

19  
2 ej.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Modelaje de Líneas Espectrales con Perfiles de Voigt

Tesis que como requisito parcial para obtener

el título de Matemático

presenta

Luis Artemio Martínez Vazquez

Noviembre de 1992.





Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## INDICE

<b>Introducción.</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo 1.</b> <i>Antecedentes.</i>	<b>3</b>
<b>Capítulo 2.</b> <i>La Función de Voigt.</i>	<b>7</b>
<b>Capítulo 3.</b> <i>Cálculo Numérico de la Función de Voigt.</i>	<b>13</b>
<b>Capítulo 4.</b> <i>Comparación de Ajustes de Líneas Espectrales.</i>	<b>24</b>
<b>Apéndice A.</b> <i>La Función de Dawson.</i>	<b>33</b>
<b>Apéndice B.</b> <i>El Código que genera la Función de Voigt.</i>	<b>35</b>
<b>Bibliografía.</b>	<b>39</b>

## INTRODUCCION

En una gran variedad de investigaciones relacionadas con el transporte de radiación a través de gases, en Astrofísica estelar como en la alta atmósfera terrestre, aparece un perfil muy particular de las líneas espectrales llamado *perfil de Voigt*, primeramente estudiado por W. Voigt (1912). Este perfil resulta de la superposición independiente de los ensachamientos natural y térmico. Esta misma función matemática es de interés para otras áreas tales como ondas de plasmas y acústica, aunque con diferente significado físico.

La luz es prácticamente el único medio que tiene el astrónomo para conocer el universo que le rodea. Una de las técnicas con que se cuenta en la actualidad para analizar la luz proveniente de las estrellas es la espectroscopia; que se inicia en 1814 cuando J. Fraunhofer descubre unas líneas oscuras en el espectro del Sol y cobra importancia en 1859 con el trabajo de G. Kirchhoff y R. Bunsen quienes explican el origen de las líneas descubiertas por Fraunhofer. El análisis de los espectros juega un papel central en la Astrofísica y dentro de ésta, en particular el análisis detallado del perfil de las líneas espectrales constituye una fuente de información sobre la estructura, efectos físicos y geométricos presentes en las zonas de formación de éstas.

Actualmente hay *software* muy especializado para analizar los espectros, que si bien en algunos aspectos es bastante sofisticado y permite obtener información valiosa, en otros no lo es. Tal es el caso del ajuste que se hace de los perfiles de las líneas espectrales con gaussianas. El defecto de este tipo de ajustes es que en algunos casos el perfil no se puede aproximar bien de esta manera, pues en las alas de las líneas es bastante deficiente, aunque es útil en las partes centrales.

La función de Voigt ha sido ampliamente estudiada, particularmente por personas dedicadas principalmente al estudio de fenómenos de transporte de radiación en la atmósfera terrestre, quienes han propuesto varios desarrollos en series, expansiones asintóticas, etc.; que facilitan el cálculo de la función. El propósito de esta tesis es hacer un estudio de algoritmos numéricos desarrollados previamente, proponer uno para el cálculo de la función y explorar la posibilidad de utilizarla en vez de una gaussiana, en el ajuste de los perfiles de líneas espectrales. Este estudio se hizo mediante la comparación de los resultados obtenidos con códigos hechos para tal fin.

Ya se han explorado desde un punto de vista teórico las posibilidades que ofrece el Análisis de Fourier en el estudio de perfiles de líneas espectrales y desarrollado los códigos numéricos necesarios para realizar dicho estudio (Aguilar 1980). Sin embargo no se ha explorado la viabilidad de la aplicación directa del perfil de Voigt a las líneas espectrales, al momento del análisis de los espectros estelares.

En el Capítulo 1 se hace una revisión del ajuste de gaussianas a las líneas espectrales y la justificación de la posibilidad de utilizar la función de Voigt en vez de gaussianas.

En el Capítulo 2 se presenta la obtención de la función de Voigt.

En el Capítulo 3 se describen brevemente los algoritmos numéricos estudiados y se presentan los resultados obtenidos.

En el Capítulo 4, se presenta la utilización de la función de Voigt en el ajuste de algunas líneas espectrales.

En el Apéndice A, se presentan los algoritmos para calcular la Función de Dawson, que jugará un papel fundamental en el cálculo de la función de Voigt. En el Apéndice B se da el código del algoritmo propuesto en el Capítulo 3.

Debo agradecer al Instituto de Astronomía de la UNAM, las facilidades que me brindó en la realización de esta tesis. Al Dr. Octavio Cardona la idea de este trabajo y el estímulo para iniciarla; a la Dra. Gloria Koenigsberger el haber aceptado dirigirla; al Fís. Franco Toledo por su paciencia en mis no siempre oportunas interrupciones; a la Dra. Silvia Torres y al Dr. Pablo Barrera sus correcciones y sugerencias. A la Dra. Miriam Peña por permitirme el uso de sus espectros. A mis padres Liduvina Vázquez e Ismael Martínez por el apoyo incondicional que me han brindado, su trabajo de tantos años y sus sueños cristalizados en esta tesis. A los "d" René Carrillo y José Guichard por su amable disposición para aclarar u oscurecer mis dudas. A todas las personas y familias que me albergaron en mis años de estudiante. A la Facultad de Ciencias, por los conocimientos y experiencias adquiridas en ella. Finalmente y en primer lugar a Dios, creador de todo cuanto existe por darme la oportunidad de nacer un día y conocerle una tarde de verano hace algún tiempo ya.

## CAPITULO 1

### Antecedentes.

En el proceso de análisis de los espectros estelares, en ocasiones se desea ajustar una función que reproduzca lo mejor posible la línea espectral. Actualmente en la mayoría de los paquetes astronómicos usados se realiza este ajuste con gaussianas. Tal es el caso de los paquetes IRAF (Image Reduction and Analysis Facility) y MIDAS (Münich Image Data Analysis System) que son de los más utilizados por la comunidad astronómica. Este ajuste es bueno en cierto tipo de líneas, sin embargo no para todas. En la fig. 1.1, se presenta una línea, en la que se muestra la deficiencia del ajuste gaussiano, la discrepancia en las alas de la línea espectral.

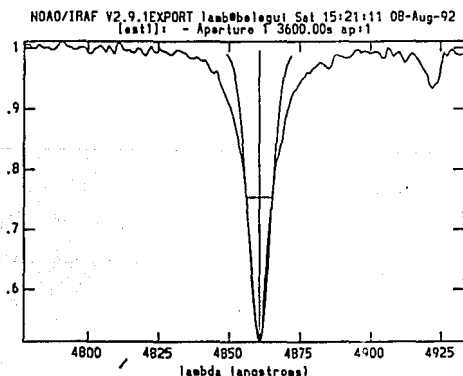


Fig. 1.1. Espectro de la estrella Feige 56 donde se muestra el perfil de la línea  $H\beta$  ( $\lambda=4861\text{\AA}$ ) y un ajuste a ésta con una gaussiana.

Es decir, en muchos casos, la forma de las líneas espectrales no corresponde a la de una gaussiana; ya que en principio, el perfil teórico de una línea espectral es el perfil de Voigt.

A continuación se da una breve descripción de los mecanismos de ensanchamiento de las líneas espectrales estelares, que son los que dan origen al perfil de Voigt.

#### 1.1. Mecanismos de Ensanchamiento de Líneas Espectrales.

Una línea espectral se origina al ocurrir una transición entre dos niveles de energía ligados, en átomos o en moléculas. Esta transición en principio es monocromática, sin embargo en la práctica sufre ensanchamientos producidos por diversos mecanismos. Entre los mecanismos de ensanchamiento en el caso de los espectros estelares se encuentran: *el natural*, *el térmico*, *el ensanchamiento por presión*, *por micro y macro turbulencias* y *rotación*. Sin embargo por sus efectos cualitativos sobre los perfiles de las líneas espectrales se pueden considerar para todo efecto práctico sólo dos tipos de mecanismos distintos, el natural y el térmico (Mihalas 1978).

### 1.1.1. Ensanchamiento Natural.

Se debe a propiedades intrínsecas de los átomos. Cuando un ensamble de átomos realiza una transición, se produce una línea. Ya que la energía de los estados cuantizados tienen cierta incertidumbre de acuerdo con el Principio de Incertidumbre de Heisenberg ( $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ ), se presenta la necesidad de hacer uso de una función de probabilidad para describir el conjunto de frecuencias que producen la línea. La función que lo describe es del tipo de una función de probabilidad de Lorentz (Mihalas 1978, Rybicki 1979):

$$\phi_N(\nu) = \frac{\Gamma/4\pi^2}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Gamma/4\pi)^2},$$

donde

$$\Gamma = \sum_n A_{nn'},$$

$A_{nn'}$  son los coeficientes de Einstein de los niveles de menor energía que  $n'$ .

$\nu$  = la frecuencia.

$\nu_0$  = la frecuencia central de la línea.

Este perfil recibe el nombre de *perfil natural*.

### 1.1.2. Ensanchamiento Térmico.

Los átomos en un gas a una temperatura T están en constante movimiento, teniendo una distribución de velocidades de Maxwell. Esta función de distribución se debe al movimiento microscópico de los átomos. En consecuencia el perfil de una línea de absorción o emisión estará dado en términos de dicha función de distribución.

Para este caso el perfil de la línea está dado por (Mihalas 1978, Rybicki 1979):

$$\phi_T(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D \sqrt{\pi}} e^{-(\nu - \nu_0)^2 / (\Delta\nu_D)^2}$$

El *Ancho de Doppler*,  $\Delta\nu_D$ , está definido como:

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

donde

$\nu$  = la frecuencia.

$\nu_0$  = la frecuencia central de la línea.

$c$  = la velocidad de la luz.

$k$  = la constante de Boltzmann.

$T$  = la temperatura.

$m$  = la masa de los átomos correspondientes.

A este perfil se le llama *perfil térmico*. Nótese que  $\phi_T(\nu)$  es una función de distribución gaussiana.

En la siguiente gráfica se aprecian un perfil natural y un perfil térmico, en la que se pueden observar las diferencias cualitativas entre los dos tipos de perfiles.

