АСТРОФИЗИКА

ТОМ 39 НОЯБРЬ, 1996 ВЫПУСК 4

УДК: 52

# ОБ ОДНОМ РАЗЛОЖЕНИИ ФУНКЦИИ ФОЙГТА

Г.А.АРУТЮНЯН

Поступила 11 июня 1996
Принята к печати 1 августа 1996

Функция Фойгта и ее производные представлены с помощью рядов по полиномам Эрмита. Полученные выражения могут быть использованы как для численных расчетов этих функций, так и при аналитических исследованиях.

1. *Введение.* Функция Фойгта описывает контур коэффициента поглощения в спектральной линии при учете как доплеровского уширения линии, вследствие теплового движения атомов, так и уширения, вследствие конечной ширины верхнего энергетического уровня и эффектов столкновения. Она имеет важное значение в теории переноса излучения и достаточно часто становится предметом исследований. Несколько десятилетий назад главной целью исследователей было составление подробных таблиц этой функции, которые могли быть использованы для прикладных расчетов (см., например, [1,2]). В настоящее время все более важным становится разработка эффективных методов численного вычисления этой функции, так как новое поколение компьютеров позволяет рассматривать более реальные и чрезвычайно сложные задачи с многократными обращениями к соответствующим подпрограммам [3-6].

В настоящей работе автор еще раз обращается к этой задаче, рассматривая не только функцию Фойгта, но также и ее производные, которые, наряду с основной функцией, играют достаточно важную роль в теории образования спектральных линий. Последние были введены в рассмотрение Хаммером [7], а в дальнейшем, как для решения различных задач теории переноса, так и в качестве объектов отдельного исследования, были рассмотрены в ряде работ [8-10]. Функция Фойгта и ее производные представляются в виде рядов по полиномам Эрмита, которые могут быть использованы как при аналитических исследованиях, так и при численных расчетах. Здесь основное внимание мы уделяем лишь на получение указанных рядов и на исследование некоторых их свойств, так как численные расчеты по полученным формулам, несмотря на чрезвычайную простоту последних, требуют отдельного описания.

2. *Функция Фойгта и ее производные.* Как известно, функция Фойгта может быть представлена различными выражениями, среди

которых наиболее часто в литературе приводится следующая форма:

$$U(x,\sigma)=\frac{\sigma}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\exp(-y^2)}{(x-y)^2+\sigma^2}dy, \tag{1}$$

где $x$ - безразмерная частота, представляющая собой разность частоты фотона и частоты центра линии, выраженная в доплеровских полуширинах, а $\sigma$, так называемый, параметр затухания.

Наряду с функцией Фойгта часто рассматриваются также и следующие функции:

$$\alpha_k(x,\sigma)=\frac{\sigma}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\alpha_k(y)}{(x-y)^2+\sigma^2}dy, \tag{2}$$

где

$$\alpha_k(x)=\alpha_k(x,0)=\left(2^k\,k!\sqrt{\pi}\right)^{-1/2}H_k(x)\exp(-x^2), \tag{3}$$

а $H_k(x)$ - полином Эрмита $k$-го порядка.

Нетрудно непосредственно проверить, что

$$\alpha_0(x,\sigma)=U(x,\sigma)/\pi^{1/4} \tag{4}$$

и

$$\alpha_k(x,\sigma)=-\frac{1}{\sqrt{2k}}\frac{\partial\alpha_{k-1}(x,\sigma)}{\partial x}. \tag{5}$$

Для этой цели можно воспользоваться, например, следующим выражением [10]:

$$\alpha_k(x,\sigma)=\left(2^k\,k!\sqrt{\pi}\right)^{-1/2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}Re(-2i)^k\int\limits_0^{+\infty}t^k e^{-t^2-2\sigma t+2ixt}dt. \tag{6}$$

Легко проверить также и тот факт, что при $\sigma=0$ из (6), учитывая аналогичное выражение для полиномов Эрмита (см., например, [11]), мы получаем формулу (3).

