_{ij}x_j r_j\frac{m_i m_j(3+z'_{ij}-\frac{4}{5}z''_{ij})}{(m_i+m_j)^2},\ i=1,\ldots,c,e. \tag{4.24}$$

Les données sont la température T, la densité ρ, les gravités $g_{\rm t}$ et $g_{{\rm R}i}$, le gradient ∇, les abondances des ions x_i, $i=1,\ldots,c$. Des abondances on déduit le nombre d'électrons et le poids moléculaire moyen.

PB `Faute de mieux, le poids moléculaire moyen, les pressions partielles, ne peuvent pas être cohérents avec ceux utilisés dans l'équation d'état retenue par` CESAM.

Les inconnues sont les $c+1$ vitesses de diffusion $w_1,\ldots,w_c,w_e$, les $c+1$ flux de chaleur $r_1,\ldots,r_c,r_e$ et le champ électrique E, soit $2c+3$ inconnues. On ajoute aux $2c+1$ Eq. 4.23 (Page 124) et Eq. 4.24 (Page 124), les deux équations de conservation:

$$\sum_{i=1}^{c}\nu_i x_i w_i=0,\ \sum_{i=1}^{e}\bar{Z}_i x_i w_i=0. \tag{4.25}$$

Les Eq. 4.23 (Page 124), Eq. 4.24 (Page 124) écrites pour les x_i et μ et Eq. 4.25 (Page 124) forment le système linéaire:

$$A\omega = \gamma + G\,D_x,\ G \equiv \frac{\mathcal{R}T}{\rho}\Delta,$$

on a noté:

$$\omega \equiv (w_1, \ldots, w_c, w_e, r_1, \ldots, r_c, r_e, E)^T,$$

$$D_x \equiv (\frac{dx_1}{dr}, \ldots, \frac{dx_c}{dr}, 0, \ldots, 0)^T,$$

$$\gamma \equiv \frac{g_{\rm t}}{\rho}\,(\mu - \nu_{1{\rm R}}, \ldots, \mu - \nu_{c{\rm R}}, -\mu\nabla, \ldots, -\mu\nabla, 0, 0)^T\,.$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu g_{\rm t}\nabla}{\rho}\right) = \frac{g_{\rm t}\nabla}{\rho}\frac{\partial\mu}{\partial x_j} + \frac{\mu\nabla}{\rho}\frac{\partial g_{\rm t}}{\partial x_j} + \left\{\frac{\mu g_{\rm t}}{\rho}\frac{\partial\nabla}{\partial x_1} - \frac{\mu g_{\rm t}\nabla}{\rho^2}\frac{\partial\rho}{\partial x_1}\right\}_{j=1},$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{g_{\rm t}(\mu - \nu_{i{\rm R}})}{\rho}\right) = \frac{(\mu - \nu_{i{\rm R}})}{\rho}\frac{\partial g_{\rm t}}{\partial x_j} + \frac{g_{\rm t}}{\rho}\left(\frac{\partial\mu}{\partial x_j} - \frac{\partial\nu_{i{\rm R}}}{\partial x_j}\right) + \left\{\frac{g_{\rm t}}{\rho^2}(\mu - \nu_{i{\rm R}})\frac{\partial\rho}{\partial x_1}\right\}_{j=1}.$$

$$\Delta \equiv {\rm Diag}\left(\frac{1}{x_1}, \frac{1}{x_2}, \ldots, \frac{1}{x_c}, 0, \ldots, 0\right) - \mu\mathcal{M},$$

$$\mathcal{M} \equiv \begin{pmatrix}
(1+\bar{Z}_1) & (1+\bar{Z}_2) & (1+\bar{Z}_3) & \ldots & (1+\bar{Z}_c) & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
(1+\bar{Z}_1) & (1+\bar{Z}_2) & (1+\bar{Z}_3) & \ldots & (1+\bar{Z}_c) & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\
(1+\bar{Z}_1) & (1+\bar{Z}_2) & (1+\bar{Z}_3) & \ldots & (1+\bar{Z}_c) & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
(1+\bar{Z}_1) & (1+\bar{Z}_2) & (1+\bar{Z}_3) & \ldots & (1+\bar{Z}_c) & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\
0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0
\end{pmatrix}.$$

La structure de la matrice A, de dimension $[2c+3 \times 2c+3]$, est la suivante:

$$\begin{pmatrix} A_w & A_r & A_e \\ A_c & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

les dimensions des sous matrices sont respectivement $A_w[2c+1 \times c+1]$, $A_r[2c+1 \times c+1]$, $A_e[2c+1 \times 1]$ et $A_c[2 \times c+1]$. En notant:

$$p_{ij} \equiv k_{ij}x_j,\ q_{ij} \equiv \frac{k_{ij}x_j z_{ij} m_j}{m_i + m_j} = p_{ij}\frac{z_{ij}m_j}{m_i + m_j},$$

$$A_w \equiv \begin{pmatrix}
-\sum_{j\neq 1} p_{1j} & p_{12} & p_{13} & \ldots & p_{1c} & p_{1e} \\
p_{21} & -\sum_{j\neq 2} p_{2j} & p_{23} & \ldots & p_{2c} & p_{2e} \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\
p_{c1} & p_{c2} & p_{c3} & \ldots & -\sum_{j\neq c} p_{cj} & p_{ce} \\
-\sum_{j\neq 1} q_{1j} & q_{12} & q_{13} & \ldots & q_{1c} & q_{1e} \\
q_{21} & -\sum_{j\neq 2} q_{2j} & q_{23} & \ldots & q_{2c} & q_{2e} \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\
q_{c1} & q_{c2} & q_{c3} & \ldots & -\sum_{j\neq c} q_{cj} & q_{ce}
\end{pmatrix},$$

avec les notations:

$$\begin{aligned}
\bar{q_{ij}} &\equiv -\frac{k_{ij}x_j z_{ij} m_i}{m_i + m_j} = -q_{ij}\frac{m_i}{m_j}, \\
d_i &\equiv \frac{4}{25}k_{ii}x_i z''_{ii} + \frac{2}{5}\sum_{j\neq i} k_{ij}x_j \frac{3m_i^2 + m_j^2 z'_{ij} + \frac{4}{5}m_i m_j z''_{ij}}{(m_i+m_j)^2}, \\
f_{ij} &\equiv -\frac{2}{5}k_{ij}x_j \frac{m_i m_j (3 + z'_{ij} - \frac{4}{5}z''_{ij})}{(m_i+m_j)^2},
\end{aligned}$$

$$A_r \equiv \begin{pmatrix}
\sum_{j\neq 1} q_{1j} & \bar{q_{12}} & \bar{q_{13}} & \dots & \bar{q_{1c}} & \bar{q_{1e}} \\
\bar{q_{21}} & \sum_{j\neq 2} q_{2j} & \bar{q_{23}} & \dots & \bar{q_{2c}} & \bar{q_{2e}} \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\
\bar{q_{c1}} & \bar{q_{c2}} & \bar{q_{c3}} & \dots & \sum_{j\neq c} q_{cj} & \bar{q_{ce}} \\
d_1 & f_{12} & f_{13} & \dots & f_{1c} & f_{1e} \\
f_{21} & d_2 & f_{23} & \dots & f_{2c} & f_{2e} \\
\ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\
f_{c1} & f_{c2} & f_{c3} & \dots & d_c & f_{ce} \\
f_{e1} & f_{e2} & f_{e3} & \dots & f_{ec} & d_e
\end{pmatrix},$$

$$A_e \equiv \frac{N_0 e}{\rho}(\bar{Z}_1, \dots, \bar{Z}_c, 0, \dots, 0)^T,$$

$$A_c \equiv \begin{pmatrix}
\nu_1 x_1 & \nu_2 x_2 & \dots & \nu_c x_c & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\bar{Z}_1 x_1 & \bar{Z}_2 x_2 & \dots & \bar{Z}_c x_c & \bar{Z}_e x_e & 0 & \dots & 0
\end{pmatrix}.$$

La solution s'écrit:

$$\omega = A^{-1}\gamma + A^{-1}G\, D_x = v + B\, D_x \Rightarrow,$$

ou encore, pour les ions, $i = 1, \dots, c$:

$$w_i = v_i + \sum_{j=1}^{c} b_{ij}\frac{dx_j}{dr},\ i = 1, \dots, c,$$

les v_i sont les c premiers coefficients de $v = A^{-1}\gamma$, les b_{ij}, $(i, j = 1, \dots, c)$, sont les coefficients des c premières lignes et colonnes de $B = A^{-1}G$. Pour l'ion i l'équation de diffusion devient:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n_i}{\partial t} &= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 n_i w_i) + \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{\text{nucl.}} = \\
\frac{\partial \rho N_0 x_i}{\partial t} &= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left\{N_0 r^2 \rho x_i \left(\sum_{j=1}^{c} b_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial r} + v_i\right)\right\} + \left(\frac{\partial \rho N_0 x_i}{\partial t}\right)_{\text{nucl.}}
\end{aligned}$$

ou encore, en notant $\frac{D\star}{Dt} \equiv \frac{\partial\star}{\partial t} + \mathcal{V} \bullet \nabla\star$ l'opérateur de dérivation lagrangien "en suivant le mouvement":

$$\frac{Dx_i}{Dt} = -\frac{4\pi}{4\pi r^2 \rho}\frac{\partial}{\partial r}\left\{\frac{4\pi r^4 \rho^2}{4\pi r^2 \rho} x_i \left(\sum_{j=1}^{c} b_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial r} + v_i\right)\right\} + \left(\frac{Dx_i}{Dt}\right)_{\text{nucl.}} \Longrightarrow$$

$$\frac{Dx_i}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial m}\left\{4\pi r^2\rho\left(4\pi r^2\rho x_i\sum_{j=1}^{c} b_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial m} + v_i x_i\right)\right\} + \left(\frac{Dx_i}{Dt}\right)_{\rm nucl.}.$$

On a utilisé l'équation de continuité:

$$0 = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\bullet\rho\mathcal{V} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho\nabla\bullet\mathcal{V} + \mathcal{V}\bullet\nabla\rho = x_i\frac{\partial\rho}{\partial t} + x_i\rho\nabla\bullet\mathcal{V} + x_i\mathcal{V}\bullet\nabla\rho,$$

et la conservation des particules d'espèce i:

$$\nabla\bullet x_i\rho\mathcal{V} = 0 \Rightarrow \rho\mathcal{V}\bullet\nabla x_i = -x_i\rho\nabla\bullet\mathcal{V} - x_i\mathcal{V}\bullet\nabla\rho,$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\rho x_i}{\partial t} = x_i\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho\frac{\partial x_i}{\partial t} - x_i\frac{\partial\rho}{\partial t} - x_i\rho\nabla\bullet\mathcal{V} - x_i\mathcal{V}\bullet\nabla\rho = \rho\left(\frac{\partial x_i}{\partial t} + \mathcal{V}\bullet\nabla x_i\right) = \rho\frac{Dx_i}{Dt}.$$

En posant:

$$D_i \equiv (d_{i1},\ldots,d_{ic},) \equiv -(x_i b_{i1},\ldots,x_i b_{ic},),\ i = 1,\ldots,c,$$

on obtient la forme de l'équation de diffusion utilisée dans CESAM[11]:

$$\frac{Dx_i}{Dt} = -\frac{\partial F_i}{\partial m} + \Psi_i,\ F_i = -4\pi R^2\rho\left(4\pi R^2\rho D_i\bullet\nabla_{\rm m}\mathcal{X} - v_i x_i\right)$$

où $\nabla_{\rm m}\mathcal{X}$ est le vecteur:

$$\left(\frac{\partial x_1}{\partial m},\ldots,\frac{\partial x_{\rm c}}{\partial m}\right)^{\rm T}.$$

4.1.12.4.6 Jacobien. CESAM intégrant l'équation de diffusion avec un schéma implicite, il est nécessaire de calculer les dérivées:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k},\ \frac{\partial d_{ij}}{\partial x_k} = -x_i\frac{\partial b_{ij}}{\partial x_k} - b_{ij}\delta_{ik},\ i,j,k = 1,\ldots,c,\ \delta_{ik} = 1 \text{ si } i = k,\ 0 \text{ sinon.}$$

En dérivant:

$$A^{-1}A = I \Rightarrow \frac{\partial A^{-1}}{\partial x_k}A + A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x_k} = 0 \Rightarrow \frac{\partial A^{-1}}{\partial x_k} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x_k}A^{-1},$$

d'où:

$$\frac{\partial A^{-1}\gamma}{\partial x_k} = \frac{\partial A^{-1}}{\partial x_k}\gamma + A^{-1}\frac{\partial\gamma}{\partial x_k} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x_k}A^{-1}\gamma + A^{-1}\frac{\partial\gamma}{\partial x_k} = A^{-1}\left(\frac{\partial\gamma}{\partial x_k} - \frac{\partial A}{\partial x_k}v\right),$$

et de façon similaire:

$$\frac{\partial B}{\partial x_k} = A^{-1}\left(\frac{\partial G}{\partial x_k} - \frac{\partial A}{\partial x_k}B\right).$$

[11] Avec la variable d'espace Lagrangienne m les opérateurs $\frac{D}{Dt}$ et $\frac{\partial}{\partial t}$ sont équivalents.

4.1.12.5 Equation de diffusion du moment angulaire

L'équation de diffusion du moment angulaire par unité de masse $\frac{2}{3}r^2\Omega$ s'écrit:

$$\frac{Dr^2\Omega}{Dt} = \frac{\partial}{\partial m}\left(16\pi^2 r^4 \rho^2 \mathcal{D}_\Omega \frac{\partial r^2\Omega}{\partial m}\right)$$

où $\mathcal{D}_\Omega$ est le coefficient de diffusion du moment angulaire. En tenant compte de l'hypothèse de contraction quasi-statique *i.e.* $\frac{\partial r}{\partial t} \sim 0$, on obtient:

$$r^2\frac{\partial\Omega}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial m}\left[16\pi^2 r^4\rho^2\mathcal{D}_\Omega\left(2r\Omega\frac{\partial r}{\partial m} + r^2\frac{\partial\Omega}{\partial m}\right)\right] = -\frac{\partial F_\Omega}{\partial m} - 2r\Omega\frac{\partial r}{\partial t}.$$

avec:

$$F_\Omega \equiv -8\pi r^3\rho\mathcal{D}_\Omega\left(\Omega + 2\pi r^3\rho\frac{\partial\Omega}{\partial m}\right)$$

équation de même structure que l'équation de diffusion pour les espèces chimiques Eq. 4.12 (Page 115).

4.1.12.6 Arguments génériques des routines de type diffm

```
subroutine diffm(p,t,r,lum,m,ro,drox,kap,dkapx,wrot,
1 gradrad,dgradradx,mstar,xchim,d,dd,v,dv)
```

entrées

p, t, r, lum, m, ro, drox, kap, dkapx, wrot: pression, température, rayon, luminosité, masse, densité, opacité, vitesse angulaire en cas de rotation solide,

gradrad, dgradradx, xchim, mstar: gradient radiatif et dérivées par rapport à l'abondance de ^{1}H **par gramme**, composition chimique, masse de létoile.

sorties

d, dd, v, dv: tableaux $d(i,j)$, $dd(i,j,k)$, $v(i)$, $dv(i,k)$, $i,j,k = 1,\ldots,n_{\rm elem}$.

APPEL: diffm est appelé par eq_diffus.

4.1.12.7 Quelques routines de type diffm

- diffm_0: coefficient de diffusion nul, sert de routine fictive à utiliser quand on ne tient pas compte de la diffusion microscopique mais de la diffusion turbulente;
- diffm_mp: coefficients de diffusion microscopique de Michaud & Proffit [1993]; pour implémenter cette formulation les expressions de $\mathtt{V_H}$ (Eq. 17) et de $\mathtt{V_i}$ (Eq. 18) corrigée de la vitesse thermique (eq. 19) et de "l'extra drag" $\sim -.23\mathtt{XV_X}$ ont été reportées dans l'expression de $\frac{\mathtt{dX_i}}{\mathtt{dt}}$ (Eq. 13) et développées pour obtenir les coefficients de $\frac{\partial^2 x_i}{\partial m^2}$ et $\frac{\partial x_i}{\partial m}$; pour ^{4}He, la relation $\mathtt{V_H} - \mathtt{V_{He}} = \mathtt{V_H}/(1-\mathtt{X}-\mathtt{Z})$ a été utilisée; la mise en œuvre de cette routine a bénéficié de collaborations avec J. Matias et G. Alécian.

- diffm_br: les coefficients de diffusion microscopique sont calculés par inversion des équations de Burgers ainsi qu'il est décrit § 4.1.12.4 (Page 116). Les forces radiatives, *cf.* § 4.1.2 (Page 101), sont introduites lorsque la variable logique f_rad=.true. est vraie dans la NAMELIST nl_chim du fichier d'initialisation mon_modele.don.

4.1.12.8 Arguments génériques des routines de type difft

```
subroutine difft(melange,p,t,r,l,m,ro,drox,kap,dkapx,age,mstar,
1 gradrad,dgradradx,gradad,dgradadx,m_zc,r_zc,lim,
2 gamma1,cp,delta,xchim,d,dd,v,dv)
```

entrées

melange: melange=.true. on est dans une zone à mélanger *i.e.* de composition chimique à homogénéiser,

p, t, r, l, m, ro, drox, kap, dkapx, gradrad, dgradradx: pression, température, rayon, luminosité, densité, opacité, gradient radiatif et dérivées par rapport à l'abondance de ^{1}H **par gramme**,

m_zc, r_zc, lim: masses, rayons aux limites zone radiative / zone convective, nombre de limites,

gamm1, cp, delta: Γ_1, chaleur spécifique à pression constante, δ,

gradad, dgradadx, xchim, mstar, age: gradient adiabatique et dérivées par rapport à ^{1}H, composition chimique, masse de l'étoile, âge du modèle.

sorties

d, dd, v, dv: tableaux $d(i,j)$, $dd(i,j,k)$, $v(i)$, $dv(i,k)$, $i,j,k = 1,\ldots,n_{\rm elem}$.

APPEL: difft est appelé par eq_diffus.

4.1.12.9 Quelques routines de type difft

- difft_cte: Le coefficient de mélange turbulent dans les zones convectives est posé égal à $10^{13}\,{\rm cm}^2\,{\rm s}^{-1}$.

- difft_g: Le coefficient de mélange turbulent dans les zones convectives est posé égal à $10^{13}\,{\rm cm}^2\,{\rm s}^{-1}$ et calcul du coeffficient de mélange sous la zone convective solaire suivant le formalime de Gabriel [1997].

- difft_pm: Le coefficient de mélange turbulent dans les zones convectives est posé égal à $10^{13}\,{\rm cm}^2\,{\rm s}^{-1}$ et calcul du coeffficient de mélange sous la zone convective solaire suivant le formalime de Proffit & Michaud [1991].

- difft_wt: Le coefficient de mélange turbulent dans les zones convectives est posé égal à $10^{13}\,{\rm cm}^2\,{\rm s}^{-1}$ et calcul d'un coeffficient de mélange dans les couches externes. On interpole linéairement, en fonction de la température sur $[0, 10^6]$ K un coefficient de diffusion turbulente de $[10^3, 0]\,{\rm cm}^2\,{\rm s}^{-1}$. Coefficient de diffusion du moment angulaire infini, *i.e.* rotation solide.

4.1.13 Routine interne diffus

Cette routine effectue, dans l'espace des B-splines, l'intégration numérique de l'équation de diffusion. Elle utilise un schéma totalement implicite par rapport à la variable temporelle de façon à éviter la limitation du pas temporel par la formule de Courant, *cf.* Richmyer & Morton, [1967].

Cette routine élégante, originale, l'une des plus "techniques" de CESAM, est basée sur la méthode des éléments finis de Petrov-Galerkin. On peut tenir compte de la perte de moment angulaire due à une perte de masse, $\dot{m}$, dans le cas où celle-ci, pour chaque élément chimique X_i, s'écrit $\dot{X}_i = X_i\dot{m}$; on fait alors porter l'intégrale de Petrov-Galerkin sur $[0, M(t+dt)]$ et la perte de masse est alors automatiquement prise en compte.

Dans la première partie de la routine on génère les bases de B-splines utilisées pour l'intégration et dans une seconde partie, on procède à l'intégration proprement dite de l'équation de diffusion par la méthode de Petrov-Galerkin dont on décrit d'abord le principe sur un exemple très simple.

4.1.13.1 Principe de la résolution

La méthode utilisée pour résoudre le problème différentiel de la diffusion consiste à développer les fonctions inconnues, ici les abondances, sur une base fonctionnelle finie; on détermine les coefficients, en écrivant que les développements satisfont les équations différentielles et les conditions limites. Le principe du formalisme de Galerkin est d'imposer à la base d'être orthogonale à son image par l'opérateur différentiel, *i.e.* orthogonaleau résidu. Par exemple, pour le problème différentiel:

$$f'(x) = \Phi(x; f), \quad f(x_1) = \alpha, \quad \text{sur } [x_1, x_n]$$

où α est un réel, avec la base $\{N_i^m\}_{i=1}^M$ des B-splines d'ordre m, sur une partition de $[x_1, x_n]$ à préciser, à l'erreur de troncature près on aura:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{M} f_i N_i^m(x), \text{ et } f'(x) = \sum_{i=1}^{M} f_i \frac{dN_i^m(x)}{dx} = \Phi(x; f).$$

En multipliant successivement les deux membres de la dernière équation par chacune des fonctions de base $N_l^m, 1 < l < M$ et en intégrant sur tout l'espace:

$$\sum_{i=1}^{M} f_i < \frac{dN_i^m}{dx} \bullet N_l^m > = < \Phi(x; f) \bullet N_l^m >, \quad 1 < l < M,$$

où $< g \bullet h >$ représente le produit scalaire:

$$< g \bullet h > \equiv \int_{x_1}^{x_n} g(t)h(t)dt,$$

on obtient M équations vérifiées par les M coefficients f_i.

On réduit l'ordre de dérivation d'une unité par une intégration par parties:

$$[f_M - \alpha] - \sum_{i=1}^{M} f_i < N_i^m \bullet \frac{dN_l^m}{dx} > = < \Phi(x_l; f) \bullet N_l^m >, \quad 1 < l < M$$

où on a tenu compte du fait, qu'aux limites x_1 et x_n, seules les B-splines N_1^m et N_M^m ne sont pas identiquement nulles et que la condition limite en x_1 est $f(x_1) = \alpha$. On voit qu'ainsi les conditions limites s'introduisent naturellement.

Si Φ est linéaire, on obtient les coefficients f_i par résolution d'un système linéaire, sinon il est nécessaire d'utiliser une méthode itérative, point fixe ou méthode de Newton–Raphson.

La particularité de la méthode de Petrov-Galerkin est que les fonctions de base sur lesquelles sont projetées les fonctions inconnues peuvent être différentes des fonctions de base qui servent à former les produits scalaires[12]. On applique cette possibilité pour l'intégration de l'équation de diffusion, la base sur laquelle est projetée la composition chimique a des dérivées premières discontinues aux limites zone radiative / zone convective, tandis que pour celle qui sert à former les produits scalaires les dérivées premières sont continues; cette dernière disposition facilite considérablement le calcul des produits scalaires.

PB `A partir de la version 4.3.0.0 de` CESAM `les algorithmes ont été simplifiés et la méthode standard de Galerkin est utilisée: les bases de spline pour l'interpolation et les produits scalaires sont identiques.`

4.1.13.2 Formulation utilisée pour la résolution numérique

Ainsi qu'il est décrit § 4.1.12 (Page 115), l'équation de diffusion, Eq. 4.12 (Page 115) est écrite sous la forme:

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = -\frac{\partial F_i}{\partial m} + \Psi_i = -\frac{2}{3M_\odot\sqrt{\nu}}\frac{\partial F_i}{\partial \nu} + \Psi_i,\ 1 \leq i \leq n_{\rm elem} \tag{4.26}$$

où x_i est l'abondance en nombre, F_i le flux et Ψ_i le taux de création par les réactions nucléaires pour l'espèce chimique d'indice i parmi les $n_{\rm elem}$ espèces utilisées. $\nu \equiv (m/M_\odot)^{2/3}$ est la variable spatiale. On représente l'abondance de chaque espèce par un polynôme par morceaux d'ordre $m_c \geq 2$ *avec discontinuité de la dérivée première* à chaque limite zone radiative / zone convective. Pour le calcul numérique on projette ces polynômes sur une base de B-splines avec discontinuité de la dérivée première aux limites zone radiative / zone convective: $\mathcal{N} \equiv \{N_k^{m_c}\}_{k=1,K_{\rm X}}$ $\mathcal{N} \subset \mathcal{C}^0[0,\nu_b]$; $K_{\rm X}$ étant la dimension de la base. On a alors:

$$x_i(\nu,t) = \sum_{k=1}^{K_{\rm X}} x_{i,k}(t) N_j^{m_c}(\nu). \tag{4.27}$$

On recherche les *solutions faibles* de Eq. 4.12 (Page 115) à l'aide du formalisme de Petrov-Galerkin[13] (Schatzman *et al.* [1981]; Marchouk & Agochkov, [1985]; Quarteroni & Valli, [1994]): soit $\mathcal{S} \equiv \{S_k^{m_c}\}_{k=1,K_{\rm X}}$ la base de B-splines *continues* avec lesquelles seront formés les produits scalaires, *i.e.* $\mathcal{S} \subset \mathcal{C}^{m_c-2}$; la base $\mathcal{S}$ est construite sur la grille formée par les nœuds de la base $\mathcal{N}$. Au § 4.1.13.3 (Page 132) on

[12] On obtient toujours les solutions faibles quand les conditions, peu contraignamtes, du théorème de Babŭshka sont vérifiées, *cf.* Quarteroni & Valli, [1994].