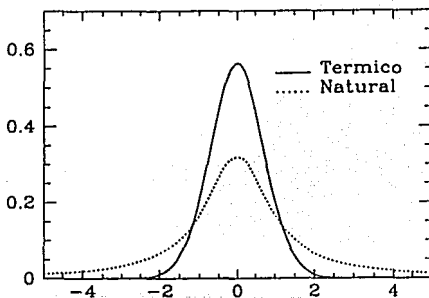


FIG. 1.2

## 1.2. El Perfil de Voigt.

Toda línea espectral estelar muestra los efectos de ambos tipos de mecanismos de ensanchamiento mencionados, de aquí que para obtener un perfil de línea espectral en el que se combinen ambos tipos de perfiles, se proponga la convolución del térmico y el natural, dando origen al *perfil de Voigt*. El centro del perfil está dominado por el perfil térmico y en las alas por el natural, características que se tratan de obtener al utilizar el perfil de Voigt en el ajuste de las líneas. De lo anteriormente descrito, surge de manera natural la idea de explorar la posibilidad de utilizar funciones de Voigt en vez de gaussianas, en el ajuste de líneas espectrales. Siendo esto último la motivación inicial de este trabajo.

El perfil de una línea espectral dado en términos de la función de Voigt es (Mihalas 1978, Rybicki 1979):

$$\phi_V(\nu) = \frac{\Gamma}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} e^{-mv^2/2kT}}{(\nu - \nu_0 - \nu_0 v_z/c)^2 + (\Gamma/4\pi)^2} dv_z,$$

$$\phi_V(\nu) = (\Delta\nu_D)^{-1} \sqrt{\pi} H(u, a),$$

donde

$$H(u, a) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(u-t)^2 + a^2} dt$$

es la *función de Voigt*.

$$a = \frac{\Gamma}{4\pi\Delta\nu_D}.$$

$$u = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D}$$

En la siguiente gráfica se presentan un perfil de Voigt, un térmico y un natural, en la que se aprecian las características particulares del perfil de Voigt, respecto de los otros dos.

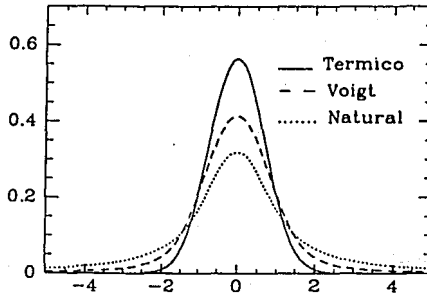


Fig. 1.3. En esta gráfica se muestran las diferencias cualitativas entre los tres tipos de perfiles.

## CAPITULO 2

### La Función de Voigt.

En el capítulo anterior, se presenta la función de Voigt como la convolución de una función de distribución de Lorentz, que corresponde a un ensanchamiento natural y una función de distribución gaussiana, del mecanismo térmico. En este capítulo se realiza dicha convolución para obtener la función de Voigt, partiendo desde la definición de Transformada de Fourier de una función.

**2.1. Definición.** Sea  $F(x)$  una función; la Transformada de Fourier  $f(\sigma)$  de  $F(x)$  está definida como:

$$f(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) e^{2\pi i \sigma x} dx. \quad (2.1)$$

La Transformada Inversa o anti-transformada de  $f(\sigma)$  está dada por:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\sigma) e^{-2\pi i \sigma x} d(\sigma). \quad (2.2)$$

Utilizando la fórmula de Euler  $e^{ix} = \cos x + i \operatorname{sen} x$  en (2.1) se obtiene:

$$f(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) [\cos 2\pi \sigma x + i \operatorname{sen} 2\pi \sigma x] dx.$$

si  $F(x)$  fuese una función compleja  $F(x) = F_R(x) + iF_I(x)$  se tendría que

$$\begin{aligned} f(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} F_R(x) \cos 2\pi \sigma x dx + i \int_{-\infty}^{\infty} F_I(x) \cos 2\pi \sigma x dx \\ &+ i \int_{-\infty}^{\infty} F_R(x) \operatorname{sen} 2\pi \sigma x dx - \int_{-\infty}^{\infty} F_I(x) \operatorname{sen} 2\pi \sigma x dx. \end{aligned}$$

Si  $F(x)$  es una función real, se tiene:

$$f(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} F_R(x) \cos 2\pi \sigma x dx + i \int_{-\infty}^{\infty} F_R(x) \operatorname{sen} 2\pi \sigma x dx$$

y solo cuando  $F_R(x)$  es una función par

$$f(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} F_R(x) \cos 2\pi \sigma x dx. \quad (2.3)$$

### 2.2. Teoremas sobre la Transformada de Fourier.

A continuación se enuncian varios teoremas básicos sobre la Transformada de Fourier. La aplicación de la transformada se denotará por  $TF$ , de modo que si  $f(\sigma)$  es la Transformada de  $F(x)$ , entonces  $TF[F(x)] = f(\sigma)$ .

#### Teorema 2.2.1.

$TF$  es una transformación lineal, i.e.

$$TF[F + G] = TF[F] + TF[G],$$

$$TF[aF] = a TF[F].$$

**Teorema 2.2.2.**

$$TF[F(ax)] = \frac{1}{|a|} f(\sigma/a).$$

**Teorema 2.2.3.**

$$TF[F(x - a)] = e^{2\pi i a \sigma} f(\sigma).$$

Las demostraciones son inmediatas de la definición de Transformada de Fourier.

### 2.3. Dos Transformadas Particulares.

Las transformadas que se obtendrán en esta sección son las de una distribución gaussiana y una de Lorentz.

#### 2.3.1. Distribución Gaussiana.

Sea

$$G(x) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\beta^2},$$

$$\begin{aligned} g(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} G(x) e^{2\pi i \sigma x} dx = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/\beta^2} e^{2\pi i \sigma x} dx = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{\beta^2}(x^2 - 2\pi i \sigma \beta^2 x)} dx \\ &= \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{\beta^2}(x^2 - 2\pi i \sigma \beta^2 x)} e^{-\pi^2 \beta^4 \sigma^2} e^{\pi^2 \beta^4 \sigma^2} dx = \frac{e^{-\pi^2 \beta^4 \sigma^2}}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[\frac{1}{\beta}(x - \pi \beta^2 \sigma i)]^2} dx, \end{aligned}$$

haciendo

$$y = \frac{1}{\beta}(x - \pi \beta^2 \sigma i),$$

se obtiene

$$\frac{e^{-\pi^2 \beta^4 \sigma^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy.$$

Por otra parte se tiene que (Gradstein 1980):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi},$$

por tanto

$$\frac{e^{-\pi^2 \sigma^4 \sigma^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = e^{-\pi^2 \beta^4 \sigma^2}.$$

De lo anterior se desprende que bajo la Transformada de Fourier una gaussiana se transforma en otra gaussiana.

### 2.3.2. Distribución de Lorentz.

Sea

$$L(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\beta}{x^2 + \beta^2},$$

$$l(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} L(x) e^{2\pi i \sigma x} dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta}{x^2 + \beta^2} e^{2\pi i \sigma x} dx,$$

dado que  $L(x)$  es una función real y par, de acuerdo con (2.3), se tiene:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta}{x^2 + \beta^2} e^{2\pi i \sigma x} dx = \frac{2\beta}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos 2\pi \sigma x}{x^2 + \beta^2} dx.$$

Por otra parte (Gradstein 1980):

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos ax}{x^2 + \beta^2} dx = \frac{\pi}{2\beta} e^{-a\beta} \quad [a > 0, \operatorname{Re}\beta > 0],$$

por tanto

$$\frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\cos 2\pi \sigma x}{x^2 + \beta^2} dx = \frac{2\beta}{\pi} \left[ \frac{\pi}{2\beta} e^{-2\pi \sigma \beta} \right] = e^{-2\pi \sigma \beta}.$$

Como  $\sigma \in (-\infty, \infty)$  se tienen dos casos.

$$\begin{cases} e^{-2\pi \sigma \beta} & \text{para } \sigma > 0; \\ e^{2\pi \sigma \beta} & \text{para } \sigma < 0. \end{cases}$$

Por tanto

$$l(x) = e^{-2\pi \beta |\sigma|}.$$

### 2.4. Convolución.

Este es un concepto de importancia fundamental, ya que aparece en una gran variedad de fenómenos físicos. En general, la convolución representa el resultado observado de un fenómeno en el que interviene una función de deformación, suavizamiento o ensanchamiento, la cual sufre a su vez punto a punto, la acción de una segunda función. Existen textos como Bracewell (1978) que discuten con detalle este concepto.

**2.4.1. Definición.** La convolución de dos funciones  $F(x)$  y  $G(x)$  está definida como:

$$F(x) * G(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(y)G(x-y)dy.$$

De la definición es fácil ver que es una operación simétrica, asociativa y distributiva:

$$F(x) * G(x) = G(x) * F(x). \quad (\text{conmutatividad})$$

$$F(x) * [G(x) * H(x)] = [F(x) * G(x)] * H(x). \quad (\text{asociatividad})$$

$$F(x) * [G(x) + H(x)] = F(x) * G(x) + F(x) * H(x). \quad (\text{distributividad})$$

Una propiedad muy importante de la convolución y que facilita su manejo es el llamado Teorema de la Convolución.

#### 2.4.2 Teorema de la Convolución.

Si las transformadas de dos funciones  $F(x)$  y  $G(x)$  son  $f(\sigma)$  y  $g(\sigma)$  respectivamente, entonces

$$\int_{-\infty}^{\infty} [F(x) * G(x)]e^{2\pi i\sigma x} dx = f(\sigma)g(\sigma).$$

La demostración es sencilla y se sigue a partir de la definición:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} [F(x) * G(x)]e^{2\pi i\sigma x} dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} F(y)G(x-y)dy \right] e^{2\pi i\sigma x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} F(y) \left[ \int_{-\infty}^{\infty} G(x-y)e^{2\pi i\sigma x} dx \right] dy = \int_{-\infty}^{\infty} F(y) \left[ e^{2\pi i\sigma y} g(\sigma) \right] dy, \end{aligned}$$

de acuerdo con el teorema 2.2.3, por tanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(y) \left[ e^{2\pi i\sigma y} g(\sigma) \right] dy = f(\sigma)g(\sigma),$$

que es lo que se quería demostrar.

### 2.5. Dos Convoluciones Particulares.

A continuación se obtienen la convolución de dos gaussianas y dos lorentzianas, que posteriormente se utilizarán en la obtención de la convolución de dos funciones de Voigt.

#### 2.5.1. Convolución de 2 Gaussianas.

Sean  $G_1(x)$  y  $G_2(x)$  dos gaussianas.

$$G_1(x) = \frac{1}{\beta_1 \sqrt{\pi}} e^{-x^2/\beta_1^2}, \quad G_2(x) = \frac{1}{\beta_2 \sqrt{\pi}} e^{-x^2/\beta_2^2},$$

$$\begin{aligned} G_1(x) * G_2(x) &= TF^{-1}[g_1(\sigma)g_2(\sigma)] = TF^{-1}[e^{-\pi^2\beta_1^2\sigma^2} e^{-\pi^2\beta_2^2\sigma^2}] \\ &= TF^{-1}[e^{-\pi^2\sigma^2\beta_3^2}] = \frac{1}{\beta_3 \sqrt{\pi}} e^{-x^2/\beta_3^2}, \end{aligned}$$

donde  $\beta_3^2 = \beta_1^2 + \beta_2^2$ .

