

# Voigt 线型及其精确快速算法

向安平 朱世德 任基

(成都气象学院基础科学系, 四川, 成都, 610041)

**摘要** 通过把上半复平面分为4个区,并在每一区利用不同近似,建立了一种精确快速计算Voigt函数、修正的Voigt函数和Voigt函数偏导数的算法,其最大相对误差小于 $5 \times 10^{-4}$ .该算法是Line-by-Line大气透过率/辐射强度计算及其相关应用的有效算法.

**关键词** Voigt函数,修正的Voigt函数,复误差函数.

## 引言

在卫星气象、气候模式、大气和空间遥感等领域,通常采用Voigt线型作为分子光谱线型,由于一些气体分子(如 $\text{CO}_2$ )光谱线的耦合对谱线线型的影响<sup>[1~4]</sup>,其线型是修正的Voigt线型.

Voigt线型和修正的Voigt线型都无解析解,因而只能用数值计算.文献[5~8]概述了Voigt函数数值计算的各种方法和数表.并进行了分析和比较.其中,Armstrong<sup>[5]</sup>方法有很高的精度,但非常耗时;而文献[9~12]的算法具有较高的精度和较快的运算速度,但这些算法都是在大中型计算机上进行的,而在微机上其精度可能不能保证.

在现代高精度、高光谱分辨的大气和空间遥感中,大气透过率/辐射强度的精确快速计算一直是研究的方向<sup>[13~14]</sup>,而且,对于一些通道必须考虑<sup>[15~16]</sup>线耦合效应对线型的影响.为此,本文提出一种能精确快速计算Voigt函数和修正的Voigt函数及Voigt函数的偏导数的算法.

## 1 基本理论

Voigt线型在数学上可表示为Lorentz线型

$$f_L(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha_L}{\alpha_L^2 + (\nu - \nu_0)^2} \quad (1)$$

与Doppler线型

$$f_D(\nu) = \frac{1}{\alpha_D} \left( \frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[ -\ln 2 \left( \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D} \right)^2 \right] \quad (2)$$

的卷积,即

$$f_v(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_L(v-v') f_D(v') dv'. \quad (3)$$

在式(1)和(2)中,  $\alpha_L$  是 Lorentz 半宽,  $\alpha_D$  是 Doppler 半宽,  $v$  是辐射频率,  $v_0$  是跃迁频率. 令

$$x = \frac{v-v_0}{\alpha_D} (\ln 2)^{1/2}, \quad (4)$$

$$y = \frac{\alpha_L}{\alpha_D} (\ln 2)^{1/2}; \quad (5)$$

则由式(1)、(2)、(4)和(5),式(3)可表示为

$$f_v = \frac{1}{\alpha_D} \left( \frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} K(x, y), \quad (6)$$

$$K(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt. \quad (7)$$

通常把式(7)表示的函数  $K(x, y)$  称为 Voigt 函数.

当考虑分子光谱线耦合(或混和)时,碰撞增宽线型将偏离 Lorentz 线型<sup>[1~4]</sup>. 在一级近似下,这种效应可用修正的 Lorentz 线型表示为

$$f'_L(v) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha_L + Y(v-v_0)}{\alpha_L^2 + (v-v_0)^2}, \quad (8)$$

式(8)中,  $Y$  为线耦合系数. 修正的 Lorentz 线型与 Doppler 线型的卷积给出修正的 Voigt 线型,即

$$f'_v = \frac{1}{\alpha_D} \left( \frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} [K(x, y) + YL(x, y)], \quad (9)$$

式(9)中,  $K(x, y)$  即式(7)表示的 Voigt 函数,  $L(x, y)$  为

$$L(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(x-t)e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt \quad (10)$$

函数.

$$K'(x, y) = K(x, y) + YL(x, y) \quad (11)$$

称为修正的 Voigt 函数.

引入复变量  $z = x + iy$  和复函数

$$W(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{z-t} dt, \quad (12)$$

容易验证下面的关系

$$K(x, y) = \text{Re}[W(z)], \quad (13)$$

$$L(x, y) = \text{Im}[W(z)], \quad (14)$$

即  $K(x, y)$  和  $L(x, y)$  分别是复函数  $W(z)$  的实部与虚部<sup>[5]</sup>.