[13] En fait, c'est une méthode *"Tau"*, *cf.* Marchouk & Agochkov, [1985].

donne les représentations schématiques des vecteurs nodaux des bases $\mathcal{N}$ est $\mathcal{S}$, voir aussi Fig. 3.3 (Page 90). Les produits scalaires s'écrivent:

$$< \frac{3}{2} M_\odot \sqrt{\nu} \left(\frac{\partial x_i}{\partial t} - \Psi_i \right) \bullet S_j^{m_c} > + < \frac{\partial F_i}{\partial \nu} \bullet S_j^{m_c} >= 0, \tag{4.28}$$

En tenant compte de la continuité des flux F_i, l'intégration par parties conduit à:

$$< \frac{\partial F_i}{\partial \nu} \bullet S_j^{m_c} >= \left[F_i S_j^{m_c} \right]_0^{\nu_\mathrm{b}} - < F_i \bullet \frac{\partial S_j^{m_c}}{\partial \nu} >, \tag{4.29}$$

avec la condition limite, $\nu \equiv 0$, $F_i(\nu = 0) = 0$ au centre et, à la limite externe de l'enveloppe $\nu = \nu_\mathrm{b}$, $v_i = \dot{M}/(4\pi R^2 \rho)$ d'où:

$$F_i(\nu = \nu_\mathrm{b}) = 4\pi R^2 \rho v_i x_i = -\dot{M} x_i$$

avec la convention que le taux de perte de masse $\dot{M}$ est négatif s'il y a perte, donc vitesse positive. Comme à la limite de l'enveloppe, seule la dernière spline $S_{K_X}^{m_c}$ est non nulle et $S_{K_X}^{m_c}(\nu_\mathrm{b}) \equiv 1$ la quantité intégrée devient:

$$\left[F_i S_j^{m_c} \right]_0^{\nu_\mathrm{b}} = -\dot{M} x_i(\nu_\mathrm{b}).$$

La continuité de x_i et F_i permet d'écrire Eq. 4.28 (Page 132) sous la forme utilisée dans CESAM:

$$\begin{aligned} & < \frac{3}{2} \sqrt{\nu} \left(x_i - x_i^{(t)} - \Psi_i \Delta t \right) \bullet S_j^{m_c} > - \frac{\dot{M}}{M_\odot} x_i \Delta t + \\ + \; & < \left[\frac{32\pi^2 R^4 \rho^2 \, \Delta t}{3 M_\odot \sqrt{\nu}} \{ D_i \bullet \nabla_\nu \mathcal{X} \} - \frac{4\pi R^2 \rho}{M_\odot} \Delta t \, V_i x_i \right] \bullet \frac{\partial S_j^{m_c}}{\partial \nu} >= 0, \; j = 1, \ldots, K_X, \end{aligned} \tag{4.30}$$

les quantités étant prises à l'instant $t + \Delta t$ sauf $x_i^{(t)}$ pris au temps t. Ce schéma complétement implicite est d'ordre m_c en espace et du premier ordre en temps.

Ces dispositions ont les avantages suivants:

1. Les discontinuités des dérivées premières sont automatiquement prises en compte par la formulation intégrale Eq. 4.28 (Page 132) des produits scalaires.

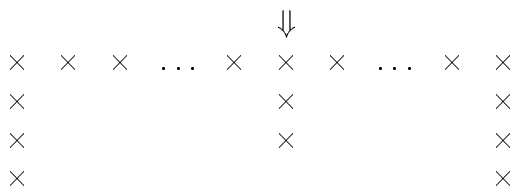
2. Avec l'utilisation de la base des B-splines les algorithmes restents simples même lorsqu'il se produit des déplacements des limites zone radiative / zone convective.

3. La formulation Petrov-Galerkin évite de former explicitement les dérivées secondes de l'équation de diffusion.

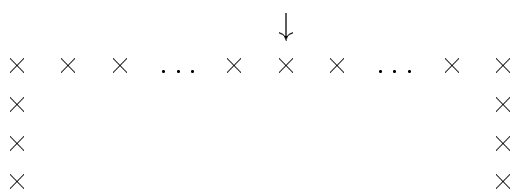
4.1.13.3 Bases de B-splines pour la méthode de Petrov-Galerkin

L'abondance de chaque élément chimique est représenté sous la forme d'un polynôme par morceaux de la variable $\nu \equiv (m/M_\odot)^{2/3}$ avec des discontinuités de la dérivée

première aux limites zone radiative / zone convective. Une représentation schématique du vecteur nodal *cf.* Schumaker [1981], pour $s = 4$ et discontinuité au point fléché est la suivante:



tandis qu'avec continuité en tous les points de grille on a:



4.1.13.4 Description de diffus

On construit dans un premier temps les bases des B-splines. Pour chaque élément de la base continue, on forme ensuite les Eq. 4.30 (Page 132) que l'on résout pour les $x_{i,j}$ par la méthode itérative de Newton-Raphson dans l'espace des B-splines. Celà nécessite le calcul des dérivées partielles de chaque produit scalaire par rapport à chaque inconnue, ce sont ces quantités qui forment le jacobien. L'algorithme utilisé s'inspire de l'algorithme 5-22 de Schumaker [1981]. Les produits scalaires sont calculés par intégration de Gauss. On résout le système linéaire pour les corrections des $x_{i,j}$ par élimination de Gauss avec recherche du pivot optimal. Le processus est répété jusqu'à convergence. L'organisation du calcul est le suivant:

1 Suivant la situation *i.e.* modèle avec ou sans zone convective, ordre de précision requis *etc...* , construction des bases de B-splines *i.e.* des vecteurs nodaux, pour:

1. la fonction de "mélange" `a_mix` sur les ν_i, `a_mix(`i`)`$=+1$ si, en $\nu_i(i)$, le modele est radiatif et `a_mix(`i`)`$= -1$ s'il est convectif;
2. le vecteur nodal `mct` de la base, avec dérivées discontinues aux limites zone radiative / zone convective, sur laquelle est projetée la fonction composition chimique. En codant, dans la routine DIFFUS `discon=.false.` on impose la continuité de la dérivée de la composition chimique aux limites zone radiative / zone convective. ;
3. le vecteur nodal `mt_fi` de la base sans discontinuité servant aux produits scalaires.

2 Calcul des produits scalaires et formation du Jacobien pour chaque B-spline de la base continue:

1. calcul des abscisses et poids de l'intégrale de Gauss,
2. calcul des $x_{i,j}$ à chaque abscisse d'intégration,

3. appel à eq_diffus pour calcul des résidus de Eq. 4.30 (Page 132), des quantités figurant à gauche des produits scalaires et de leurs dérivées par rapport aux $x_{i,j}$,
4. formation de la ligne correspondante du jacobien.

3 Résolution du sytème linéaire, extraction des corrections aux $x_{i,j}$, estimation de la précision, poursuite éventuelle du processus itératif.

4.1.13.5 Arguments de diffus

```
subroutine diffus(bp,q,qt,n,knot,chim,mc,mct,nc,knotc,r2,m23,mstar,age,
1 bp_t,q_t,n_t,qt_t,knot_t,r2_t,m23_t,chim_t,mc_t,mct_t,nc_t,knotc_t,
2 dt,convd,convf,nzc,tot_rad,ok,new,r_zc,lim,
3 old_m23,new_m23,nm,new_m23t,knotm,wrot,
4 etat,opa,conv,nuc,coeff_diff)
```

entrées

bp, q, qt, n, knot, r2, m23, bp_t, q_t, qt_t, n_t, knot_t, r2_t, m23_t: éléments pour interpolation de la structure aux temps $t + dt$ et t;

new: si new=.true. c'est première intégration pour le nouveau pas temporel il y aura initialisation du vecteur de composition chimique; si new=.false. une intégration au moins a déjà eut lieu et le vecteur de composition chimique a une valeur voisine de celle à déterminer;

dt, r2, m23, mstar, age: pas temporel, éléments pour interpolation inverse, masse totale, age;

chim_t, mc_t, mct_t, nc_t, knotc_t: éléments pour interpolation de la composition chimique au temps t;

convd, convf, nzc, tot_rad, r_zc, lim: indices des débuts et fin des zone convective, nombre de zone convective, `tot_rad=.true.` le modèle est totalement radiatif, rayons et nombre de limites zone radiative / zone convective;

old_m23, new_m23, nm, new_m23t, knotm, wrot: éléments pour interpolation de la masse conséquence de la perte de masse, vitesse angulaire avec rotation solide.

in/out

chim, mc, mct, nc, knotc: éléments pour interpolation de la composition chimique au temps $t + dt$.

sorties

ok: `ok=.true.` l'algorithme itératif a convergé au niveau de précision requis.

externes

etat, opa, conv, nuc, coeff_diff: noms des routines de calcul d'équation d'état, d'opacité, de convection, de réactions thermonucléaires, des coefficients de diffusion microscopique.

APPEL: diffus est appelé par evol.

4.1.14 Routine interne dnunl

La fonction de cette routine est le calcul approximatif, pour le cas solaire, de ν_0, $\delta\nu_{02}$ et $\delta\nu_{13}$ suivant Schatzman & Praderie [1990], formules 100, 101 et 102 p. 389.

4.1.14.1 Description de dnunl

1 Tabulation de la vitesse du son en fonction de R^2, calcul de ν_0 par intégration numériques de type Gauss (on utilise le fait que $rdr = 1/2dr^2$),

2 calcul de $\delta\nu_{02}$ et $\delta\nu_{13}$.

4.1.14.2 Arguments de dnunl

```
subroutine dnunl(r,c,n,rtot,nu0,dnu02,dnu13,a)
```

entrées r, c, n, rtot: tables des rayons, vitesses du son, nombre de points, rayon total.

sorties nu0, dnu02, dnu13, a: ν_0, $\delta\nu_{02}$, $\delta\nu_{13}$, le A de la formule 100.

APPEL: dnunl est appelé de list.

4.1.15 Routine interne eqatm

La fonction de cette routine est de former les Eq. 4.36 (Page 152) du § 4.1.23.5 (Page 151) aux points de collocation et aux points limites pour la restitution de l'atmosphère.

4.1.15.1 Description de eqatm

1 Au premier appel, après quelques initialisations, on projette sur la base de B-spline l'atmosphère solaire, connue sous forme de DATA, on obtient ainsi la solution initiale, on définit ensuite les limites et on détermine les points de collocation.

2 Extraction des grandeurs physiques, calcul de la $T_{\rm eff}$, de la gravité et loi $T(\tau)$,

3 calcul des grandeurs thermodynamiques, de ∇ en particulier, et dérivées, formation des équations aux points de collocation et points limites.

4.1.15.2 Arguments de eqatm

```
subroutine eqatm(fait,knot,li,q,qt,xx,xl,mstar,wrot,
1 derxx,lderxx,bp,xchim,cx,y,yp,be,ae,ray,lum,
2 tdetau,etat,opa,conv)
```

entrées fait, cx, li: `fait=1` point de collocation, `fait=2` point limite, indice du point de collocation, du point limite;

y, yp: variables et dérivées;

ray, lum, mstar, wrot: rayon à la base de l'atmosphère, luminosité, masse totale, vitesse angulaire en cas de rotation solide.

in/out knot, q, qt, xx, xl: nombre, abscisses des points de table, abscisses des points de collocation et des points limites,

derxx, lderxx, bp: vecteur des dérivées des splines aux points de collocation, aux limites, et des coefficients de spline des varibles d'atmosphère.

sorties be, ae: seconds membres et dérivées des équations.

externes tdetau, etat, opa, conv: noms des routines de loi $T(tau)$, d'équation d'état, d'opacité et de convection.

APPEL: eqatm est appelé de colatm.

4.1.16 Routine interne eq_diffus

La routine interne eq_diffus a pour fonction de calculer, dans l'espace physique les résidus de Eq. 4.30 (Page 132), les quantités figurant à gauche des produits scalaires et leurs dérivées par rapport aux abondances.

4.1.16.1 Description de eq_diffus

1 Au point courant:

1. Initialisations diverses,
2. extraction des variables de structure au point de calcul cx, appel à l'équation d'état, détermination des opacités, calcul des réactions thermonucléaires et des coefficients de l'équation de diffusion,
3. détermination des résidus de Eq. 4.30 (Page 132), des quantités figurant à gauche des produits scalaires et de leurs dérivées par rapport aux abondances. On donne au § 4.1.12.2 (Page 115) la codification de ces variables importantes.

2 Au point limite externe, évaluation et exploitation de la perte de moment angulaire.

4.1.16.2 Arguments de eq_diffus

```
 subroutine eq_diffus(y,cx,aes,aed,bes,bed,fait,mstar,age,
1 bp,q,qt,knot,n,bp_t,q_t,qt_t,knot_t,n_t,
2 r2,m23,r2_t,m23_t,mc_t,mct_t,nc_t,knotc_t,chim_t,dt,
3 a_mix,nmix,mix,a_mixt,knot_mix,r_zc,lim,
4 old_m23,new_m23,nm,new_m23t,knotm,wrot,
5 etat,opa,conv,nuc,coeff_diff)
```

entrées y, cx, fait, mstar: composition chimique, abscisse du point de calcul, fait=1 calcul en un point courant, fait=2 calcul en un point limite, masse à l'instant $t + dt$, age;

bp, q, qt, knot, n, r2, m23,bp_t,q_t,qt_t,knot_t,n_t, r2_t,m23_t, mc_t, mct_t, nc_t, knotc_t, chim_t: éléments pour l'évaluation des variables de structure et de la composition chimique au temps aux temps $t + dt$ et t;

a_mix, nmix, mix, a_mixt, knot_mix, r_zc, lim: éléments pour l'identification des zones mélangées, rayons et nombre de limites zone radiative / zone convective;

old_m23, new_m23, nm, new_m23t, knotm, wrot: éléments pour l'évaluation de la perte de masse, vitesse angulaire en cas de rotation solide.

sortiees bes, bed, aes, aed: coefficients et dérivées par rapport aux abondances $x_{i,j}$ des arguments des produits scalaires avec $S_j^{m_c}$ et $\frac{\partial x_{i,j}}{\partial \nu}$ de Eq. 4.30 (Page 132).

externes etat, opa, conv, nuc, coeff_diff: noms des routines de calcul d'équation d'état, d'opacité, de convection, de réactions thermonucléaires, des coefficients de diffusion microscopique.

APPEL: eq_diffus est appelé par diffus.

4.1.17 Routine externe de type etat

La pluaprt des routines externes de type etat sont des interfaces entre CESAM et la routine de calcul de l'équation d'état qui a souvent une origine externe. Pour une pression gazeuse P, une température T et une composition chimique X_i données, etat calcule la densité ρ, l'énergie interne spécifique U, $c_{\rm p}$, δ, $\nabla_{\rm ad}$, et leurs dérivées premières, α, β, Γ_1, les taux d'ionisation de ^{1}H et ^{4}He et le coefficient de dégénérescence.

PB `Certaines quantités peuvent ne pas être calculées, auquel cas une valeur arbitraire est affectée à la variable` *e.g.* `5 pour le coefficient de dégénérescence.`

4.1.17.1 Quelques routine de type etat

4.1.17.2 etat_gong1

Selon les prescriptions du "Solar Model Comparison Project" J. Christensen–Dalsgaard [1988], la routine etat_gong1 suppose le milieu totalement ionisé mais ne tient compte ni de la dégénérescence ni de l'énergie interne d'ionisation ni de la pression de radiation.

4.1.17.3 etat_gong2

Suivant "Solar Model Comparison Project" J. Christensen–Dalsgaard [1988], la routine etat_gong2 utilise le formalisme EFF simplifié sans tenir compte ni de la pression de radiation ni de la dégérescence. La mise en œuvre de etat_gong2 a bénéficié de la collaboration de J. Provost.

4.1.17.4 etat_eff

La routine etat_eff utilise le formalisme EFF, la source rassemblée dans le package EFF *cf.* § 4.2.1 (Page 188), est une adaptation à CESAM des programmes originaux de J. Christensen-Dalsgaard par A. Baglin et M. Auvergne.

4.1.17.5 etat_ceff

La routine etat_ceff utilise le formalisme CEFF, la source rassemblée dans le package CEFF *cf.* § 4.2.2 (Page 188), est une adaptation à CESAM des programmes originaux de J. Christensen-Dalsgaard par A. Baglin, M. Auvergne & Y. Lebreton.

4.1.17.6 etat_mhd

La routine etat_mhd assure l'interface avec l'équation d'état solaire tabulée MHD de W. Däppen *cf.* Mihalas *et al.* [1988]. Les tables, en ASCII compressé, sont distribuées par W. Däppen, les plus récentes *i.e.* avec "correction τ", sont disponibles à l'adresse FTP anonymous `usc.edu` directory `pub/astro-physics/mhd-oc/wd-evo`; leur mise en place est décrite au § 4.2.3 (Page 188).

4.1.17.7 etat_opal

La routine etat_opal assure l'interface avec l'équation d'état tabulée OPAL, Iglesias & Rogers [1991]. Les tables d'équation d'état, disponibles sur le site WEB `ftp://www-phys.llnl.gov/pub/opal/eos/` sont très grandes, le sous directory `DATA` de la source de CESAM ne ne contient qu'une seule table eos_195.data, calculée pour $Z = 0.0195$; pour des valeurs différentes, il convient de se procurer le package OPAL pour contruire les tables ad-hoc. La routine etat_opal utilise la table OPAL écrite en binaire. Une modification de l'ordre initial des arguments du BLOCKDATA blk_eos permet des gains de place et de temps calcul appréciables. Le programme opal_ascii_bin du sous-directory `EXPLOIT` de la source de CESAM, lit la table en ASCII, construite par le package OPAL *e.g.* eos_195.data, et la transforme en binaire. L'acquisition des tables d'équation d'état OPAL est décrite au § 4.2.4 (Page 188). La mise en œuvre de cette routine a bénéficié d'une collaboration de S. Brun.

4.1.17.8 Arguments génériques des routines de type etat

```
subroutine etat(p,t,xchim,deriv,
1 ro,drop,drot,drox,u,dup,dut,dux,
2 delta,deltap,deltat,deltax,cp,dcpp,dcpt,dcpx,
3 gradad,dgradadp,dgradadt,dgradadx,alfa,beta,gamma1)
```

entrées p, t, xchim, deriv: pression, température, composition chimique par gramme, deriv=.true. calcul des dérivées;

sorties ro, drop, drot, drox: densité et dérivées;

u, dup, dut, dux: énergie interne et dérivées;

delta, deltap, deltat, deltax: δ et dérivées;

cp,dcpp,dcpt,dcpx: $c_{\rm p}$ et dérivées;

gradad, dgradadp, dgradadt, dgradadx: $\nabla_{\rm ad}$ et dérivées;

alfa, beta, gamma1: α, β, Γ_1.

APPEL: etat est appelé de divers endroits, en particulier evol, thermo, thermo_atm, eq_diffus, cesam.

4.1.18 Routine interne evol

La routine evol gère l'intégration temporelle de la composition chimique et donc le mélange convectif. Cette routine est appelée par resout. Schématiquement son organigramme est le suivant:

4.1.18.1 Description de evol

1 Initialisations diverses, éliminations éventuelles pour le mélange convectif *uniquement* de limites zone radiative / zone convective trop externes, détermination si le modèle est totalement radiatif ou convectif.

2 Détermination de la répartition en masse – en $(m/M_\odot)^{2/3}$ – utilisée pour l'interpolation de la composition chimique. Les points retenus sont ou bien identiques aux points de la grille utilisée pour les variables globales, ou bien situés aux centres des intervalles entre deux points de cette grille. Le but de cette disposition est de stabiliser l'évolution en introduisant une légère diffusion numérique. Aux voisinages du centre et des limites zone radiative / zone convective des points supplémentaires sont ajoutés pour améliorer la précision.

3 Les indices du début et de lafin de chaque zone convective sont ensuite identifiées dans la grille pour l'interpolation de la composition chimique; en enlevant les "c" de commentaires, des algorithmes de test permettent des vérifications.

4 Une alternative se présente alors :

- On tient compte de la diffusion microscopique, il y a appel à la routine diffus, sauf si le modèle est complétement convectif depuis le début de l'évolution – ou de la reprise du calcul. Au retour de la routine diffus la précision du calcul de l'évolution des abondances est grossièrement estimée.
- Il y intégration et mélange convectif classiques en tenant compte d'éventuels gains ou pertes de masse et en estimant la précision du calcul de l'évolution des abondances:
  - d'abord pour les zones convectives où l'ingégration de la composition chimique est réalisée de façon simultanée avec le mélange convectif,
  - ensuite pour les zones radiatives.
  - La composition chimique est ensuite ajustée en fonction des retraits ou avancées des limites zone radiative / zone convective.

– Enfin, on calcule les coefficients d'interpolation de la composition chimique en tenant compte des discontinuités aux limites zone radiative / zone convective.

5 Une renormalisation de la composition chimique de façon à assurer $X+Y+Z=1$ est effectuée dans l'espace des splines. Cette renormalisation est nécessaire pour des arguments:

1. `Physiques`: les masses atomiques n'étant pas des nombres entiers, les équations de l'évolution thermonucléaire de la composition chimique ne peuvent conserver *exactement* $X+Y+Z=1$. Pour ce faire, il faudrait tenir compte de corrections relativistes.
2. `Numériques`: les équations implicites de l'évolution de la composition chimique étant résolues de façon itérative, il y a nécessairement une erreur numérique résultant de l'appréciation de la convergence. Les erreurs d'arrondi sont aussi à prendre en ligne de compte.

6 Une estimation du pas temporel à venir est faite en fonction des valeurs, requise et obtenue, de la précision de l'intégration. En cas de non convergence d'algorithmes itératifs ou si la précision requise n'est pas atteinte, le modèle est réinitialisé lors du retour à `resout` et le calcul est alors repris avec un pas temporel divisé par 2.

4.1.18.1.1 Renormalisation de la composition chimique En un point d'abscisse Lagrangienne m, situé entre les points d'indice l et $l+1$, $m_l \leq m < m_{l+1}$, l'abondance par mole de l'élément chimique d'indice $i=1, n_{\rm chim}$ est:

$$x_i(m) = \sum_{j=l-m_c+1}^{l} x_{ij} N_j^{m_c}(m).$$

La relation $X+Y+Z \equiv 1$ s'écrit donc:

$$1 \equiv \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} \nu_i \sum_{j=l-m_c+1}^{l} x_{ij} N_j^{m_c}(m) = \sum_{j=l-m_c+1}^{l} N_j^{m_c}(m) \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} \nu_i x_{ij} =$$

$$= \sum_{j=l-m_c+1}^{l} N_j^{m_c}(m) \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} X_i.$$

L'expérience des calculs a montré que la relation $\sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} X_i$ est vérifiée avec une erreur relative de quelques $\epsilon \sim 10^{-7}$ en raison des erreurs numériques et des approximations physiques évoquées précédemment. Pour renormaliser on utilise la propriété des B-splines normalisées $\sum_{j=l-m_c+1}^{l} N_j^{m_c}(m) \equiv 1$ et on pose, pour chaque indice $j = 1, \ldots, K_X$:

$$(1+\epsilon)_j \equiv \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} \nu_i x_{ij}, \;\; x'_{ij} \equiv \frac{x_{ij}}{(1+\epsilon)_j}, \; i = 1, \ldots n_{\rm chim},$$

si bien qu'en utilisant pour les coefficients de spline x'_{ij} en lieu et place des x_{ij}:

$$X+Y+Z = \equiv \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} \nu_i \sum_{j=l-m_c+1}^{l} x'_{ij} N_j^{m_c}(m) = \sum_{j=l-m_c+1}^{l} N_j^{m_c}(m) \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} \nu_i x'_{ij} =$$

$$= \sum_{j=l-m_c+1}^{l} N_j^{m_c}(m) \sum_{i=1}^{n_{\rm chim}} \nu_i \frac{x_{ij}}{(1+\epsilon)_j} = \sum_{j=l-m_c+1}^{l} N_j^{m_c}(m) = 1.$$

4.1.18.2 Arguments de evol

```
subroutine evol(new,bp,q,n,qt,knot,chim,mc,nc,mct,knotc,
1 r2,m23,dts,m_zc,r_zc,r_ov,lim,jlim,lconv,mstar,age,
2 bp_t,q_t,n_t,qt_t,knot_t,chim_t,mc_t,nc_t,mct_t,knotc_t,
3 r2_t,m23_t,dt,m_zc_t,r_zc_t,r_ov_t,lim_t,jlim_t,lconv_t,
4 kmax,estim,g_max,old_m23,new_m23,nm,new_m23t,knotm,wrot,
5 etat,opa,conv,nuc,coeff_diff)
```

entrées

new: si new=.true. c'est première intégration avec le nouveau pas temporel, le vecteur de composition chimique généralisée est initialisé avec la valeur obtenue au pas temporel précédent; si new=.false. une intégration, au moins, a déjà eut lieu et le vecteur de composition chimique généralisée est conservé, sa valeur étant, en principe, voisine de celle à déterminer;

bp, q, n, qt, knot: éléments d'interpolation pour les variables principales au temps t+dt;

bp_t, q_t, n_t, qt_t, knot_t, chim_t, mc_t, nc_t, mct_t, knotc_t: éléments d'interpolation pour les variables principales et la composition chimique au temps t;

r2, m23, dt, m_zc, r_zc, r_ov, lim, jlim, lconv: éléments d'interpolation pour le rayon et la masse, pas temporel, masses, rayons et rayons étendus des limites zone radiative / zone convective, nombres et tableaux des indices et de la nature des limites zone radiative / zone convective;

r2_t, m23_t, dts, m_zc_t, r_zc_t, r_ov_t, lim_t, jlim_t, lconv_t,: idem pour le pas temporel précédent;

mstar, age, old_m23, new_m23, nm, new_m23t, knotm, wrot: masse totale, âge, répartition de masse au pas temporel précédent et actuel, nombre de points de masse, éléments d'interpolation pour ces masses, vitesse angulaire en cas de rotation solide.

sorties

chim, mc, nc, mct, knotc: éléments d'interpolation pour la composition chimique au temps t+dt;

kmax, estim, g_max: indice où se produit l'erreur maximale, vecteur des estimations de précision de l'intégration, la précision requise est atteinte si g_max=.true.

externes

etat, opa, conv, nuc, coeff_diff: noms des routines de calcul d'équation d'état, d'opacité, de convection, de réactions thermonucléaires, des coefficients de diffusion microscopique.

APPEL: evol est appelé par resout.

4.1.19 Routine interne fich_osc

Cette routine a pour fonction la constitution d'un fichier *cf.* § 2.8.1 (Page 66) de type mon_modele.osc. Le but essentiel est d'étendre le nombre de couches d'un modèle en reconstituant la solution soit:

- en disposant zéro, un ou plusieurs points supplémentaires entre deux points consécutifs de la grille,
- en des points de masse fixée,
- en des points de rayon fixé.