### 2.5.2. Convolución de 2 Lorentzianas.

Sean  $L_1(x)$  y  $L_2(x)$  dos lorentzianas.

$$L_1(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\beta_1}{x^2 + \beta_1^2}, \quad L_2(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\beta_2}{x^2 + \beta_2^2},$$

$$\begin{aligned} L_1(x) * L_2(x) &= TF^{-1}[l_1(\sigma)l_2(\sigma)] = TF^{-1}[e^{-2\pi\beta_1|\sigma|} e^{-2\pi\beta_2|\sigma|}] \\ &= TF^{-1}[e^{-2\pi\beta_3|\sigma|}] = \frac{1}{\pi} \frac{\beta_3}{x^2 + \beta_3^2}, \end{aligned}$$

donde  $\beta_3 = \beta_1 + \beta_2$ .

### 2.6. La Función de Voigt.

En esta sección se presenta la convolución de una gaussiana y una lorentziana, para obtener la función de Voigt.

**2.6.1. Definición.** A la convolución de una distribución gaussiana y una distribución de Lorentz se le llama función de Voigt.

$$\begin{aligned} G(x) * L(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} G(y)L(x-y)dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\beta_1 \sqrt{\pi}} e^{-y^2/\beta_1^2} \right] \left[ \frac{1}{\pi} \frac{\beta_2}{(x-y)^2 + \beta_2^2} \right] dy \\ &= \frac{\beta_2}{\beta_1 \sqrt{\pi}} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2/\beta_1^2}}{(x-y)^2 + \beta_2^2} dy, \end{aligned}$$

sean  $t = y/\beta_1$ ,  $a = \beta_2/\beta_1$ ,  $u = x/\beta_1$ ;

$$\begin{aligned} \frac{\beta_2}{\beta_1 \sqrt{\pi}} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta_1 e^{-t^2}}{(x - \beta_1 t)^2 + \beta_2^2} dt &= \frac{\beta_1 a}{\sqrt{\pi} \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\beta_1^2 (u - t)^2 + \beta_2^2} dt \\ &= \frac{1}{\beta_1 \sqrt{\pi}} \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(u - t)^2 + a^2} dt. \end{aligned}$$

Sea

$$H(u, a) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(u-t)^2 + a^2} dt.$$

Esta última expresión es la llamada función de Voigt, mencionada en la sección 1.3; que también se conoce como la función de Hjerting. Sobre la cual se desarrollará el trabajo de la tesis que se presenta a continuación.

**Corolario 2.6.1.**

La convolución de dos funciones de Voigt es otra función de Voigt.

Lo anterior se desprende claramente de lo siguiente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} [G(x) * L(x)] e^{2\pi i \sigma x} dx = g(\sigma) l(\sigma) = e^{-\pi^2 \beta_1^2 \sigma^2} e^{-2\pi \beta_2 |\sigma|}.$$

En la siguiente gráfica se presentan algunos perfiles de Voigt para diferentes dispersiones.

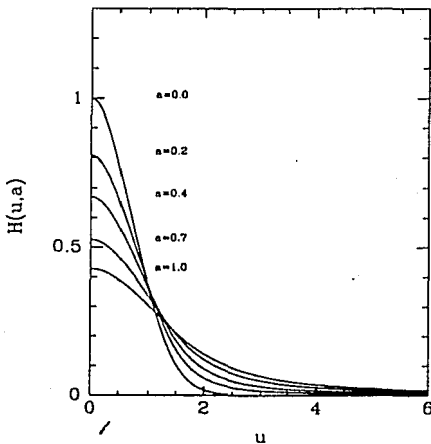


Fig. 2.1. La función de Voigt como función de  $u$  para los valores indicados de  $a$ .

## CAPITULO 3

### Cálculo Numérico de la Función de Voigt.

De 1913 a la fecha han sido publicadas diversas aproximaciones de la función de Voigt. Las primeras buscaban simplificar la función por algún método analítico de modo que su cálculo fuese sencillo. Con el desarrollo de las computadoras, el problema de calcular la función también evolucionó, al buscar métodos más exactos y rápidos. Las características de las computadoras que se tenían anteriormente imponían ciertas restricciones al cálculo de la función, lo que se reflejaba en el hecho de que si se deseaba exactitud se perdía rapidez o viceversa. Actualmente con las modernas computadoras ambas cuestiones han sido superadas.

Fundamentalmente existen dos tipos de métodos numéricos para calcular la función de Voigt; por una parte están los que utilizan el hecho de que la función de Voigt es la parte real de la función compleja de probabilidad. El segundo tipo de aproximaciones hacen uso de diversas representaciones de la función, como su expansión en series de potencias, etc.; para aproximar la función. Algunas de estas aproximaciones, son las que se estudiarán en este capítulo.

#### 3.1. La Función Compleja de Probabilidad.

La Función Compleja de Probabilidad:

$$w(z) = e^{-z^2} \left( 1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt \right),$$

fue introducida por Faddeyeva y Terent'ev (1961), quienes demuestran que

$$H(u, a) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(u-t)^2 + a^2} dt$$

y la función

$$L(u, a) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(u-t) e^{-t^2}}{(u-t)^2 + a^2} dt,$$

son las partes real e imaginaria, respectivamente de la función

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

que es una representación de  $w(z)$ . Esto es  $w(z) = W(z)$ , si  $\text{Im}(z) \geq 0$  (Abramowitz et al. 1972).

Dada la relación que hay entre la función  $w(z)$  y otras funciones más de interés en otras áreas de estudio, el análisis de estas funciones ha redundado en nuevos algoritmos para el cálculo de  $w(z)$  y en consecuencia

de la función de Voigt. Un ejemplo de esto lo constituye la función de error. La relación entre ambas está dada por:

$$w(z) = e^{-z^2}(1 - \operatorname{erf}(-iz))$$

donde

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

Algunos de los autores que proponen algoritmos para el cálculo de la función de error son Abramowitz et al. (1972) quienes a su vez dan varias representaciones de  $w(z)$ , que pueden ser utilizadas para obtener la función de Voigt. Autores que han estudiado la función de Voigt como la parte real de  $w(z)$  o la misma función  $w(z)$  son: Drayton (1976), Humlíček (1979, 1982), Karp (1978), Kui et al. (1978) y Pierluissi et al. (1977). La mayoría de estos métodos emplean en algún momento del proceso, la integración vía cuadraturas de Gauss-Hermite, con lo que el problema deriva en un cierto tipo de método directo para calcular la función de Voigt. La exactitud que reportan es rebasada por el método de Hummer, que se presenta en la sección 3.2.3.

### 3.2. Aproximaciones Directas.

Las primeras aproximaciones directas de  $H(u, a)$  fueron dadas por Reiche (1913) y Mitchell y Zemansky (1934). Estas representaciones dieron lugar a un gran número de métodos para calcular la función, conforme estas dos aproximaciones se fueron mejorando.

Debido al papel fundamental que juega la función de Dawson en el cálculo de la función de Voigt, en el Apéndice A, se discute más en detalle.

#### 3.2.1. Método de Harris.

Harris (1948), escribe  $H(u, a)$  como la parte real de la función de error de argumento complejo en la forma:

$$H(u, a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \left\{ e^{(u+ia)^2} \int_{u+ia}^{\infty} e^{t^2} dt \right\} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \left\{ e^{(u+ia)^2} \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{2} - i \int_0^{a-iu} e^{t^2} dt \right] \right\}$$

de la que obtiene para valores pequeños de  $a$ , la serie de Taylor:

$$H(u, a) = H_0(u) + aH_1(u) + a^2H_2(u) + a^3H_3(u) + a^4H_4(u) + \dots$$

Una forma alterna de obtener las mismas expresiones es partiendo de la representación de Reiche:

$$H(u, a) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-at-(t/2)^2} \cos ut \, dt \quad (3.1)$$

reemplazando  $e^{-at}$ , ( $a < 1$ ) por su desarrollo en series de Taylor, se obtiene:

$$H(u, a) = \sum_{n=0}^{\infty} a^n H_n(u)$$

donde

$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi} n!} \int_0^{\infty} e^{-(t/2)^2} t^n \cos ut \, dt.$$

Para  $n = 0$  se tiene:

$$H_0(u) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-(t/2)^2} \cos ut \, dt,$$

se sabe que la transformación coseno de la gaussiana es (Gradstein 1980):

$$\int_0^{\infty} e^{-y^2} \cos xt \, dt = \sqrt{\pi} e^{-(x/2)^2}$$

por tanto  $H_0(u) = e^{-u^2}$ .

Diferenciando repetidamente esta expresión se obtienen

$$H_2(u) = \frac{-1}{2} \frac{d^2}{du^2} H_0(u) = (1 - 2u^2)e^{-u^2},$$

$$H_4(u) = \frac{-1}{12} \frac{d^4}{du^4} H_0(u) = \left(\frac{1}{2} - 2u^2 + \frac{2}{3}u^4\right)e^{-u^4}.$$

Los siguientes términos pares se pueden calcular análogamente.

Para obtener el primer término impar, se integra por partes  $H_n(u)$ , con  $n = 1$

$$H_1(u) = \frac{-2}{\sqrt{\pi}} \left[ 1 - u \int_0^{\infty} e^{-(t/2)^2} \operatorname{sen} ut \, dt \right],$$

utilizando ahora la transformación seno de la gaussiana (Gradstein 1980):

$$\int_0^{\infty} e^{-t^2} \operatorname{sen} 2ut \, dt = e^{-u^2} \int_0^u e^{t^2} \, dt = F(u)$$

se tiene que :

$$H_1(u) = \frac{-2}{\sqrt{\pi}} \left[ 1 - 2uF(u) \right],$$

$$H_3(u) = \frac{-1}{6} \frac{d^3}{du^3} H_1(u) = \frac{-2}{\sqrt{\pi}} \left[ \frac{2}{3}(1 - u^2) - 2u(1 - \frac{2}{3}u^2)F(u) \right].$$

donde  $F(u)$  es conocida como la Función de Dawson:

$$F(u) = e^{-u^2} \int_0^{\infty} e^{t^2} \, dt.$$

Los siguientes términos impares se obtienen de manera análoga.

Para calcular la función de Dawson, se utilizó el algoritmo de Clenshaw (ver Apéndice A).

### 3.2.2. Método de Sulzmann.

Sulzmann (1983), es el autor que da las ecuaciones más sencillas para el cálculo de la función, en los intervalos  $0 \leq u \leq 2$  y  $0 \leq a \leq 10$ .

