УДК 535.375.5

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ИСТИННЫХ КОНТУРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

И. Д. Молоденкова и *И. Ф. Ковалев*

Разработана теория расчета истинных контуров спектральных линий по наблюдаемым контурам этих линий и аппаратной функции на основе метода регуляризации. Указанный метод применен к решению интегрального уравнения типа свертки. Приведен пример использования метода регуляризации при конкретных расчетах и дано сопоставление результатов расчета с соответствующими данными, получаемыми аналитическим методом.

Известно, что распределение энергии по спектру, получаемое с помощью реального спектрального аппарата, отличается от истинного. Даже при монохроматическом излучении контур каждой из спектральных линий искажается в связи с дифракцией на диафрагмах оптической системы, ее аберрациями, конечностью ширины щелей и некоторыми другими причинами. Задача восстановления истинного контура по наблюдаемому для линий комбинационного рассеяния света сводится к рассмотрению трех интегральных уравнений [1]

$$\left.\begin{aligned} k(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\lambda)\, a(x-\lambda)\, d\lambda, \\ \varphi(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k(x)\, \varphi_b(\lambda - x)\, dx, \\ k_b(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_b(\lambda)\, a(x-\lambda)\, d\lambda, \end{aligned}\right\} \qquad (1)$$

где $k(x)$ и $k_b(x)$ — соответственно наблюдаемые контуры исследуемой и возбуждающей линий, $\varphi(x)$ — функция, определяющая форму изучаемой спектральной линии (влияние возбуждающей линии не исключено), $\varphi_k(x)$ — функция, описывающая вид истинного контура этой линии, $\varphi_b(x)$ — истинного контура линии возбуждения, $a(x)$ — функция искажений спектрального прибора — аппаратная функция, x — точка в фокальной плоскости спектрального прибора ($x=0$ соответствует максимуму кривой, описывающей контур).

Общее решение уравнений (1) дано в [1]. Чтобы из общего решения получить в каждом конкретном случае вид истинного распределения и истинных параметров, характеризующих контур линии, можно воспользоваться и численными, и аналитическими методами [1–6]. Эти методы дают устойчивое решение лишь в случае изучения куполообразных колебательных полос [7]. Кроме того, аналитический метод связан с подбором аппроксимирующих функций, а численный требует большой информации, особенно в крыльях полос.

При исследовании более тонкой (например, вращательной) структуры оказывается удобным метод регуляризации Тихонова [8–10]. Он применяется для решения интегральных уравнений 1-го рода, в частности, типа сверток (1), и может быть использован как в спектроскопии комбинационного рассеяния, так и в инфракрасном поглощении. Метод требует знания аппаратной функции. В случае узкой возбуждающей линии, что имеет место в комбинационном рассеянии света, приближенно можно считать аппаратную функцию совпадающей с возбуждающей линией. Так как контуры наблюдаемой исследуемой линии и аппаратной функции оказываются усеченными, то вместо уравнения (1) при восстановлении истинного контура по наблюдаемому возможно рассмотрение приближенного уравнения

$$k(x) = \int_a^b \varphi(\lambda)\, a(x-\lambda)\, d\lambda. \tag{2}$$

В связи с этим возникает задача приближенного решения интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода типа свертки (2), где роль ядра играет аппаратная функция $a(x)$. При этом предполагается выполнение следующих условий, аналогичных [8]: 1) x и λ изменяются в одном интервале $[a, b]$, 2) уравнение (2) имеет решение $\varphi(\lambda)$ и притом единственное, 3) $\varphi(\lambda) \subset C_1[a, b]$, 4) правая часть уравнения (2) задана с погрешностью δ в пространстве $L_2[a, b]$, т. е. $\|k_\delta(x) - k(x)\| \leqslant \delta$ или $\left[\int_a^b [k_\delta(x) - k(x)]^2 dx\right]^{1/2} \leqslant \delta$, 5) ядро является ограниченной функцией.