La solution est reprise d'un fichier de type mon_modele.dat pour la structure interne et, éventuellement d'un fichier de type mon_modele.atm pour l'atmosphère. Bien que comportant plus de couches, le modèle ainsi étendu n'est pas numériquement plus précis que le modèle initial; de plus l'algorithme actuel n'exploite pas la super convergence. Les arguments de sortie ne seront tous calculés que si les routines de physique "sortent" les grandeurs nécessaires à leur détermination, ce qui n'est pas la règle générale *e.g.* les taux d'ionisation pour certaines routines de type etat.

4.1.19.1 Description de fich_osc

1 Dialogue au cours duquel est défini le modèle à étendre, le type d'extension à faire et si on tient compte ou non de l'atmosphère;

2 construction d'une table correspondant au type d'extension requise: ou bien des indices intermédiaires sont disposés dans la table des indices de couche avec une densité plus importante dans le voisinage du centre et des limites zone radiative / zone convective, ou bien à partir d'une table, lue sur un fichier dont fich_osc s'inquiert du nom, des rapports de, masse/masse totale ou de, rayon/rayon total, des points du fichier à contituer;

3 lecture des fichiers du modèle et initialisations;

4 formation du fichier par appels successifs à la routine de restitution intertot.

4.1.19.2 Arguments de fich_osc

```
subroutine fich_osc(etat,opa,conv,nuc,lim_ext,tdetau,cte)
```

externes

etat, opa, conv, nuc: noms des routines d'équation d'état, d'opacité , de convection, de réations thermonucléaires, utilisées pour le calcul du modèle;

lim_ext, tdetau, cte: noms des routines de calcul de la limite externe, de la loi $T(\tau)$ et d'initialisation des constantes utilisées pour le calcul du modèle.

APPEL: fich_osc est appelé par les programmes du type for037.

4.1.20 Routine interne iben

Cette routine est une routine de type nuc particulière qui calcule l'énergie gravifique lors de l'initialisation de l'évolution avec pré-séquence principale . Ses arguments, ceux d'une routine de type nuc, sont fictifs, sauf l'énergie gravifique. Pour le calcul de la pré-séquence principale il est nécessaire de disposer d'un modèle en équilibre quasi-statique dont la seule source d'énergie est gravitationnelle. Le modèle initial est obtenu par la méthode due à Iben [1975] qui a été adaptée à CESAM en collaboration avec A. Baglin. Au début de la pré-séquence principale l'étoile est complètement convective donc isentropique sauf, peut-être, dans une partie suradiabatique externe. Dans ces conditions, la composition chimique est, spatialement et temporellement *constante* et l'équation d'énergie s'écrit:

$$\frac{\partial L}{\partial m} = \epsilon_G = -T\frac{\partial S}{\partial t} = cT$$

où c est la "*constante de contraction*" qui caractérise un modèle en équilibre quasi-statique, totalement convectif et sans réaction thermonucléaire. La donnée de la constante de contraction c, permet de résoudre le système des équations au temps $t + dt$ sans avoir à déterminer explicitement la quantité $T\frac{\partial S}{\partial t}$.

La méthode consiste à construire un premier modèle (indice 1) avec une première valeur c_1 pour c. Puis un second modèle (indice 2) avec une valeur c_2 voisine – CESAM utilise $c_2 = 1.1 \times c_1$. Si on admet que ces deux modèles appartiennent à la même séquence évolutive, l'énergie rayonnée pendant l'intervalle de temps Δt les séparant est alors égale à la variation d'énergie gravitationnelle si bien que:

$$\frac{L_1 + L_2}{2}\Delta t \sim \left(\frac{\mathcal{G}M^2}{R_2} - \frac{\mathcal{G}M^2}{R_1}\right) \Rightarrow \Delta t \sim 2\mathcal{G}M^2\frac{R_1 - R_2}{(L_1 + L_2)R_1R_2}.$$

On peut alors débuter le calcul de l'évolution en utilisant cette valeur de Δt et le modèle 2 comme modèle initial. Une valeur typique pour la constante est $c = 0.02$, la température centrale du modéle initial avoisine alors 150 000K; on obtient 500 000K (*respt.* 1 000 000K) avec $c = 0.0005$ (*respt.* $c = 0.00003$). Ces ordres de grandeur dépendent assez peu de la masse du modèle.

Au cours du déroulement du calcul CESAM demande la valeur de c à utiliser. A chaque étape de la détermination du modèle initial de pré-séquence principale , il est possible de vérifier les valeurs de la température centrale, de la luminosité et du rayon total de façon à pouvoir modifier c jusqu'à obtenir le modèle désiré. L'initialisation pour le calcul du premier modèle peut être faite, soit à partir d'un modèle de pré-séquence principale calculé pour des paramètres voisins, fichier en BINAIRE d'extension _B.pms, soit avec le fichier ASCII du modèle de PMS pms.dat du sous-directory DATA de la source. Une fois le modèle initial de pré-séquence principale obtenu celui-ci est écrit, en vue d'une autre initialisation, dans le fichier BINAIRE mon_modele_B.pms.

APPEL: iben est appelé par cesam.

4.1.21 Routine interne inter

Détermine, à partir de son développement sur une base de B-splines, par interpolation inverse, l'indice de la couche correspondant à une masse ou à un rayon donné,

puis, par interpolation directe, détermine en ce point les valeurs des variables et de leurs dérivées premières, par rapport à la variable de masse ou de rayon. En variables lagrangiennes l'interpolation est effectuée soit en $(m/M_\odot)^{2/3}$ ou en $(r/R_\odot)^2$; en variables eulériennes l'interpolation est effectuée soit en $(m/M_\odot)$ ou en $(r/R_\odot)$.

4.1.21.1 Arguments de inter

```
subroutine inter(m23_ou_r2,bp,q,qt n,knot,x,f,dfdx,r2,m23)
```

entrées
- m23_ou_r2: chaine de 3 caractères, si `m23_ou_r2='m23'` interpolation en masse si `m23_ou_r2='r2␣'` interpolation en rayon;
- bp, q, qt, n, knot, x: éléments pour l'interpolation;
- r2, m23: points d'interpolation.

sorties
- f, dfdx, r2, m23: fonctions, dérivées, rayon, masse.

PB `La variable d'indice 6` *i.e.* $f(6)$, `normalement affectée à la fonction de répartition, est utilisée pour transmettre l'indice décimal de la couche où s'effectue l'interpolation.`

APPEL: inter est appelé par divers programmes en particulier evol.

4.1.22 Routine interne intertot

C'est la routine de restitution de la solution en un point d'un modèle connu sous la forme de fichiers binaires de types mon_modele_B.xxx et mon_modele_B.atm. La restitution pouvant être faite en un point d'indice non nécessairement entier, de rayon ou de masse donnés. Les arguments de sortie ne seront tous calculés que si les routines de physique "sortent" les grandeurs nécessaires à leur détermination, *e.g.* les taux d'ionisation pour certaines routines de type etat.

4.1.22.1 Description de intertot

1 Initialisation:

1. lecture du fichier binaire de type mon_modele_B.xxx et initialisations diverses,
2. lecture du fichier binaire de type mon_modele_B.atm et initialisations diverses;

2 pour l'interpolation en masse ou rayon, détermination de l'indice de couche;

3 localisation et restitution des variable pour l'atmosphère ou la structure interne;

4 calcul des variables dérivées *e.g.* la fréquence de Brunt-Väissälä.

4.1.22.2 Arguments de intertot

```
subroutine intertot(atm,m_ou_r,dxchim,q_int,jlim,lim,m_zc,
1 pt,p,t,xchim,m,l,r,ro,drop,drot,drox,u,dup,dut,dux,rstar,ltot,
2 grad,dgradp,dgradt,dgradl,dgradr,dgradm,dgradx,mstar,w,
3 epsilon,depsp,depst,depsx,kap,dkapp,dkapt,dkapx,alfa,grad_mj,
4 delta,cp,hp,gradad,gradrad,gamma1,vaissala,beta,age,n,ns,
5 nh1,nhe1,nhe2,etat,opa,conv,nuc,lim_ext,tdetau,cte)
```

entrées — atm, m_ou_r: atm=.true. l'atmosphère est restituée, m_ou_r=' q ',' m ' ou ' r ' la restitution est effectuée en indice, en masse ou en rayon.

in/out — jlim, lim, m_zc, q_int, m, r: indices, nombre, masses des limites zone radiative / zone convective, indice, masse, rayon du point d'interpolation;

rstar, mstar, ltot, age, n, ns: rayon, masse, luminosité, âge du modèle, nombre de couches dans la structure interne, nombre total de couches *i.e.* avec l'atmosphère.

sorties — pt, p, t, xchim, dxchim, l, ro, drop, drot, drox, u: Pression totale, pression gazeuse, température, composition chimique et dérivée, luminosité, densité et dérivées par rapport à la pression, température et composition chimique, énergie interne spécifique;

grad, dgradp, dgradt, dgradl, dgradr, dgradm, dgradx, w: gradient et dérivées par rapport à la pression, température, luminosité, rayon, masse, composition chimique, vitesse angulaire;

epsilon, depsp, depst, depsx, kap, dkapp, dkapt, dkapx, alfa, grad_mj: taux de débit d'énergie nucléaire et dérivées par rapport à la pression, température et composition chimique, opacité et dérivées par rapport à la pression, température et composition chimique, $\alpha = \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln P_{\rm gaz}}$, gradient réel du modèle;

delta, cp, hp, gradad, gradrad, gamma1, vaissala, beta: $\delta = -\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T}$, chaleur spécifique à pression constante, échelle de hauteur de pression, gradients adiabatique et radiatif, fréquence de Brunt-Väissälä, $\beta = \frac{P_{\rm rad}}{P_{\rm tot}}$;

nh1, nhe1, nhe2: taux d'ionisation de ^{1}H, ^{4}He.

externes — etat, opa, conv, nuc, lim_ext, tdetau, cte: noms des routines externes de calcul d'équation d'état, d'opacité , de convection, de limite externe, de loi $T(\tau)$ et d'initialisation des constantes.

APPEL: intertot est appelé par fich_osc.

4.1.23 Routine externe de type lim

lim est la routine où sont définies les conditions limites externes du problème différentiel de la structure interne; ces conditions limites doivent porter sur deux des

trois variables thermodynamiques P, T et ρ. Elles se trouvent localisées dans la région optiquement mince de l'atmosphère. Les équations de la structure interne supposent que le flux d'énergie radiative est transporté par diffusivité radiative *i.e.* approximation de diffusion, ce qui est inexact dans le milieu optiquement mince où sont définies les conditions limites externes. Il faut donc transporter ces limites du milieu mince dans le milieu épais. La source de CESAM offre la possibilité d'utiliser deux types de méthodes: l'approximation monocouche et la reconstitution de l'atmosphère; se reporter, pour plus de détails, à Morel *et al.* [1994].

4.1.23.1 Arguments génériques des routines de type lim

```
subroutine lim(list,l_rac,r_rac,xchim,
1 pt_rac,dptsdl,dptsdr,t_rac,dtsdl,dtsdr,
2 m_rac,dmsdl,dmsdr,p_rac,dpsdl,dpsdr,t_eff,r_star,
3 pt_atm,t_atm,m_atm,tau,r_atm,p_atm,dlpp_atm,mstar,wrot,
4 tdetau,etat,opa,conv)
```

entrées

list: list=.true. calcul simplifié pour former un listing;

l_rac ,r_rac ,xchim: luminosité, rayon au raccord, composition chimique;

mstar, wrot: masse de l'étoile tenant compte de la perte de masse, vitesse angulaire en cas de rotation solide.

sorties

pt_rac, dptsdl, dptsdr: pression au raccord et dérivées;

t_rac, dptsdl, dptsdr: température au raccord et dérivées;

m_rac, dptsdl, dptsdr: masse au raccord et dérivées;

p_rac, dpsdl, dpsdr: pression gazeuse au raccord et dérivées;

t_eff, r_star: température effective, rayon de l'étoile;

pt_atm ,t_atm ,m_atm ,tau ,r_atm ,p_atm , dlpp_atm: tableaux des pression, température, profondeur optique, masse, rayon, pression gazeuse, $\frac{d\ln P_{\rm gaz}}{d\ln P}$.

externes

tdetau, etat, opa, conv: noms des routines externes de loi $\mathcal{T}(\tau)$, d'équation détat, d'opacité, de convection.

APPEL: lim est appelé par static_m et static_r.

4.1.23.2 L'approximation monocouche lim_tau1

Le "Solar Model Comparison Project", J. Christensen–Dalsgaard [1988], utilise une atmosphère simplifiée pour transporter les conditions limites externes dans le milieu optiquement épais; elle est obtenue à l'aide de deux relations déduites d'une discrétisation simple des équations de l'atmosphère:

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{dP}{d\tau} = \frac{\mathcal{G}M_\star}{R_\star^2\kappa} \sim \frac{\Delta P}{\Delta\tau} = \frac{P-P_{\rm ext}}{\tau-0} \\ L_\star = 4\pi R_\star^2\sigma T^4 \end{array}\right. \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} P = \frac{\mathcal{G}M_\star}{R_\star^2\kappa} \\ L_\star = 4\pi R_\star^2\sigma T^4 \end{array}\right.$$

sur la couche externe on a alors $T\text{ext} = T_{\rm eff}$; σ est la constante de Stéfan, $R_\star$, $M_\star$ et $L_\star$ sont respectivement, le rayon, la masse et la luminosité de l'étoile. Les deux dernières relations étant obtenues avec $\tau = 1$ et $P_{\rm ext} = 0$ ce qui, physiquement, peut être interprété en disant que les conditions limites externes sont écrites à $\tau = 1$. Cette formulation est utilisée dans la routine lim_tau1. Dans la routine lim_gong1, deux facteurs $\beta = 7.22$ et $\lambda = 6$, affectent respectivement les équations de la pression et de la luminosité, leur effet étant, avec une équation d'état supposant l'ionisation totale, d'obtenir un modèle solaire qui ressemble au soleil actuel.

PB `Avec l'approximation monocouche, la pression turbulente est ignorée dans l'atmosphère.`

4.1.23.3 Reconstitution d'une atmosphère lim_atm

Dans les cas où une grande précision doit être atteinte, en particulier pour les modèles solaires servant au calcul des oscillations, il n'est pas possible d'ignorer la structure fine des couches externes où se réfléchissent les modes d'oscillation. Il est nécessaire de reconstituer le moins mal possible cette couche limite; c'est l'objet de la routine lim_atm. Dans un calcul de structure interne il n'est pas réaliste de traiter le transfert radiatif avec toute sa complexité. L'approximation de diffusion, cas gris, utilisé dans la structure interne, n'est justifiée que pour des profondeurs optiques Rosseland $\tau_{\rm rac} \gtrapprox 20$ au delà de laquelle *cf.* Morel *et al.* [1994], le flux radiatif calculé par l'approximation de diffusion et le flux réel ne diffèrent que par moins de 1%. Pour éviter de traiter explicitement l'atmosphère, on transporte de $\tau = 0$ à $\tau = \tau_{\rm rac}$ les conditions externes *i.e.* celles au raccord avec le milieu interstellaire, à savoir: la densité ou la pression, la température et la masse.
Avec CESAM, afin de relier le modèle de l'atmosphère et celui de la structure interne, il faut disposer pour la pression, la température et la masse de trois fonctions[14] au point de raccord en $\tau = \tau_{\rm rac}$ *i.e.* à la limite externe de l'enveloppe:

$$P_{\rm rac}(R, L),\ T_{\rm rac}(R, L),\ M_{\rm rac}(R, L),$$

avec $M_{\rm rac}(R, L) \simeq M_{\rm tot}$ masse contenue à l'intérieur de la couche la plus externe de l'enveloppe. Dans l'atmosphère la luminosité L est supposée constante $L = L_\star$, la composition chimique qui, éventuellement varie en fonction du temps *e.g.* par diffusion et mélange convectif, est fixée à sa valeur sur la couche la plus extérieure de l'enveloppe. Pour une longueur de mélange et une composition chimique fixées, la température est donnée dans l'atmosphère par une loi $T(\tau)$ de la forme: $T(\tau_{\rm R}, T_{\rm eff}, g)$ dépendant, de la profondeur[15] optique Rosseland $\tau_{\rm R}$, $d\tau = -\kappa\rho dR$, de la température effective $T_{\rm eff}$ et de la gravité g:

$$T_{\rm eff} = \left(\frac{L}{4\pi R_{\rm tot}^2 \sigma}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad g = \frac{\mathcal{G}M}{R^2} \cong \frac{\mathcal{G}M_{\rm tot}}{R_{\rm tot}^2},$$

$R_{\rm tot}$ est le rayon au point de raccord avec le milieu interstellaire *cf.* Mihalas, [1978] p. 49, et κ est l'opacité.

[14] On assurera ensuite, par itérations, l'égalisation de ces valeurs résultant de l'intégration de l'atmosphère et de celles résultant de l'intégration de la structure interne.

[15] Pour plus de lisibilité l'indice R pour "Rosseland" sera omis dans la suite.

Cette définition de la température effective correspond à la température du corps noir rayonnant la même densité d'énergie que l'étoile, elle n'est pas universelle. Une seconde définition, souvent utilisée, permet de définir un "rayon observable" $R_\star$:

$$R_\star = R(\tau = \frac{2}{3}) \text{ et } T_{\rm eff} = \left(\frac{L}{4\pi\sigma R_\star^2}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

Dans ces conditions, la masse $M_\star < M_{\rm tot}$ est celle à la profondeur optique $\tau = 2/3$: $M_\star = M(\tau = 2/3)$.
Dans CESAM une troisième définition de $T_{\rm eff}$ *cf.* Schatzman & Praderie [1990], est utilisée: le rayon de l'étoile $R_\star$ est défini à la profondeur optique à laquelle la température est égale à la température effective. Pour certaines lois $T(\tau)$ les deux dernières définitions sont équivalentes. Pour la suite, on notera $\tau_\star$ la profondeur optique où le rayon est celui de l'étoile: $R(\tau_\star) = R_\star$.
La composition chimique, l'opacité et la définition retenue pour la température effective doivent, évidemment, être les mêmes dans:

1. le programme de calcul du modèle d'atmosphère à partir duquel est déduite la loi $T(\tau, T_{\rm eff}, g)$,

2. la partie atmosphère du programme de structure interne,

3. la partie supérieure de l'enveloppe.

Connaissant $R_{\rm rac}$ et L on peut intégrer de $\tau = \tau_{\rm min}$ à $\tau = \tau_{\rm rac}$ où on obtient, au rayon $R_{\rm rac}$, point de raccord entre l'enveloppe et l'atmosphère, les trois quantités:

$$P_{\rm rac}(R, L),\ T_{\rm rac}(R, L),\ M_{\rm rac}(R, L).$$

En utilisant τ comme variable indépendante le système des équations à intégrer est:

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{dP}{d\tau} = \frac{\mathcal{G}M}{\kappa R^2} - \frac{2\Omega^2 R}{3\kappa} \\ \frac{dT}{d\tau} = \frac{T}{P}\frac{dP}{d\tau}\nabla \\ \frac{dR}{d\tau} = -1\,/\,\kappa\rho \\ \frac{dM}{d\tau} = -4\pi R^2\,/\,\kappa \\ \frac{dR_\star}{d\tau} = 0 \\ \frac{d\tau_\star}{d\tau} = 0 \\ P_{\rm gaz} = P\left\{1 - \frac{a\alpha^2\delta}{8}\frac{\Gamma}{\Gamma+1}(\nabla - \nabla^*_{\rm ad})\right\} \end{array}\right. \quad \left\{\begin{array}{l} \text{conditions limites} \\ \rho(\tau_{\rm min}) = \rho_{\rm ext} \text{ ou } P(\tau_{\rm min}) = g\kappa\tau_{\rm min} \\ P_{\rm gaz}(\tau_{\rm min}) = P(\tau_{\rm min}) \\ M(\tau_\star) = M_\star \\ R(\tau_\star) = R_\star \\ T_{\rm eff} = \mathcal{T}(\tau_\star, T_{\rm eff}, g_\star) \\ T(\tau_\star) = \mathcal{T}(\tau_\star, T_{\rm eff}, g_\star) \\ R(\tau_{\rm rac}) = R_{\rm rac} \end{array}\right. \tag{4.31}$$

Les deux équations différentielles et les deux conditions limites portant sur $R_\star$ et $\tau_\star$ ont été ajoutées pour résoudre le problème différentiel avec la limite libre à $\tau = \tau_\star$ *cf.* Stoer & Bulirsch [1979] §7.3.0, elles couplent $R_\star$ et $\tau_\star$ aux autres variables. En codant lim_ro=.true. dans la NAMELIT `nl_espace`, à la limite optiquement mince, définie par $\tau = \tau_{\rm min}$, la condition limite porte sur la densité fixée à la valeur $\rho_{\rm ext}$ donnée par le modèle d'atmosphère; avec lim_ro=.false. la condition limite porte sur la pression

on utilise la relation dérivée de l'approximation monocouche. La condition sur la pression permet de s'affranchir de la contrainte sur la densité à une profondeur optique fixée arbitrairement. En général on fixe $\tau_{\rm min} \equiv 10^{-4}$ ce qui correspond, approximativement, au minimum de température dans la photosphère solaire, celà ne constitue évidemment pas une règle absolue[16]. A ce niveau l'atmosphère est supposée radiative si bien que $P_{\rm gaz} \equiv P$.
La dernière équation qui relie P et $P_{\rm gaz}$ est celle qui est vérifiée dans les zones radiatives où l'efficacité de la convection est nulle *i.e.* $\Gamma \equiv 0$.
Les conditions limites sont donc écrites aux trois niveaux: $\tau = \tau_{\rm rac}$, $\tau = \tau_\star(t)$ et $\tau = \tau_{\rm min}$, en se rappelant que $\tau_\star(t)$ est susceptible de varier au cours du temps. De plus, $\rho_{\rm ext}$ dépend aussi du temps puisque dépendant de la gravité $\rho_{\rm ext}(g_\star(t))$.
Au temps t, la solution des équations Eq. 4.31 (Page 148) donne $P_{\rm rac}$, $T_{\rm rac}$ et $M_{\rm rac}$ pour R et L donnés.
Evidemment, autant que faire se peut, la loi $T(\tau)$ et la structure interne doivent être calculées avec des physiques aussi équivalentes que possible à savoir: équation d'état, opacité, longueur de mélange, composition chimique *etc...* Malgré de nombreuses tentatives, à cause des incohérences entre la physique, les données, les paramètres, utilisés dans le modèle d'atmosphère d'une part, et dans la structure interne d'autre part, il s'est avéré impossible de raccorder non seulement les fonctions (*i.e.* pression, température, masse) mais aussi leurs gradients à la limite entre atmosphère et enveloppe; si le gradient de pression *i.e.* $\frac{dP}{dr} = -g\rho$, se raccorde parfaitement, il n'en est pas de même du gradient de température ni, parconséquent, du gradient $\nabla \equiv \frac{d\ln T}{d\ln P}$; des différences de l'ordre de 0.1 à 0.2 pouvent exister de part et d'autre du raccord. Pour certaines applications de telles différences sont prohibitives et, au prix de ne pas vérifier parfaitement la loi $T(\tau)$, un artifice numérique semi-original a été mis au point pour assurer aussi le raccord de ∇.

4.1.23.4 Artifices numériques utilisés pour le raccord de ∇

La gravité g étant fixée, la loi $T(\tau)$ est supposée pouvoir s'écrire sous la forme: $T^4 = \frac{3}{4}T_{\rm eff}^4 f(\tau)$; en utilisant l'expression de la luminosité, $L = 4\pi R_\star^2 \sigma T_{\rm eff}^4$, il vient:

$$T^4 = \frac{3}{4\pi ac}\frac{L_\star}{R_\star^2}f(\tau), \quad (\sigma = \frac{ac}{4}),\ \text{d'où}\ \frac{dT}{d\tau} = \frac{3}{16\pi ac}\frac{L_\star}{R_\star^2 T^3}\frac{df}{d\tau},$$

si bien qu'avec $d\tau = -\kappa\rho dr$:

$$\begin{aligned}\nabla \equiv \frac{d\ln T}{d\ln P} &= -\frac{P}{T}\frac{dT}{d\tau}\kappa\rho\frac{dr}{dP} = \frac{P\kappa}{T}\frac{dT}{d\tau}\frac{R^2}{\mathcal{G}M} = \frac{3}{16\pi ac\mathcal{G}}\frac{P\kappa L_\star}{MT^4}\left(\frac{R}{R_\star}\right)^2\frac{df}{d\tau} = \\ &= \nabla_{\rm rad}\frac{L}{L_\star}\left(\frac{R}{R_\star}\right)^2\frac{df}{d\tau} \qquad (4.32)\end{aligned}$$

puisque le gradient radiatif a pour expression:

$$\nabla_{\rm rad} = \frac{3}{16\pi ac\mathcal{G}}\frac{P\kappa L}{MT^4}.$$

[16] Il faut s'assurer que l'équation d'état et les tables d'opacité donnent des valeurs réalistes pour les conditions physiques auxquelles on peut s'attendre jusqu'à $\tau_{\rm min}$.

Ici $L \equiv L_\star$ et, dans le cas solaire $R/R_\star < 1 \pm 10^{-3}$. Dans une zone convective le flux total F est la somme du flux radiatif et du flux convectif: $F = F_{\rm rad} + F_{\rm conv}$. *Si et seulement si* l'approximation de diffusion est vérifiée *i.e.* à la limite $\tau \gg 1$, le flux radiatif $F_{\rm rad}(\tau) = \int_0^\infty F_\nu d\nu$ a pour expression:

$$F_{\rm rad} = \frac{4acT^4}{3\kappa\rho H_{\rm p}}\nabla$$

avec pour le flux total F:

$$F = \frac{4acT^4}{3\kappa\rho H_{\rm p}}\nabla_{\rm rad}$$

alors:

$$\lim_{\tau\gg1}\frac{F_{\rm rad}}{F} = \left(\frac{R}{R_\star}\right)^2\frac{df}{d\tau} \sim \frac{df}{d\tau},$$

puisque dans l'atmosphère, du moins pour les étoiles naines, le quotient $(R/R_\star)^2 \sim 1 \pm 10^{-8}$ peut être pris égal à l'unité.