3. *Разложение по полиномам Эрмита.* Как с точки зрения разработки алгоритмов для численных расчетов, так и для аналитических исследований, разложение некоторых функций по полиномам Эрмита нередко оказывается весьма полезным. Ниже будут найдены подобные разложения для функций $\alpha_k(x,\sigma)$ по тем же полиномам:

$$\alpha_k(x,\sigma)=\sum_{n=0}^{\infty}a_{kn}(\sigma)\hat{H}_n(x), \tag{7}$$

где $\hat{H}_n(x)$ - нормированные полиномы Эрмита

$$\hat{H}_n(x) = \left(2^n n!\sqrt{\pi}\right)^{-1/2} H_n(x).$$

Для этого умножим обе части равенства (7) на $\alpha_m(x)dx$ и проинтегрируем по всем частотам. Тогда, учитывая, что полиномы $\hat{H}_n(x)$ ортонормированы с весом $\exp(-x^2)$, с учетом (3), получим

$$a_{km}(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha_k(x,\sigma)\, \alpha_m(x)\, dx. \tag{8}$$

Далее, произведя замену переменной в (2), вместо (8) мы будем иметь следующее выражение:

$$a_{km}(\sigma) = \frac{\sigma}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{y^2+\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha_k(x+y)\, \alpha_m(x)\, dx. \tag{9}$$

Интегрирование по $x$ может быть произведено аналитически. Для этого наиболее удобно использовать выражение (6) при $\sigma=0$. Тогда для интеграла по $x$ в (9) получим

$$\begin{aligned} I_{km}(y) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha_k(x+y)\, \alpha_m(x)\, dx = \left(2^{k+m} k!m!\pi\right)^{-1/2} \frac{1}{\pi} \times \\ &\times Re(-2i)^k \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} t^k e^{-t^2+2i(x+y)t}\, dt \cdot Re(-2i)^m \int_{-\infty}^{+\infty} u^m e^{-u^2+2ixu} du = \\ &= \left(2^{k+m} k!m!\pi\right)^{-1/2} \frac{1}{\pi} Re(-2i)^{k+m} \int_{-\infty}^{+\infty} t^k e^{-t^2+2iyt} dt \int_{-\infty}^{+\infty} u^m e^{-u^2} du \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2ix(t+u)} dx. \end{aligned} \tag{10}$$

Учитывая также, что $\delta$-функция Дирака допускает следующее представление:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[2ix(t+u)]\, dx = 2\pi\delta[2(t+u)] = \pi\delta(t+u), \tag{11}$$

мы для величины $I_{km}(y)$ получим

$$I_{km}(y) = \frac{\pi^{1/4}(-1)^m}{2^{(k+m+1)/2}} \sqrt{\frac{(k+m)!}{k!m!}}\, \alpha_{k+m}(y/\sqrt{2}). \tag{12}$$

Тогда, непосредственной подстановкой $I_{km}(y)$ в (9), для искомых коэффициентов $a_{km}(\sigma)$ получим (см. также [12])

$$a_{km}(\sigma)=\frac{\pi^{1/4}(-1)^m}{2^{(k+m+1)/2}}\sqrt{\frac{(k+m)!}{k!m!}}\alpha_{k+m}(0,\sigma/\sqrt{2}). \quad (13)$$

Отметим, что в работе [10] автором получено выражение для функций $\alpha_k(x,\sigma)$ при $x=0$. Для нечетных значений индекса $k$ функции $\alpha_k(x,\sigma)$ равняются нулю, а для четных значений индекса имеем

$$\alpha_{2k}(0,\sigma)=\frac{\sigma}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\alpha_{2k}(y)dy}{y^2+\sigma^2}=$$
$$=\frac{(-1)^k}{\pi^{1/4}\sqrt{(2k)!}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n\sigma^{2n}}{(2n)!}\left[(2k+2n-1)!!-\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}\frac{2}{2n+1}(2k+2n)!!\right]. \quad (14)$$