Sulzmann utiliza las expresiones en series de potencias dadas por Penner (1959), para obtener la siguiente representación de la función:

$$H(u, a) = e^{-u^2} \sum_{n=0}^{\infty} (u^{2n}/n!) Q_n(a)$$

donde:

$$Q_n(a) = \frac{a}{2n-1} \left[ \frac{2}{\sqrt{\pi} - 2aQ_{n-1}(a)} \right]$$

y

$$Q_0(a) = e^{a^2} \operatorname{erfc}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (e^{a^2} \int_a^\infty e^{-t^2} dt).$$

Para  $a \leq 3$ ,  $Q_0(a)$  está dado por:

$$Q_0(a) = \sum_{m=1}^5 a_m t^m,$$

con

$$t = 1/(1 + a_0 a),$$

$$a_0 = 0.327591117, \quad a_1 = 0.254829502,$$

$$a_2 = -0.284496736, \quad a_3 = 1.421413741,$$

$$a_4 = -1.453152027, \quad a_5 = 1.061405429.$$

El error en  $Q_0(a)$  crece conforme lo hace  $a$  pero es menor que  $8 \times 10^{-4}$  para  $a = 3$ .

Para  $a \geq 3$ , de acuerdo con Dwight (1961),  $Q_0(a)$  puede ser expresada como:

$$Q_0(a) = \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \right] \left\{ 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \left[ \frac{(2m)!}{m!} \right] \left[ \frac{-1}{4a^2} \right]^m \right\}.$$

### 3.2.3. Método de Hummer.

Hummer (1965) calcula la función de Voigt normalizada  $U(u, a)$ :

$$U(u, a) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} H(u, a) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-at - (t/2)^2} \cos ut \, dt, \quad (3.2)$$

de acuerdo con (3.1).

Este método está basado en la expansión de  $H(u, a)$  dada por Harris (1948) y en las propiedades encontradas por Hummer (1964) sobre los coeficientes de la serie.

Expandiendo el factor  $e^{-at}$  en el integrando de (3.2), se obtiene

$$U(u, a) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} I_n(u) \quad (3.3)$$

donde

$$I_n(u) = 2^{n+1} \int_0^\infty e^{-t^2} t^n \cos 2ut \, dt, \quad (3.4)$$

que satisface la siguiente relación de recurrencia

$$I_n(u) - 2[2n - 3 - 2u^2]I_{n-2}(u) + 4(n-2)(n-3)I_{n-4}(u) = 0, \quad n = 4, 5, \dots \quad (3.5)$$

Para valores pares de  $n$ , se tiene que

$$I_n(u) = (-1)^{n/2} \sqrt{\pi} e^{u^2} H_n(u), \quad n = 0, 2, \dots$$

donde  $H_n(u)$  es el  $n$ -ésimo polinomio de Hermite. Cuando  $n$  es impar  $I_n(u)$  puede ser expresado en términos de la función de Dawson.

Para  $n = 1, 3$

$$I_1(u) = 2[-F(u)H_1(u) + 1],$$

$$I_3(u) = 2[F(u)H_3(u) - H_2(u) + 2].$$

En general para  $n$  impar,  $I_n(u)$  tiene la siguiente expansión asintótica

$$I_n(u) \sim (-1)^{n+2/2} n! u^{-n-1} \sum_{m=0} A_m^n u^{-2m},$$

donde

$$A_0^n = 1,$$

$$A_{m+1}^n / A_m^n = \frac{4m^2 + 2m(2n+3) + (n+1)(n+2)}{4(m+1)},$$

con  $n = 1, 3, 5, \dots$ ;  $m = 0, 1, 2, \dots$

Hummer considera dos casos para el cálculo de la función:  $u \leq 5$  y  $u \geq 5$ , este hecho es importante ya que es el primer autor en sugerir la división del dominio de la función para aplicar diferentes métodos en cada región.

El cálculo de la función en el primer caso ( $u \leq 5$ ) se realiza con la ecuación (3.3), donde la función  $F(u)$  se evalúa utilizando el algoritmo de Clenshaw que se describe en el Apéndice A. Las razones importantes por las cuales Hummer divide así el plano son:

- El algoritmo para el cálculo de  $F(u)$  falla para  $u \geq 5.71$ .
- El término  $\cos 2ut$  en (3.4) oscila conforme  $u$  crece, con lo que el método se vuelve inestable.

Para  $u \geq 5$ , la función se calcula de la siguiente manera

$$U(u, a) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0, 2, \dots}^{2N_2} \frac{(-a)^n}{n!} I_n(u) + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{N_2} u^{-2n} C_n(a),$$

donde

$$C_n(a) = - \sum_{m=1}^n (-1)^m a^{2m-1} A_{n-m}^{2m-1}, \quad n = 1, 2, \dots, N_2.$$

### 3.2.4. Método de Hjerting.

Hjerting (1938) propone la siguiente expansión asintótica, para valores grandes de  $u$ :

$$H(u, a) \sim \frac{a^3}{\sqrt{\pi}u^2} \left[ 1 + \frac{3}{2u^2} + \frac{15}{4u^4} + \frac{105}{6u^6} + \dots \right].$$

La forma en que obtiene esta expresión es parecida a la que se muestra en la sección 3.2.1.

### 3.2.5. Método de Posener-Kopal.

Este método lo sugiere Posener (1959) y consiste en utilizar la fórmula de Cuadratura de Gauss-Hermite para 20 términos que propone Kopal (1955) sin término de error:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} f(t) dt = \sum_{j=1}^n H_j f(a_j),$$

donde

$$f(t) = \frac{1}{(x-t)^2 + a^2}.$$

Las  $a_j$  son las raíces del  $n$ -ésimo polinomio de Hermite y las  $H_j$  son los valores de peso dados por:

$$H_j = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H'_n(a_j)]^2},$$

donde  $H'_n$  es la derivada del  $n$ -ésimo polinomio de Hermite. Estos valores se dan en el Apéndice B.

### 3.3. Comparación de los Métodos Numéricos.

Los diferentes métodos ya expuestos se pueden dividir en tres grupos, dependiendo de las regiones del dominio de  $H(u, a)$  en que son válidos. El primer cuadrante se dividió en tres subdominios: *I*, *II*, *III*.

$$I = \{u \in R \mid 0 \leq u \leq 5, a \leq 2.5\}$$

$$II = \{u \in R \mid 5 \leq u, a \leq 2.5\}$$

$$III = \{u \in R \mid 0 \leq u \leq 100, 2.5 \leq a\}$$

En el primer grupo se incluyen los métodos de Harris, Hummer y Sulzmann, que son válidos en *I*, en el segundo grupo se incluyen los de Hummer y Hjerting, válidos en *II*, finalmente el en el tercero solo se incluye el de Posener-Kopal.

Como referencia se utilizaron las tablas dadas por Hjerting (1938), Hummer (1965) y Finn y Mugglestone (1965). Hjerting tabuló valores (4 dígitos) de  $H(u, a)$ , para  $0 \leq u (0.25) \leq 5$  y 21 valores de  $a$ .  $0 \leq a (0.01) \leq 20$ . Hummer publicó sus tablas (8 dígitos) en los siguientes intervalos:  $0 \leq u (0.05) \leq 5$ ,  $5 \leq u (0.10) \leq 10$  y 25 valores de  $a$ ,  $0 \leq a \leq 0.5$ . Finn y Mugglestone proporcionan tablas (6 dígitos) en los siguientes rangos:  $0 \leq u (0.25) \leq 6$ ,  $6 \leq u (0.50) \leq 10$ ,  $10 \leq u (1.0) \leq 22$  y 20 valores de  $a$  entre 0 y 1. Dado que las tablas consultadas, solo reportan valores de  $a$  entre 0 y 1, la comparación con los diferentes métodos se hizo en este rango.

#### 3.3.1 Región *I*.

En el caso del método de Harris para el cálculo de  $H(u, a)$ , se observó que para valores pequeños de  $a$ , ( $a \leq 0.01$ ) coincide en 4 dígitos (promedio) con las tablas. Conforme  $a$  crece, difiere significativamente de los resultados publicados; para  $a = 0.50$ , solo coincide en un dígito en el intervalo  $0 \leq u \leq 4$ .

La exactitud del método de Sulzmann fue de 4 dígitos (promedio) para  $a \leq 0.01$  en el intervalo  $0 \leq u \leq 5$ . Para valores de  $a$  mayores la precisión del método llega a descender a solo un dígito para  $a = 0.50$ ; en el mismo intervalo. Un detalle observado es, para  $u \geq 6$ , los valores dados por el algoritmo decaen rápidamente.

El método de Hummer es el más exacto comparado con los dos anteriores; ya que en el caso de sus tablas, la congruencia de los resultados obtenidos con el código fue de 7 dígitos (promedio), para todos los valores en el intervalo  $0 \leq u \leq 5$ , salvo en casos en los que la exactitud descendió a 5 dígitos; este comportamiento en el que de pronto se pierde exactitud es aleatorio, tanto en el número de dígitos, como su aparición en el intervalo. Asimismo la congruencia con los resultados de Finn y Mugglestone es en general de los 6 dígitos.

En la tabla 3.1, se muestran algunos valores de  $H(u, a)$  obtenidos con los métodos de Harris, Hummer y Sulzmann, para  $a = 0.001, 0.1, 0.5$ ; que permiten comparar los valores obtenidos con los diferentes métodos y los tabulados por Hummer y Finn y Mugglestone. En la primera columna se presentan los valores de  $u$  (abcisa) en que fue calculada  $H(u, a)$ , en la segunda columna se tienen los valores publicados, en las columnas restantes se dan los resultados obtenidos en esta tesis con los algoritmos de Harris, Hummer y Sulzmann, respectivamente.

Tabla 3.1.

Comparación de los valores obtenidos en la región I con los distintos algoritmos para diferentes  $u, a$ .

$u$	$H(u, a)^*$	Harris	Hummer	Sulzmann
Dispersión ( $a = 0.001$ )				
0.0	0.56355353	0.56355349	0.56355353	0.56355350
1.0	0.20760203	0.20760201	0.20760202	0.20760269
2.0	0.10464158	0.10464157	0.10464157	0.10464292
Dispersión ( $a = 0.10$ )				
0.0	0.50577169	0.50619768	0.50577169	0.50577164
1.0	0.21053871	0.21098060	0.21053871	0.21702685
2.0	0.22681210	0.23443476	0.22681210	0.24091531
Dispersión ( $a = 0.50$ )				
0.0	0.34736607	0.40455800	0.34736609	0.34736596
1.0	0.20023107	0.24608731	0.20023107	0.35112572
2.0	0.58313972	0.14869428	0.58313970	0.10927336

\* valores publicados por Hummer (1965), Finn y Mugglestone (1965).