L'artifice numérique utilisé pour le raccord de ∇ repose sur la formulation Eq. 4.32 (Page 149): pour le calcul de la température, au lieu d'utiliser explicitement la loi $T(\tau)$, on intègre l'équation différentielle:

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{T}{P}\frac{dP}{d\tau}\nabla = \frac{T}{P}\frac{dP}{d\tau}\nabla_{\rm rad}\left(\frac{R}{R_\star}\right)^2\frac{df}{d\tau},$$

et une condition limite sur la température, cette dernière étant écrite, *par exemple*, en $\tau_\star$:

$$T(\tau_\star) = T(\tau_\star, T_{\rm eff}, g_\star).$$

Ainsi, à un changement de variable près, les équations *sont les mêmes* dans l'atmosphère restituée et dans la structure interne.
Pour des lois $T(\tau)$ purement radiatives, telles que celles d'Eddington ou de Hopf, $\lim_{\tau\gg1}\frac{df}{d\tau} = 1$. On remarque qu'alors le flux total est posé égal au flux radiatif même si l'approximation de diffusion est injustifiée. Pour des lois $T(\tau)$ incorporant la convection, telles que celles dérivées de modèles d'atmosphères solaires, $\lim_{\tau\gg1}\frac{df}{d\tau} < 1$ (typiquement $\frac{df}{d\tau} \sim 0.2$ à $\tau = 20$). Il faudra donc un traitement différent suivant que la loi $T(\tau)$ est, ou non, purement radiative.

4.1.23.4.1 Loi $T(\tau)$ purement radiative La loi $T(\tau)$ ne contient pas la partie convective de l'atmosphère, force est donc d'utiliser le formalisme de la structure interne pour le calcul du gradient dans la partie convective, sachant qu'elle sera incorrecte tant que l'approximation de diffusion ne sera pas justifiée *i.e.* tant que $\tau \lessapprox 20$. Dans la partie radiative le gradient aura l'expression Eq. 4.32 (Page 149), dans la partie convective, son expression sera celle déduite de la théorie de la convection utilisée *cf.* § 4.1.7 (Page 107), la continuité du gradient sera assurée s'il est calculé avec des expressions qui ont mêmes limites de part et d'autre de la transition convectif/radiatif, ce qui est réalisé en utilisant, dans le formalisme de la longueur de mélange, un $\nabla_{\rm rad}$ *modifié*:

$$\nabla^*_{\rm rad} \equiv \nabla_{\rm rad}\frac{df}{d\tau}.$$

Cet artifice numérique est dû à Henyey *et al.* [1965], M. Gabriel & J. Christensen-Dalsgaard, *communications privées*. A la limite $\tau \gg 1$ le gradient sera ainsi exactement celui donné par le formalisme de la longueur de mélange puisque, pour une loi purement radiative, $\lim_{\tau \gg 1} \frac{df}{d\tau} = 1$.

4.1.23.4.2 Loi $T(\tau)$ avec convection L'artifice numérique précédent n'est pas utilisable puisque $\lim_{\tau \gg 1} \frac{df}{d\tau} < 1$ et, par ailleurs, l'utilisation d'une loi $T(\tau)$ non purement radiative perdrait de son intérêt puisque la description de la partie convective aux profondeurs optiques $\tau \sim 1$ serait effectuée avec une théorie de la convection qui utilise une expression du flux radiatif déduite de l'approximation de diffusion. Dans ce cas, pour assurer la continuité du gradient, l'artifice numérique utilisé consiste en une interpolation linéaire, en fonction de l'épaisseur optique, entre la valeur du gradient déduit de la loi $T(\tau)$:

$$\nabla = \nabla_{\rm rad} \left(\frac{R}{R_\star} \right)^2 \frac{df}{d\tau} \tag{4.33}$$

et de celle $\nabla_{\rm mel}$ calculée par la théorie de la longueur de mélange ainsi qu'il est décrit § 4.1.7 (Page 107). Ainsi, pour les profondeurs optiques $\tau \lessapprox 1$ le gradient est ou, est proche, de celui dérivé de la loi $T(\tau)$, tandis qu'il tend vers celui de la longueur de mélange pour les profondeurs optiques $\tau \gtrapprox \tau_{\rm rac}$. L'interpolation linéaire utilisée a pour expression:

$$\nabla = (1-x)\nabla_{\rm rad} \left(\frac{R}{R_\star} \right)^2 \frac{df}{d\tau} + x\nabla_{\rm mel}, \; x = \frac{\tau - 1}{\tau_{\rm rac} - 1}. \tag{4.34}$$

Pour les profondeurs optiques intermédiaires $\tau \sim 1$, cet artifice numérique permet de restituer, en partie, le modèle d'atmosphère avec convection, tout en assurant, plus profond, le raccord des gradients malgré les incohérences de la physique.

PB `Avec une loi` $T(\tau)$ `non purement radiative, la valeur` $\tau_{\rm rac} = 20$ `est imposée indépendemment de celle indiquée pour` $\tau_{\rm max}$ `dans la NAMELIST nl_espace du fichier de données mom_modele.don.`

4.1.23.5 Résolution numérique

Pour résoudre numériquement le problème différentiel défini par le système Eq. 4.31 (Page 148), on impose (dans la routine lim_atm) un indice *fixe* $n_\star = 3/4 n_{\rm a}$ à la limite libre $\tau = \tau_\star(t)$ parmi les $n_{\rm a}$ points de grille que comporte l'atmosphère. Pour ce faire, on utilise la **bijection linéaire par morceaux**: $\tau \mapsto \omega$ de $[\tau_{\rm rac}, \tau_{\rm min}]$ dans $[1, n_{\rm a}]$ définie par:

$$\ln \tau \mapsto \varphi(\omega) = \begin{cases} \ln \tau_{\rm rac} + (\omega - 1)\Delta\varphi^+, & \text{si } \omega \in [1, n_\star]; \\ \ln \tau_{\rm min} + (\omega - n_{\rm a})\Delta\varphi^-, & \text{sinon.} \end{cases} \tag{4.35}$$

Les deux valeurs de la pente $\Delta\varphi^+$ et $\Delta\varphi^-$ étant définies par:

$$\Delta\varphi^+ \equiv \frac{\ln \tau_\star - \ln \tau_{\rm min}}{n_\star - n_{\rm a}}, \; \Delta\varphi^- \equiv \frac{\ln \tau_\star - \ln \tau_{\rm rac}}{n_\star - 1};$$

ainsi on a:

$\omega = 1$, au fond de l'atmosphère où $\tau = \tau_{\rm rac}$,

$\omega = n_\star$, sur la limite libre interne à $\tau = \tau_\star$,

$\omega = n_{\rm a}$, sur la limite externe où $\tau = \tau_{\rm min}$.

On travaille donc avec un pas de grille constant ce qui est un avantage de la méthode. Pour l'intégration numérique on a utilisé les variables: $\xi = \ln P$, $\xi_{\rm g} = \ln P_{\rm gaz}$, $\eta = \ln T$, $\zeta_{\rm a} = R/R_\odot$, $\mu_{\rm a} = M/M_\odot$, $\zeta_\star = R_\star/R_\odot$ et $\varphi_\star = \ln \tau_\star$, si bien que le système Eq. 4.31 (Page 148) devient:

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{d\xi}{d\omega} = \left[\frac{\mathcal{G}M_\odot}{R_\odot^2}\frac{\mu_{\rm a}}{\zeta_{\rm a}^2} - \frac{2R_\odot\Omega^2\zeta_{\rm a}}{3}\right]\frac{\Delta\varphi^\pm}{\kappa}\exp(\varphi-\xi) \\ \frac{d\eta}{d\omega} = \frac{d\xi}{d\omega}\nabla \\ \frac{d\zeta_{\rm a}}{d\omega} = -\frac{1}{R_\odot}\frac{\Delta\varphi^\pm\exp(\varphi)}{\kappa\rho} \\ \frac{d\zeta_\star}{d\omega} = 0 \\ \frac{d\mu_{\rm a}}{d\omega} = -\frac{4\pi R_\odot^2}{M_\odot}\frac{\Delta\varphi^\pm}{\kappa}\exp(\varphi)\zeta_{\rm a}^2 \\ \frac{d\varphi_\star}{d\omega} = 0 \\ \frac{d\varphi}{d\omega} = \Delta\varphi^\pm \\ \exp(\xi)\left\{1 - \frac{a\alpha^2\delta}{8}\frac{\gamma}{\gamma+1}(\nabla - \nabla^*_{\rm ad})\right\} - \exp(\xi_{\rm g}) = 0 \end{array}\right. \tag{4.36}$$

avec $\Delta\varphi^\pm = \Delta\varphi^+$ (*respt.* $\Delta\varphi^-$) si $\omega \in [1, n_\star]$ (*respt.* $\omega \in [n_\star, n_{\rm a}]$).
Les conditions limites sont alors:

$$\left\{\begin{array}{l} \zeta_{\rm a}(1) = \zeta_{\rm rac} \\ \mu_{\rm a}(n_\star) = M_\star/M_\odot \\ \zeta_\star(n_\star) = R_\star/R_\odot \\ \eta(n_\star) = \ln\mathcal{T}(\exp(\varphi_\star), T_{\rm eff}, g_\star) \\ \eta(n_\star) = \ln T_{\rm eff} \\ \varphi(n_{\rm a}) = \ln\tau_{\rm min} \\ \rho(n_{\rm a}) = \rho_{\rm ext} \\ \xi(n_{\rm a}) = \xi_{\rm g}(n_{\rm a}) \end{array}\right.$$

avec:

$$T_{\rm eff}^4 = \frac{L_\odot\sqrt{\lambda_{\rm rac}^3}}{4\pi R_\odot^2\sigma\zeta_\star^2}, \quad g = \frac{\mathcal{G}M_\odot\mu_{\rm a}}{R_\odot^2\zeta_{\rm a}^2}.$$

La solution numérique de ce problème différentiel non-linéaire utilise la méthode de spline-collocation. Le processus itératif est initialisé, lors du premier calcul par un modèle d'atmosphère solaire et, pendant l'évolution par le modèle d'atmosphère du modèle au pas de temps précédent.

PB A cause de la discontinuité de la dérivée de la bijection linéaire par morceaux *cf.* § 2.3 (Page 31), au point $\tau = \tau_\star$, il semble se produire des difficultés de convergence lorsque $\tau_\star$ tente de franchir la discontinuité, un grand nombre d'itérations est alors nécessaire. En

`fait, une propriété de la méthode de spline-collocation qui permet d'atteindre effectivement la solution.`

Typiquement on utilise de $n_{\rm a} = 30$ à $n_{\rm a} = 100$ points de grille pour l'intervalle $[\tau_{\rm rac}, \tau_{\rm min}]$. Avec des B-splines d'ordre 3 il y a de 59 à 199 points d'intégration où les Eqs. (4.36) sont satisfaites, en tenant compte de la superconvergence l'ordre du schéma est 4.

Dans le programme de résolution le point d'indice 1 correspond au raccord à $\tau = \tau_{\rm rac}$ et $R = R_{\rm rac}$, le point d'indice $n_{\rm a}$ à $\tau = \tau_{\rm min}$. La densité externe $\rho_{\rm ext}$ à $\tau = \tau_{\rm min}$ dépend de la loi $T(\tau)$ utilisée. La profondeur optique $\tau = \tau_{\rm rac}$ du fond de l'atmosphère est un paramètre externe introduit dans la NAMELIST `nl_espace`: $\tau_{\rm rac}$ =`tau_max`.

La solution consiste en $\xi_{\rm rac}(\zeta_{\rm rac}, \lambda_{\rm rac})$, $\eta_{\rm rac}(\zeta_{\rm rac}, \lambda_{\rm rac})$, $\mu_{\rm rac}(\zeta_{\rm rac}, \lambda_{\rm rac})$; les dérivées par rapport à $\eta_{\rm rac}$ et $\lambda_{\rm rac}$ sont calculées numériquement.

4.1.24 Routine interne lim_zc

Cette routine a trois fonctions principales: i) initialisation, si nécessaire, de la répartition des couches en fonction du nombre de points à utiliser, ii) localisation des limites des zones radiatives et convectives, au besoin avec overshoot enfin, iii) détermination des coefficients de répartition.

4.1.24.1 Description de lim_zc

Initialisation:

1. initialisation diverses effectuées au premier appel, en particulier, détermination des points limites et calcul des coefficients d'intégration correspondants à cette répartition;
2. au cas où le nombre de couches doit être modifié, détermination de la nouvelle fonction d'espacement, changement de la base de B-splines, redéfinition des points limites et calcul des coefficients d'intégration.

2 localisation:

1. calcul en chaque point de la grille de la différence $\nabla_{\rm rad} - \nabla^*_{\rm ad}$, localisation des changements de signe et identification de la nature de la limite à l'aide de la variable logique `lconv` qui est `.true.` lorsqu'on passe d'une zone radiative à une zone zone convective en traversant la limite dans le sens croissant de la variable d'espace *i.e.* masse, rayon ou encore, indice;
2. Elimination des zones convectives mal définies *i.e.* soit trop proches du centre, de la limite externe ou encore ne portant que sur très peu de couches;
3. affinement, par dichotomie, de la localisation des limites retenues;
4. si besoin, extension de diverses natures des zones convectives et analyse des chevauchements éventuels.

3 détermination:

1. des coefficients de répartition qui permettent d'amener chacune des limites sur un point de la grille.

4.1.24.2 Arguments de lim_zc

```
subroutine lim_zc(bp,q,qt,knot,n,jlim,lim,lconv,derxx,lderxx,
1 xx,xl,new_n,ni,nl,fac,wrot,
2 mc,mct,nc,knotc,chim,m_zc,mstar,r2,m23,dim,
3 r_zc,r_ov,etat,opa,conv,nuc)
```

entrées mc, mct, nc, knotc, chim: éléments pour interpolation de la composition chimique;

new_n : .true. on modifie le nombre de couches;

mstar,wrot: masse totale, vitesse angulaire en cas de rotation solide.

in/out bp ,q, qt, knot, n: éléments pour l'interpolation des variables d'espace;

derxx, lderxx, xx, xl, ni, nl : quantités pour le calcul des B-splines aux points de collocation et aux points limites, abscisses des points de collocation et des points limites, nombre de limite en chaque point limite, nombre de lignes du Jacobien;

r2, m23, dim: éléments pour interpolation en une masse ou en un rayon donné, dimension de la base.

sorties fac, jlim, lim, lconv, m_zc, r_zc, r_ov: facteurs de répartition, indices des limites zone radiative / zone convective, nombre et nature des limites, masses, rayons et rayons étendus des limites.

externes etat, opa, conv, nuc: routines pour équation d'état, opacités, convection, réactions thermonucléaires.

APPEL: lim_zc est appelé par resout.

4.1.25 Routine interne list

La fonction de cette routine qui n'a que des arguments d'entrée, est de construire le listing qui permet de suivre le déroulement du calcul et de produire pour différentes époques de l'évolution une liste détaillée des variables du modèle, des abondances des rapports isotopiques à la surface et des flux de neutrinos, le calcul de ces derniers résultant d'une collaboration avec G.Berthomieu.

4.1.25.1 Description de list

1 Initialisations diverses, en particulier d'index pour l'identification des éléments chimiques.

2 une alternative se présente:

i) un listing complet du modèle est requis, dans un cartouche on reproduit l'âge du modèle, la température effective, la luminosité, le rayon, la gravité , la pression, la température, les abondances par fraction de masse de ^{1}H et ^{4}He centrales, les proportions d'énergie libérées par les cycles thermonucléaires et la gravité, la nature du modèle, la variation relative de masse, ses valeurs présente et initiale, les abondances et les rapports isotopiques en surface. Puis le modèle est listé couche par couche du sommet de l'enveloppe vers le centre, un cartouche est disposé toutes les 10 couches pour identifier les quantitées reportées. Les limites zone radiative / zone convective sont matérialisées. L'atmosphère est ensuite reproduite couche à couche en partant de l'enveloppe vers la surface; on indique ensuite la déplétion des éléments en surface, les abondances relatives en nombre à la surface, les flux de neutrinos, et une estimation, pour le cas solaire, de ν_0 $\delta\nu_{02}$, $\delta\nu_{13}$ et de A.

ii) seul un listing réduit est requis, dans un cartouche on reproduit l'âge du modèle, la température effective, la luminosité, le rayon, la gravité , la pression, la température, les abondances par fraction de masse de ^{1}H et ^{4}He centrales, les proportions d'énergie libérées par les cycles thermonucléaires et la gravité, la nature du modèle, la variation relative de masse, ses valeurs présente et initiale, les abondances et les rapports isotopiques en surface.

4.1.25.2 Arguments de list

```
subroutine list(n,m,pt,p,ro,t,r,l,compg,age,teff,rstar,hp,mstar,
1 methode,preci,ecritout,kap,epsilon,eint,xdot,ydot,rdot,gamma1,
2 nh1,nhe1,nhe2,alfa,beta,delta,cp,vaissala,conv,dlpdxt,dlpdxr,
3 gradconv,gradrad,gradad,dcapdt,dcapdr,depsdr,depsdt,d2p,d2ro,
4 anupp,anupep,anub8,anube7,anun13,anu015,degene,w,z,chaine,
5 pt_atm,p_atm,t_atm,m_atm,tau,r_atm,ro_atm,k_atm,gradr_atm,grada_atm,
6 gradc_atm,n_atm,i_pp,i_cno,i_3a,i_gr)
```

n, m, pt, p, ro, t, r, l, compg: nombre de couches, tables des $P_{\rm tot}$, $P_{\rm gaz}$, densité, tempéarture, rayon, luminosité, composition chimique par unité de masse;

age, teff, rstar, mstar: âge, température effective, rayon total, masse totale;

methode, preci, ecritout: identification de la méthode numérique, précision; `ecritout=.true.`: il y écriture d'un modèle complet;

hp, kap, epsilon, eint, xdot, ydot, rdot, gamma1: table des échelles de hauteur de pression, opacité , énergie thermonucléaire, gravifique, interne, taux de destruction de ^{1}H et ^{4}He, vitesse, Γ_1;

nh1, nhe1, nhe2, alfa, beta, delta: taux d'ionisation de ^{1}H ^{4}HeI et ^{4}HeII, $\alpha = \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln P_{\rm gaz}}$, $\beta = \frac{P_{\rm rad}}{P}$, $\delta = -\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T}$ cf, Eq. 4.49 (Page 183) et Eq. 4.50 (Page 183);

cp, vaissala, conv, dlpdxt, dlpdxr: tables des chaleurs spécifiques à pression constante, fréquence de Brunt-Väissälä *cf.* Eq. 4.49 (Page 183) et Eq. 4.50 (Page 183), `conv(i)=.true.` si la couche d'indice `i` est dans une zone convective;

gradconv, gradrad, gradad, dcapdt, dcapdr: tables du gradient dans une zone convective, radiatif, adiabatique, dérivées de l'opacité par rapport à la température et à la densité;

depsdr, depsdt, d2p, d2ro: dérivées de l'énergie nucléaire par rapport à la densité et à la température, dérivées secondes de la pression et de la densité centrales;

anupp, anupep, anub8, anube7, anun13, anu015: tables des nombres de neutrinos des diverses sources;

degene, w, z, chaine: table des coefficients de dégénérescence, vitesse angulaire, abondances en éléments lourds, nature du modèle;

pt_atm, p_atm, t_atm, m_atm,: tables des pression totale, pression gazeuse, température, masse pour l'atmosphère;

tau, r_atm, ro_atm, k_atm, gradr_atm, grada_atm, gradc_atm, n_atm: tables d'épaisseur optique, rayon, densité, opacité, gradient radiatif, adiabatique et convectif, nombre de couches de l'atmosphère;

i_pp, i_cno, i_3a, i_gr: pourcentage d'énergie d'origine nucléaire PP, CNO, 3α et gravifique.

APPEL: list est appelé de cesam.

4.1.26 Routine interne lit_nl

Routine sans argument dont la fonction est de lire les NAMELISTS du fichier d'entrée mon_modele.don, d'en transférer les données dans les COMMONs *ad-hoc* et de reproduire ces NAMELISTs sur l'écran et dans le fichier mon_modele.lis.

APPEL: lit_nl est appelé par resout.

4.1.27 Routine externe de type nuc

En un point de température, de densité, de composition chimique données, la routine nuc calcule les seconds membres et le jacobien des équations de l'évolution temporelle de la composition chimique, le débit d'énergie thermonucléaire, ainsi que ses dérivées par rapport à la température, à la densité et aux abondances et, enfin, même si la masse totale n'est pas $1M_\odot$, le nombre de neutrinos produits par unité de masse et de temps par les différentes réactions qui en font intervenir.

Selon la nature du problème physique à traiter, la précision requise, lors de l'appel à CESAM il faut faire choix d'une routine de type nuc, celle-ci utilise les tables de taux de réactions nucléaires et un certain nombre de données nucléaires spécifiques, préalablement calculées par le programme tab_reac *cf.* § 2.1.3.5 (Page 11).

La routine externe nuc retenue fait appel à la routine rq_reac qui effectue les interpolations des taux de réactions nucléaires, le calcul de l'effet d'écran et des

énergies, ainsi que les dérivées[17] des taux écrantés et des énergies par rapport à la température, densité et composition chimique.

Dans la routine de type nuc utilisée il faut indiquer le chemin d'accès au fichier de tables; elles seront lues lors d'un appel d'initialisation à rq_reac:

Exemple: ppcno9e

```
nom='/home/morel/SUN\_DATA/ppcno9.data'
comp(1)=.7 !fictif, evite une division par 0
call rq_reac(comp,1.d7,1.d0,r,drt,dro,drx,q,dqt,dqo,dqx,
1 mue,dmuex,nom)
```

Ces dispositions ont l'inconvénient de nécessiter de former la table de réactions nucléaires et d'en indiquer le nom dans la routine nuc mais elles présentent l'avantage d'optimiser la tabulation pour le problème à traiter, et de rassembler à un seul endroit *i.e.* dans le programme tab_reac, les réactions nucléaires pour toutes les applications.

CESAM offre aussi la possibilité de faire transiter par le COMMON evol_chim.common le nom du fichier des tables de réactions nucléaires, du fichier de données mon_modele.don à la routine de type nuc, par l'intermédiaire de la chaine de character*50 f_nuc *cf.* § 2.6.3 (Page 55).

4.1.27.1 Description des routines de type nuc

Au premier appel les abondances initiales sont déterminées en fonction des abondances requises pour l'hydrogène et l'hélium puis, suivant la valeur de l'argument fait :

1 fait=1 Initialisations,

2 fait=2 calcul des taux de réactions et du jacobien,

3 fait=3 calcul de l'énergie nucéaire,

4 fait=4 calcul des flux de neutrinos.

Ce qui précède ne concerne pas la routine nuc_gong décrite en détails plus avant.

4.1.27.2 Arguments génériques des routines de type nuc

```
subroutine nuc(t,ro,comp,dcomp,jac,deriv,fait,
1 epsilon,et,ero,ex,hhe,be7e,b8e,n13e,o15e,f17e)
```

entrées

t, ro, comp: température, densité, abondances;

deriv: deriv=.true. on calcule le jacobien et les dérivées;

fait: fait=1 : initialisation de la composition chimique, fait=2 : calcul de dcomp et jacobien si deriv=.true. fait =3 : energie nucleaire et si deriv=.true., derivees / température, densité et abondances, fait=4 : calcul des neutrinos.

[17] C'est la nécessité du calcul des dérivées qui a motivée la tabulation des taux de réactions nucléaires plutôt que l'emploi direct des formules.

sorties dcomp, jac: dérivée temporelle des abondances, jacobien;

epsilon, et, ero, ex: énergie thermonucleaire et dérivées;

hhe, be7e, b8e, n13e, o15e, f17e: nombres de neutrinos pour les réactions $^1\mathrm{H}(p,\beta^+\nu)^2\mathrm{H}$, $^7\mathrm{Be}(e^-,\nu\gamma)^7\mathrm{Li}$, $^8\mathrm{B}(\beta^+\nu)^8\mathrm{Be}$ $^{13}\mathrm{N}(\beta^+\nu)^{13}\mathrm{C}$, $^{15}\mathrm{O}(\beta^+\nu)^{15}\mathrm{N}$, $^{17}\mathrm{F}(\beta^+\nu)^{17}\mathrm{O}$.

APPEL: nuc est appelé de divers endroits, en particulier rk_imps, thermo, eq_diffus, cesam.

4.1.27.3 Quelques routines de type nuc

La mise en œuvre de ces routines a bénéficié, à divers titres, de collaborations de la part de B. Pichon, Y. Lebreton, S. Brun et D. Cordier. La source de CESAM contient diverses routines du type nuc avec divers degrés de sophistication:

4.1.27.3.1 Cycle PP simplifié Il s'agit de la routine nuc_gong du Solar Model Comparison Project Christensen–Dalsgaard [1988]. On ne tient compte que d'un seul élément chimique: l'hydrogène dont l'abondance par unité de masse est ici notée X. L'énergie thermonucléaire générée par unité de masse et de temps est:

$$\epsilon = Q_e a_{11} \frac{X^2}{2m_u} \rho T_9^{-\frac{2}{3}} \exp(-bT_9^{-\frac{1}{3}})$$

qui correspond à un taux:

$$\dot{X} = \frac{\partial X}{\partial t} = -R_e a_{11} \frac{X^2}{2} \rho T_9^{-\frac{2}{3}} \exp(-bT_9^{-\frac{1}{3}})$$

où $R_e = 6.5$, $Q_e = 6.5 \times 10^{-5}$, $a_{11} = 4.21 \times 10^{-15}$, $b = 3.6$, m_u est l'unité de masse atomique et $T_9 = T \times 10^{-9}$.

4.1.27.3.2 Cycles PP et CNO Pour une évolution solaire nécessitant une précision maximale diverses routines de type nuc sont disponibles. La tabulation porte sur 200 points régulièrement espacés en $\ln T$ et couvre l'intervalle de température 500 000K – 20 000 000K. Les réactions nucléaires retenues sont celles des cycles PP et CNO. Le nombre d'isotopes retenu varie de 9 a 13. L'élément fictif complémentaire Ex est sensé représenter les éléments lourds dont on ne tient pas explicitement compte dans le réseau nucléaire. Une charge moyenne de 13 et une masse atomique moyenne de 28 lui sont attribuées. Les routines suivantes sont disponibles:

1. ppcno9e: les isotopes ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O et l'élément fictif, Ex, sont pris en compte, ^{2}H, ^{7}Li, ^{7}Be étant à l'équilibre.

