Вычисление фойгтовских ядерных функций

1. Определения ядерных функций. При теоретическом рассмотрении переноса излучения в спектральной линии в рамках определенных допущений (двухуровенный атом с континуумом, полное перераспределение по частоте, плоскопараллельная среда или однородный шар и др.) возникает необходимость решения уравнения (см., например, [1])

$$S(\tau) = S_0(\tau) + \frac{\lambda}{2}\int\limits_0^{\tau_0} K(|\tau-\tau'|,\beta)S(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{1}$$

Это уравнение называется основным интегральным уравнением теории переноса излучения в спектральной линии при полном перераспределении по частоте (ППЧ). Его ядро зависит от модуля разности аргументов, то есть фактически является функцией одной переменной (величина β закреплена). Эта функция называется ядерной и выражается через профиль коэффициента поглощения $\alpha(x)$, $\alpha(0)=1$, и отношение коэффициентов поглощения в континууме и центре линии β ([1], равенство (2.4.17)):

$$K(\tau,\beta) = A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha^2(x)\mathrm{d}x\int\limits_0^1 e^{-[\alpha(x)+\beta]\tau/\mu}\frac{\mathrm{d}\mu}{\mu}. \tag{2}$$

Через x обозначена безразмерная частота, а через τ — оптическое расстояние, то есть длина, измеряемая в единицах среднего свободного пробега фотона в центре линии. Величина A — постоянная нормировки профиля: $A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(x)\mathrm{d}x = 1.$

Одновременно с ядерной функцией в теории возникают и некоторые другие, связанные с ней. В частности, приходится рассматривать три следующие функции ((7.1) – (7.4) из [1]):

$$K_0(\tau,\beta) = A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha(x)\mathrm{d}x\int\limits_0^1 e^{-[\alpha(x)+\beta]\tau/\mu}\frac{d\mu}{\mu}, \tag{3}$$

$$L(\tau,\beta) = A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha^2(x)\mathrm{d}x}{\alpha(x)+\beta}\int\limits_0^1 e^{-[\alpha(x)+\beta]\tau/\mu}d\mu, \tag{4}$$

$$L_0(\tau,\beta) = A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha(x)\mathrm{d}x}{\alpha(x)+\beta}\int\limits_0^1 e^{-[\alpha(x)+\beta]\tau/\mu}\frac{d\mu}{\mu}. \tag{5}$$

Общее определение таких функций ($n\geq 1,\ l\geq 0$) можно записать по–разному

$$K_{nl}(\tau,\beta) = A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha^{l+1}(x)E_n(\tau[\alpha(x)+\beta])\frac{\mathrm{d}x}{[\alpha(x)+\beta]^{n-1}} = \tag{6}$$

$$= A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha^{l+1}(x)\mathrm{d}x}{[\alpha(x)+\beta]^{n-1}}\int\limits_0^1 e^{-[\alpha(x)+\beta]\tau/\mu}\mu^{n-2}\mathrm{d}\mu = A\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha^{l+1}(x)\mathrm{d}x}{[\alpha(x)+\beta]^{n-1}}\int\limits_1^{\infty} e^{-[\alpha(x)+\beta]\tau y}\frac{\mathrm{d}y}{y^n}$$

в зависимости от альтернативного представления интегральных экспонент:

$$E_n(\tau) = \int\limits_0^1 e^{-\tau/\mu}\mu^{n-2}\mathrm{d}\mu = \int\limits_1^{\infty} e^{-\tau y}\frac{\mathrm{d}y}{y^n}. \tag{7}$$

Ядерные функции можно выразить и через неполную гамма–функцию:

$$K_{n\,l}(\tau,\beta) = A\tau^{n-1}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha^{l+1}(x)\mathrm{d}x\Gamma(1-n,\tau[\alpha(x)+\beta]), \quad \Gamma(n,x) = \int\limits_x^{\infty} e^{-t}t^{n-1}\mathrm{d}t. \tag{8}$$

Увеличение первого индекса на 1 происходит при взятии интеграла по τ, а уменьшение при нахождении производной:

$$K'_{nl}(\tau,\beta) = -K_{n-1\,l}(\tau,\beta), \quad K_{nl}(\tau,\beta) = \int\limits_{\tau}^{\infty} K_{n-1\,l}(\tau',\beta)\mathrm{d}\tau'. \tag{9}$$

Второй индекс определяет независимые последовательности функций.