如果进一步引入复函数  $W'(z)$ , 并使之满足条件

$$W'(z) = \begin{cases} W(z), & y > 0 \\ W(z) + 2e^{-z^2}, & y < 0 \end{cases} \quad (15)$$

则  $W'(z)$  正好是 Faddeeva et al.<sup>[17]</sup> 最先引入的复误差函数, 其定义为

$$W'(z) = e^{-z^2} [1 - \operatorname{erf}(-iz)]. \quad (16)$$

式(16)中, 误差函数,  $\operatorname{erf}(-iz)$  为

$$\operatorname{erf}(-iz) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{-iz} e^{-t^2} dt. \quad (17)$$

由于  $y > 0$ , 故  $K(x, y)$  和  $L(x, y)$  亦可分别表示为复误差函数  $W'(z)$  的实部与虚部, 即

$$K(x, y) = \operatorname{Re}[W'(z)], \quad (18)$$

$$L(x, y) = \operatorname{Im}[W'(z)]. \quad (19)$$

用非线性最小平方拟合法反演分子光谱参数时, 需要计算 Voigt 函数及其偏导数<sup>[18]</sup>, Brown et al.<sup>[19]</sup> 的研究表明, Voigt 函数偏导数的计算是困难而且耗时的. 容易证明,  $W'(z)$  满足 Cauchy-Riemann 条件, 且满足微分方程

$$[W'(z)]' = \frac{2i}{\sqrt{\pi}} - 2zW'(z). \quad (20)$$

利用式(7)、(10)、(16)、(18)和(20)容易证明

$$\begin{aligned} \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} &= -2[xK(x, y) - yL(x, y)] \\ &= -2\operatorname{Re}[ZW'(z)], \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial K(x, y)}{\partial y} &= 2[yK(x, y) + xL(x, y)] - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \\ &= 2\operatorname{Im}[zW'(z)] - \frac{2}{\sqrt{\pi}}. \end{aligned} \quad (22)$$

由上述关系式, 不仅可以方便地表示 Voigt 函数和修正的 Voigt 函数, 而且实现了简便表示 Voigt 函数的偏导数.

## 2 算法

公式(7)、(11)、(16)、(18)、(19)、(21)和(22)构成了计算 Voigt 函数、修正的 Voigt 函数和 Voigt 函数偏导数的基本公式. 显然, 计算的核心是  $K(x, y)$  和  $L(x, y)$ , 这可由计算复

误差函数  $W'(z)$  同时实现.

计算 Voigt 函数的简单直接方法是把  $\operatorname{erf}(-iz)$  展示为 Taylor 级数

$$\operatorname{erf}(-iz) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)n!} (-iz)^{2n+1}, \quad (23)$$

由于

$$e^{-z^2} = e^{-(x^2-y^2)} [\cos(2xy) - i \sin(2xy)], \quad (24)$$

故由式(16)、(23)和(24),即可计算  $W'(z)$ . 除了较小的  $|x|$ 、 $y$  值外,这种级数展开法是无效的,因为涉及大数,很容易使计算机产生溢出,且级数收敛的速度随  $|x|$ 、 $y$  值的增加而快速下降. 大量的数值试验表明,只用一个函数来近似  $W'(z)$ ,不可能保持高精度和高速度. 为此把复平面  $z=x+iy$  分解为几个区,并分别应用不同的近似.

根据我们的大量数值试验和 Drayson<sup>[9]</sup>、Pierluissi et al.<sup>[12]</sup>等的研究,我们提出了一个新的分区方案,把上半复平面分为 4 个区(见图 1). 这一分区方案可用 FORTRAN 语句表示为

区 I:利用式(16)、(23)和(24)构成的级数展开法计算  $W'(z)$ . 为了加速程序的运行,程序中不应设置对级数式(23)的收敛性检验. 求和的项数强烈地依赖于  $|x|$  和  $y$ ,随  $|x|$  和  $y$  的增大其项数非单调地增加,可根据预期的精度事先由经验确定.

区 II、III:分别采用 6 点和 2 点 Gauss-Hermite 近似. Gauss-Hermite 求积公式为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k), \quad (25)$$

式(25)中,  $x_k$  为  $n$  次 Hermite 多项式的根,  $A_k$  为权重系数. 用式(25)近似式(12),有

$$W'(z) \approx \sum_{k=1}^n \frac{i}{\pi} \left[ \frac{A_k}{z-x_k} \right]. \quad (26)$$

Gauss-Hermite 近似的精度依赖于  $|x|$ 、 $y$  的大小和展开项数.

区 IV:由于  $y$  很小 ( $<10^{-3}$ ),在该区利用上述级数展开法能获得高的精度和速度,而且其精度和速度均高于区 I 的精度和速度. 实际上,如果只需要计算 Voigt 函数,那么在该区利用 Doppler 近似

$$K(x, y) = e^{-x^2} \quad (27)$$

更为有效,而且其速度高于级数展开法的速度. 但是,用 Doppler 近似不能获得复误差函数的虚部,因而不能计算 Voigt 函数和 Voigt 函数的偏导数以及修正的 Voigt 函数.