2. ppcno9en: identique aux précédent avec des taux de réactions PP et CNO très légérement corrigés de Adelberger *et al.* [1998].

3. ppcno10Fe, ppcnoLi: les isotopes ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{7}Li, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O, ^{55}Fe et l'élément fictif, Ex qui correspond à ^{24}Mg, sont pris en compte, ^{2}H, ^{7}Be étant à l'équilibre. La routine ppcnoLi est destinée à suivre l'évolution de l'abondance du lithium à partir d'un modèle de ZAMS homogène en utilisant l'abondance météoritique du lithium. Une disposition est introduite pour éviter le flash du lithium dans la partie centrale ou il se trouve initialement très fortement en déséquilibre voir § 2.3 (Page 31). Pour ce faire, on utilise le fait que le lithium doit avoir disparu si la température dépasse ≈ 3 MK. L'artifice consiste à ne pas tenir compte de l'énergie générée par la destruction du lithium lorsque son abondance est supérieure au centième de son abondance météoritique et la température supérieure à 3 MK. Ainsi, le modèle de ZAMS homogène est obtenu avec l'abondance météoritique pour le lithium et à l'issue de quelques pas temporels le profil de l'abondance du lithium correspond au réactions nucléaires.

PB `La routine ppcnoLi ne peut être utilisée pour suivre l'évolution sur la branche des géantes à cause de la génération d'énergie due à la combustion du lithium au cours du dredge up.`

4. ppcno13e: les isotopes ^{1}H, ^{2}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{7}Li, ^{7}Be, ^{9}Be, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O et l'élément fictif, Ex, sont pris en compte.

5. ppcno13en: identiques au précédent avec des taux de réactions PP et CNO très légérement corrigés de Adelberger *et al.* [1998].

6. ppcno12e, ppcno12en: identiques aux deux précédentes sans ^{9}Be.

PB `Les routines qui prennent en compte` ^{2}`H,` ^{7}`Li,` ^{7}`Be hors de l'équilibre, ne doivent pas être utilisées pour des évolutions initialisées sur la ZAMS; les abondances protosolaires de ces éléments étant incompatibles avec les températures du modèle de ZAMS, il se produit une sorte de flash et le modèle de séquence principale d'âge zéro homogène, ne peut être initialisé qu'avec grandes difficultés.`

4.1.27.3.3 Au delà de la séquence principale

1. ppcno9e_gt: les isotopes ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O et l'élément fictif, Ex, sont pris en compte, ^{2}H, ^{7}Li, ^{7}Be étant à l'équilibre. Le domaine de température couvre 1 000 000K – 50 000 000K, pour évolution jusqu'au début de la branche des géantes.

2. ppcno3a9e: les isotopes ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O et l'élément fictif, Ex, sont pris en compte, ^{2}H, ^{7}Li, ^{7}Be étant à l'équilibre. Le domaine de température couvre 1 000 000K – 120 000 000K, pour évolution jusqu'au début de la combustion de l'hélium.

3. ppcno3ac10: les isotopes ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O, ^{20}Ne et l'élément fictif, Ex, sont pris en compte, ^{2}H, ^{7}Li, ^{7}Be étant à l'équilibre. Le domaine de température couvre 1 000 000K – 2 000 000 000K, pour évolution jusqu'au début de la combustion du carbone.

4.1.27.3.4 Utilisation de la compilation NACRE La source contient les routines nacre12e, nacre12FeMg, nacre13e, nacre9, nacre9FeMg, nacre9_gt dont les taux de réaction sont calculés à l'aide des réactions de la compilation européenne de NACRE (Angulo *et al.* [1999], Morel *et al.* [1999]). Ces routines diffèrent par les éléments chimiques qui sont pris en compte.

4.1.27.4 Construction des routines du type nuc

On décrit sur l'exemple de la routine ppcno3a9e la méthode à utiliser pour construire une routine de type nuc.

4.1.27.4.1 Ordre des éléments L'ordre des éléments chimiques est défini dans le programme tab_reac qui crée les tables d'interpolation des réactions nucléaires *e.g.* dans ppcno3a9e l'ordre des éléments est: ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O. L'élément fictif complémentaire Ex, est ajouté par la routine externe de type nuc. Des éléments hors du réseau de réactions thermonucléaires seront éventuellement ajoutés par la suite:

- Z, élément chimique fictif, simulant les éléments lourds dans leur ensemble, dans la routine resout.
- Ω, vitesse angulaire, dans la routine resout.

4.1.27.4.2 Abondances initiales La composition chimique initiale est déterminée à partir des données suivantes:

1. abondances initiales *en masse* de l'hydrogène X, et de l'hélium Y, lues dans la NAMELIST nl_chim,
2. proportions initiales *en nombre* des éléments lourds dans $Z = 1 - X - Y$,
3. rapports isotopiques initiaux.

De l'ensemble de ces données résulte un système d'équations linéaires dont la solution est la composition chimique initiale. Dans ce qui suit x_i désigne l'abondance par mole *i.e.* l'abondance par masse divisée par la masse atomique ν_i, de l'isotope d'ordre $i = 1, \ldots, 10$ dans la liste: ^{1}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O, Ex. Les rapports d'abondances initiaux en nombre, dans Z, du carbone, azote et oxygène seront respectivement désignés par C, N et O; par exemple pour le soleil: $C = 0.24551$, $N = 0.06458$, $O = 0.51295$. Les rapports isotopiques initiaux en nombre, seront désignés par le rapport de leurs symboles *e.g.* ^{3}He/^{4}He$= 4.2\,10^{-4}$. Le système d'équations linéaires vérifiées par les abondances initiales en nombre, $x_{i,\ i=1,\ldots,10}$ s'écrit:

$$\begin{aligned} x_1\nu_1 &= X \\ x_2\nu_2 + x_3\nu_3 &= Y \\ \Sigma_{i=4}^{10} x_i\nu_i &= 1 - X - Y \\ x_4 + x_5 - C \times \Sigma_{i=4}^{10} x_i &= 0 \\ x_6 + x_7 - N \times \Sigma_{i=4}^{10} x_i &= 0 \end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned} x_8 + x_9 - O \times \Sigma_{i=4}^{10} x_i &= 0 \\ x_2 - x_3 \ {}^3\mathrm{He}/{}^4\mathrm{He} &= 0 \\ x_5 - x_4 \ {}^{13}\mathrm{C}/{}^{12}\mathrm{C} &= 0 \\ x_7 - x_6 \ {}^{15}\mathrm{N}/{}^{14}\mathrm{N} &= 0 \\ x_9 - x_8 \ {}^{17}\mathrm{O}/{}^{16}\mathrm{O} &= 0 \end{aligned}$$

Pour chaque isotope on fixe une abondance minimale ou dessous de laquelle l'isotope est considéré comme inexistant, son évolution temporelle n'est alors pas contrôlée. La plupart des rapports isotopiques utilisés sont ceux de la nébuleuse solaire issus de la table 3 des nuclides de l'article de Anders et Grevesse [1989]. Le rapport isotopique ${}^3\mathrm{He}/{}^4\mathrm{He} = 1.104 \times 10^{-4}$ est déduit d'une mesure dans Jupiter; toutefois si ${}^2\mathrm{H}$ est pris à l'équilibre, il convient d'ajouter à l'abondance initiale de ${}^3\mathrm{He}$ celle de ${}^2\mathrm{H}$ qui est transformé en ${}^3\mathrm{He}$ pendant la pré-séquence principale , d'où la valeur du rapport isotopique initial ${}^3\mathrm{He}/{}^4\mathrm{He} = 4.2\,10^{-4}$.

4.1.27.4.3 Cycles PP, CNO et 3α En désignant indistinctement par un même symbole l'isotope et son abondance, en nombre par mole, les principales réactions thermonucléaires des cycles PP, CNO et 3α sont les suivantes Clayton, [1968], p. 380 et p. 392:

$$\underbrace{\begin{array}{ll} R_1 : & {}^1\mathrm{H}(p,\beta^+\nu)^2\mathrm{H} \\ R_2 : & {}^2\mathrm{H}(p,\gamma)^3\mathrm{He} \\ R_3 : & {}^3\mathrm{He}({}^3\mathrm{He},2p)^4\mathrm{He} \\ R_4 : & {}^4\mathrm{He}({}^3\mathrm{He},\gamma)^7\mathrm{Be} \\ R_5 : & {}^7\mathrm{Li}(p,\alpha)^4\mathrm{He} \\ R_6 : & {}^7\mathrm{Be}(e^-\nu\gamma)^7\mathrm{Li} \\ R_7 : & {}^7\mathrm{Be}(p,\gamma)^8\mathrm{B}^*(\beta^+\nu)^8\mathrm{Be}(\alpha)^4\mathrm{He} \end{array}}_{\text{cycle PP}} \qquad \underbrace{\begin{array}{ll} R_8 : & {}^{12}\mathrm{C}(p,\gamma)^{13}\mathrm{N}(\beta^+\nu)^{13}\mathrm{C} \\ R_9 : & {}^{13}\mathrm{C}(p,\gamma)^{14}\mathrm{N} \\ R_{10} : & {}^{14}\mathrm{N}(p,\gamma)^{15}\mathrm{O}(\beta^+\nu)^{15}\mathrm{N} \\ R_{11} : & {}^{15}\mathrm{N}(p,\gamma)^{16}\mathrm{O} \\ R_{12} : & {}^{15}\mathrm{N}(p,\alpha)^{12}\mathrm{C} \\ R_{13} : & {}^{16}\mathrm{O}(p,\gamma)^{17}\mathrm{F}(\beta^+\nu)^{17}\mathrm{O} \\ R_{14} : & {}^{17}\mathrm{O}(p,\alpha)^{14}\mathrm{N} \end{array}}_{\text{cycle CNO}}$$

$$\underbrace{\begin{array}{ll} R_{15} : & {}^4\mathrm{He}(2\alpha,\gamma)^{12}\mathrm{C} \\ R_{16} : & {}^{12}\mathrm{C}(\alpha,\gamma)^{16}\mathrm{O} \\ R_{17} : & {}^{16}\mathrm{O}(\alpha,\gamma)^{20}\mathrm{Ne} \end{array}}_{\text{cycle } 3\alpha}$$

Compte non tenu de l'effet d'écran, le nombre R_i de réactions i, $i = 1, \ldots, 17$, par $\mathrm{sec}^{-1}\ \mathrm{g}^{-1}$ est obtenu en mutipliant le taux tabulé par:

- ρ pour les réactions binaires entre éléments différents,
- $\rho/2!$ pour les réactions binaires entre éléments identiques: R_1 et R_3,
- $\rho^2/3!$ pour la réaction ternaire R_{15}, Fowler *et al.* [1975], p. 86 et 87.

Le nombre d'électrons par mole e^- et les taux de réaction incluant l'effet d'écran sont des fonctions $R_{i,\, i=1,\ldots,17}(T, \rho, \mathcal{X})$, $\mathcal{X}$ désignant le vecteur de composition chimique. Ils sont calculés ainsi que leur dérivées, par rapport à $(T, \rho, \mathcal{X})$, dans la routine rq_reac en utilisant les tables construites par le programme tab_reac.

4.1.27.4.4 Eléments à l'équilibre Dans certaines phases de l'évolution des éléments *e.g.* ^{2}H, ^{7}Li et ^{7}Be pour le soleil, ont des temps caractéristiques d'évolution très courts par rapport à l'échelle de temps de l'évolution. Leur taux de création est égal à leur taux de destruction. De tels éléments sont dits "*à l'équilibre*". L'abondance de chaque élément à l'équilibre résulte directement de la relation d'équilibre ce qui permet des simplifications importantes. ^{2}H, ^{7}Li et ^{7}Be sont considérés à l'équilibre dans la routine `ppcno3a9e`. On a alors:

$$0 = \frac{d\ ^2\mathrm{H}}{dt} = R_1\ ^1\mathrm{H}^2 - R_2\ ^1\mathrm{H}\ ^2\mathrm{H} \Rightarrow\ ^2\mathrm{H} = \frac{R_1\ ^1\mathrm{H}}{R_2},$$

$$\begin{cases} 0 = \frac{d\ ^7\mathrm{Be}}{dt} = R_4\ ^3\mathrm{He}\ ^4\mathrm{He} - R_6\ ^7\mathrm{Be}\ e^- - R_7\ ^1\mathrm{H}\ ^7\mathrm{Be} \\ 0 = \frac{d\ ^7\mathrm{Li}}{dt} = R_6\ ^7\mathrm{Be}\ e^- - R_5\ ^1\mathrm{H}\ ^7\mathrm{Li} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} ^7\mathrm{Be} = \frac{R_4\ ^3\mathrm{He}\ ^4\mathrm{He}}{R_6\ e^- + R_7\ ^1\mathrm{H}} \\ ^7\mathrm{Li} = \frac{R_6\ ^7\mathrm{Be}\ e^-}{R_5\ ^1\mathrm{H}} \\ R_4\ ^3\mathrm{He}\ ^4\mathrm{He} = R_5\ ^1\mathrm{H}\ ^7\mathrm{Li} \\ + R_7\ ^1\mathrm{H}\ ^7\mathrm{Be} \end{cases}$$

4.1.27.4.5 Effet d'écran L'effet d'écran est un abaissement de la barrière de potentiel coulombienne dû à la charge d'espace des ions. Il se traduit par l'augmentation des taux des réactions thermonucléaires. Pour une évolution jusque sur la branche des géantes l'approximation "*écran faible*" est suffisante, son expression est la suivante: Clayton, [1968], équations 4–215 à 4–221:

$$f = \exp(-\frac{U_0}{kT}) = \exp\left(0.188 z_1 z_2 \sqrt{\frac{\rho\ \zeta}{T_6^3}}\right), \qquad \zeta = \sum_i z_i(1+z_i)x_i$$

z_i étant la charge du noyau i, x_i l'abondance, par mole, de l'élément chimique i et $T_6 = T \times 10^{-6}$. ζ représente l'effet des charges. L'approximation "*écran faible*", n'est valable que si f est proche de l'unité.

CESAM offre l'alternative d'utiliser l'écrantage de Mitler [1977], qui généralise, d'après cet auteur, les cas d'écrantage faible et intermédiaire; le cas écrantage fort n'est pas implémenté dans la version actuelle de CESAM. Pour son emploi, coder `mitler=.true.` dans la NAMELIST `nl_chim`. L'implantation de l'écrantage de Mitler a bénéficié d'une collaboration avec S. Turck-Chièze.

PB `Pour la capture électronique de la réaction` ^{7}Be$(e^-\nu\gamma)^7$Li `l'effet d'écran est inclus dans l'expression du taux de réaction (Fowler` *et al.* `[1975]).`

4.1.27.4.6 Nombre d'électrons libres Bien que les réactions nucléaires ne sont pas uniquement localisées dans un milieu totalement ionisé *e.g.* le fer n'est pas totalement ionisé au centre du soleil, le nombre d'électrons libres par mole est pris égal à:

$$n_\mathrm{e} = \sum_i z_i x_i.$$

4.1.27.4.7 Energie thermonucléaire La quantité d'énergie thermonucléaire, $Q_i, i = 1, \ldots, 17$, libérée par chaque réaction i, est déterminée pour chaque réaction par le programme tab_reac à partir des excès de masse et des énergies des neutrinos, Clayton [1968] p. 289. Ces quantités sont tabulées avec les taux des réactions.

La quantité d'énergie thermonucléaire libérée, est alors:$\sum_i Q_i R_i$ *e.g.* pour les cycles PP, CNO et 3 α on a:

$$\epsilon = q_1\ {}^1\mathrm{H}^2 + q_2\ {}^1\mathrm{H}\ {}^2\mathrm{H} + q_3\ {}^3\mathrm{He}^2 + q_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He} + q_5\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Li} + (q_6\ e^- + q_7\ {}^1\mathrm{H})\ {}^7\mathrm{Be}$$
$$+q_8\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{12}\mathrm{C} + q_9\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{13}\mathrm{C} + q_{10}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{14}\mathrm{N} + (q_{11} + q_{12}){}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} + q_{13}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{16}\mathrm{O} + q_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O}$$
$$+q_{15}\ {}^4\mathrm{He}^3 + q_{16}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{12}\mathrm{C} + q_{17}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{16}\mathrm{O},$$

chacune des lignes représente l'énergie libérée respectivement par les cycles PP, CNO et 3α. Ces quantités apparaissent séparément dans la liste du modèle. Avec ^{2}H, ^{7}Li et ^{7}Be à l'équilibre, il convient d'utiliser les valeurs à l'équilibre établies précédemment.

4.1.27.4.8 Neutrinos Le nombre de neutrinos, par unité de masse et de temps, émis par les réactions R_1, R_6, R_7, R_8, R_{10} et R_{13} sont respectivement:

$$H_n = R_1\ {}^1\mathrm{H}^2,\ Be_n = R_6 e^-\ {}^7\mathrm{Be},\ B_n = R_7\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Li},$$
$$N_n = R_8\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{12}\mathrm{C},\ O_n = R_{10}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{14}\mathrm{N},\ F_n = R_{13}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{16}\mathrm{O}.$$

4.1.27.4.9 Equations d'évolution Pour l'exemple des cycles PP+CNO+3α, avec ^{2}H, ^{7}Be, et ^{7}Li à l'équilibre, en désignant les abondances par mole par les symboles isotopiques, les équations d'évolution sont les suivantes:

$$\begin{aligned}
\frac{d^1\mathrm{H}}{dt} &= -3R_1\ {}^1\mathrm{H}^2 + 2R_3\ {}^3\mathrm{He}^2 - R_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He} \\
&\quad -R_8\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{12}\mathrm{C} - R_9\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{13}\mathrm{C} - R_{10}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{14}\mathrm{N} - (R_{11} + R_{12}){}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} \\
&\quad -R_{13}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{16}\mathrm{O} - R_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O}, \\
\frac{d^3\mathrm{He}}{dt} &= R_1\ {}^1\mathrm{H}^2 - 2R_3\ {}^3\mathrm{He}^2 - R_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He}, \\
\frac{d^4\mathrm{He}}{dt} &= R_3\ {}^3\mathrm{He}^2 + R_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He} \\
&\quad +R_{12}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} + R_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O} \\
&\quad -3R_{15}\ {}^4\mathrm{He}^3 - R_{16}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{12}\mathrm{C} - R_{17}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{16}\mathrm{O}, \\
\frac{d^{12}\mathrm{C}}{dt} &= -R_8\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{12}\mathrm{C} + R_{12}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} \\
&\quad +R_{15}\ {}^4\mathrm{He}^3 - R_{16}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{12}\mathrm{C}, \\
\frac{d^{13}\mathrm{C}}{dt} &= R_8\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{12}\mathrm{C} - R_9\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{13}\mathrm{C}, \\
\frac{d^{14}\mathrm{N}}{dt} &= R_9\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{13}\mathrm{C} - R_{10}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{14}\mathrm{N} + R_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O}, \\
\frac{d^{15}\mathrm{N}}{dt} &= R_{10}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{14}\mathrm{N} - (R_{11} + R_{12}){}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N}, \\
\frac{d^{16}\mathrm{O}}{dt} &= R_{11}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} - R_{13}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{16}\mathrm{O}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

$$
\begin{aligned}
& + R_{16}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{12}\mathrm{C} - R_{17}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{16}\mathrm{O}, \\
\frac{d^{17}\mathrm{O}}{dt} &= R_{13}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{16}\mathrm{O} - R_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O}, \\
\frac{d\,\mathrm{Ex}}{\mathrm{dt}} &= -\frac{1}{m_{\mathrm{Ex}}}\left[m_{{}^1\mathrm{H}}\frac{d^1\mathrm{H}}{dt} + m_{{}^3\mathrm{He}}\frac{d^3\mathrm{He}}{dt} + m_{{}^4\mathrm{He}}\frac{d^4\mathrm{He}}{dt} + m_{{}^{12}\mathrm{C}}\frac{d^{12}\mathrm{C}}{dt} + m_{{}^{13}\mathrm{C}}\frac{d^{13}\mathrm{C}}{dt}\right. \\
& \left. + m_{{}^{14}\mathrm{N}}\frac{d^{14}\mathrm{N}}{dt} + m_{{}^{15}\mathrm{N}}\frac{d^{15}\mathrm{N}}{dt} + m_{{}^{16}\mathrm{O}}\frac{d^{16}\mathrm{O}}{dt} + m_{{}^{17}\mathrm{O}}\frac{d^{17}\mathrm{O}}{dt}\right],
\end{aligned}
$$

la dernière équation exprime la conservation du nombre de baryons, elle permet de tenir compte des éléments qui, comme le ^{20}Ne, n'est brulé par aucune réaction mais qui est crée, m_i est le nombre atomique de l'espèce chimique i.

Sans élément à l'équilibre il faut remplacer les trois premières et la dernière équations par:

$$
\begin{aligned}
\frac{d^1\mathrm{H}}{dt} &= -2R_1\ {}^1\mathrm{H}\ {}^2 - R_2\ {}^1\mathrm{H}\ {}^2\mathrm{H} + 2R_3\ {}^3\mathrm{He}^2 - R_5\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Li} - R_7\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Be} \\
& - R_8\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{12}\mathrm{C} - R_9\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{13}\mathrm{C} - R_{10}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{14}\mathrm{N} \\
& - (R_{11} + R_{12}){}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} - R_{13}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{16}\mathrm{O} - R_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O}, \\
\frac{d^2\mathrm{H}}{dt} &= R_1\ {}^1\mathrm{H}\ {}^2 - R_2\ {}^1\mathrm{H}\ {}^2\mathrm{H}, \\
\frac{d^3\mathrm{He}}{dt} &= R_2\ {}^1\mathrm{H}\ {}^2\mathrm{H} - 2R_3\ {}^3\mathrm{He}^2 - R_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He}, \\
\frac{d^4\mathrm{He}}{dt} &= R_3\ {}^3\mathrm{He}^2 - R_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He} + 2R_5\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Li} + 2R_7\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Be} \\
& + R_{12}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{15}\mathrm{N} + R_{14}\ {}^1\mathrm{H}\ {}^{17}\mathrm{O} \\
& - 3R_{15}\ {}^4\mathrm{He}^3 - R_{16}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{12}\mathrm{C} - R_{17}\ {}^4\mathrm{He}\ {}^{16}\mathrm{O}, \\
\frac{d^7\mathrm{Li}}{dt} &= -R_5\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Li} + R_6\ {}^7\mathrm{Be}\ e^-, \\
\frac{d^7\mathrm{Be}}{dt} &= R_4\ {}^3\mathrm{He}\ {}^4\mathrm{He} - R_6\ {}^7\mathrm{Be}\ e^- - R_7\ {}^1\mathrm{H}\ {}^7\mathrm{Be}. \\
\frac{d\,\mathrm{Ex}}{\mathrm{dt}} &= -\frac{1}{m_{\mathrm{Ex}}}\left[m_{{}^1\mathrm{H}}\frac{d^1\mathrm{H}}{dt} + m_{{}^2\mathrm{H}}\frac{d^2\mathrm{H}}{dt} + m_{{}^3\mathrm{He}}\frac{d^3\mathrm{He}}{dt} + m_{{}^4\mathrm{He}}\frac{d^4\mathrm{He}}{dt}\right. \\
& + m_{{}^7\mathrm{Li}}\frac{d^7\mathrm{Li}}{dt} + m_{{}^7\mathrm{Be}}\frac{d^7\mathrm{Be}}{dt} + m_{{}^{12}\mathrm{C}}\frac{d^{12}\mathrm{C}}{dt} + m_{{}^{13}\mathrm{C}}\frac{d^{13}\mathrm{C}}{dt} \\
& \left. + m_{{}^{14}\mathrm{N}}\frac{d^{14}\mathrm{N}}{dt} + m_{{}^{15}\mathrm{N}}\frac{d^{15}\mathrm{N}}{dt} + m_{{}^{16}\mathrm{O}}\frac{d^{16}\mathrm{O}}{dt} + m_{{}^{17}\mathrm{O}}\frac{d^{17}\mathrm{O}}{dt}\right].
\end{aligned}
$$

4.1.27.4.10 Jacobien On dénommera par "jacobien" la matrice des dérivées partielles des équations d'évolution par rapport aux abondances:

$$J(i,j) \equiv \left(\frac{\partial \frac{dx_i}{dt}}{\partial x_j}\right)_{i,j}.$$

Il est nécessaire d'y tenir compte du fait que l'effet d'écran est fonction des abondances. Une erreur dans l'expression du jacobien entraîne des difficultés de con-

vergence de l'algorithme d'intégration numérique des équations d'évolution. Le programme test_nuc du directory EXPLOIT de la source de CESAM peut servir de canevas pour construire un programme permettant de vérifier l'exactitude du jacobien *cf.* § 3.2.1.2.2 (Page 91).

4.1.28 Routine externe de type opa

Pour un triplet: (composition chimique, température, densité), cette routine détermine l'opacité Rosseland $\kappa(T, \rho, X, Z)$, ainsi que ses dérivées premières par rapport à i) la température, ii) la densité, iii) la teneur en hydrogène et, iv) la proportion en éléments lourds Z dont la valeur est déterminée suivant l'option retenue, *cf.* § 2.5 (Page 42) et Table 2.3 (Page 50).

PB Il est possible, ce qui est évidemment déconseillé, mais parfois incontournable, d'effectuer des calculs avec des tables d'opacité et d'équation d'état dont les abondances en éléments lourds Z différent ou qui ne correspondent pas à la valeur réelle de Z.

4.1.28.1 Arguments génériques des routines de type opa

```
subroutine opa(xh,t,ro,kappa,dkapdt,dkapdr,dkapdx)
```

entrées xh, t, ro: composition chimique, température, densité.

sorties kappa,dkapdt,dkapdr,dkapdx: opacite, dérivées.

APPEL: opa est appelé de divers endroits en particulier evol, thermo, thermo_atm, eq_diffus, cesam.