Все эти функции можно привести к виду суперпозиции (наложения, суммы) экспонент, то есть представить в форме

$$K_{nl}(\tau,\beta)=\int\limits_0^\infty A_l(y)e^{-\tau(y+\beta)}\frac{y\mathrm{d}y}{(y+\beta)^n}. \tag{10}$$

Весовые функции суперпозиций не зависят от β:

$$A_l(y)=\begin{cases} 2\dfrac{A}{y}\int\limits_{x(y)}^\infty \alpha^{l+1}(x)\mathrm{d}x \quad \text{при} \quad 0\le y\le 1,\\ 2\dfrac{A}{y}\int\limits_0^\infty \alpha^{l+1}(x)\mathrm{d}x \quad \text{при} \quad y\ge 1.\end{cases} \tag{11}$$

Здесь в нижнем пределе интеграла в первой строчке стоит функция, обратная по отношению к профилю поглощения, так что $\alpha(x(y))=y,\ x(\alpha(x))=x$.

Четыре функции (2) – (5) равны соответственно: $K(\tau,\beta)=K_{11}(\tau,\beta),\ K_0(\tau,\beta)=K_{10}(\tau,\beta),\ L(\tau,\beta)=K_{21}(\tau,\beta),\ L_0(\tau,\beta)=K_{20}(\tau,\beta)$.

Наряду с ядерными функциями в теории часто встречаются некоторые интегральные величины, так или иначе характеризующие излучение в линии. В частности, такими величинами являются моменты профиля поглощения.

2. Моменты профиля. Представляют интерес два типа таких моментов. Во–первых, это просто интегралы от степеней профиля ($l\ge 0$ не обязательно целое):

$$a_l=A\int\limits_{-\infty}^\infty \alpha^{l+1}(x)\mathrm{d}x, \quad a_0=1, \tag{12}$$

а также от произведения степеней профиля на логарифм

$$\tilde a_l=A\int\limits_{-\infty}^\infty \alpha^{l+1}(x)\ln\alpha(x)\mathrm{d}x=\frac{\mathrm{d}a_l}{\mathrm{d}l}. \tag{13}$$

Во–вторых, моменты могут содержать степени знаменателя, входящего в определение ядерных функций ($n\ge 1$), или его логарифм:

$$a_{n\,l}(\beta)=A\int\limits_{-\infty}^\infty \alpha^{l+1}(x)\frac{\mathrm{d}x}{[\alpha(x)+\beta]^n}, \tag{14}$$

$$\tilde a_l(\beta)=A\int\limits_{-\infty}^\infty \alpha^{l+1}(x)\ln(\alpha(x)+\beta)\mathrm{d}x. \tag{15}$$

Очевидно, что $a_{n\,l}(0)=a_{l-n},\ a_{0\,l}(\beta)=a_{0\,l}(0)=a_l,\ \tilde a_l(0)=\tilde a_l$. При больших β асимптотическое поведение моментов отражается формулами $a_{n\,l}(\beta)\sim a_l/\beta^n,\ \tilde a_l(\beta)\sim a_l\ln\beta$. Справедливы также соотношения $a'_{n\,l}(\beta)=-na_{n+1\,l}(\beta)$, $\tilde a'_l(\beta)=a_{1l}(\beta)$.

Специальные обозначения применяются для величин $a_{1\,0}(\beta)=\delta(\beta)$ и $\Delta(\beta)=\beta\delta(\beta)$ (это не функция Дирака и не оператор Лапласа, которые здесь не встретятся). Через $\delta(\beta)$ выражаются другие моменты. Действительно, для каждого l моменты с целым n могут быть представлены как производные или интегралы от момента с первым индексом 1:

$$a_{n\,l}(\beta)=\frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!}a_{1\,l}^{(n-1)}(\beta),\ \tilde a_l(\beta)=\tilde a_l(0)+\int\limits_0^\beta a_{1\,l}(\beta')\mathrm{d}\beta'. \tag{16}$$

В свою очередь моменты с целым индексом l и $n=1$ выражаются через моменты профиля, функцию $\delta(\beta)$ и степени β:

$$a_{1\,l}(\beta)=\sum_{m=0}^{l-1}(-1)^m a_{l-m-1}\beta^m+(-1)^l\beta^l\delta(\beta). \tag{17}$$

3. Вспомогательные функции. В явные выражения для ядерных функций (2)–(5) и (6) входят интегрально–показательные функции. Их расчет при не очень больших значениях аргумента можно производить при помощи рядов. В общем случае индекса ($n \neq 1, 2, 3, ...$):

$$E_n(\tau) = \tau^{n-1}\Gamma(1-n) - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \tau^m}{m!(m+1-n)}. \tag{18}$$

