VOIGT PROFILE 評価のための DAWSON 関数の近似式*

牧野忠男**・山本博聖***・関口宏之**

気球高度に於て光学的測定を行う場合は，しばしば下層大気の吸収を考慮しなければならない．線スペクトルの広がりを考慮した一般的な吸収，放射の線スペクトルの形は Voigt profile と呼ばれる．自然幅及び衝突による影響が少く，Doppler profile に近い場合に，Voigt profile は Doppler profile の近傍で展開され，数値評価される．この展開式を数値計算するためには Dawson 関数の数値評価が必要である．本論文では従来の近似式よりも少い労力で評価できる方法を述べる．

1. Introduction

気球によって大気光を測定する場合，その光が発光層より出発してどのような過程を経て観測器に入射するかを知らなければ発光層での様子が正しく把握できない．

即ち，地球大気内で放射輸送問題を解決する必要がある．この問題を解くには大気モデル，光と大気の相互作用を知らなければならない．相互作用の一つに大気分子の光に対する共鳴散乱がある．共鳴散乱を数値評価するには吸光の振動子強度のみならず，吸収線の拡がりを知る必要がある．この拡がりの原因は大気分子の熱運動によるドップラー幅，衝突による衝突幅，自然寿命による自然幅があるが，これらを全部考慮したものは Voigt profile と呼ばれる．地球大気では自然副は無視することができ，高度 30 km 以上ではドップラー幅のみの考慮でよいが 30 km 以下では衝突幅を考慮しなければならない．気球高度，20〜40 km，では一般に Voigt profile によって光の吸収，放出を処理しなければならない．

Voigt profile は Penner [*1*] のテキストによれば吸収係数を $P_{|\xi|}$ として次のように表わせる．

$$P_{|\xi|}=P'\left(\frac{a}{\pi}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{exp\,(-y^2)}{a^2+(\xi-y)^2}\,dy \tag{1}$$

ここで，

$$P'=\frac{S}{b_D}\sqrt{ln\ 2/\pi}\qquad S\,;\,line\ Strength$$

* 宇宙研特別事業費による研究論文

** 立教大学理学部

*** 東京大学理学部

$$a=\frac{(b_N+b_C)(ln\,2)^{\frac{1}{2}}}{b_D}$$

$$\xi=\frac{\omega-\omega_0}{b_D}\,(ln\,2)^{\frac{1}{2}}$$

b_D, b_N, 及び b_C はそれぞれ Doppler, Natural 及び衝突のみを考慮した吸収線の半値幅であり, ω_0 は中心の波数, ω は(1)式で評価しているところの波紋である.

Harris [2] によれば(1)は a が小さい場合に次のように展開される.

$$\frac{P_{|\xi|}}{P'}=H_0(\xi)+aH_1(\xi)+a^2H_2(\xi)+\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{2}$$

ここで,

$$H_0(\xi)=e^{-\xi^2}$$

$$H_1(\xi)=-\frac{2}{\sqrt{\pi}}[1-2\xi F(\xi)]$$

$$H_2(\xi)=(1-2\xi^2)e^{-\xi^2}$$

$$H_3(\xi)=-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left\{\frac{2}{3}(1-\xi^2)-2\xi\left[1-\frac{2}{3}\xi^2\right]F(\xi)\right\}$$

$$F(\xi)=exp(-\xi^2)\int_0^{\xi}exp(t^2)\,dt \tag{3}$$

$F(\xi)$ は Dawson 関数と呼ばれる. $F(\xi)$ は ξ が大きい場合に

$$F(\xi)=\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{1}{2}\right)_m}{\xi^{2m+1}},$$

$$(a)_n=a(a+1)\cdots\cdots(a+n-1),\ a_0=1$$

$0\leqq\xi\leqq5$ の場合は Hummer [3] によって Chebyshev の多項式で展開され,

$$F(\xi)=\sum_{m=0}^{\infty}a_n^*T_{2n+1}(\xi) \tag{4}$$

$T_i(\xi)$, i 次の Chebyshev 多項式

として求められる. a_n^* は $n=0$ より $n=33$ に対して与えられ, 全ての項を計算すれば14

桁の精度があり，7桁の精度のためには21項を必要とする.

ここではこの Hummer による近似式を，展開区間を二つに分けてより早く収束する近似式を与えるのが目的である.

2. 近似式及び結果

求める近似式の区間を $0 \leqq \xi \leqq 2$ 及び $2 \leqq \xi \leqq 4.5$ に分けて Chebyshev 補間の方法を用いる.

$$F(\xi)=\sum_{n=0}^{N} a_n T_n(\xi) \tag{5}$$

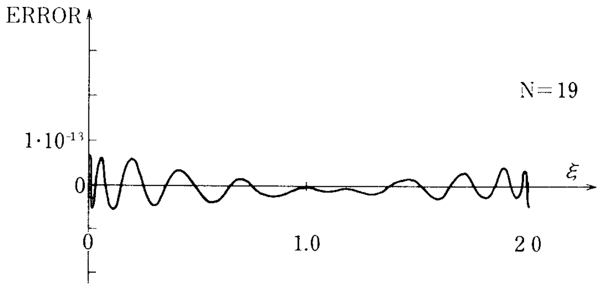
$$\left.\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{N+1}\sum_{m=1}^{N+1} F(x_m) \\ a_n &= \frac{2}{N+1}\sum_{m=1}^{N+1} F(x_m)\,T_n(x_m),\quad n=1,\ 2,\cdots\cdots,\ N \\ x_m &;\ T_{N+1}(x)=0 \text{ の根} \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