4.1.28.2 Opacités simplifiées

D'après "Solar Model Comparison Project", J. Christensen-Dalsgaard [1988], l'opacité moyenne de Rosseland peut être approchée par une formule de Kramers amélioré sous la forme d'une somme de deux termes correspondants l'un à une valeur interne et l'autre à une valeur externe:

$$\kappa_{\rm R}^{-1} = \kappa_e^{-1} + \kappa_i^{-1}, \quad \kappa_e = c_e \rho^{m_e} T^{n_e}, \quad \kappa_i = c_i \rho^{m_i} T^{n_i},$$

avec: $c_e = 1.6236784 \times 10^{-33}$, $m_e = 0.407895$, $n_e = 9.28289$, $c_i = 7.1548412 \times 10^{13}$, $m_e = 0.138316$, $n_e = -1.97541$. Cette forme analytique correspond à $Z = 0.02$. La routine opa_gong utilise ce formalisme.

4.1.28.3 Opacités tabulées

Sauf pour des modèles simplifiés, pour lesquels on peut utiliser une approximation analytique de l'opacité, il est nécessaire de déduire l'opacité par interpolation dans des tables.

4.1.28.3.1 opa_int_zsx La routine opa_int_zsx interpole les *anciennes* tables Livermore 1991 prolongées par les opacité Kurucz pour les basses températures. Elle utilise une interpolation spline 4D linéaire[18] suivant les axes $(T_6, \ln \rho/T_6^3, X, Z)$, $T_6 \equiv T \times 10^{-6}$.

PB `Les données Livermore 91 sont actuellement caduques. Des difficultés de convergence, observées principalement dans la restitution de l'atmosphère, peuvent provenir de l'interpolation linéaire -- non dérivable aux points de la table -- dans ces tables aux larges intervalles tabulaires.`

4.1.28.3.2 opa_houdek La routine opa_houdek utilise les interpolations des tables de Livermore 95 prolongées, pour les basses températures par les opacités Kurucz ou Alexander; elles peuvent, ou non, tenir compte de la conductivité électronique. Elles utilisent les bibliothèques et les données du package de Houdek & Rogl [1996]. Pour son utilisation *cf.* § 4.2.5 (Page 189), il est nécessaire d'indiquer dans la routine opa_houdek le chemin qui permet d'atteindre les données OPINPATH_95; il faut aussi indiquer au LINK le chemin de la bibliothèque libopint.a. La mise en œuvre de opa_houdek a bénéficié de la collaboration de N. Audard.

PB `La version originale du package de routines d'interpolation de G.Houdek se trouve à: ftp://solaris.tuwien.ac.at/incoming/.`

4.1.28.3.3 opa_yveline Calcul de l'opacité OPAL 95, Iglesias & Rogers [1991], repris en partie du code de Genève et prolongées avec lissage par les opacités Kurucz par Y. Lebreton cf, § 4.2.6 (Page 189).

4.1.28.4 Opacités conductives

La routine kappa_cond calcule les opacites conductives en utilisant les ajustements polynomiaux de Iben [1975]. Cette routine, appelée à l'issue du calcul de l'opacité radiative, effectue la moyenne harmonique des opacités. Avec la routine opa_houdek les opacites conductives sont incluses dans le calcul.

4.1.29 Routine externe de type perte

Routine externe du calcul de la perte de masse et détermination de ce qui est nécessaire pour remonter à la valeur au temps t, de la variable lagrangienne, la masse, à partir sa valeur en un point du modèle au temps $t + dt$. Une perte de masse correspond à une valeur négative de l'argument `mdot` de la NAMELIST `nl_temps` du fichier de données mon_modele.don; un accroissement de masse à une valeur positive de `mdot`.

PB `Pour un accroissement de masse, la composition chimique de la partie ajoutée est identique à celle de l'atmosphère du modèle au moment de l'accroissement de masse.`

[18] La base est duale, les calculs d'interpolation sont alors immédiats.

4.1.29.1 Arguments génériques des routines de type perte

```
subroutine perte(bp,q,n,qt,knot,chim,mc,nc,mct,knotc,mstar,
1 dt,age,old_m23,new_m23,nm,new_m23t,knotm,etat,nuc)
```

entrées bp, q, n, qt, knot, chim, mc, nc, mct, knotc: éléments permettant d'interpoler le modèle au temps $t + dt$;

dt, age : pas temporel, âge.

in/out mstar: masse totale avec perte de masse.

sorties old_m23, new_m23, nm, new_m23t, knotm : permet de remonter à la valeur au temps t de la variable lagrangienne, la masse, en fonction de sa valeur au temps $t + dt$.

APPEL: perte est appelé par resout.

4.1.29.2 Routines de type perte

- perte_ext: perte de masse linéaire en fontion du temps de taux mdot $M_\odot$ par an,
- perte_rapid: perte de masse non linéaire,
- perte_tot perte de masse linéaire en fontion du temps de taux mdot $M_\odot$ par an et tenant compte de la masse perdue par la transformation de la masse en énergie dans les réactions thermonucléaires,
- gain_1m: simulation de l'accroissement de la masse d'une proto-étoile de $1M_\odot$ suivant les résultats Winkler & Newman [1980].

4.1.30 Routine interne read_osc

Cette routine a pour fonction la lecture des fichiers du type mon_modele.osc et l'extraction des diverses grandeurs caractérisant le modèle, les unités sont c.g.s.

4.1.30.1 Description de read_osc

1. Ouverture du fichier de type mon_modele.osc, lecture de l'entête et des constantes,
2. lecture des variables.

4.1.30.2 Arguments de read_osc

```
subroutine read_osc(nom_fich,itot,iconst,ivar,modele,glob,var)
```

in/out nom_fich, itot, iconst, ivar, modele, glob: nom du fichier de type mon_modele.osc[19], nombre total de couches, nombre de variables, nom du modèle, constantes globales *i.e.* glob(1)= $M_\star$, glob(2)= $R_\star$, glob(3)= $L_\star$, glob(4)= Z_0, glob(5)= $X0$, glob(6)= l/H_p, glob(7)= 9./4., glob(8)= 1./162., glob(9)= X_ZC, glob(10)= Y_ZC, glob(11)= $(\frac{\partial^2 P}{\partial R^2})_{R=0}$, glob(12)= $(\frac{\partial^2 \rho}{\partial R^2})_{R=0}$, glob(13)=âge, glob(14) $\frac{V}{Al}$, glob(15)= Ω_0.

sorties var: grandeurs caractérisant le modèle *i.e.* i étant l'indice de la couche, var(1,i)= R, var(2,i)= $\log_($ $M)$, 10^{-38} si$|M = 0$, var(3,i)= T, var(4,i)= P, var(5,i)= ρ, var(6,i)= ∇, var(7,i)= L, var(8,i)= κ, var(9,i)= ϵ_tot, var(10,i)= Γ_1, var(11,i)= ∇_ad, var(12,i)= δ, var(13,i)= c_p, var(14,i)= $1/\mu_\mathrm{e}$), var(15,i)= N^2, var(16,i)= Ω, var(17,i)= $\frac{\partial \ln \kappa}{\partial \ln T}$, var(18,i)= $\frac{\partial \ln \kappa}{\partial \ln \rho}$, var(19,i)= $\frac{\partial \epsilon}{\partial \ln T}$, var(20,i)= $\frac{\partial \epsilon}{\partial \ln \rho}$, var(21,i)= $\frac{P}{P_\mathrm{gaz}}$, var(22,i)= ∇_rad, var(22+j,i)= X_j, j = $1 \ldots n_\mathrm{elem}$.

APPEL: read_osc est appelé par divers programmes de dessin en particulier des_osc, des_abon, des_diff_osc ou encore lit_osc.

4.1.31 Routine interne resout

La fonction essentielle de resout est la résolution, dans l'espace des B-splines, des équations de la structure interne, celles-ci étant écrites, dans l'espace physique, par static_m ou static_r *cf.* § 4.1.35.3 (Page 180). On effectue d'abord diverses initialisations puis, suivant le type de calcul à effectuer ou bien, i) il y a poursuite d'une évolution auquel cas il y a retour vers cesam pour transcrire sur le fichier mon_modele.lis le modèle repris et retour vers resout pour la poursuite de l'évolution ou bien, ii) il y a initialisation d'une évolution auquel cas le modèle initial est calculé avant le retour vers cesam. Pour chaque pas temporel le calcul débute par la détermination de la nouvelle composition chimique puis les équations de la structure interne sont résolues et le processus est répété jusqu'à convergence.

4.1.31.1 Description de resout

1 Initialisation:

1. écritures diverses, mise en mémoire des caractéristiques du modèle repris, appel à lit_nl pour initialisations des COMMONs; initialisation du pas temporel initial, des constantes de répartition, des paramètres de calcul suivant le type de précision requis, des constantes, formation de l'identificateur, recherche de la date de calcul;
2. initialisation de la composition chimique, gestion du nombre d'éléments du vecteur de composition chimique généralisée;
3. initialisation de paramètres de convergence, écritures diverses;

[19] Sans l'extension .osc.

4. gestion des différents type de calcul, pour la reprise d'une évolution:
   (a) vérifications de diverses cohérences entre les paramètres du modèle repris et celles du modèle à poursuivre;
   (b) initialisations du pas temporel, des paramètres de B-splines;
5. pour une initialisation avec un modèle initial:
   (a) en binaire, transformation, si nécessaire, eulérien $\longleftrightarrow$ lagrangien;
   (b) en ASCII, projection sur l'espace des B-splines;
6. changement de base, sur 300 points de grille de l'espace des B-splines en assurant des incréments constants à la fonction de répartition, initialisation du vecteur de composition chimique généralisée, appel à lim_zc pour la détermination des limites zone radiative / zone convective et des coefficients de répartition;
7. en cas de reprise, retour à cesam, en cas d'initialisation calcul d'un modèle initial en utilisant les algorithmes d'évolution mais avec un pas temporel nul.

2 Evolution:

1. pour les modèles en précision solaire `"sa"`, modification du facteur de répartition de façon à introduire un nombre de couches maximum; test portant sur une modification éventuelle du nombre de couches, appel à update pour mettre en mémoire le modèle du pas temporel précédent, calcul de la perte de masse, appel à lim_zc pour changer, éventuellement le nombre de couches et déterminer les limites zone radiative / zone convective et les coefficients de répartition, calcul de la nouvelle composition chimique par appel à evol.
2. **A)** en cas de difficuté, la variable logique `g_max = .true.`, le calcul est réinitialisé si le pas temporel est suffisant, sinon il y a abandon du calcul; la réinitialisation s'effectue par un appel à update qui reprend le modèle calculé au pas temporel précédent, puis calcul de la perte de masse, appel à lim_zc pour changer, éventuellement le nombre de couches et déterminer les limites zone radiative / zone convective et les coefficients de répartition, calcul de la nouvelle composition chimique par appel à evol;
3. **B)** intégration du système différentiel de l'équilibre quasi-statique, formation du Jacobien par appels à static_m ou à static_r, résolution du système linéarisé par appel à gausdp_g;
4. gestion des corrections:
   (a) s'il y a convergence, retour à cesam pour écritures diverses et gestion générale, sinon:
   (b) si le nombre d'itérations est inférieur à `ini0` ~ 4, appels à lim_zc, perte_m puis evol et reprise du calcul du jacobien en **B)**, sinon:
   (c) si le nombre d'itérations est inférieur à `iter_max` ~ 30, reprise directe du calcul du jacobien en **B)**, sinon:
   (d) si le pas temporel est supérieur à `dt_min` $\sim 10^{-8}$ diminution du pas temporel, réinitialisation et reprise en **A)**.

4.1.31.2 Paramètres numériques

Il est souhaitable, et même fort recommandé, d'optimiser les paramètres numériques en fonction du type de modèle à calculer *e.g.* les contraintes sont différentes pour le modèle solaire et pour une évolution sur la branche de géantes. On a indiqué Table 2.1 (Page 43) et Table 2.2 (Page 44) les différentes options de précision prévues *cf.* § 2.5 (Page 42), cette liste n'est pas exhaustive. On donne ici la description de la fonction de chaque paramètre numérique.

- `m_qs` (*respt.* `m_ch`): ordre des B-splines utilisées pour la représentation des variables de structure (*respt.* de la composition chimique);

- `ordre`: ordre de précision pour l'intégration temporelle de la composition chimique si la diffusion microscopique est ignorée, avec diffusion `ordre=1` est imposé.

- `precix` (*respt.* `precit`): précision de l'intégration spatiale (*respt.* temporelle);

- `ro_test`: valeur de la densité au dessus de laquelle un contrôle de précision est effectué sur les variations temporelles de la densité et de la température pour l'estimation de l'énergie gravifique;

- `d_grav`: valeurs maximales des variations relatives de la densité et de la température pour l'estimation de l'énergie gravifique;

- `loc_zc`: précision de la localisation d'une limite zone radiative / zone convective en unité de l'épaisseur de la maille où a lieu la transition;

- `dtmax`: pas temporel maximum;

- `ini0`: nombre maximum d'itérations globales avec réajustement de la position des limites zone radiative / zone convective et des abondances;

- `n_atm`: nombre de couches dans l'atmosphère;

- `kipp`: avec `kipp=.true.` l'approximation de Kippenhahan pour le calcul de l'énergie gravifique est utilisée;

- `en_masse`: avec `en_masse=.true.` on utilise les variable lagrangiennes, les variables eulériennes sinon;

- `ctem` (*respt.* `cter`): facteur de répartition pour la masse (*respt.* le rayon);

- `mvt_dis`: avec `mvt_dis=.true.` on ajuste la composition chimique au voisinage de chaque limite zone radiative / zone convective en tenant compte de son déplacement.

4.1.31.3 Arguments de resout

```
subroutine resout(bp,q,n,qt,knot,chim,mc,nc,mct,knotc,
1 r2,m23,m_zc,r_zc,r_ov,lim,jlim,lconv,mstar,age,un23,
2 bp_t,q_t,n_t,qt_t,knot_t,chim_t,mc_t,nc_t,mct_t,knotc_t,
3 r2_t,m23_t,dt,m_zc_t,r_zc_t,r_ov_t,lim_t,jlim_t,
4 lconv_t,mstar_t,m23t_t,knot23_t,tdst,
5 ctes,etat,opa,conv,nuc,lim_ext,tdetau,coeff_diff,perte_m)
```

entrées

m23t_t, knot23_t, tdst: éléments pour l'interpolation du $T\frac{\partial S}{\partial t}$;

un23: variable entière définissant la nature de l'initialisation, reprise ou nouvelle évolution.

in/out

bp ,q, qt, knot, n: éléments pour l'interpolation des variables d'espace au temps $t + dt$;

bp_t ,q_t, qt_t, knot_t, n_t: éléments pour l'interpolation des variables d'espace au temps t;

mc, mct, nc, knotc, chim: éléments pour interpolation de la composition chimique au temps $t + dt$;

mc_t, mct_t, nc_t, knotc_t, chim_t: éléments pour interpolation de la composition chimique au temps t;

r2, m23, m_zc, r_zc, r_ov, lim, jlim, lconv: éléments pour interpolation en une masse ou en un rayon donné, masses, rayons, rayons étendus, nombre, indices et nature des limites zone radiative / zone convective au temps $t + dt$;

r2_t, m23_t, m_zc_t, r_zc_t, r_ov_t, lim_t, jlim_t, lconv_t: éléments pour interpolation en une masse ou en un rayon donné, masses, rayons, rayons étendus, nombre, indices et nature des limites zone radiative / zone convective au temps t;

mstar, mstar_t, age: masse totale aux temps $t + dt$ et t, âge.

externes

ctes, etat, opa, conv, nuc, lim_ext, tdetau, coeff_diff, perte_m: routines pour initialisation des constantes, équation d'état, opacités, convection, réactions thermonucléaires, limite externe, loi $T(\tau)$.

APPEL: resout est appelé à divers niveaux de cesam.

4.1.32 Routine interne rk_imps

Cette routine a pour fonction l'intégration des équations de l'évolution des espèces chimiques *e.g.* Eq. 4.38 (Page 163) en l'absence de diffusion. Les échelles de temps d'évolution des divers isotopes diffèrent par plusieurs dizaines de magnitudes. A titre d'exemple, dans le soleil, l'échelle de temps d'évolution de ^{2}H est de quelques minutes, alors que celle de ^{1}H est de l'ordre de la centaine de million d'années. La disparité de ces échelles de temps est à l'origine de difficultés numériques: si on s'impose de suivre la plus courte échelle de temps le temps de calcul est inimaginable,

si on s'impose de suivre la plus grande l'échelle de temps, les erreurs numériques engendrées sur les espèces chimiques avec courte échelle de temps font "exploser" le calcul.

Pour ce type de problème, qualifié de "raide", ou encore de "mal posé", il existe des algorithmes spécifiques qui, *en gros*, permettent de suivre l'échelle de temps que l'on désire, *e.g.* celle de ^{1}H pour le soleil sans que, pour autant, les erreurs numériques engendrées sur les espèces chimiques à courte échelle de temps perturbent la solution de façon catastrophique. Ces algorithmes sont implicites, ils nécessitent le calcul d'un Jacobien; en cas de non linéarité la solution est obtenue par approximations successives, le plus souvent la méthode de Newton-Raphson qu'il convient parfois d'aménager.

Dans le cas de la structure interne le mélange convectif complique encore le problème qui, non seulement est raide, mais est donc aussi intégral. En résumé, le problème du calcul de l'évolution des espèce chimiques est un problème intégro-différentiel aux valeurs initiales, non linéaire, raide.

La routine rk_imps utilise le formalisme de Runge-Kutta implicite avec le schéma Lobatto IIIC *cf.* Hairer & Wanner [1991], noté dans la suite IRK Lobatto IIIC. L'ordre d'intégration est limité au troisième ordre. L'utilisation d'un ordre supérieur nécessiterait l'interpolation de la température, de la densité et de la composition chimique en tous les points du modèle entre différents pas temporel, interpolations dans lesquelles serait perdu le gain en précision que l'on peut attendre de l'utilisation d'un schéma d'ordre élevé.

Cette routine originale est l'une des plus "techniques" et élégantes de CESAM.

4.1.32.1 Intégration avec les formules IRK Lobatto IIIC.

Dans une zone radiative, sans diffusion, le système des équations de l'évolution de la composition chimique s'écrit formellement:

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = \Psi(T, \rho, \mathcal{X}), 1 \leq i \leq n_{elem}. \tag{4.39}$$

Dans une zone convective, lorsque l'échelle de temps de la convection est petite par rapport à celle des réactions nucléaires, la composition chimique est homogénéisée par les mouvements de convection. Pour l'isotope i, le taux de destruction Ψ_i n'est plus la quantité locale $\Psi_i(T, \rho, \mathcal{X})$ mais une quantité moyennée sur toute la zone convective. Ainsi dans une zone convective Eq. 4.39 (Page 172) doit être remplacée par:

$$\frac{d\bar{x}_i}{dt} = \frac{\int_{ZC} \Psi_i(\rho, T, \bar{\mathcal{X}}, t) dm}{\int_{ZC} dm} = \frac{\int_{ZC} \Psi_i(\rho, T, \bar{\mathcal{X}}, t) \sqrt{\nu} d\nu}{\int_{ZC} \sqrt{\nu} d\nu}, \ \nu = \left(\frac{m}{M_\odot}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{4.40}$$

on remarquera que le taux de destruction local Ψ_i est calculé avec $\bar{\mathcal{X}}$ *i.e.* la valeur moyenne des abondances sur la zone mélangée, ce qui évidemment complique la situation.

Dans ce qui suit on décrit l'utilisation de la formule IRK LobattoIIIC, pour alléger le formalisme on ne considère qu'une seule espèce chimique. On notera x_0 (*respt.* x) l'abondance de cet élément au temps t (*respt.* $t + dt$). Avec les coefficients de la table Table 4.1 (Page 173) le schéma IRK LobattoIIIC est :

Table 4.1: Coefficients de Eq. 4.41 (Page 173) pour les formules IRK Lobatto IIIC d'ordre $p = 1, 2, 4$ avec $s = 1, 2, 3$ étapes. On utilise la notation usuelle, les c_i, $i = 1, \ldots, s$ sont éléments de la première colonne, les b_i ceux de la dernière ligne, les autres coefficients sont les a_{ij} de la matrice caractérisant la formule de Runge-Kutta.

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{c|cc} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ 1 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

$$\begin{aligned} x_i &= x_0 + dt \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \Psi(T_j, \rho_j, x_j), \; i = 1, \ldots, s \\ x &= x_0 + dt \sum_{j=1}^{s} b_j \Psi(T_j, \rho_j, x_j) \end{aligned} \tag{4.41}$$

où T_j, ρ_j et x_j sont, respectivement, la temperature, la densité, l'abondance aux temps intermédiaires, $t + c_j dt$, $j = 1, \ldots, s$; s est le nombre d'étapes de la formule IRK LobattoIIIC.

Toutefois cette formulation élémentaire d'un schéma de Runge-Kutta ne donne pas des résultats satisfaisants pour le problème de l'évolution des espèces chimiques, des valeurs notablement négatives des abondances pouvent survenir; la cause est la multiplication des erreurs numériques par les constantes de Lipschitz qui ont des valeurs élevées *e.g.* 10^{18}. Cette difficulté est surmontée en écrivant la première équation Eq. 4.41 (Page 173) pour les écarts $z_i = x_i - x_0$ aux quantités initiales *cf.* Hairer & Wanner, *op. cit.* , §IV.8:

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_s \end{pmatrix} = dt \; \mathcal{A} \begin{pmatrix} \Psi(T_1, \rho_1, x_0 + z_1) \\ \Psi(T_2, \rho_2, x_0 + z_2) \\ \vdots \\ \Psi(T_s, \rho_s, x_0 + z_s) \end{pmatrix}. \tag{4.42}$$

La matrice $\mathcal{A} \equiv (a_{i,j})_{i,j=1}^{s}$ d'une quelconque formule IRK Lobatto IIIC étant inversible, en notant $(d_1, d_2, \ldots, d_s) \equiv (b_1, b_2, \ldots, b_s)\mathcal{A}^{-1}$, la seconde équation Eq. 4.41 (Page 173) devient simplement[20]:

$$x = x_0 + z_s. \tag{4.43}$$

[20]Cette particularité résulte du fait que la dernière ligne de A est identique au vecteur b *e.g.* toutes les formules IRK Lobatto IIIC sont construites avec cette propriété.

4.1.32.1.1 Mélange d'une zone convective Comme il est rappelé plus haut, dans une zone convective l'abondance de chaque isotope est constante. Pour reprendre l'exemple d'un seul élément notons $\bar{x}$ sa valeur dans une zone convective et à chaque étape temporelle $t + c_j dt,\ j = 1, \ldots, s$ de l'intégration Runge-Kutta, notons sa valeur moyenne $\bar{x_j}$. On estime par la formule du point milieu les intégrales de Eq. 4.40 (Page 172) si bien que:

$$\bar{x_j} = \sum_{k \in \mathrm{MZ}} x_{j,k+1/2} \Delta\nu_{k+1/2}, \tag{4.44}$$

où la somme porte sur toutes les couches que comporte la zone convective, $x_{0,k+1/2}$ est l'abondance au point milieu, $\nu_{k+1/2} \equiv (\nu_{k+1} + \nu_k)/2$ et:

$$\Delta\nu_{k+1/2} \equiv \frac{(\nu_{k+1} - \nu_k)\sqrt{\nu_{k+1/2}}}{\sum_{j \in \mathrm{MZ}} (\nu_{j+1} - \nu_j)\sqrt{\nu_{j+1/2}}}. \tag{4.45}$$

L'èquation 4.42 devient:

$$\begin{pmatrix} \bar{z}_1 \\ \bar{z}_2 \\ \vdots \\ \bar{z}_s \end{pmatrix} = dt\ \mathcal{A} \begin{pmatrix} \sum_k \Psi(T_{1,k+\frac{1}{2}}, \rho_{1,k+\frac{1}{2}}, \bar{x_0} + \bar{z}_1)\Delta\nu_{k+\frac{1}{2}} \\ \sum_k \Psi(T_{2,k+\frac{1}{2}}, \rho_{2,k+\frac{1}{2}}, \bar{x_0} + \bar{z}_2)\Delta\nu_{k+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ \sum_k \Psi(T_{s,k+\frac{1}{2}}, \rho_{s,k+\frac{1}{2}}, \bar{x_0} + \bar{z}_s)\Delta\nu_{k+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \tag{4.46}$$

où $T_{j,k+\frac{1}{2}}$ (*respt.* $\rho_{j,k+\frac{1}{2}}$) est la température (*respt.* la densité) au temps intermédiaire $t + c_j dt$; $\bar{x}$ s'écrit:

$$\bar{x} = \bar{x_0} + \bar{z_s}. \tag{4.47}$$

Formellement, cette formulation est aussi valable en un point d'une zone radiative les sommes ne portant que sur une seule valeur de l'indice k. Pour simplifier, la valeur de $\bar{x_0}$ est obtenue en faisant porter la sommation Eq. 4.44 (Page 174) sur l'intervalle de masse correspondant à la zone convective au temps $t+dt$ qui peut ne pas *exactement* coïncider avec l'intervalle de masse au temps t. L'imprécision engendrée est faible si la zone convective se déplace peu, par contre, dans le cas d'une apparition ou d'une disparition l'erreur engendrée peut être conséquente. Tenir compte de ces subtilités entrainerait de grandes complications dans les algorithmes car il faudrait introduire explicitement le déplacement de la zone convective.

L'extension à plusieurs isotopes ne présente que des difficultés algorithmiques assez techniques. Avec l'approximation des intégrales Eq. 4.44 (Page 174) sur la zone convective à l'aide de la formule du point milieu la précision numérique n'est que du second ordre, une formule intégrale de Gauss à deux points permettrait d'atteindre le troisième ordre[21]. Dans le cas solaire, l'erreur reste limitée car les réactions thermonucléaires sont peu efficaces dans la zone convective; pour le cas stellaire les imprécisions de la théorie et des données physiques surpassent largement celles engendrées par un ordre d'intégration peu élevé.

Dans rk_imps les équations Eq. 4.42 (Page 173) à Eq. 4.47 (Page 174) sont résolues itérativement à l'aide du schéma de Newton-Raphson[22] avec un jacobien

[21] Ce qui n'entrainerait qu'une complication supplémentaire d'algorithme.