При натуральных n надо произвести предельный переход, что дает

$$E_n(\tau) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}\tau^m}{m!} \left[\frac{1-\delta_{m,n-1}}{m+1-n} - \left(\ln\frac{1}{\tau} - C_{\mathrm{E}} + \sum_{k=1}^{n-1}\frac{1}{k} \right) \delta_{m,n-1} \right]. \tag{19}$$

Здесь $C_{\mathrm{E}} = 0.5772156649015325$ — постоянная Эйлера, а пустая сумма, то есть сумма при верхнем пределе суммирования, меньшем нижнего (эта сумма возникает при $n = 1$), считается равной нулю. Через $\delta_{n,m}$ (с запятой между индексами) обозначен обычный символ Кронеккера. Два слагаемых в квадратных скобках альтернативны: первое принимается во внимание при всех $m \neq n-1$, а второе, напротив, — только при $m = n-1$.

Очевидно, что интегрально–показательная функция целого порядка $n = 1, 2, ...$ имеет при $\tau = 0$ разрыв в производной порядка на единицу меньшего. В частности, функция $E_1(\tau)$ сама при $\tau \to 0$ стремится к бесконечности, как $-\ln\tau$. Ряды (18) и (19) сходятся при всех значениях аргумента, так как радиус сходимости их из–за наличия в знаменателе факториала равен бесконечности. Отметим еще значения функций в нуле: $E_n(0) = 1/(n-1),\ n > 1$.

При больших аргументах удобно использовать разложение этих функций в непрерывные дроби.

Непрерывные, или цепные, дроби вычисляются итеративно, при помощи рекуррентных соотношений. Если цепная дробь имеет вид

$$R = a_0 + \cfrac{b_1}{a_1 + \cfrac{b_2}{a_2 + \cfrac{b_3}{a_3 + \cfrac{b_4}{a_4 + \ldots}}}}, \tag{20}$$

то надо положить $P_{-1} = 1,\ Q_{-1} = 0,\ P_0 = a_0,\ Q_0 = 1$ и вычислить две последовательности

$$P_n = a_n P_{n-1} + b_n P_{n-2},\ Q_n = a_n Q_{n-1} + b_n Q_{n-2}. \tag{21}$$

Тогда

$$R = \lim_{n\to\infty} \frac{P_n}{Q_n}. \tag{22}$$

Для функции $E_n(\tau)$ надо принять $a_0 = 0, a_1 = \tau, a_{2m} = 1, a_{2m+1} = \tau, b_1 = 1, b_{2m} = n+m-1, b_{2m+1} = m, m = 1, 2, 3...$.

Наконец, при очень больших аргументах возможно использование асимптотического разложения

$$E_n(\tau) \sim \frac{e^{-\tau}}{\tau} \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\Gamma(n+m)}{\tau^m}. \tag{23}$$

Нам понадобится еще одна специальная функция, а именно функция ошибок. Мы здесь введем связанную с ней функцию, которую можно выразить через интегральную экспоненту:

$$\Phi(x) = e^{x^2} \int_x^{\infty} e^{-z^2} \mathrm{d}z = \frac{x}{2} e^{x^2} \int_1^{\infty} e^{-x^2 y} \frac{\mathrm{d}y}{y^{1/2}} = \frac{x}{2} e^{x^2} E_{1/2}(x^2). \tag{24}$$

Тем самым эта функция вычисляется так же, как и $E_n(\tau)$. Для нее нет проблемы целого индекса при разложении в ряд, а в цепной дроби $a_{2n} = 1-\delta_{n,0},\ b_{2n} = (2n-1)/2,\ a_{2n+1} = x^2,\ b_{2n+1} = n+\delta_{n,0}$. Асимптотическое разложение этой функции при $x \gg 1$ легко получается из (24) и (23):

$$\Phi(x) \sim \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(2m-1)!!}{2^{m+1} x^{2m+1}}. \tag{25}$$

4. Связь моментов с ядерными функциями. Введенные в пункте 2 моменты связаны с ядерными функциями. Так, моменты самих ядерных функций, то есть интегралы по всей оптической глубине с весовыми множителями τ^m, и значения функций в нуле

$$\int\limits_0^\infty \tau^m K_{n\,l}(\tau,\beta)\mathrm{d}\tau = K_{n+m+1\,l}(0,\beta) = \frac{a_{n+m\,l}(\beta)}{n+m}, \quad n+m>0. \tag{26}$$

Моментам пропорциональна и часть весовых функций, определяемая во второй строчке равенства (11): $A_l(y) = a_l/y$ при $y \geq 1$. Эти моменты также появляются явно в выражениях для ядерных функций, если выделить упомянутую часть весовой функции:

$$K_{n\,l}(\tau,\beta) = e^{-\tau\beta}\int\limits_0^1 e^{-\tau y}\frac{y\mathrm{d}y}{(y+\beta)^n}A_l(y) + \frac{a_l}{(1+\beta)^{n-1}}E_n((1+\beta)\tau)). \tag{27}$$