Следует отметить, что степенной ряд (14) очень быстро сходится для любого значения параметра $\sigma$, представляющего интерес с точки зрения астрофизических применений ($10^{-4}\le\sigma\le 10^{-1}$), и может быть использован для практических вычислений. Тем не менее, мы можем получить также и рекуррентные соотношения, которые в некоторых отношениях могут оказаться более удобными для численных расчетов. Для этого воспользуемся выражением (6) при $\sigma=0$ и проинтегрируем его по частям. Тогда получим

$$\alpha_{2m+2}(0,\sigma)=-\sigma\sqrt{\frac{2}{2m+2}}\beta_{2m+1}(0,\sigma)-\sqrt{\frac{2m+1}{2m+2}}\alpha_{2m}(0,\sigma) \quad (15)$$

и

$$\beta_{2m+3}(0,\sigma)=\sigma\sqrt{\frac{2}{2m+3}}\alpha_{2m+2}(0,\sigma)-\sqrt{\frac{2m+2}{2m+3}}\beta_{2m+1}(0,\sigma), \quad (16)$$

где

$$\alpha_0(0,\sigma)=\pi^{-1/4}\exp\left(\sigma^2\right)\mathrm{erfc}(\sigma),$$
$$\beta_1(0,\sigma)=\left[\sigma\alpha_0(0,\sigma)-\pi^{-3/4}\right]\sqrt{2}, \quad (17)$$

а

$$\beta_k(x,\sigma)=\left(2^k k!\sqrt{\pi}\right)^{-1/2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}I_m(-2i)^k\int_0^{+\infty}t^k e^{-t^2-2\sigma t+2ixt}dt. \quad (18)$$

Как нетрудно видеть с помощью формул (6) и (18), функции $\alpha_k(x,\sigma)$ с нечетным индексом и $\beta_k(x,\sigma)$ с четным индексом являются нечетными, и при $x=0$ обращаются в нуль. Отметим также, что для тех значений параметра $\sigma$, которые представляют наибольший интерес с точки зрения практических расчетов, и выражение (14), и рекуррентные соотношения (15)-(17) обеспечивают достаточно высокую скорость вычислений, и в общем объеме численных расчетов функции Фойгта и ее производных составляют лишь ничтожную долю.

Таким образом, разложение (7) принимает следующий окончательный вид:

$$\alpha_k(x,\sigma) = \pi^{1/4} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{2^{(k+m+1)/2}} \sqrt{\frac{(k+m)!}{k!m!}} \alpha_{k+m}(0,\sigma/\sqrt{2})\, \hat{H}_m(x). \tag{19}$$

Учитывая, что в выражении (19) сумма $(k+m)$ всегда есть четная величина (в противном случае величины $\alpha_k(0,\sigma)$ равны нулю), можно заключить, что функции $\alpha_k(x,\sigma)$ с четным индексом выражаются суммой, состоящей только из четных полиномов, а нечетные функции - только из нечетных полиномов Эрмита, что можно было ожидать также, исходя из общих соображений.

4. *Разложение (19).* Полученное здесь выражение (19) может быть использовано для численных расчетов функций $\alpha_k(x,\sigma)$ и, в частности, функции Фойгта. Однако остановимся лишь на исследовании некоторых свойств этого выражения, знание которых может быть полезным при использовании этих функций в прикладных целях. Достаточно важные вопросы, связанные с численными методами, а также с эффективностью вычислительных алгоритмов, построенных на основе указанного выражения, будут рассмотрены в одной из следующих работ автора, так как представляют отдельный интерес, с точки зрения выбора оптимальных численных схем.

Во-первых, отметим, что ряд (19) почленно дифференцируем. Нетрудно непосредственно проверить справедливость соотношения (5), пользуясь следующим соотношением:

$$\hat{H}'_m(x) = \sqrt{2m}\, \hat{H}_{m-1}(x). \tag{20}$$

Далее, из (19) при $k=0$ для функции Фойгта получим сравнительно более простое выражение

$$U(x,\sigma) = \pi^{1/4}\alpha_0(x,\sigma) = \pi^{1/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha_{2m}\left(0,\sigma/\sqrt{2}\right)}{2^{m+1/2}} \hat{H}_{2m}(x), \tag{21}$$

которое, в свою очередь, при $\sigma=0$ переходит в разложение

$$\exp(-x^2) = \pi^{1/4} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{2^{m+1/2}} \sqrt{\frac{(2m-1)!!}{(2m)!!}}\, \hat{H}_{2m}(x), \tag{22}$$

сходящееся при любом $x$ (см. также [11]).