[22] A cause de la raideur, les constantes de Lipschitz sont grandes et un schéma du type predicteur-correcteur est inefficace.

recalculé pour chaque itération; la méthode implicite est initialisée avec des valeurs initiales nulles pour les z_i; la convergence est supposée atteinte dès que les corrections sur les z_j sont, en valeurs relatives inférieures à 10^{-8}; la plupart du temps l'algorithme converge en moins de 5 itérations.

4.1.32.1.2 Conservation des baryons et de la charge Pour un nombre d'isotopes $n_{\rm elem} > 1$, notons pour l'instant t:

$$\sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i x_i^t = cte,$$

une relation linéaire quelconque entre les abondances avec des coefficients α_i *constants e.g.* la conservation du nombre de baryons et de la charge se formulent de cette façon, alors:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i x_i = 0 \Longrightarrow \sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i \Psi_i = 0.$$

en tenant compte de la linéarité de Eq. 4.42 (Page 173) et Eq. 4.46 (Page 174), pour $n_{\rm elem}$ elements et avec des notations évidentes:

$$\sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i z_i = 0,$$

alors:

$$\sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i x_i^{t+dt} = \sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i x_i^t + \sum_{i=1}^{n_{\rm elem}} \alpha_i z_i = cte;$$

en particulier, avec le schémas IRK LobattoIIIC le nombre de baryons et de charges seront conservés au niveau de la fermeture du schéma de Newton-Raphson et de l'ordre du schéma d'intégration utilisé pour le mélange convectif et aux erreurs d'arrondi près. Des tests numériques ont montré, dans le cas solaire, que sur un pas temporel, le nombre de baryons était conservé à mieux que 10^{-13} en valeur relative *cf.* Morel [1997].

4.1.32.1.3 Choix du pas temporel La valeur du pas temporel à utiliser dépend de la précision requise. A l'issue de chaque intégration la précision obtenue est estimée, le pas temporel est alors diminué (*respt.* augmenté) si la précision obtenue est inférieure (*respt.* supérieure) à ce qui est souhaité. La précision d'une intégration peut être estimée en l'effectuant avec des algorithmes différents, ou des pas temporels différents ce qui nécessite de refaire plusieurs fois le calcul. Pour limiter l'effort de calcul, avec rk_imps on se contente de contrôler le pas temporel en limitant les variations de certains isotopes au cours d'un pas temporel. Cette méthode, très répandue, n'est pas correcte car une grande (*respt.* petite) variation d'une abondance ne signifie pas, *nécessairement*, que l'intégration est imprécise (*respt.* précise).

4.1.32.2 Description de rk_imps

1 Initialisations des matrices de IRK Lobatto IIIC suivant l'ordre de précision `rk_n` défini dans la routine resout par la variable `ordre` *cf.* § 4.1.31 (Page 168) et

Table 2.1 (Page 43), des contraintes du schéma de Newton-Raphson et de l'ordre de grandeur de chaque abondance utilisée pour estimer la précision relative de l'intégration et la convergence,

2 pour chaque temps intermédiaire appel à la routine de réactions thermonucléaires pour le calcul des Ψ_i et de la ligne correspondante du jacobien, détermination de la contribution à l'intégrale de Gauss dans les zone convective,

3 formation de la ligne correspondante de Eq. 4.46 (Page 174),

4 solution du sytème linéaire donnant les corrections du processus itératif,

5 estimation de la précision et des nouvelles abondances et poursuite, si besoin, du processus itératif.

4.1.32.3 Arguments de rk_imps

```
subroutine rk_imps(t_t,ro_t,compx,t,ro,compy,dt,esti,ok,nuc,kk,dm)
```

entrées — t_t, ro_t, t, ro: tables des températures, densité aux temps t et $t + dt$;

dt, kk, dm, compx: pas temporel, nombre de couches à mélanger, tables des intervalles de masse et de la composition chimique au temps t.

in/out — compy: table des la composition chimique au temps $t + dt$.

sorties — ok: `ok=.true.` la précision requise est atteinte.

externes — nuc: routine de calcul des réactions thermonucléaires.

APPEL: rk_imps est appelé par evol.

4.1.33 Routine interne rq_reac

La fonction de cette routine est le calcul, en fonction de la température, de la densité et des abondances, des taux des réactions nucléaires utilisées et des énergies libérées[23] ainsi que de leurs dérivées par rapport à la température, à la densité et aux abondances. Suivant la valeur de la variable logique `mitler=.false.` ou `mitler=.true.` de la NAMELIST `NLCHIM` du fichier de type mon_modele.don, l'écrantage est calculé soit par la théorie standard de l'écrantage faible soit par celle, plus universelle, de l'écrantage de Mitler [1977] qui recouvre l'écrantage faible et intermédiaire[24]. Suivant les réactions utilisées cf, § 4.1.27 (Page 156), la routine utilise les tabulations des taux de réactions nucléaires effectuées par le programme tab_reac du sous directory `EXPLOIT` de la source.

[23] Avec déduction de l'énergie emportée par les neutrinos.

[24] Bien que prévu, l'écrantage fort n'est pas opérant dans la version actuelle.

4.1.33.1 Description de rq_reac

1 Initialisation: lecture du fichier de réactions nucléaires, écritures et initialisations diverses,

2 calcul du nombre d'électrons libres, du facteur d'écran et des dérivées,

3 calcul des taux et des énergies libérées, *c'est dans la tabulation qu'il est tenu compte des dénominateurs 2! ou 3! et les pertes par neutrinos.*

4.1.33.2 Arguments de rq_reac

```
subroutine rq_reac(comp,t,ro,r,drt,dro,drx,q,dqt,dqo,dqx,mue,dmuex,nom)
```

entrées comp, t, ro: composition chimique par volume, température, densité;

in/out nom: nom du fichier de réactions thermonucléaires;

sorties r, drt, dro, drx, q, dqt, dqo, dqx, mue, dmuex: taux, énergie des réactions et dérivées par rapport à la température, densité, composition chimique, nombre d'électrons e^- par volume et dérivées par rapport à la composition chimique.

APPEL: rq_reac est appelé des routines de type nuc.

4.1.34 Routine interne saha

Calcule les taux d'ionisation des divers éléments chimiques à l'aide de l'équation de Saha (Cox & Guili [1968], formule 15-30) dans laquelle on limite les fonctions de partition aux poids statistiques des niveaux fondamentaux. La formulation est décrite au § 4.1.12.4.1 (Page 118). Les équations sont écrites sous la forme:

$$\rho N_0 \sum_i \bar{z}_i(n_e) x_i - n_e = 0$$

et résolues par itération Newton-Raphson.

4.1.34.1 Description de saha

1 Initialisation au premier appel: les différents isotopes sont regroupés par espèces chimiques à laquelle l'abondance totale est affectée (on admet que les taux d'ionisation sont identiques pour tous les isotopes d'une même espèce chimique). Initialisation des potentiels d'ionisation et les poids statistiques pour les espèces identifiées par leur charge totale Z. La fonction de Fermi-Dirac $F_{1/2}$ est ensuite tabulée en fonction du paramètre de dégérescence.

2 Pour les appels suivants: initialisation des abondances de chaque espèce.

3 Initialisation du nombre d'électrons libres.

4 Calcul du facteur de dégénérescence et résolution des équations de Saha pour chaque ion, redétermination du nombre d'électrons libres. Itération Newton-Raphson sur le nombre d'électrons libres.

5 Détermination de la charge moyenne de chaque ion.

6 Après convergence: Restitution des taux d'ionisation et de la charge moyenne pour chaque isotope.

PB CESAM signale si un des éléments utilisé est inconnu et le déroulement du le programme est arrèté.

PB Le niveau maximum d'ionisation prévu est de 13. Si besoin l'augmenter en modifiant le paramètre pzi dans le fichier INCLUDE cesam.parametres et recompiler la source. CESAM signale toute tentative de dépasssement et le déroulement du programme est arrèté.

4.1.34.2 Arguments de saha

```
subroutine saha(xchim,t,ro,ioni,z_bar,nel,eta)
```

entrées xchim, t, ro: composition chimique par volume, température, densité;

sorties ioni, z_bar, nel, eta: taux d'ionisation et charge moyenne de chaque ion, nombre d'électrons libres, facteur de dégérescence.

APPEL: saha est appelé par cesam, diff_burgers, diff_bgr.

4.1.35 Routines internes static_m et static_r

Dans ces deux routines équivalentes, pour chaque point de collocation, les équations de la structure interne sont écrites sous la forme $f(x) = 0$ ainsi que les conditions limites. On utilise les variables retenues pour l'intégration numérique. Ces équations ont été détaillées § 3.1.1 (Page 79). Bien que, formellement, la variable indépendante soit la masse (lagrangien), dans static_m et le rayon (eulérien) dans static_r, les équations sont écrites pour la variable indépendante q: "l'indice réel de couche" *cf.* § 3.1.1 (Page 79).

Après quelques initialisations, on détermine la fonction de répartition et ses dérivées puis on forme les équations et leurs dérivées par rapport à toutes les variables dépendantes. Les équations pour les conditions limites sont écrites à la fin de la routine. On a conservé dans la source des instructions permettant des vérifications, en particulier celles des dérivées.

4.1.35.1 Dissipation locale du moment angulaire

Lorsque la vitesse angulaire est non nulle le moment angulaire local n'est pas nécessairement conservé *e.g.* avec une rotation rigide constante, en un point d'abscisse

lagrangienne donnée, le rayon donc le moment angulaire, change au cours du temps. On suppose que la variation locale d'énergie cinétique par unité de masse:

$$\Delta \frac{1}{2} \frac{dI}{dm} \omega^2$$

crée par la variation locale de moment angulaire par unité de masse:

$$\Delta \frac{dI}{dm} \omega$$

est restituée sous la forme d'une source de chaleur ϵ_Ω. Le moment d'inertie $d\mathcal{I}$ du volume sphérique élémentaire $dV = r \sin\theta dr d\theta d\phi$ au point (r, θ, ϕ) s'écrit $d\mathcal{I} = r \sin\theta \rho r dr d\theta d\phi$, soit, pour la calotte sphérique et par unité de masse:

$$\frac{dI}{dm} = \frac{\int_0^{2\pi} d\mathcal{I} d\phi}{dm} = \frac{2\pi r^4 \rho dr}{4\pi r^2 \rho dr} \int_0^\pi \sin^2\theta d\theta = \frac{2}{3} r^2.$$

En un point d'abscisse lagrangienne m, l'hypothèse de conservation *locale* du moment angulaire spécifique:

$$\frac{2}{3} r_1^2 \Omega_1 = \frac{2}{3} r_2^2 \Omega_2,$$

entre les instants t_1 et t_2 a pour conséquence un excès local d'énergie cinétique que l'on suppose restituée au milieu sous la forme de la source de chaleur ϵ_Ω:

$$\epsilon_\Omega = \frac{1}{3} \left[(r_2 \Omega_2)^2 - (r_1 \Omega_1)^2 \right]. \tag{4.48}$$

4.1.35.2 Conservation globale du moment angulaire

Avec l'hypothèse de rotation rigide, le moment angulaire total change au cours de l'évolution en raison des variations locales de densité et de rayon. On peut imaginer qu'un processus physique, non décrit, permet de conserver globalement le moment angulaire, auquel cas la vitesse angulaire *rigide* varie au fur et à mesure de l'évolution[25]. Compte tenu de l'hypothèse de sphéricité le moment angulaire total au temps t est:

$$\mathcal{M}_\Omega(t) = \frac{2}{3} \int_0^{M_\star(t)} r(t,m)^2 \Omega(t,m) \, \mathrm{d}m,$$

où $\Omega(t,m)$ est la vitesse angulaire locale au temps t pour l'abscisse lagrangienne m. Avec l'hypothèse de rotation rigide i.e. $\Omega(t,m) \equiv \Omega(t)$ et conservation globale du moment angulaire i.e. $\mathcal{M}_\Omega(t) \equiv \mathcal{M}_\Omega = cte.$, la vitesse angulaire $\Omega(t)$ à l'instant t vérifie:

$$\mathcal{M}_\Omega = \frac{2}{3} \Omega(t) \int_0^{M_\star(t)} r(t,m)^2 \, \mathrm{d}m.$$

[25] La possibilité de la conservation globale du moment angulaire a été implantée dans CESAM à l'initiative de MJ.Goupil.

4.1.35.3 Description de static_m et static_r

1 Initialisations de quantités invariables.

2 Pour chaque point de collocation:

1. Initialisations de quantités invariables.
2. Extraction des variables physiques et vérification que le rayon, la masse et la luminosité, *pour* static_m, ont des valeurs positives.
3. Extraction de la composition chimique locale, initialisation de quantités liées à la rotation, à la pression turbulente.
4. Calcul par un appel à thermo des valeurs locales des grandeurs thermodynamiques, de l'opacité, de l'énergie nucléaire, des gradients et de leurs dérivées, transformations de ces grandeurs des unités cgs. en unités locales avec des aménagements algorithmiques.
5. Calcul de l'énergie gravifique, pour un nouveau pas temporel, à la première itération *i.e.* `new=.true.`, cette énergie est interpolée, en masse, à partir de ses valeurs au pas temporel précédent, pour les itérations suivantes, cette quantité est calculée avec l'alternative de l'approximation de Kippenhahn *cf.* § 3.2.2.2.1 (Page 98) ou du calcul direct. Au cas où, à la même abscisse lagrangienne, un écart relatif trop important de pression ou de température est observé avec le pas temporel précédent cf, § 2.3 (Page 31), la variable logique `g_max=.true.` et le calcul est réinitialisé par un retour à resout.
6. Après quelques dispositions algorithmiques concernant le moment angulaire, détermination de la fonction de répartition et des dérivées, puis formulation analytique des équations et de leurs dérivées partielles par rapport à chacune des variables si l'option `der_num=.false.` *cf.* § 2.5.1 (Page 43), avec `der_num=.true.` les dérivées sont estimées numériquement.
7. Ensemble d'instructions permettant de tester[26] numériquement les dérivées analytiques.

3 Pour chaque point limite:

1. Ecriture des conditions limites au centre *i.e.* `li=1, 2, 3`.
2. Ecriture des conditions limites à l'extérieur *i.e.* `li=4, 5, 6`. Pour limiter le nombre de calculs de l'atmosphère, lim_ext n'est appelé qu'une seule fois, les grandeurs alors calculées étant utilisées pour formuler les autres conditions externes. Il suffit d'enlever les `c` de commentaires pour rendre effectifs les tests de vérification des dérivées.

[26] La détermination numérique des dérivées demande beaucoup plus de ressources et entraîne une convergence moins bonne que la détermination analytique *sans erreur*.

4.1.35.4 Arguments de static_m et static_r

```
subroutine static_m(fait,xx,cx,li,y,yp,be,ae,g_max,xl,compt,new,fac,
1 mc,mct,nc,knotc,chim,r_zc,r_ov,lim,mstar,dt,wrot,
2 bp_t,q_t,n_t,qt_t,knot_t,chim_t,mc_t,nc_t,mct_t,knotc_t,
3 m23_t,r2_t,m23t_t,knot23_t,tdst,old_m23,new_m23,nm,new_m23t,knotm,
4 etat,opa,conv,nuc,lim_ext,tdetau)

subroutine static_r(fait,xx,cx,li,y,yp,be,ae,g_max,xl,compt,new,fac,
1 mc,mct,nc,knotc,chim,r_zc,r_ov,lim,mstar,dt,wrot,
2 bp_t,q_t,n_t,qt_t,knot_t,chim_t,mc_t,nc_t,mct_t,knotc_t,
3 m23_t,r2_t,m23t_t,knot23_t,tdst,old_m23,new_m23,nm,new_m23t,knotm,
4 etat,opa,conv,nuc,lim_ext,tdetau)
```

entrées

fait: `fait=1` calcul au point de collocation, `fait=2` calcul en un point limite;

xx, cx, xl, li, y, yp: table et indice des points de collocation, et des limites, variables et dérivées;

dt, wrot, fac, compt : pas temporel, vitesse angulaire en cas de rotation solide, facteurs de répartition, indice d'itération de Newton-Raphson;

mc, mct, nc, knotc, chim, mc_t, mct_t, nc_t, knotc_t, chim_t: éléments pour interpolation de la composition chimique aux temps $t + dt$ et t;

bp_t, q_t, n_t, qt_t, knot_t: éléments pour interpolation de la solution au temps t;

new, r_zc, r_ov, lim, mstar: `new=.true.` nouveau pas temporel, rayons des limites zone radiative / zone convective et extensions, masse totale au temps $t + dt$;

m23_t, r2_t, m23t_t, knot23_t, tdst: éléments pour interpolation inverse de la structure, table des $T\frac{\partial S}{\partial t}$ au temps t;

old_m23, new_m23, nm, new_m23t, knotm: éléments d'interpolation des masses entre les temps t et $t + dt$.

sorties

be, ae, g_max: seconds membres, jacobien local, si g_max=.true. il faut diminuer le pas temporel.

externes

etat, opa, conv, nuc, lim_ext, tdetau: routines pour équation d'état, opacités, convection, réactions thermonucléaires, limite externe, loi $T(\tau)$.

APPEL: static_m et static_r sont appelés par resout.

4.1.36 Routine interne taueff

Cette routine interne a pour fonction la détermination de $\tau_\star$ par la résolution de l'équation implicite : $T_{\rm eff} = \mathcal{T}(\tau_\star, T_{\rm eff}, g)$.

4.1.36.1 Description de taueff

1. Initialisation $\tau_\star = 2/3$,
2. détermination de $\tau_\star$ par l'algorithme de Newton-Raphson avec appel à la routine externe de la loi $T(\tau)$ concernée.

4.1.36.2 Arguments de taueff

```
subroutine taueff(teff,grav,tdetau,tau)
```

entrées teff, grav: température effective, gravité.

sorties tau: $\tau_\star$.

externes tdetau: nom de la routine externe de la loi $T(\tau)$.

APPEL: taueff est appelé par eqatm.

4.1.37 Routine externe de type t_detau

Calcule, en fonction de la profondeur optique τ, de la température effective $T_{\rm eff}$, de la gravité $g_\star = \mathcal{G}M_\star/R_\star^2$, la température, ses dérivées par rapport à τ, $T_{\rm eff}$ et $g_\star$, la fonction $f(\tau)$ et ses dérivées première et seconde par rapport à τ, une variable logique signale si la loi est, ou non, purement radiative *cf.* § 4.1.23.4 (Page 149). Il faut, *en principe*, qu'il y ait cohérence entre la physique qui a servi au calcul du modèle d'atmosphère dont est déduit cette loi et celle utilisée dans les couches extérieures du modèle de structure interne, en particulier en ce qui concerne l'opacité, l'équation d'état et la composition chimique. Dans ces routines la profondeur optique $\tau_{\rm min}$ et la densité externe $\rho_{\rm ext}$ sont initialisées; ces quantités dépendent du modèle d'atmosphère d'où dérive chaque loi $T(\tau)$. La source de CESAM propose les lois $\mathcal{T}(\tau)$ décrites au § 2.4.1 (Page 34).

4.1.37.1 Arguments génériques des routines de type t_tau

```
subroutine t_tau(tau,teff,grav,t,dtsdtau,dtsdteff,dtsdg,
1 ro_ext,dro_grav,dro_teff,f_tau,df_tau,d2f_tau)
```

entrées tau, teff, grav: profondeur optique, température effective, gravité.

sorties t, dtsdtau, dtsdteff, dtsdg: température et dérivées;

ro_ext, dro_grav, dro_teff: densité externe et dérivées;

f_tau, df_tau, d2f_tau: fonction f et dérivées *cf.* § 4.1.23.4 (Page 149).

APPEL: t_tau est appelé par eq_atm.

4.1.37.2 Routines de type t_tau

- hopf: Loi $T(\tau)$ de Hopf.
- edding: Loi $T(\tau)$ d'Eddington.
- hsra: Loi $T(\tau)$ du HSRA.
- k5750: Loi $T(\tau)$ solaire $T_{\rm eff} = 5750\,{\rm K}$ calculée par C. Van't Veer avec Atlas 9 de Kurucz.
- k5777: Loi $T(\tau)$ solaire $T_{\rm eff} = 5777\,{\rm K}$ calculée par C. Van't Veer avec Atlas 12 de Kurucz.
- roger00: Lois $T(\tau)$ à [Fe/H]=0, calculs avec avec Atlas 12 de Kurucz, interpolations de R. Cayrel. Utilise la table fesh00.data du directory DATA de la source de CESAM, avant utilisation indiquer, dans le sous programme, le chemin d'accès de la table.
- roger02: Lois $T(\tau)$ à [Fe/H]=0, calculs avec avec Atlas 12 de Kurucz, interpolations de R. Cayrel. Utilise la table fesh02.data du directory DATA de la source de CESAM, avant utilisation indiquer, dans le sous programme, le chemin d'accès de la table.

4.1.38 Routine interne thermo

Cette routine gère le calcul de la thermodynamique au sens large en appelant les diverses routines optionnelles. A partir des résultats obtenus dans les routines externes: etat, opa, conv, nuc de l'appel à cesam, elle effectue le calcul de grandeurs thermodynamiques telles que $c_{\rm p}$, δ, α, *etc...* et de leurs dérivées premières par rapport à la pression *totale* $P \equiv P_{\rm tot}$ et à la pression gazeuse $P_{\rm gaz}$:

$$P_{\rm gaz} \equiv P_{\rm th} + P_{\rm rad},\ P \equiv P_{\rm gaz} + P_{\rm tur} \equiv P_{\rm tot},$$

la température T, la luminosité L, le rayon R, la masse M et l'abondance en hydrogène X; $P_{\rm th}$ est la pression thermodynamique, somme des pressions moléculaire, atomique, ionique, électronique, $P_{\rm rad}$ est la pression de radiation, $P_{\rm tur}$ est la pression turbulente *cf.* § 4.1.7.4 (Page 109). CESAM utilise les définitions habituelles:

$$\begin{aligned}
\delta &= -\left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T}\right)_{P_{\rm gaz},X} = \frac{T}{\rho}\left(\frac{\partial P_{\rm gaz}}{\partial T}\right)_{\rho,X} \Big/ \left(\frac{\partial P_{\rm gaz}}{\partial \rho}\right)_{T,X},\\
\alpha &= \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln P_{\rm gaz}}\right)_{T,X} = \frac{P_{\rm gaz}}{\rho} \Big/ \left(\frac{\partial P_{\rm gaz}}{\partial \rho}\right)_{T,X},\ \beta = \frac{P_{\rm th}}{P_{\rm gaz}},\\
c_{\rm p} &= \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{P_{\rm gaz},X} + \frac{P_{\rm gaz}\delta}{T\rho} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\rho,X} + \frac{\delta}{T}\left(\frac{P_{\rm gaz}}{\rho} - \rho\left(\frac{\partial U}{\partial \rho}\right)_{T,X}\right)
\end{aligned} \tag{4.49}$$

le gradient adiabatique, le grand gamma, la fréquence de Brunt-Väissälä[27] sont calculés par:

$$\begin{aligned}
&\nabla_{ad} = \frac{P_{\rm gaz}\delta}{T\rho c_p},\ \Gamma_1 = \left(\frac{\partial \ln P_{\rm gaz}}{\partial \ln \rho}\right)_S = \frac{1}{\alpha - \delta\nabla_{ad}},\\
&N^2 = \frac{R}{H_{\rm p}}\left[\alpha\left(\frac{\partial \ln P_{\rm gaz}}{\partial \ln P} - 1\right) + \delta\left(\nabla_{\rm ad} - \nabla\right)\right] - 4\pi R^3 \frac{\partial \rho}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial M}
\end{aligned} \tag{4.50}$$

[27] Non valable si $X \equiv 0$.

l'échelle de hauteur de la pression, le coefficient de conductivité radiative et le gradient radiatif ont pour expressions:

$$H_{\rm p} = -\left(\frac{\partial \ln P}{\partial R}\right)^{-1} = \frac{r^2 P}{\mathcal{G} M \rho}, \quad K = \frac{4acT^3}{3\kappa\rho}, \qquad \nabla_{rad} = \frac{L H_p}{4\pi R^2 K T}$$

4.1.38.1 Description de thermo

1 Initialisations effectuées lors du premier appel,

2 appel à l'équation d'état pour le calcul des grandeurs thermodynamiques,

3 détermination de l'énergie thermonucléaire,

4 détermination de l'opacité,

5 calcul du gradient radiatif,

6 formation du critère de convection (Schwarzschild ou Ledoux),

7 pour les zones convectives, calcul du gradient.

4.1.38.2 Arguments de thermo

```
subroutine thermo(pt,p,t,xchim,m,l,r,dlpp,dxchim,
1 ro,drop,drot,drox,u,dup,dut,dux,lamb,r_zc,r_ov,lim,
2 grad,dgradpt,dgradp,dgradt,dgradx,dgradm,dgradl,dgradr,dgradlpp,
3 gam,dgampt,dgamp,dgamt,dgamx,dgamm,dgaml,dgamr,dgamlpp,
4 epsilon,depsp,depst,depsx,kap,dkapp,dkapt,dkapx,
5 delta,deltap,deltat,deltax,cp,dcpp,dcpt,dcpx,
6 gradad,dgradadp,dgradadt,dgradadx,wrot,
7 hp,dhppt,dhpp,dhpt,dhpx,dhpr,dhpm,
8 gradrad,alfa,beta,gamma1,radiatif,deriv,
9 etat,opa,conv,nuc)
```

entrées

pt, p, t, m, l, r: pression totale, pression gazeuse, température, masse, luminosité, rayon;

xchim, dxchim, dlpp: composition chimique par mole, dérivée / $(M/M_\odot)$, $\frac{d\ln P_{\rm gaz}}{d\ln P_{\rm tot}}$;

r_zc, r_ov, lim, wrot: rayons aux limites des zones convectives, rayons aux limites des zones convectives étendues, nombre de limites zone radiative / zone convective, vitesse angulaire en cas de rotation solide;

deriv=.true.: le calcul des dérivées est requis.

sorties

ro, drop, drot, drox: densité et dérivées;

u, dup, dut, dux: énergie interne et dérivées;

grad, dgradpt, dgradp, dgradt, dgradx, dgradm, dgradl, dgradr, dgradlpp: gradient de température $\nabla \equiv \frac{\partial \ln T}{\partial \ln P_{\rm tot}}$ et dérivées;

gam, dgampt, dgamp, dgamt, dgamx, dgamm, dgaml, dgamr, dgamlpp: efficacité de la convection et dérivées;

lamb: dégénérescence;

epsilon, depsp, depst, depsx: énergie nucléaires et gravifique et dérivées;

kap, dkapp, dkapt, dkapx: opacité et dérivées;

delta, deltap, deltat, deltax: δ et dérivées;

cp, dcpp, dcpt, dcpx: $c_{\rm p}$ et dérivées;

gradad, dgradadp, dgradadt, dgradadx: gradient adiabatique et dérivées;

hp, dhppt, dhpp, dhpt, dhpx, dhpr, dhpm: échelle de hauteur de pression et dérivées;

gradrad, alfa, beta, gamma1, radiatif: gradient radiatif, α, β, Γ_1, radiatif=.true. on est dans une zone radiative.

externes etat, opa, conv, nuc: noms des routines d'équation d'état, d'opacité, du calcul de la convection et des réactions thermonucléaires.