### 3.3.2. Región II.

En la región II se compararon únicamente los algoritmos de Hummer y el de Hjerting. En el caso de Hummer se utilizó la expansión asintótica dada por Erdelyi et al. (1953), que se muestra en el Apéndice A, para calcular la función de Dawson. La comparación en esta región se hizo con las tablas de Hummer ( $5 \leq u \leq 10$ ) y las de Finn y Mugglestone ( $5 \leq u \leq 22$ ).

Los resultados son los siguientes. Para el método de Hjerting, la exactitud fué de 4 dígitos (promedio) de acuerdo con los resultados de Finn y Mugglestone, para valores pequeños de  $a$  ( $\leq 0.5$ ) en el intervalo  $0 \leq u \leq 20$  y conforme  $a$  crece, la exactitud se va perdiendo gradualmente, de modo que para  $a \sim 1$  la coincidencia es de solo 2 dígitos para  $u \sim 20$ .

El método de Hummer, coincidió en 7 dígitos respecto de sus tablas y en 6 dígitos con los de Finn y Mugglestone, salvo en casos en los cuales al igual que en la región I, la exactitud llegó a descender a 5 dígitos de manera aleatoria.

En la tabla 3.2, se muestran algunos valores de  $H(u, a)$  obtenidos en esta tesis con los métodos de Hjerting, y Hummer, para valores de  $a = 0.001, 0.1, 0.48$ ; que permiten comparar los resultados obtenidos con los diferentes métodos y los tabulados por Finn y Mugglestone. En la primera columna se presentan los valores de  $u$  (abscisa) en que fue calculada  $H(u, a)$ , en la segunda columna se tienen los valores publicados, en las columnas restantes se dan los resultados obtenidos con los algoritmos de Hjerting, y Hummer, respectivamente.

**Tabla 3.2.**

Comparación de los valores obtenidos en la región II con los distintos algoritmos para diferentes  $u, a$ .

$u$	$H(u, a)^*$	Hjerting	Hummer
Dispersión ( $a = 0.01$ )			
5.0	2.40803-04	2.40891-05	2.40803-05
7.0	1.18859-04	1.18864-05	1.18859-05
10.0	5.72871-05	5.72874-05	5.72871-05
13.0	3.36847-05	3.36848-05	3.36847-05
17.0	1.96243-05	1.96243-05	1.96243-05
20.0	1.41579-05	1.41579-05	1.41579-05
22.0	1.16931-05	1.16931-05	1.16931-05
Dispersión ( $a = 0.1$ )			
5.0	2.40691-03	2.40891-03	2.40691-03
7.0	1.18833-03	1.18864-03	1.18833-03
10.0	5.72812-04	5.72874-04	5.72812-04
13.0	3.36827-04	3.36848-04	3.36827-04
17.0	1.96236-04	1.96243-04	1.96236-04
20.0	1.41576-04	1.41579-04	1.41576-04
22.0	1.16929-04	1.16931-04	1.16928-04
Dispersión ( $a = 0.48$ )			
5.0	1.14347-02	1.15627-02	1.14347-02
7.0	5.67644-03	5.70550-03	5.67644-03
10.0	2.74323-03	2.74979-03	2.74323-03
13.0	1.61462-03	1.61687-03	1.61462-03
17.0	9.41208-04	9.41968-04	9.41208-04
20.0	6.79187-04	6.79582-04	6.79187-04
22.0	5.61001-04	5.61269-04	5.61000-04

\* valores publicados por Finn y Mugglestone (1965).

En el estudio del algoritmo de Hummer se pueden observar dos hechos importantes:

1. Conforme se aumenta el número de sumandos en (3.3) mayor es la  $a$  que se puede alcanzar sin que el algoritmo falle. Esto es, para un valor  $a_0$  fijo el algoritmo falla en  $u_0$ , con un número  $n_0$  de sumandos. Si se toma otro valor  $n_1 > n_0$  el algoritmo falla en  $u_1 > u_0$  y permite alcanzar una  $a_1 > a_0$ . En la fig. 3.1 se aprecian los valores máximos de  $a$  alcanzados por el algoritmo, en función del número de sumandos.

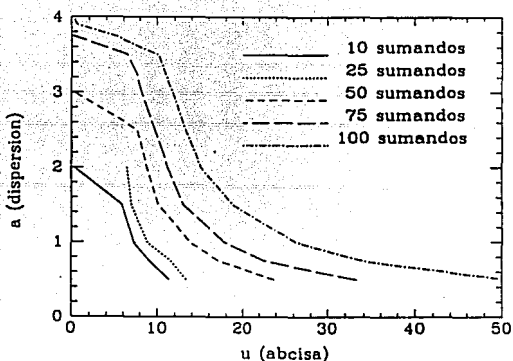


Fig. 3.1. En esta gráfica se muestra que dependiendo del número de sumandos en (3.3), son los valores de  $H(u, a)$  que se pueden calcular para una  $u$  y  $a$  dadas.

2. El segundo es que la suma no converge, ya que los valores de la suma (3.3), a partir de un punto, que depende de  $a$  y el número de sumandos utilizados, cambian de signo y son cada vez mayores.

La razón de la falla del método es atribuida a la oscilación de los valores de  $I_n(x)$  en (3.3).

El comportamiento del algoritmo en un punto en que no converge se ilustra en la fig. 3.2.

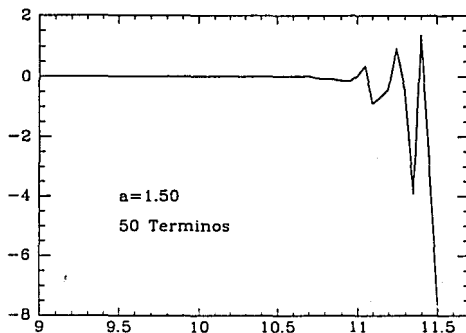


Fig. 3.2. Comportamiento observado por el algoritmo de Hummer, para una  $u(\text{dispersión})=1.5$  y 50 términos en (3.3).

### 3.3.3. Región III.

El método de Cuadraturas de Gauss-Hermite, en esta región es bien comportada y particularmente rápida en el cálculo de  $H(u, a)$ .

El motivo por el cual este tipo de cuadratura no se utiliza en la región I, es porque el error es particularmente grande (100%), cuando los valores de  $u$  y  $a$  son pequeños simultáneamente; sobre todo cuando  $u$  se encuentra cerca de las raíces  $a_j$  del polinomio de Hermite dado.

La exactitud de este método es de 6 dígitos en los intervalos  $0.7 \leq a \leq 1$  y  $15 \leq u \leq 22$ , de acuerdo con las tablas de Finn y Mugglestone.

En la tabla 3.3, se muestran algunos valores de  $H(u, a)$  obtenidos en esta tesis con el método de Posener-Kopal, para valores de  $a = 0.1, 0.8, 1.0$ ; que permiten comparar los resultados obtenidos y los tabulados por Finn y Mugglestone. En la primera columna se presentan los valores de  $u$  (abcisa) en que fue calculada  $H(u, a)$ , en la segunda columna se tienen los valores publicados, en la tercera columna los resultados del método.

Tabla 3.3.

Comparación de los valores obtenidos en la región III con el algoritmo de Posener-Kopal para diferentes  $u, a$ .

$u$	$H(u, a)^*$	Posener-Kopal
Dispersión ( $a = 0.1$ )		
0.0	8.96456-01	4.57281-01
10.0	5.72812-04	5.72812-04
15.0	2.52430-04	2.52430-04
20.0	1.41576-04	1.41576-04
Dispersión ( $a = 0.8$ )		
0.0	4.89100-01	4.88969-01
10.0	4.55276-03	4.55276-03
15.0	2.01371-03	2.01371-03
20.0	1.13081-03	1.13081-03

\* valores publicados por Finn y Mugglestone (1965).

### 3.4. Propuesta Final.

De lo descrito en la sección 3.3, el algoritmo que se considera más adecuado para calcular la función de Voigt, es el siguiente:

1. Para  $0.0 \leq u \leq 10$ ,  $0.0 \leq a \leq 2.5$ ; se propone el algoritmo de Hummer con 50 sumandos en (3.3), utilizando para el cálculo de la función de Dawson  $F(u)$  en el intervalo  $0 \leq u \leq 5$  el algoritmo de Clenshaw y en  $5 \leq u$  la serie de Erdelyi et al. Se encuentra que este método es el más exacto y estable de los que se revisaron en esta región.

2. Para  $10 \leq u \leq 20$ ,  $0.0 < a \leq 0.5$ ; se propone el algoritmo de Hjerting. La razón de esta propuesta es la economía en el cálculo y la exactitud *razonable* de este método en relación a la magnitud de los valores de la función de Voigt en esta región como se puede apreciar en la tabla 3.2; sin embargo no se descarta el método de Hummer, quedando a criterio del usuario la decisión final.

3. Para  $0.0 \leq u \leq 10$ ,  $2.5 \leq a \leq 100$ ;  $10 \leq u \leq 20$ ,  $0.5 \leq a \leq 100$ ;  $20 \leq u \leq 100$ ,  $0.0 \leq a \leq 100$ ; se propone el algoritmo de Posener-Kopal. Se encuentra que es muy exacto y estable en esta región.

En el Apéndice B, se da el código en fortran para el cálculo de la función de Voigt con el algoritmo propuesto.

En la fig. 3.3, se muestran las regiones y los respectivos algoritmos para el cálculo de la función de Voigt en ellas.

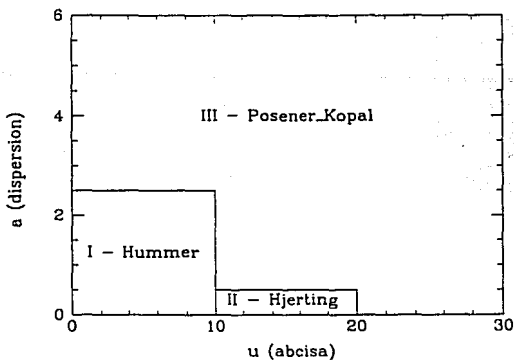


Fig. 3.3. En esta gráfica se presentan los subdominios y los respectivos algoritmos propuestos, para el cálculo de la función de Voigt.

## CAPITULO 4

### Comparación de Ajustes de Líneas Espectrales.

En este capítulo se muestran ajustes de líneas espectrales con funciones de Voigt y Gaussianas.

Los espectros de los cuales se extrajeron las líneas, fueron proporcionadas amablemente por los Dres. G. Koenigsberger, M. Peña y J. Guichard.

Estrella: *Wolf 1346*, Tipo Espectral: *DA*,  $m_{5556} = 11.54$ .