Сами моменты выражаются через функции $A_l(y)$, что следует из формул (26) и (10):

$$a_{n\,l}(\beta) = nK_{n+1\,l}(0,\beta) = n\int\limits_0^\infty A_l(y)\frac{y\mathrm{d}y}{(y+\beta)^n}. \tag{28}$$

Наконец, моменты возникают при разложении ядерных функций в ряды по степеням τ, которые порождаются разложениями в ряды интегральных экспонент (18) и (19). В случае целых n, которые нам только и понадобятся, получается

$$K_{n\,l}(\tau,\beta) = \sum_{m=0}^{n-2}\frac{(-1)^m}{n-1-m}\frac{\tau^m}{m!}a_{n-1-m\,l}(\beta) + (-1)^{n-1}\left[\left(\ln\frac{1}{\tau} - C + \sum_{k=1}^{n-1}\frac{1}{k}\right)a_l - \tilde{a}_l(\beta)\right]\frac{\tau^{n-1}}{(n-1)!} +$$
$$+\sum_{m=n}^{\infty}\frac{(-1)^{m-1}}{m+1-n}\frac{\tau^m}{m!}a_{-(m+1-n)\,l}(\beta). \tag{29}$$

Зависящие от β моменты с отрицательными первыми индексами, стоящие в последней сумме, всегда выражаются через суммы произведений моментов профиля поглощения и степеней β.

Приведем разложения в ряды четырех основных ядерных функций:

$$K(\tau,\beta) = -a_1(\ln\tau + C) - \tilde{a}_1(\beta) + \sum_{j=0}^\infty c_j^{\mathrm{S}}(\beta)\tau^{j+1}, \tag{30}$$

$$K_0(\tau,\beta) = -(\ln\tau + C) - \tilde{a}_0(\beta) + \sum_{j=0}^\infty c_j^{\mathrm{E}}(\beta)\tau^{j+1}, \tag{31}$$

$$L(\tau,\beta) = 1 - \beta\delta(\beta) + [a_1(\ln\tau + C - 1) + \tilde{a}_1(\beta)]\tau - \sum_{j=0}^\infty c_j^{\mathrm{S}}(\beta)\frac{\tau^{j+2}}{j+2}, \tag{32}$$

$$L_0(\tau,\beta) = \delta(\beta) + [\ln\tau + C - 1 + \tilde{a}_0(\beta)]\tau - \sum_{j=0}^\infty c_j^{\mathrm{E}}(\beta)\frac{\tau^{j+2}}{j+2}. \tag{33}$$

Коэффициенты c_j^{S} и c_j^{E}, как говорилось выше, выражаются через моменты поглощения и степени β:

$$c_j^{\mathrm{E}}(\beta) = \frac{(-1)^j}{j+1}\sum_{m=0}^{j+1}a_{j+1-m}\frac{\beta^m}{m!(j+1-m)!},\; c_j^{\mathrm{S}}(\beta) = \frac{(-1)^j}{j+1}\sum_{m=0}^{j+1}a_{j+2-m}\frac{\beta^m}{m!(j+1-m)!}. \tag{34}$$

Как и у интегральных экспонент, производная ядерной функции $K_{n\,l}(\tau,\beta)$ порядка $n-1$ бесконечна при $\tau = 0$. В частности, бесконечны значения $K(0,\beta)$ и $K_0(0,\beta)$. Поэтому вместо указанных значений мы вычисляем пределы комбинаций $K(\tau,\beta) + a_1\ln\tau$ и $K_0(\tau,\beta) + \ln\tau$ при $\tau \to 0$, которые конечны.

Момент $\delta(\beta)$, а вместе с ним и функция $L_0(\tau,\beta)$ стремятся к бесконечности при $\beta \to 0$. Поэтому при $\beta = 0$ целесообразно вычислять предел

$$\tilde{L}_0(\tau,0) = \lim_{\beta\to 0}[L_0(\tau,\beta) - \delta(\beta)]. \tag{35}$$

В связи с этим и при $\beta > 0$ мы для единообразия будем, как правило, находить конечную разность $\tilde{L}_0(\tau,\beta) = L_0(\tau,\beta) - \delta(\beta)$, а величину $\delta(\beta)$ получать отдельно. Новая функция обращается в нуль в нуле, $\tilde{L}_0(0,\beta) = 0$, и убывает до $-\delta(\beta)$ (и, следовательно, до $-\infty$, когда $\beta = 0$) при $\tau \to \infty$. Поэтому при больших τ и малых β целесообразно находить отдельно большое слагаемое этой функции и его дополнение.