APPEL: thermo est appelé de divers endroits en particulier par cesam, static_m, static_r.

4.1.39 Routine interne thermo_atm

Pour la restitution de l'atmosphère cette routine est l'homologue de la précédente dont elle ne diffère que par:

- il n'y a pas d'appel aux réactions thermonucléaires,
- le calcul du gradient de température tient compte de la loi $T(\tau)$ utilisée pour la restitution de l'atmosphère *cf.* § 4.1.23.3 (Page 147),
- la composition chimique et la luminosité sont spatialement constantes.

4.1.39.1 Arguments de thermo_atm

```
subroutine thermo_atm(pt,p,t,xchim,m,l,r,dlpp,
1 tau,f_tau,df_tau,d2f_tau,rstar,wrot,
2 ro,drop,drot,kap,dkapp,dkapt,gradad,dgradadp,dgradadt,
3 grad,dgradpt,dgradp,dgradt,dgradr,dgradrs,dgradm,dgradtau,dgradlpp,
4 gam,dgampt,dgamp,dgamt,dgamr,dgamrs,dgamm,dgamtau,dgamlpp,
5 hp,dhppt,dhpp,dhpt,dhpr,dhpm,delta,deltap,deltat,
6 cp,gradrad,alfa,beta,gamma1,radiatif,deriv,
7 etat,opa,conv)
```

entrées pt, p, t, m, l, r, rstar, wrot: pression totale, pression gazeuse, température, masse, luminosité, rayon, rayon de l'étoile à l'instant t, vitesse angulaire en cas de rotation solide;

xchim, dlpp: composition chimique par mole, $\frac{d\ln P_{\rm gaz}}{d\ln P_{\rm tot}}$;

tau, f_tau, df_tau, d2f_tau: profondeur optique, partie dépendante de τ de la loi $T(\tau)$ et dérivées premières et secondes;

deriv=.true.: le calcul des dérivées est requis.

sorties ro, drop, drot: densité et dérivées;

grad, dgradpt, dgradp, dgradt, dgradr, dgradrs, dgradm, dgradtau, dgradr, dgradlpp: gradient de température $\nabla \equiv \frac{\partial \ln T}{\partial \ln P_{\rm tot}}$ et dérivées;

gam, dgampt, dgamp, dgamt, dgamr, dgamrs, dgamm, dgamtau, dgamlpp: efficacité de la convection et dérivées;

kap, dkapp, dkapt: opacité et dérivées;

gradad, dgradadp, dgradadt: gradient adiabatique et dérivées;

hp, dhppt, dhpp, dhpt, dhpr, dhpm: échelle de hauteur de pression et dérivées;

delta, deltap, deltat: δ et dérivées;

cp, gradrad, alfa, beta, gamma1, radiatif: $c_{\rm p}$, gradient radiatif, α, β, Γ_1, radiatif=.true. on est dans une zone radiative.

externes etat, opa, conv: noms des routines d'équation d'état, d'opacité, du calcul de la convection et des réactions thermonucléaires.

APPEL: thermo_atm est appelé par eq_atm.

4.1.40 Routine interne update

Suivant la valeur `.true.` / `.false.` de la variable logique `next`, cette routine permet, soit de translater au temps t le modèle calculé pour temps $t + dt$, soit de réinitialiser un modèle pour le temps $t + dt$ avec celui obtenu pour le temps t. L'extension _t permet de différencier les variables au temps t de celles au temps $t + dt$.

4.1.40.1 Description de update

1. Si `next=.true.` les grandeurs caractérisant le modèle au temps $t + dt$ sont transcrites sur celles du modèle au temps t, le pas temporel est ajusté de façon à éventuellement arrèter le calcul sur l'âge maximum désiré.

2. Si `next=.false.` les grandeurs caractérisant le modèle au temps t sont transcrites sur celles du modèle au temps $t + dt$, le pas temporel est ajusté de façon à éventuellement arrèter le calcul sur l'âge maximum désiré.

4.1.40.2 Arguments de update

```
subroutine update(next,bp,q,n,qt,knot,chim,mc,nc,mct,knotc,
1 r2,m23,dts,m_zc,r_zc,r_ov,lim,jlim,lconv,mstar,age,
2 bp_t,q_t,n_t,qt_t,knot_t,chim_t,mc_t,nc_t,mct_t,knotc_t,
3 r2_t,m23_t,dt,m_zc_t,r_zc_t,r_ov_t,lim_t,jlim_t,lconv_t,mstar_t)
```

entrées next: `next=.true.` on écrase les variables au temps $t + dt$ sur celle au temps t et réciproquement si `next=.false.`

in/out bp, q, n, qt, knot, chim, mc, nc, mct, knotc: éléments pour l'interpolation de la structure et de la composition chimique au temps $t + dt$;

bp_t, q_t, n_t, qt_t, knot_t, chim_t, mc_t, nc_t, mct_t, knotc_t: éléments pour l'interpolation de la structure et de la composition chimique au temps t;

r2, m23, m_zc, r_zc, r_ov, lim, jlim, lconv, mstar: éléments pour interpolation inverse, masse, rayons, rayons étendus, nombre de limites, indices des limites des zone convective masse totale au temps $t + dt$;

r2_t, m23_t, m_zc_t, r_zc_t, r_ov_t, lim_t, jlim_t, lconv_t, mstar_t: éléments pour interpolation inverse, masse, rayons, rayons étendus, nombre de limites, indices des limites des zone convective masse totale au temps t;

r2, m23, m_zc, r_zc, r_ov, lim, jlim, lconv, mstar: éléments pour interpolation inverse, masse, rayons, rayons étendus, nombre de limites, indices des limites des zone convective masse totale au temps $t + dt$;

age, dt, dts: âge, pas temporel, pas temporel proposé.

APPEL: update est appelé par resout.

4.1.41 Routine interne zone

Permet de déterminer la répartition des abscisses de façon à ce que les incréments des ordonnées soient constants.

4.1.41.1 Arguments de zone

```
subroutine zone(n,m,p,newn,newm)
```

entrées n, m, p, newn: nombre de points, abscisses, ordonnées de la répartition initiale, newn nombre de points de la répartition uniforme désirée.

sorties newm: abscisses de la répartition uniforme désirée.

APPEL: zone est appelé par resout et lim_zc.

4.2 Packages externes

La source de CESAM contient des routines d'origine externe qui correspondent à des "boites noires" dont la fonction est le calcul d'opacité et d'équation d'état essentiellement. Les routines correspondantes sont réunies dans des packages se trouvant dans le sous-directory `CESAM` de la source. On donne la liste à défaut d'une description réelle.

PB `Certaines routines, mais pas toutes, ont été remaniées pour absence de déclarations de type ou correction de BUGs; la compilation ne peut donc pas toujours en être faite avec contrôle de type.`

4.2.1 Package équation d'état EFF

Package de l'équation d'état EFF, Eggleton *et al.* [1973], appelée par la routine externe etat_eff de type etat. Ce package a été fourni par J. Christensen-Dalsgaard et l'essentiel de l'interface avec CESAM a été réalisée par A. Baglin et M. Auvergne. Les routines qui relèvent de ce package sont regroupées avec la routine etat_eff du sous-directory `CESAM` de la source; ce sont les suivantes:

bilin, block data bleqst, eqstf, eqstp, hviona, inteff, omega, phder, setcns, store, theffp, zero.

4.2.2 Package équation d'état CEFF

Package de l'équation d'état CEFF, addition des corrections Coulombiennes à l'équation d'état EFF, appelée par la routine externe etat_ceff de type etat. Ce package a été fourni par J. Christensen-Dalsgaard et l'essentiel de l'interface avec CESAM a été réalisée par A. Baglin et M. Auvergne. Les routines qui relèvent de ce package sont regroupées avec la routine etat_ceff du sous-directory `CESAM` de la source; ce sont les suivantes:

bilinc, clmnew, cvmgp, cvmgz, cvmgn, cvmgt, cvmgm, dmpeqs, derive, eostst, eqstfc, eqstpc, eqstrh, eosder, f4der, f4n, f4mhd, hheion, hmnion, hvionac, inteffc, ismax, isamax, ismin, leq, neweta, omegac, phderc, prthvi, setgm1, setf4, seteqs, blockdata bleqstc, setcnsc, sdot, ssum, sscal, scopy, saxpy, storec, zeroc, blockdata blstio.

4.2.3 Package équation d'état MHD

Package de l'équation d'état MHD, Mihalas *et al.* [1988], appelée par la routine externe etat_mhd de type etat. Ce package a été fourni par W. Däppen. Les 8 tables `mhd1_oc_tau.tab` ... `mhd8_oc_tau.tab` qui trouvent sur le serveur anonyme usc.edu, dans le répertoire `pub/astro-physics/mhd-oc-tau/wd-evo` ont été reproduites dans le sous-directory `DATA` de la source de CESAM. Après avoir décompressé ces tables en ASCII, les transformer en fichiers binaires en exécutant le programme fmttobin du sous-directory `EXPLOIT` de la source de CESAM, puis indiquer dans la routine etat_mhd leur chemin d'accès. Les routines qui relèvent de ce package sont regroupées avec la routine etat_mhd du sous-directory `CESAM` de la source; ce sont les suivantes:

fmttob, mhdpx, mhdpx1, mhdpx2, intpt, mhdst, mhdst1, rtab, rabu, quint, quintd, lir.

4.2.4 Package équation d'état OPAL

Package de l'équation d'état OPAL, Iglesias & Rogers [1991], appelée par la routine externe etat_opal de type etat. Le package original et les tables d'équation d'état ont été repris du site WEB `ftp://www-phys.llnl.gov/pub/opal/eos/` où l'on trouve un "README" expliquant la démarche à suivre pour construire une table d'équation d'état pour une valeur de Z fixée. Transformer cette table ASCII en fichier binaire en exécutant le programme opal_ascii_bin du sous-directory `EXPLOIT` de la source de CESAM, et indiquer le chemin d'accès de ce fichier dans la routine etat_opal. Dans le sous-directory `DATA` de la source de CESAM la table ASCII

eos_OPAL_195_ASCII.dat a été calculée pour la mixture solaire et $Z = 0.0195$. Les routines qui relèvent de ce package sont regroupées avec la routine etat_opal du sous-directory CESAM de la source; ce sont les suivantes:

blockdata blk_eos, esac, opal_ascii_bin, quad, r_opal_bin, radsub, readco, ro_new, t6rinterp.

PB Certains des sous-programmes du package original d'OPAL ont été modifiés pour l'exploitation avec CESAM.

4.2.5 Package opacité HOUDEK

Package de calcul de l'opacité OPAL, Iglesias & Rogers [1991], par les routines d'interpolation par splines birationnelles de Houdek & Rogl [1996] il est appelé par la routines externe opa_houdek9 de type opa *cf.* § 4.1.28.3.2 (Page 166). Ce package peut être obtenu "via anonymous ftp from ftp.ast.cam.ac.uk in the subdir 'pub/hg/opacity', where you should find opint_v9f.tar.gz". Il est constitué du fichier opint_v9f.tar.gz qu'il faut décompresser: `tar -xvf opint_v9f.tar`, puis en suivant les instructructions du README, éditer ensuite le makefile dans le directory v9 et adapter le compilateur et l'optimiseur à la machine UNIX dont on dispose, exécuter le MAKEFILE: `make`; dans le directory v9/OPINPATH_AX, remplacer les "./" par les chemins `./v9/opal95/opal95e.bin` donne, par exemple: `/home/morel/OPACITE/HOUDEK/v9/opal95/opal95e.bin`; faire de même pour v9/OPINPATH_91 et v9/OPINPATH_95. Suivant les tables à utiliser, dans la routine d'appel opa_houdek9, indiquer le chemin d'accès aux données, par exemple:

```
tabnam='/home/morel/OPACITE/HOUDEK/v9/OPINTPATH_AX'
tabnam='/home/morel/OPACITE/HOUDEK/v9/OPINTPATH_95'
tabnam='/home/morel/OPACITE/HOUDEK/v9/OPINTPATH_91'
```

et définir les paramètres iorder et imode en se référant à la notice constituée par le fichier ./doc/notes.ps du directory v9. Il convient aussi d'indiquer au LINK le chemin d'accès à la bibliothèque libopint.a.

4.2.6 Package opacité YVELINE

Package construit par Y. Lebreton pour le calcul de l'opacité OPAL, Iglesias & Rogers [1991]. Il est appelé par la routines externe opa_yveline *cf.* § 4.1.28.3.3 (Page 166), de type opa pour un mélange solaire. La table en ASCII se trouve dans le fichier opa_yveline_ASCII.dat du sous-directory DATA de la source de CESAM. Extraire cette table et la transformer en un fichier binaire à l'aide du programme fmttobin de ce package. Les routines qui relèvent de ce package sont regroupées avec la routine opa_yveline du sous-directory CESAM de la source; ce sont les suivantes:

kappa_opal, intlin_opal, intl_opal, sub_quad, lect_opal, lpol_op, pos_table_op.

4.3 Routines purement numériques

On ne donne qu'une description sommaire de ces routines qui relèvent de l'analyse numérique.

4.3.1 Description de difdiv

Calcul des différences divisées pour interpolation Newton *cf.* , Stoer & Bulirsch [1979].

4.3.2 Description de gausdp_g

Routine de résolution d'un système linéaire bande dont la largeur de la bande est constante. L'algorithme est celui de l'élimination de Gauss avec équilibrage et pivot partiel. Il est possible de résoudre un système ayant plus de lignes que de colonnes à condition que son rang soit exactement égal au nombre de colonnes. L'espace mémoire utilisé correspond à la partie non identiquement nulle du système.

4.3.3 Description de gausdn

Routine de résolution d'un système linéaire bande dont la largeur de la bande est constante et comportant plusieurs seconds membres. L'algorithme est celui de l'élimination de Gauss avec équilibrage et pivot partiel. L'espace mémoire utilisé correspond à la partie non identiquement nulle du système.

4.3.4 Description de horner

C'est l'algorithme de Hörner qui permet de calculer, pour $x = \alpha$, les dérivées de tous ordres d'un polynôme ainsi que le quotient de ce polynôme par $x - \alpha$.

4.3.5 Description de intgauss

Initialisation des poids et des abscisses pour l'intégration de Gauss de divers ordres.

4.3.6 Description de long

Effectue le calcul de la longueur d'une chaine de caractères (programme original de G. Gonczy).

4.3.7 Description de neuville

Algorithme de Neville pour interpolation polynômiale, *cf.* , Stoer & Bulirsch [1979].

4.3.8 Description de newton

Interpolation polynômiale avec dérivées, par la formule de Newton, *cf.* , Conte & deBoor [1987].

4.3.9 Description de pminmax

Recherche du maximum et du minimum d'une table. Cette routine est adaptée au calcul des échelles pour des tracés.

4.3.10 Description de polyder

C'est une autre version de l'algorithme de Hörner dont les arguments diffèrent de ceux de horder. Pour des raisons historiques CESAM fait appel aux deux versions.

4.3.11 Description de simq

Programme de résolution de la SSP 360 d'un sytème linéaire carré. Utilise l'élimination de Gauss avec pivot partiel.

4.3.12 Description de shell

Routine tri d'un tableau inspirée de Numerical Recipes Press *et al.* [1986] p. 229.

4.4 Routines spécifiques aux B-splines

Beaucoup de ces routines sont originales, elles sont, dans leur ensemble, inspirées des algorithmes décrits dans de Door [1978] et Schumaker [1981].

4.4.1 Description de bspint

Fonction qui calcule en un point la valeur de l'interpolée d'une fonction à partir de son développement sur une base de B-splines.

4.4.2 Description de bval

Routine qui calcule la valeur de toutes les B-splines non identiquement nulles en un point donné.

4.4.3 Description de bvald

Routine qui calcule la valeur de toutes les B-splines non identiquement nulles ainsi que leurs dérivées en un point donné.

4.4.4 Description de colloc

Routine qui calcule les valeurs des B-splines et de leurs dérivées aux points de collocation et aux points limites de la base de De Boor pour l'intégration des équations différentielles.

4.4.5 Description de colpnt

Routine qui génère les points de collocation et les points limites de la base de De Boor pour l'intégration des équations différentielles.

4.4.6 Description de newsp1

Effectue un changement de base de B-splines pour le développement d'un polynôme par morceaux.

4.4.7 Description de newspn

Généralise newsp1 pour n fonctions. Effectue un changement de base de B-splines pour le développement d'un polynôme par morceaux.

4.4.8 Description de noedif

Routine d'initialisation du réseau de points de table de la base de De Boor pour la résolution des équations différentielles par collocation.

4.4.9 Description de noeu_dis

Détermine la séquence de nœuds de raccord pour une interpolation "optimale" en tenant compte de discontinuités; identique a snoein s'il n'y a pas de discontinuité.

4.4.10 Description de sbsp1d

Calcule en un point l'interpolée ainsi que sa dérivée première d'une fonction à partir de son développement sur une base de B-splines. Le calcul de la dérivée première est fait systématiquement. car il ne demande pratiquement pas de ressource en plus du calcul de la fonction. Si le développement sur une base de B-splines est inconnu, sbsp1d en calcule un en utilisant la base de B-splines de snoein qui optimise la répartition des points de raccords.

4.4.11 Description de sbsp1dn

Routine d'interpolation qui généralise sbsp1d en effectuant l'interpolation au même point, pour n fonctions simultanément. Le développement sur une base de B-splines calculé par sbsp1d peut être exploité par sbsp1dn en précisant qu'il n'y a qu'une seule fonction à interpoler. sbsp1d est en fait caduque et n'est gardé que pour des raisons historiques.

4.4.12 Description de sbsp1ddn

Généralise sbsp1dn en calculant toutes les dérivées non identiquement nulles. Ne doit être utilisée que si des dérivées d'ordre supérieur à 1 sont requises car cette routine demande plus de ressources que sbsp1dn et sbsp1d pour les dérivées premières.

4.4.13 Description de sbsp_dis

Routine de calcul des coefficients d'interpolation pour n fonctions avec discontinuités; s'exploite avec sbsp1dn.

4.4.14 Description de sbval

Routine qui calcule la valeur de toutes les B-splines non identiquement nulles ainsi que leurs dérivées en un point donné. Similaire à bvald.

4.4.15 Description de schu58

Calcul de la valeur en un point d'un polynôme par morceaux à partir de son développement sur une base de B-splines et des valeurs des B-splines non identiquement nulles en ce point.

4.4.16 Description de schu58_n

Généralise schu58 pour n fonctions.

4.4.17 Description de sgauss

Routine de De Boor pour la résolution d'un système linéaire par élimination de Gauss avec stratégie de pivots, équilibrage et optimisé pour le calcul des coefficients des B-splines.

4.4.18 Description de slinf

Localisation d'un point dans une table d'abscisses en ordre strictement croissant.

4.4.19 Description de snoein

Routine de création du réseau des points de table pour interpolation. Les valeurs de la fonction aux points les plus extérieurs seront utilisées pour obtenir le nombre correct de conditions.

4.4.20 Description de sum_n

Calcule l'intégrale d'une spline entre des bornes données pour n fonctions. Les coefficients doivent avoir été précédemment calculés par sbsp1dn par exemple. Au premier appel ces coefficients seront adaptés au calcul de l'intégrale, donc modifiés. Ils ne seront pas recalculés lors les appels ultérieurs. S'inspire de l'algorithme 5.19 de Schumaker [1981].

Bibliography

[1998] Adelberger E., et al., 1998, Rev. Mod. Phys. 70, 4, 1265

[1989] Anders E., Grevesse N., 1989, Geochimica et Cosmochimica Acta 53, 197

[1999] Angulo C., Arnould M., Rayet M., and the NACRE collaboration 1999, Nuclear Physics A 656, 1 and WEb site http://pntpm.ulb.ac.be/Nacre/nacre.htm

[1985] Alécian G., 1985, A&A 145, 275

[1990] Alécian G., Artru M.C., 1990, A&A 234, 323

[1990] Alécian G., Michaud G., Tully J., 1990, ApJ 411, 882

[1969] Arnett W.D., Truran J.W., 1969, ApJ 157, 339

[1969] Burgers J.M., 1969, Flow equations for composite gases, Academic Press, New york and London

[1988] Caughlan G.R., Fowler W.A., 1988, Atomic Data and Nuclear Data Tables 40, 284

[1991] Canuto V.M., Mazitelli I., 1991, ApJ 370, 295

[1996] Canuto V.M., Goldman ???, Mazitelli I., 1996, ApJ 473, 550 **INCOMPLET**

[1988] Christensen-Dalsgaard J., 1988, Computational procedures for GONG solar model project, Astronomisk Institut, Aarhus Universitet

[1968] Clayton D.D. ,1968, Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis, Mc Graw–Hill

[1987] Conte S.D., de Boor C., 1987, Elementary Numerical Analysis, McGraw-Hill Book Company, third edition

[1968] Cox J.P., Guili R.T., 1968, Principles of Stellar Structure, vol I & II, Gordon & Bretch, New-York

[1989] Cox A.N., Guzik J.A., Kidman R.B., 1989, ApJ 342, 1187

[1978] De Boor C., 1978, A Practical Guide to Splines Springer; third ed. 1985

[1971] Eggleton P., 1971, Mon. Not. Roy. astr. Soc. 151, 351

[1972] Eggleton P., 1972, Mon. Not. Roy. astr. Soc. 156, 361

[1973] Eggleton P.P., Faulkner J., Flannery B.P., 1973, A&A 23, 325

[1975] Fowler W.A., Caughlan G.R., Zimmerman B.A., 1975, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 13, 69

[1997] Gabriel M., 1997, A&A 327, 771

[1991] Hairer E., Wanner G., 1991, Solving Ordinary Differential Equations II, Springer-Verlag

[2002] Heiter??? et al????, 2002, A&A **INCOMPLET**

[1962] Henrici P., 1962, Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons.

[1959] Henyey L.G., Le Levier R., Levee R.D., 1959, ApJ 129, 2

[1965] Henyey L.G., Vardya M.S., Bodenheimer P., 1965, ApJ 142, 841

[1996] Houdek G., Rogl J., 1996, Bull. Astr. Soc. India 24, 317

[1964] Iben I., 1964, ApJ 141, 993

[1975] Iben I., 1975, ApJ 196, 525

[1985] Iben I., MacDonald J., 1985, ApJ 296, 540

[1991] Iglesias C.A., Rogers F.J., 1991, ApJ 371 ,408

[1979] Kaps P., Rentrop P., 1979, Numer. Math. 33, 55

[1968] Kippenhahn R., Weigert A., Hofmeister E., 1968, Methods of Computational Physics 7, 129

[1991] Kippenhahn R., Weigert A., 1991, Stellar Structure and Evolution, Springer-Verlag

[1983] Maeder A., 1983, A&A 120, 113

[1987] Maeder A., Meynet G., 1987, A&A 182, 243

[1985] Marchouk G., Agochkov, V., 1985, Méthode des Eléments Finis, Mir

[1978] Mihalas D., 1978, Stellar Atmosphere, 2d Ed. Freeman and Cie

[1988] Mihalas D., Däppen W., Hummer D.G., 1988, ApJ 331, 815

[1993] Michaud G., Proffitt C.R., 1993, *Inside the Stars*, ed. A. Baglin & W.W. Weiss (San Francisco: ASP), 246

[1977] Mitler H.E., 1977, ApJ 212, 513

[1994] Morel P., van't Veer C., Provost J., Berthomieu G., Castelli F., Cayrel R., Lebreton Y., 1994, A&A 286, 91

[1997] Morel P., 1997, A&AS 124, 597 (une version incluant les appendices, est disponible sur le WEB : http://www.obs-nice.fr/morel/articles.html)

[1999] Morel P., Pichon B., Provost J., Berthomieu G., 1999, A&A 350, 275

[2002] Morel P., Thévenin F., 2002, A&A 390, 611

[1989] Muchmore D., 1984, ApJ 278, 769

[1986] Paquette C., Pelletier C., Fontaine G., Michaud G., 1986, ApJS 61, 177

[1986] Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., 1986, Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge

[1991] Proffit C.R., Michaud G., 1991, ApJ 371, 584

[1994] Quarteroni A., Valli A., 1994, Numerical approximation of partial differential equations, Springer-Verlag

[1967] Richtmyer R.D., Morton K.W., 1967, Finite Differences Methods for Initial Values Problems, 2d. Ed., Intersciences Publishers, New-York

[1981] Schatzman E., Maeder A., Angrand F., Glowinski R., 1981, A&A 96, 1

[1990] Schatzman E., Praderie F., 1990, Les Etoiles, Ed. InterEditions/Editions du CNRS

[1981] Schumaker L., 1981, Splines Functions: Basic Theory, John Whiley

[1979] Stoer J., Bulirsch R., 1979, Introduction to Numerical Analysis, Springer-Verlag

[1970] Strittmatter P.A., Faulkner J., Robertson J.W., Faulkner D.J., 1970, ApJ 161, 369

[1994] Thoul A.A., Bahcall J.N., Loeb A., 1994, ApJ 421, 828

[1980] Trenoguine V., 1980, Analyse Fonctionnelle, Mir

[1969] Wagoner R.V., 1969, ApJS 18, 247

[1980] Winkler K.H., Newman M.J., 1980, ApJ 236, 201

[1991] Zahn J.P., 1991, A&A 252, 179