Учитывая (22), нетрудно получить аналогичное выражение для интеграла вероятностей, а, следовательно, и для функции $\mathrm{erfc}(x)$. Не останавливаясь на технических подробностях, отметим лишь, что это разложение позволяет выразить величину $\alpha_0(0,\sigma)$ и, следовательно, все остальные необходимые величины $\alpha_{2m}(0,\sigma)$, с помощью полиномов Эрмита выражением

$$\alpha_0(0,\sigma)=\pi^{-1/4}\exp\left(\sigma^2\right)\left[1-\pi^{-1/4}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m}{2^m\sqrt{2m+1}}\sqrt{\frac{(2m-1)!!}{(2m)!!}}\,\hat{H}_{2m+1}(\sigma)\right], \tag{23}$$

которое сходится гораздо быстрее, чем степенной ряд и является достаточно хорошим представлением для численных расчетов. Тем не менее, часто полезным оказывается также следующее представление:

$$\alpha_0(0,\sigma)=\pi^{-1/4}\exp\left(\sigma^2\right)\left[1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m!}\frac{\sigma^{2m+1}}{2m+1}\right]. \tag{24}$$

Из (17) подстановкой $\sigma=0$ непосредственно получается также выражение:

$$\alpha_k(x)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^{k-m}}{2^{(k+m+1)/2}}\frac{(k+m-1)!!}{\sqrt{k!m!}}\hat{H}_m(x), \tag{25}$$

которое, с учетом соотношений (5), можно было получить также из (22).

Полученные формулы могут быть полезными как при численных расчетах, так и при аналитических исследованиях. В настоящей работе автор не рассматривает подробно вопросы, связанные с методами реализации соответствующих численных расчетов, так как предполагает посвятить отдельную работу этим методам, где детально будут обсуждены эти вопросы.

Автор выражает искреннюю признательность администрации Парижского института астрофизики, где эта работа была выполнена. Он признателен также Н.Б.Енгибаряну и О.В.Пикичяну за полезную критику и советы.

Бюраканская астрофизическая
обсерватория, Армения

## ON AN EXPANSION OF THE VOIGT FUNCTION

H.A.HARUTYUNIAN

The Voigt function and its derivatives are presented as series of Hermit polynomials. The obtained expressions can be used both for numerical calculations of the mentioned functions and for analytical investigations.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *G.D.Finn, D.Muggleston*, Mont. Notic. Roy. Astron. Soc., **129**, 221, 1965.
2. *D.G.Hummer*, Mem. R.A.S., **70**, 1, 1965.
3. *B.H.Armstrong*, J.Quant, Spectrosc. Radiat. Transfer, **7**, 61, 1967.
4. *T.Andersen*, J.Quant, Spectrosc. Radiat. Transfer, **19**, 169, 1978.
5. *F.Schreier*, J.Quant, Spectrosc. Radiat. Transfer, **48**, 743, 1991.
6. *Z.Shippony, W.G.Read*, J.Quant, Spectrosc. Radiat. Transfer, **50**, 635, 1993.
7. *D.G.Hummer*, Mont. Notic. Roy. Astron. Soc., **125**, 21, 1962.
8. *C.Magnan*, J.Quant, Spectrosc. Radiat. Transfer, **15**, 979, 1975.
9. *М.С.Геворкян, Н.Б.Енгибарян, А.Г.Никогосян*, Астрофизика, **11**, 455, 1975.
10. *Г.А.Арутюнян*, Сообщ. Бюраканской обс., **52**, 137, 1980.
11. *П.К.Суетин*, Классические ортогональные многочлены, Наука, М., 1976.
12. *Г.А.Арутюнян*, Докл. АН СССР, **321**, 285, 1991.