Далее мы рассмотрим случай фойгтовского профиля и дадим способ вычисления ядерных функций, позволяющий достичь практически произвольной желаемой точности.

5. Фойгтовский профиль. Для этого профиля

$$\alpha(x) = \frac{U(a,x}{U(a,0)},\ A = U(a,0), \tag{36}$$

где функция Фойгта

$$U(a,x) = \frac{a}{\pi^{3/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}\mathrm{d}y}{(x-y)^2 + a^2}. \tag{37}$$

Постоянную нормировки можно выразить через функцию ошибок:

$$U(a,0) = \frac{2}{\pi} e^{a^2} \int\limits_{a}^{\infty} e^{-u^2}\mathrm{d}u = \frac{2}{\pi}\Phi(a). \tag{38}$$

Для функции Фойгта справедливо асимптотическое разложение

$$U(a,x) = \frac{a}{\pi x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)!}{x^{2n}} \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k a^{2n}}{(2k+1)!(n-k)!2^{2(n-k)}}, \tag{39}$$

если параметр a не очень близок к нулю. Впредь ограничимся значениями $a \geq 0.001$.

Только два момента профиля вычисляются аналитически. Очевидно, что нулевой равен 1. Аналитически можно вычислить также первый момент. Он выражается через функцию ошибок:

$$a_1 = A \int\limits_{-\infty}^{\infty} \alpha^2(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{U(a,0)} \int\limits_{-\infty}^{\infty} U^2(a,x)\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{2}}{\pi U(a,0)}\Phi(a\sqrt{2}). \tag{40}$$

Остальные моменты приходится вычислять численно.

В качестве квадратурной формулы для вычисления моментов можно применять формулу Симпсона. При этом можно использовать таблицу значений функции Фойгта в точках частоты $x = 0(h_1)5(h_2)10$, затем сделать замену $x = 10e^t,\ t = 0(h_3)t_0$, после чего достаточно в асимптотике (39) оставлять одно–два слагаемых (в зависимости от требуемой точности). В случае оставления одного слагаемого различные интегралы с нижним пределом $10e^{t_0}$ и верхним ∞ берутся аналитически. Шаги h_1, h_2, h_3, а также граничное значение t_0 выбираются также в зависимости от желаемой точности расчетов.

Приведем расчетную формулу для величины $\delta(\beta)$:

$$\delta(\beta) = 2U(a,0)\left[\int\limits_{0}^{10} \frac{U(a,x)\mathrm{d}x}{U(a,x) + \beta U(a,0)} + 10\int\limits_{0}^{t_0} \frac{U(a,10e^t)e^t\mathrm{d}t}{U(a,10e^t) + \beta U(a,0)} + \right.$$
$$\left. + \sqrt{\frac{a}{\beta U(a,0)}}\,\mathrm{arctg}\,\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\beta U(a,0)}10e^{t_0}}\right]. \tag{41}$$

Формула для момента с логарифмом аналогична (41).

Момент $\delta(\beta)$ всегда положителен и монотонно возрастает с уменьшением β. Моменты с тильдами меняют знаки с минуса при малых β на плюс, обращаясь в ноль при некотором β каждый: $\tilde{a}_l(\beta_l) = 0$. В таблице приводятся значения величин β_n для ряда значений параметра a.

Нам понадобится еще момент, который назовем частичным, или неполным:

$$\delta(\beta,x) = 2U(a,0)\int\limits_{0}^{x} \frac{U(a,x)\mathrm{d}x'}{U(a,x) + \beta U(a,0)} = \delta(\beta) - \Delta(\beta,x), \tag{42}$$

где

$$\Delta(\beta,x) = 2U(a,0)\int\limits_{x}^{\infty} \frac{U(a,x)\mathrm{d}x'}{U(a,x) + \beta U(a,0)}. \tag{43}$$

Вычисления интегралов ведем по тем же точкам, что и выше. Можно использовать также численное неопределенное интегрирование.

6. Фойгтовские ядерные функции. В случае фойгтовского профиля функция, обратная профилю поглощения, $x(y)$, может быть найдена только таблично. Однако в таком обращении функции нет необходимости, все интегралы вычисляем интегрированием по частоте. Две весовых функции находим численным неопределенным интегрированием. Таким образом, общие представления ядерных функций в виде суперпозиции экспонент (10) для фойгтовского профиля переходят в

Литература

1. В.В.Иванов. Перенос излучения и спектры небесных тел. Наука, М., 1969.