Detector: *Mepsicrón*.

Dispersión Espectral:  $2.79 \text{ \AA/pixel}$ .

Fecha de observación: *02/06/84*.

Observatorio: *Observatorio Astronómico Nacional en San Pedro Mártir, B. C.*

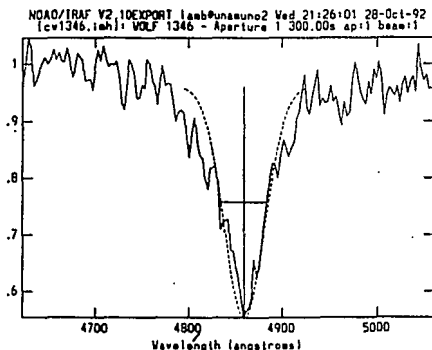


Fig. 4.1. Estrella *Wolf 1346*,  $\lambda = 4861 \text{ \AA}$ ,  $FWHM = 50.91 \text{ \AA}$ , ajuste Gaussiano.

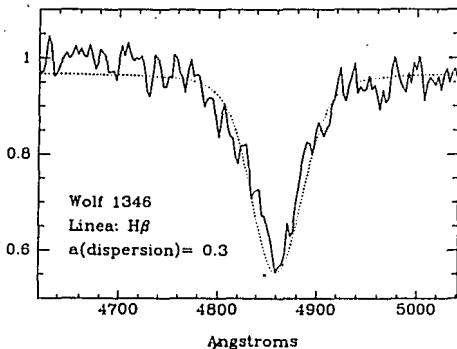


Fig. 4.2. Estrella *Wolf 1346*,  $\lambda = 4861 \text{ \AA}$ ,  $FWHM = 59.86 \text{ \AA}$ , ajuste Voigt.

Estrella: *Wolf 1346*, Tipo Espectral: *DA*,  $m_{5556} = 11.54$ .

Detector: *Mepsicrón*.

Dispersión Espectral:  $2.79 \text{ \AA/pixel}$ .

Fecha de observación: *02/06/84*.

Observatorio: *Observatorio Astronómico Nacional en San Pedro Mártir, B. C.*

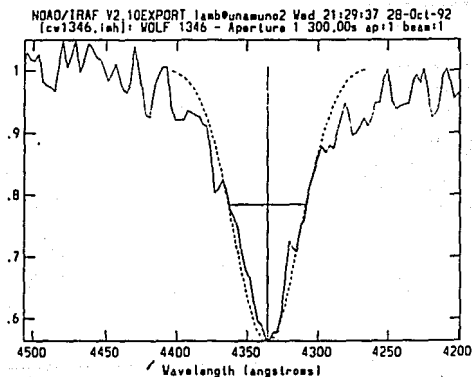


Fig. 4.3. Estrella *Wolf 1346*,  $\lambda=4340\text{\AA}$ ,  $FWHM=51.46\text{\AA}$ , ajuste Gaussiano.

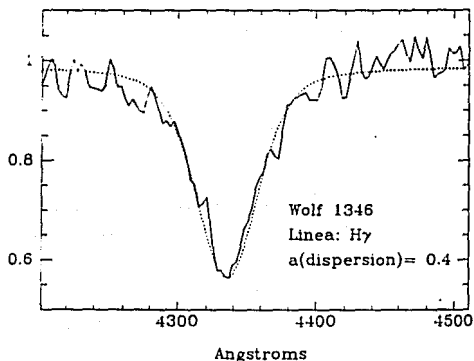


Fig. 4.4. Estrella *Wolf 1346*,  $\lambda=4340\text{\AA}$ ,  $FWHM=51.05\text{\AA}$ , ajuste Voigt.

Estrella: Feige 56, Tipo Espectral: B5p,  $m_{5556}=11.11$ .

Detector: CCD.

Dispersión Espectral: 1.01 Å/pixel.

Fecha de observación: 02/02/91.

Observatorio: Observatorio Astronómico Nacional en San Pedro Mártir, B. C.

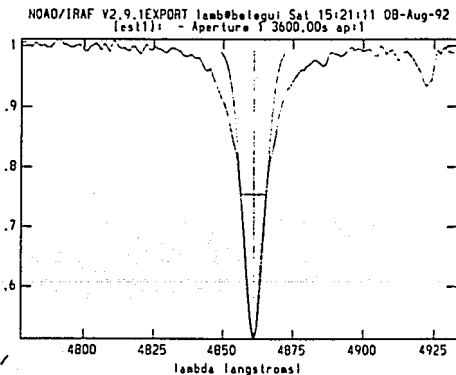


Fig. 4.5. Estrella Feige 56,  $\lambda=4861\text{\AA}$ ,  $FWHM=9.2\text{\AA}$ , ajuste Gaussiano.

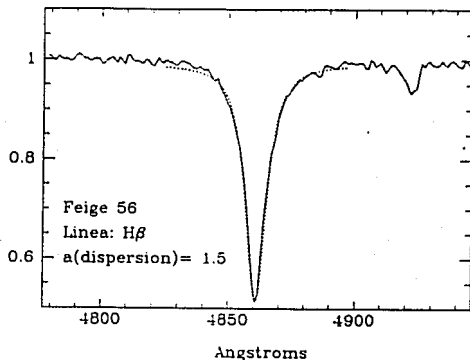


Fig. 4.6. Estrella Feige 56,  $\lambda=4861\text{\AA}$ ,  $FWHM=9.7\text{\AA}$ , ajuste Voigt.

Estrella: Feige 110, Tipo Espectral: sdO,  $m_{5556}=11.88$ .

Detector: CCD.

Dispersión Espectral:  $1.97 \text{ \AA}/\text{pizel}$ .

Fecha de observación: 12/08/92.

Observatorio: Observatorio Astronómico Nacional en San Pedro Mártir, B. C.

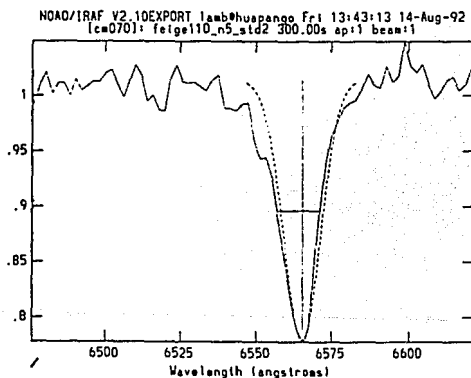


Fig. 4.7. Estrella Feige 110,  $\lambda=6563\text{\AA}$ ,  $FWHM=14.59\text{\AA}$ , ajuste Gaussiano.

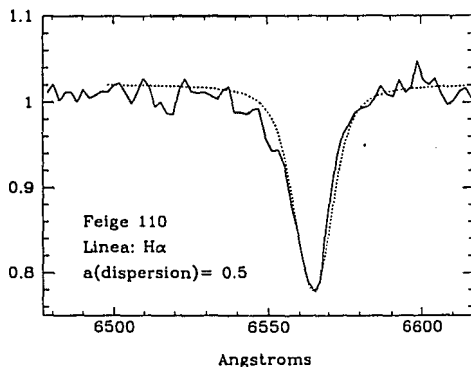


Fig. 4.8. Estrella Feige 110,  $\lambda=6563\text{\AA}$ ,  $FWHM=14.82\text{\AA}$ , ajuste Voigt.

Estrella: *LTT 2415*,  $m_{6556} = 12.2$ .

Detector: *CCD*.

Dispersión Espectral:  $1.97 \text{ \AA/pixel}$ .

Fecha de observación: *12/08/92*.

Observatorio: *Observatorio Astronómico Nacional en San Pedro Mártir, B. C.*

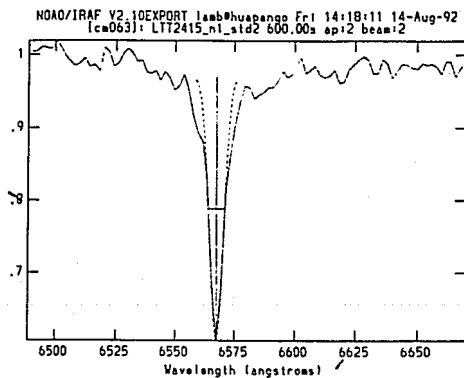


Fig. 4.9. Estrella *LTT 2415*,  $\lambda = 6563 \text{ \AA}$ ,  $FWHM = 7.16 \text{ \AA}$ , ajuste Gaussiano.

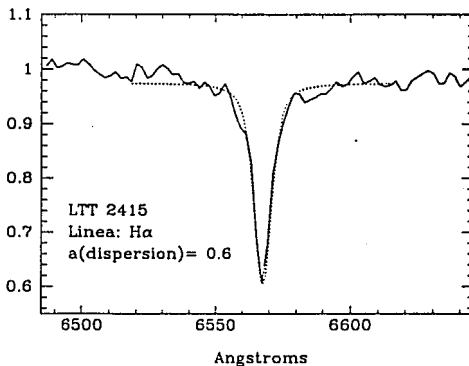


Fig. 4.10. Estrella *LTT 2415*,  $\lambda = 6563 \text{ \AA}$ ,  $FWHM = 8.00 \text{ \AA}$ , ajuste Voigt.

Estrella: HD 50896, Tipo Espectral: WN5,  $m_v=6.94$ .

Detector: CCD.

Dispersión Espectral:  $1.01 \text{ \AA/pixel}$ .

Fecha de observación: 24/09/91.

Observatorio: Observatorio Astronómico Nacional en San Pedro Mártir, B. C.

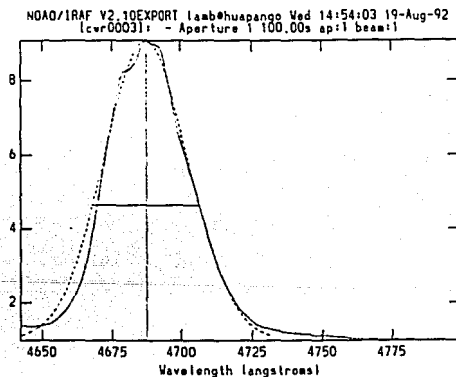


Fig. 4.11. Estrella HD 50896,  $\lambda=4686\text{\AA}$ ,  $FWHM=34.94\text{\AA}$ , ajuste Gaussiano.

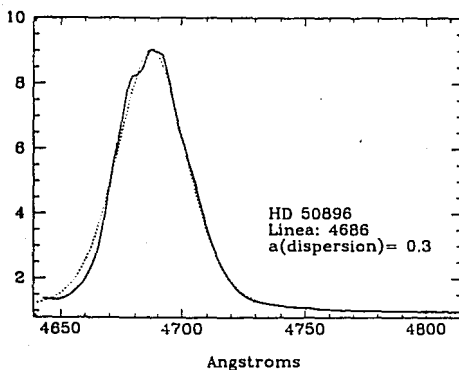


Fig. 4.12. Estrella HD 50896,  $\lambda=4686\text{\AA}$ ,  $FWHM=33.31\text{\AA}$ , ajuste Voigt.