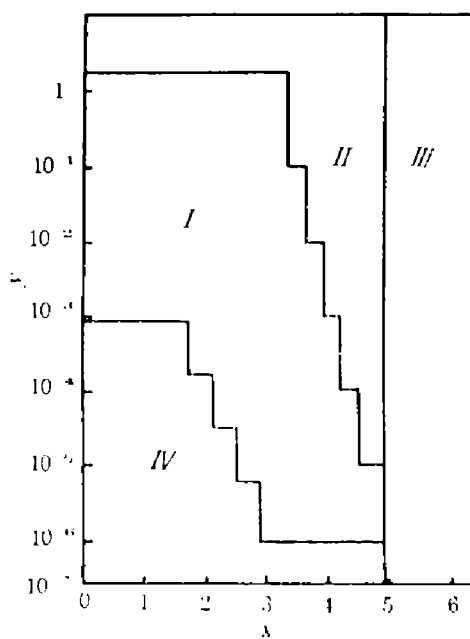


图 1 复平面分区

Fig. 1 Divided regions of complex plane

### 3 算法的精度与速度

利用上述算法,我们计算了  $K(x,y)$  和  $L(x,y)$ ,其结果分别如图 2 和图 3 所示. Armstrong<sup>[6]</sup>算法的  $K_A(x,y)$  的最大的相对误差为  $4 \times 10^{-5}$ ,它作为我们误差比较的标准. 本算法的相对误差  $\sigma = |K(x,y) - K_A(x,y)| / K_A(x,y)$  如图 4 所示. 本算法及文献[9-12]的几种典型算法的最大相对误差分别为  $5 \times 10^{-4}$ 、 $5 \times 10^{-4}$ 、 $2 \times 10^{-4}$ 、 $2 \times 10^{-5}$  和  $3 \times 10^{-3}$ ;其耗时分别为 5.00、5.06、5.00、6.12 和 5.075s.

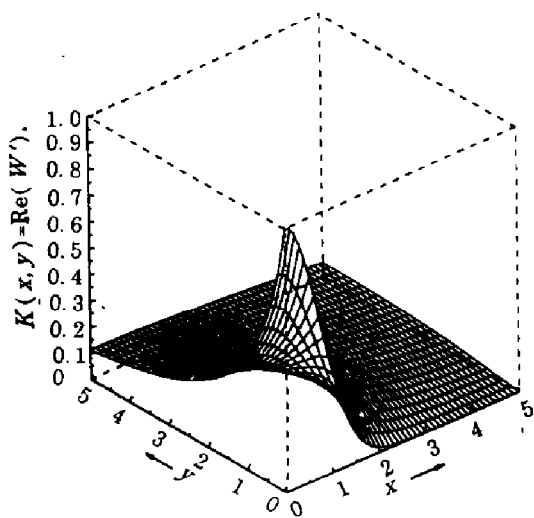


图 2 Voigt 函数  $K(x,y) = \text{Re}[W'(z)]$

Fig. 2 Voigt function  $K(x,y) = \text{Re}[W'(z)]$

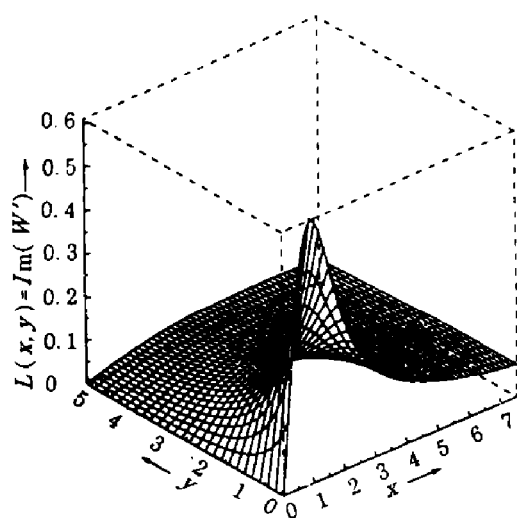


图 3 复误差函数虚部  $L(x,y) = \text{Im}[W'(z)]$

Fig. 3 Imaginary part of complex error function

$L(x,y) = \text{Im}[W'(z)]$

### 4 结语

本文列出的 Voigt 函数、修正的 Voigt 函数和 Voigt 函数偏导数同复函数  $W(z)$  及复误差函数  $W'(z)$  的关系是普遍适用的,在此基础上我们提出了同时计算 Voigt 函数、修正的 Voigt 函数和 Voigt 函数偏导数的算法.