第1表　区間　$0 \leqq \xi \leqq 2$ に対する a_n

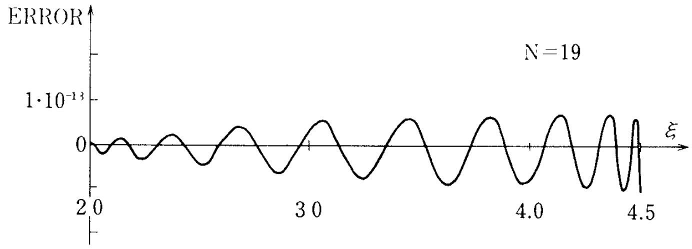
n	a_n $(0 \leqq \xi \leqq 2)$		
0	0.33410	68915	41372
1	0.10814	30780	14952
2	−0.19405	51918	71098
3	0.04896	71839	50789
4	0.01034	48037	30291
5	−0.00685	38094	81291
6	0.00034	52248	36293
7	0.00042	82469	25869
8	−0.00007	66110	48514
9	−0.00001	46807	49500
10	0.00000	53034	10806
11	0.00000	01645	16251
12	−0.00000	02333	63895
13	0.00000	00121	57425
14	0.00000	00073	95005
15	−0.00000	00009	08479
16	−0.00000	00001	71922
17	0.00000	00000	36956
18	0.00000	00000	02662
19	−0.00000	00000	01141

第2表　区間　$2.8 \leqq \xi \leqq 4.5$ に対する a_n

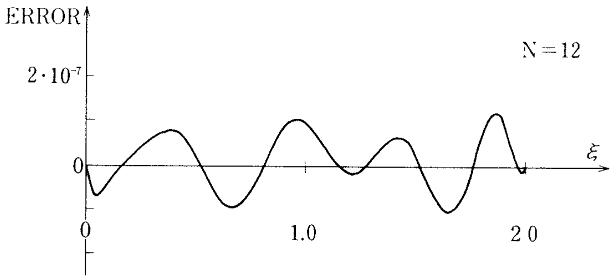
n	a_n $(2.0 \leqq \xi \leqq 4.5)$		
0	0.18374	47873	98508
1	−0.08747	68106	89971
2	0.02258	75669	95136
3	−0.00595	66878	03278
4	0.00140	91072	93735
5	−0.00022	25014	07285
6	−0.00001	55729	20111
7	0.00002	76403	02103
8	−0.00001	12296	21538
9	0.00000	25705	46993
10	−0.00000	02015	18092
11	−0.00000	00931	34437
12	0.00000	00420	90311
13	−0.00000	00075	49560
14	−0.00000	00000	52289
15	0.00000	00003	82432
16	−0.00000	00000	93079
17	0.00000	00000	05270
18	0.00000	00000	02684
19	−0.00000	00000	00796



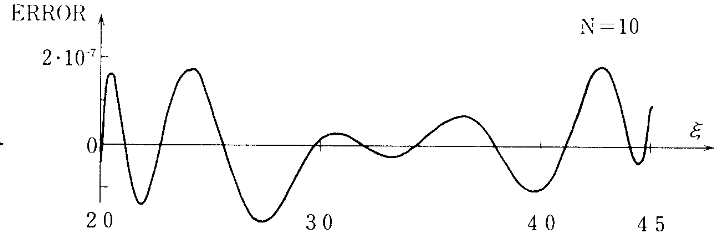
第 1 図



第 2 図



第 3 図



第 4 図

(6)によって与えられる係数は通常の Chebyshev 多項式による展開とは多少異なる値が得られるが実用上は十分に役に立つ場合が多い.

$N=19$ に対して区間 $0 \leqq \xi \leqq 2$ 及び区間 $2 \leqq \xi \leqq 4.5$ における a_n を小数16位で四捨五入したものを Table 1，2 に与えた．この値を使用したときの誤差を Hummer による値を真値として計算したものを第1，2図に示す．誤差は $\pm 1 \times 10^{-13}$ 以下である．有効数字7桁の計算機に対しては区間 $0 \leqq \xi \leqq 2$ 及び $2 \leqq \xi \leqq 4.5$ に対してそれぞれ $N=12$ 及び $N=10$ と採って a_n を8桁目を五捨五入して使用すれば小数位7桁目で誤差は ±2 程度に押えられている．(第3図，第4図)

区間をせばめれば収束が高まることは当然の結果であるが Hummer の場合，T_n の次数が同じ項数を採っても2倍になることも考え合わせ，このように区間を二分することにより計算時間は半減するので十分に利用価値があると思われる．

ここで求められた近似式を出発点として，いわゆる min − max 法(近似区間での最大誤差を最小にする法)で修正すれば誤差は更に小さくなるが，労力の割には効果は少いと思われ，このままで実用には十分であろう．

計算は Nova −01 を使用し，Chebyshev の多項式は漸化式を用いて計算した．

1977年6月7日

参考文献

[1] S. S. Penner, Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities, Addison-Wesley, Mass (1959).
[2] D. L. Harris III, Astrophys. J., **108**, 112 (1948).
[3] D. G. Hummer, Math. Comp., **18**, 317 (1964).