Una posible aplicación de los perfiles de Voigt, aunque muy simple, es el de servir como referencia para observar la variabilidad de los perfiles de las líneas espectrales.

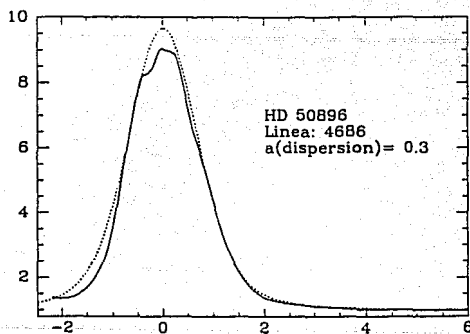


Fig. 4.13. Estrella HD 50896,  $\lambda=4686\text{\AA}$ .

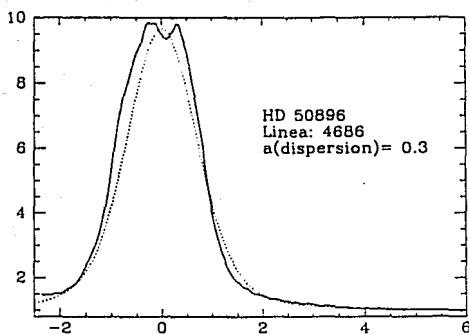


Fig. 4.14. Estrella HD 50896.  $\lambda=4686\text{\AA}$ . observada dos días después

#### 4.1. Conclusiones.

- En este capítulo se presentan algunos ajustes de líneas espectrales observadas por perfiles de Voigt, calculados con el algoritmo propuesto en el Capítulo 3; lo cual muestra la viabilidad de utilizarla en el ajuste de líneas. En principio se encuentra que dada una línea espectral, se necesitan cuatro parámetros para ajustarle un perfil de Voigt: la  $a$  (dispersión), un factor de escala en la abscisa, un factor de escala en la ordenada y una constante traslación que depende de la línea. Existe una posibilidad de que se pueda prescindir del último parámetro, en función de cómo se calcule el perfil de Voigt.

- El perfil de Voigt es la convolución de un perfil térmico y un natural, lo que permite tener en principio ambos tipos de perfiles en el de Voigt, sin embargo al de tratar de aproximar una línea con una función, el perfil de Voigt no siempre es el mejor, ya que hay líneas que son mejor aproximadas por un perfil térmico (gausiana) o por un natural (lorentziana). Estos casos se pueden considerar como los extremos del intervalo de funciones susceptibles de ser utilizadas en el ajuste, quedando en la parte media el perfil de Voigt. La razón por la que en ocasiones el perfil térmico es mejor que el de Voigt, se debe a que la línea no tiene alas muy largas, teniéndose solo el centro de ésta, para lo cual basta un ajuste gaussiano, como se muestra en la fig. 4.15, además de la simplificación en el cálculo de la función. Por su parte el perfil natural es mejor que el de Voigt, cuando las líneas tienen alas muy grandes. En la fig. 4.16, se presenta un ejemplo de ajuste lorentziano a una línea.

- El criterio para decidir que tipo de perfil utilizar, depende de la calidad de las observaciones, la dispersión espectral, la extensión de las alas y las necesidades del astrónomo.

- Se encontró que las líneas de absorción intensas, que no presentan asimetría, ni subestructura fina, se pueden aproximar bien con perfiles de Voigt. Afirmación que concuerda con Van de Hulst et al. (1947).

Estrella: 209BAC, Tipo Espectral: WN8,  $m_v = 11.03$ .

Detector: CCD.

Dispersión Espectral: 0.15 Å/píxel.

Fecha de observación: 07/09/89.

Observatorio: Observatorio Nacional de Kitt Peak, E.U.A.

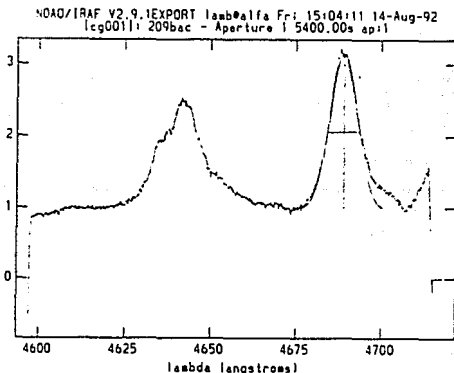


Fig. 4.15. Estrella 209BAC,  $\lambda = 4686\text{\AA}$ , ajuste Gaussiano.

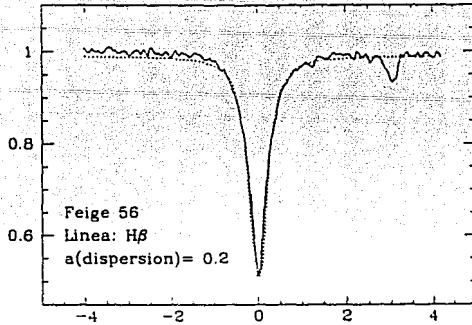


Fig. 4.16. Estrella Feige 56,  $\lambda=4861\text{\AA}$ , ajuste Lorentziano.

El ajuste de los perfiles de Voigt presentados al inicio de este capítulo se hicieron mediante prueba y error. De este hecho se pueden desprender 4 líneas de trabajo posterior:

- Buscar un algoritmo que permita dada una línea espectral, ajustarle el mejor perfil de Voigt, esto conlleva verificar si los tres primeros parámetros mencionados en la conclusiones son suficientes o existen otros que pueden ser utilizados. Por otra parte, algunos autores (Van de Hulst et al. 1947) han propuesto diferentes métodos analíticos y tabulares para ajustar perfiles a líneas espectrales dadas; habría que estudiarlos con detalle para explorar su implementación numérica.

- Hay estudios de la *función generalizada de Voigt* (Cope et al. 1988) en los cuales se consideran las asimetrías de las líneas; al igual que el caso anterior habría que estudiar su implementación numérica.

- Hacer un muestreo para verificar bajo que condiciones la afirmación, de que líneas preferentemente en absorción, tienden a ser cercanas a perfiles de Voigt.

- Estudiar la manera de separar componentes mezcladas en una sola línea espectral.

## APENDICE A

### La Función de Dawson.

La función de Dawson

$$F(u) = e^{-u^2} \int_0^{\infty} e^{t^2} dt,$$

no sólo está relacionada con la función de Voigt, sino también con otras funciones especiales tales como la función de error, la función compleja de probabilidad, por lo cual ha sido estudiada por varios autores entre ellos Clenshaw (1955) y Erdelyi et al. (1953), quienes proponen diferentes métodos para su cálculo.

Hummer (1965) genera  $F(u)$  de una expansión en términos de polinomios de Chebyshev obteniendo

$$F(u) = \sum_{n=0}^{33} a_n T_{2n+1}(u/5), \quad |u| \leq 5$$

donde  $T_n(u) = \cos(ncos^{-1}u)$ . Las  $a_n$  son los coeficientes que calculó Hummer (1964).

a(0)=.1999999999972224	a(17)=-.27876379719D-5
a(1)=-.184000000029998	a(18)=.8566873627D-6
a(2)=-.1558399999965025	a(19)=-.2518433784D-6
a(3)=-.1216640000043988	a(20)=-.709360221D-7
a(4)=-.0877081599940391	a(21)=-.191732257D-7
a(5)=-.0585141248086907	a(22)=-.49801256D-8
a(6)=-.0362157301623914	a(23)=-.12447734D-8
a(7)=-.0208497654398036	a(24)=-.2997777D-9
a(8)=-.0111960116346270	a(25)=-.696450D-10
a(9)=-.562318961671090D-2	a(26)=-.156262D-10
a(10)=-.26487634172265D-2	a(27)=-.33897D-11
a(11)=-.11732670757704D-2	a(28)=-.7116D-12
a(12)=-.4899519978088D-3	a(29)=-.1447D-12
a(13)=-.1933630801528D-3	a(30)=-.285D-13
a(14)=-.722877446788D-4	a(31)=-.55D-14
a(15)=-.256555124979D-4	a(32)=-.10D-14
a(16)=-.86620736841D-5	a(33)=-.2D-15

Para evaluar esta suma, se define la secuencia  $b_n$  con el algoritmo de Clenshaw, donde

$$b_{N+1} = b_{N+2} = 0$$

y

$$b_n = [4(u/5)^2 - 2]b_{n+1} - b_{n+2} + a_n, \quad n = N, N-1, \dots, 0$$

con lo que

$$F(u) = u(b_0 - b_1)/5$$

Al comparar  $F(u)$ , para  $0 \leq u \leq 2$ , con las tablas dadas por Abramowitz et al. (1972), salvo en casos raros, utilizando doble precisión, la congruencia fué de los 10 dígitos dados por Abramowitz et al. Sin embargo el algoritmo es válido solo hasta  $u = 5.7$ , ya que para  $u \geq 5.71$  el algoritmo arroja valores negativos.

Erdelyi et al. (1953) dan la siguiente expansión asintótica, válida para  $1 \ll u$ .

$$F(u) = \frac{1}{2u} + \frac{1}{2^2 u^3} + \frac{1.3}{2^3 u^5} + \frac{1.3.5}{2^4 u^7} + \dots \quad (A1)$$

Esta expresión es adecuada para valores de  $u$  mayores que 4.00, en el siguiente sentido: si consideramos el algoritmo de Clenshaw como referencia (que es muy exacto de acuerdo con las tablas de Abramowitz et al.) en el intervalo  $[0, 5]$ , los valores dados por la expansión asintótica coinciden en 5 dígitos en  $[4, 5]$ , de modo que para calcular  $F(u)$  en valores mayores que 5.00 se propone utilizar la serie (A1).

En la fig. A.1 se ilustra de manera gráfica el comportamiento de ambos métodos.