由图 3 可见,当线耦合系数  $Y$  不为零时,修正的 Voigt 函数对 Voigt 函数的偏离是明显的. 引入线型修正因子为<sup>[1-2]</sup>

$$\chi = \frac{K'(x,y)}{K(x,y)} = 1 + Y \frac{L(x,y)}{K(x,y)}, \quad (28)$$

可定量揭示  $K'(x,y)$  对  $K(x,y)$  的偏离.

由图 4 可知,本算法是有效的,其精度 ( $5 \times 10^{-4}$ ) 已可满足大多数应用的要求.

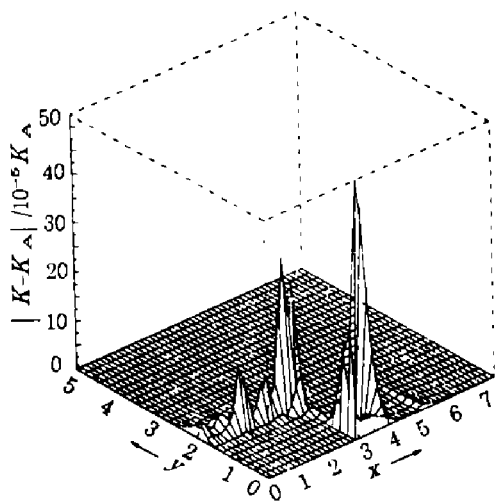


图 4 Voigt 函数的相对误差

Fig. 4 Relative errors of Voigt function

在非热力学平衡(NLTE)条件下,本算法已成功地用于大气 Line-by-Line 透过率/辐射强度模式(NLTECODE)的计算.

### 参考文献

- 1 Doucen R L, et al. *Appl. Opt.*, 1985, **24**(6):897
- 2 Cousin C, et al. *Appl. Opt.*, 1985, **24**(22):3899
- 3 Hartmann J M, et al. *J. Chem. phys.*, 1991, **94**(10):6406
- 4 Strow L L. *Line Mixing in Infrared Atmospheric Spectra*, in *SPIE*, 1988, **928**:194
- 5 Armstrong B H. *JQSRT*, 1976, **7**:61
- 6 Armstrong B H, et al. *Emission, Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmosphere*, pergamon press, Oxford, 1972, 215
- 7 Twitty J T, et al. *JQSRT*, 1980, **24**:529
- 8 Klim A. *JQSRT*, 1981, **26**:5378
- 9 Drayson S R. *JQSRT*, 1976, **16**:611
- 10 Humlicek J. *JQSRT*, 1979, **21**:309, 1982, **27**:437
- 11 Hui A K, et al. *JQSRT*, 1978, **19**:509
- 12 Pierluissi J H, et al. *JQSRT*, 1977, **18**:555
- 13 Clough S A, et al. *Atmospheric Radiance and Transmittance: FASCOD2*, in *proceedings, Sixth Conference on Atmospheric Radiation, Williamsburg VA, American Meteorological Society*, 1986:287~304
- 14 Edqards D P. *Atmospheric Transmittance and Radiance Calculations Using Line-by-Line Computer Models*, in: *SPIE*, 1988, **928**:94
- 15 Strow L L, et al. *Appl. Opt.*, 1988, **27**:872
- 16 Edwards D P, et al. *J. Geophys. Res.*, 1991, **96**(D11):20859
- 17 Faddyeva V N, et al. *Tables of the Probability Integral for Complex Argument*, pergamon press, Oxford, 1961, 1
- 18 Press W H, et al. *Numerical Recipes*, Cambridge University press, Cambridge, 1986, 150
- 19 Brown L R, et al. *Appl. Spectrosc.*, 1983, **37**:287

## THE VOIGT LINE SHAPE AND ITS ACCURATE AND FAST ALGORITHM

Xiang Anping Zhu Shide Ren Ji

*(Department of Basic Sciences, Chengdu Institute of Meteorology,  
Chengdu, Sichuan 610041, China)*

**Abstract** The Voigt function, the modified Voigt function and its partial derivatives are presented by introducing the complex error function. By dividing the complex plane into four regions and using different approximations for each region, an accurate and fast algorithm is developed to evaluate the Voigt function, the modified Voigt function and its partial derivatives. Its maximum relative error is less than  $5 \times 10^{-4}$ . It is an efficient algorithm for calculating the line-by-line atmospheric transmittance/radiance and its related applications.

**Key words** Voigt function, modified Voigt function, complex error function