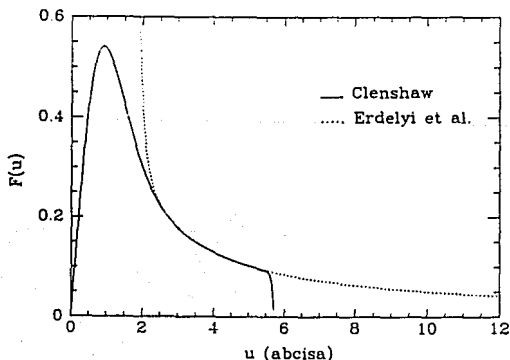


FIG. A.1

## APENDICE B

### El Código que genera la Función de Voigt.

Este programa calcula la función de Voigt en tres partes. En la parte uno, se calcula la función de Voigt con el algoritmo de Hummer. En la parte dos, se utiliza el algoritmo de Hjerting. En la parte tres, se utiliza el método de Posener-Kopal.

```
PROGRAM VOIGT
  DOUBLE PRECISION U,A,V1,V2,V3
  C  DEFINICION DE VARIABLES.
  C  A: VALOR DE LA DISPERSION.
  C  U: VALOR DE LA ABCISA EN QUE SE CALCULA LA FUNCION VOIGT.

  C  LECTURA DE PARAMETROS.

  PRINT*.'VALOR DE A:'
  READ*.A
  PRINT*.'VALOR DE U:'
  READ*.U

  IF(A.EQ.0.00)GO TO 100
  IF(A.LE.2.50.AND.U.LE.10.0)GO TO 100
  IF(A.LE.0.50.AND.U.GT.10.0.AND.U.LT.20.0)GO TO 200

100 VOIGT=V1(U,A)
   GO TO 500
200 VOIGT=V2(U,A)
   GO TO 500
300 VOIGT=V3(U,A)
500 WRITE(*,*) U, A, VOIGT
   END

  C  CALCULO DE LA FUNCION VOIGT UTILIZANDO EL METODO DE HUMMER.

  FUNCTION V1(U,A)
  C  DEFINICION DE VARIABLES.
  C  C(N): COEFICIENTES PARA CALCULAR LA FUNCION DE DAWSON CON
  C  EL ALGORITMO DE CLENSHAW (VER APENDICE A).
  C  F: VALOR DE LA FUNCION DE DAWSON EN EL PUNTO U.
  C  H(N): VALOR DEL DIVIDENDO EN LA SUMA 3.3.

  DOUBLE PRECISION V1,U,A,C(50),F,I(100),SUMA,BN,BN1,BN2,K
  IF(U.GT.5.0)GO TO 102
```

C CALCULO DE LA FUNCION DE DAWSON CON EL ALGORITMO DE  
C CLENSHAW.

C(1)=.199999999972224  
 C(2)=-.1840000000029998  
 C(3)=.1558399999965025  
 C(4)=-.1216640000043988  
 C(5)=.0877081599940391  
 C(6)=-.0585141248086907  
 C(7)=.0362157301623914  
 C(8)=-.0208497654398036  
 C(9)=.0111960116346270  
 C(10)=-.562318961671090D-2  
 C(11)=.26487634172265D-2  
 C(12)=-.11732670757704D-2  
 C(13)=.4899519978088D-3  
 C(14)=-.1933630801528D-3  
 C(15)=.722877446788D-4  
 C(16)=-.256555124979D-4  
 C(17)=.86620736841D-5  
 C(18)=-.27876379719D-5  
 C(19)=.8566873627D-6  
 C(20)=-.2518433784D-6  
 C(21)=.709360221D-7  
 C(22)=-.191732257D-7  
 C(23)=.49801256D-8  
 C(24)=-.12447734D-8  
 C(25)=.2997777D-9  
 C(26)=-.596450D-10  
 C(27)=.156262D-10  
 C(28)=-.33897D-11  
 C(29)=.7116D-12  
 C(30)=-.1447D-12  
 C(31)=.285D-13  
 C(32)=-.55D-14  
 C(33)=.10D-14  
 C(34)=-.2D-15  
 BN1=0  
 BN2=0  
 DO 101 K=1,34  
 BN=(4\*((U/5)\*\*2)-2)\*BN1-BN2+C(35-K)  
 BN2=BN1  
 BN1=BN  
 101 CONTINUE  
 F=U\*(BN1-BN2)/5  
 GO TO 110

C CALCULO DE LA FUNCION DE DAWSON CON LA SERIE DE ERDELYI ET AL.

102 K=1  
 DO 103 M=1,9  
 P=10-M  
 K=(2\*P-1)/(2\*U\*\*2)\*K  
 K=1+K  
 103 CONTINUE  
 F=(1/(2\*U))\*K

C CALCULO DE LAS I's.

```
110 I(0)=1.77245385*EXP(-U**2)
    I(1)=2*(-F*2*U+1)
    I(2)=-I(0)*(4*U**2-2)
    I(3)=2*(F*(8*U**3-12*U)-4*U**2+4)
    DO 111 M=4,50
    P=M-2
    Q=M-4
    I(M)=2*(2*M-3-2*U**2)*I(P)-4*(M-2)*(M-3)*I(Q)
111 CONTINUE
    SUMA=I(50)
    DO 112 M=1,50
    P=51-M
    SUMA=(A/P)*SUMA
    SUMA=I(P-1)-SUMA
112 CONTINUE
    V1=SUMA/1.77245385
    END
```

C CALCULO DE LA FUNCION VOIGT CON EL METODO DE HJERTING.

```
FUNCTION V2(U,A)
DOUBLE PRECISION V2,U,A,SUMA
SUMA=1+3/(2*U**2)+15/(4*U**4)+105/(6*U**6)+945/(8*U**8)
V2=(A/(1.77245385*U**2))*SUMA
END
```

C CALCULO DE LA FUNCION VOIGT CON EL METODO DE POSENER-KOPAL.

```
FUNCTION V3(U,A)
C DEFINICION DE VARIABLES.
C R(N): VALORES DE LAS RAICES DEL POLINOMIO DE HERMITE DE
C ORDEN 20.
C H(N): VALORES DE PESO PARA LA CUADRATURA DE GAUSS-HERMITE.
```

```
DOUBLE PRECISION V3,U,A,H(10),R(10),G
H(1)=4.62243670D-1
H(2)=2.86675505D-1
H(3)=1.09017206D-1
H(4)=2.48105209D-2
H(5)=3.24377331D-3
H(6)=2.28336936D-4
H(7)=7.80255648D-6
H(8)=1.08606957D-7
H(9)=4.39934099D-10
H(10)=2.22939365D-13
R(1)=0.245340708
R(2)=0.737473729
R(3)=1.2340762
R(4)=1.73853771
R(5)=2.25497400
R(6)=2.78880606
R(7)=3.34785457
```

```
R(8)=3.94476404
R(9)=4.60368245
R(10)=5.38748089
G=0.0D0
DO 301 I=1,10
G=G+(1.0D0/((U-R(I))**2+A**2)+1.0D0/((U+R(I))**2+A**2))*H(I)
301 CONTINUE
V3=0.318309886*A*G
END
```

BIBLIOGRAFIA

- Abramowitz, M; Stegun, I. A. 1972. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York.
- Aguilar, L. A. 1980. *Análisis de Fourier de Líneas Espectrales en Atmósferas Estelares*. Tesis Profesional, Facultad de Ciencias, UNAM; México.
- Aller, L. H. 1963. *Astrophysics; The Atmospheres of the Sun and Stars*. Ronald Press, New York.
- Andersen, T.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. Vol. 19, 169, 1978.
- Armstrong, B. H.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. Vol. 7, 61, 1967.
- Balfour, A.; Marwick, D. H. 1979. *Programming in Standard Fortran 77*. North-Holland, New York.
- Bracewell, R. N. 1978. *The Fourier Transform and Its Applications*. McGraw-Hill, 2nd. Ed.
- Cope, D.; Khoury, R.; Lovett, R. J.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. Vol. 39, 163, 1988.
- Drayson, S. R.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. Vol. 16, 611, 1976.
- Dwight, H. B. 1961. *Tables of Integrals and Other Mathematical Data*. McMillan, New York.
- Erdelyi, A.; Oberbettinger, F.; Tricomi, F. G. 1953. *Higher Transcendental Functions*. Vols I, II. McGraw-Hill, New York.
- Faddeyeva, V. M.; Terent'ev, N. M. 1961. *Tables of Values of the Function  $w(z) = e^{-z^2}(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt)$ . For Complex Argument*. Pergamon Press, New York.
- Finn, G. D.; Mugglestone, D.; *Mon. Not. R. astr. Soc.* Vol. 129, 221, 1965.
- Gray, D. F. 1976. *The Observation and Analysis of Stellar Photospheres*. John Wiley & Sons.
- Gradstein, I. S.; Ryzhik, I. M. 1980. *Tables of Integrals, Series and Products*. Academic Press, 4th. Ed.
- Harris, D. L.; *Astrophys. J.* Vol. 108, 112, 1948.
- Hjerting, F.; *Astrophys. J.* Vol. 88, 508, 1938.
- Humlíček, J.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. Vol. 21, 309, 1979.
- Humlíček, J.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. Vol. 27, 437, 1982.
- Hummer, D. G.; *Mon. Not. R. astr. Soc.* Vol. 125, 21, 1962.
- Hummer, D. G.; *Mathematics of Computation*. Vol. 18, 317, 1964.
- Hummer, D. G.; *Mem. R. astr. Soc.* Vol. 70, 1, 1965.

- Karp, A. H.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 20, 379, 1978.
- Klim, A.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 26, 537, 1981.
- Kopal, Z. 1955. *Numerical Analysis.* Chapman & Hall Ltd. London.
- Kui, A. K.; Armstrong, B. H.; Wray, A. A.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 19, 509, 1978.
- Mihalas, D. 1978. *Stellar Atmospheres.* W.H. Freeman and Company, 2nd. Ed.
- Mitchell, A. C. G.; Zemansky, M. W. 1934. *Resonance Radiation and Excited Atoms.* Cambridge University Press.
- Penner, S. S. 1959. *Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities.* Addison-Wesley, Reading, Mass.
- Pierluissi, J. H.; Vanderwood, P. C.; Gómez, R. B.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 18, 555, 1977.
- Posener, D. W.; *Aust. J. Phys.* Vol. 12, 184, 1959.
- Reiche, F.; *Verh. Phys. Med. Ges.* Vol. 15, 67, 1913.
- Rybicki, G. B.; Ligthman, A. P. 1979. *Radiative Processes in Astrophysics.* John Wiley & Sons.
- Squire, W.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 23, 531, 1980.
- Sulzmann, K. G. P.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 29, 89, 1983.
- Terrill, H. M.; Sweeney, L.; *J. of the Franklin Institute.* Vol. 238, 220, 1944.
- Twitty, J. T.; Rarig, P. L.; Thompson, R. E.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* Vol. 24, 539, 1980.
- Van de Hulst, H. C.; Reesinck, J. J. M.; *Astrophys. J.* Vol. 106, 121, 1947.
- Voigt, W.; *S. B. Bayer Akad. Wiss.* 603, 1912.
- White, H. E. 1980. *Introduction to Atomic Spectra.* McGraw-Hill, Tokio.