Метод регуляризации приближенного решения уравнения Фредгольма 1-го рода общего вида

$$\int_a^b \varphi(\lambda)\, a(x, \lambda)\, d\lambda = \bar{k}(x), \quad a \leqslant \lambda \leqslant b, \quad c \leqslant x \leqslant d \tag{3}$$

сводится к решению краевой задачи интегро-дифференциального уравнения вида [8]

$$\left.\begin{aligned} &\alpha\left\{\frac{d}{d\lambda}\left[q\frac{d\varphi}{d\lambda} - p\varphi\right]\right\} - \left\{\int_a^b \bar{a}(\lambda, \xi)\,\varphi(\xi)\, d\xi - \bar{b}(\lambda)\right\} = 0, \\ &\varphi'(a) = \varphi'(b) = 0, \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

где

$$\bar{a}(\lambda, \xi) = \int_c^d a(\zeta, \lambda)\, a(\zeta, \xi)\, d\zeta, \tag{5}$$

$$\bar{b}(\lambda) = \int_c^d a(\zeta, \lambda)\, \bar{k}(\zeta)\, d\zeta. \tag{6}$$

При решении (4) нами применялся метод конечных разностей. Выбор сетки производился так, чтобы

$$\lambda_j = h_1(j + 0,5) \text{ и } \xi_i = ih \quad (i = 1, 2, \ldots, n),$$

где $h_1 = h = 1/n$. Интеграл $\int_a^b \bar{a}(\lambda, \xi)\,\varphi(\xi)\, d\xi$ взят по формуле прямоугольников

$$\int_a^b \bar{a}(\lambda, \xi)\,\varphi(\xi)\, d\xi = \sum_{i=1}^n \bar{a}(\lambda, \xi_i)\,\varphi(\xi_i)\, h + \rho(\lambda, h), \tag{7}$$

причем $\rho(\lambda, h)$ — погрешность аппроксимации. Выражения (5) и (6) вычислялись по формуле Симпсона

$$\bar{a}_{ji} = \sum_{k=1}^{m} a_{kj} a_{ki} \sigma_k h_1, \tag{8}$$

$$\bar{b}_j = \sum_{k=1}^{m} a_{kj} \bar{k}_k \sigma_k h_1, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n, \tag{9}$$

где σ_k — коэффициент формулы Симпсона, а $\bar{a}_{ji} = \bar{a}(\lambda_j, \xi_i)$, $\bar{b}_j = \bar{b}(\lambda_j)$. Дифференциальное уравнение (4) заменялось разностным

$$\alpha \left\{ \frac{1}{h^2} [q_j (\varphi_{j+1} - \varphi_j) - q_{j-1} (\varphi_j - \varphi_{j-1})] - p_j \varphi_j \right\} - \sum_{i=1}^{n} \bar{a}_{ji} \varphi_i h = -\bar{b}_j. \tag{10}$$

При этом использовалась аппроксимация второго порядка.

Для применения ЭЦВМ удобно систему (10) записать в виде

$$\alpha \left\{ \frac{1}{h^2} q_{j-1} \varphi_{j-1} - \left[(q_{j-1} + q_j) \frac{1}{h^2} + p_j \right] \varphi_j + \frac{1}{h^2} q_j \varphi_{j+1} \right\} - \sum_{i=1}^{n} \bar{a}_{ji} \varphi_i h = -\bar{b}_j, \tag{11}$$

$$\varphi_0 = \varphi_1, \quad \varphi_{n+1} = \varphi_n, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n.$$

Регуляризующий параметр выбирался по величине невязки на основе соотношения

$$\int_c^d \left[\int_a^b a(x, \lambda) \varphi^\alpha(\lambda) d\lambda - k_\delta(x) \right]^2 dx = \varepsilon^2. \tag{12}$$

Решение будет наилучшим, когда $|\varepsilon^2 - \delta^2|$ принимает минимальное значение.

В нашем случае x и λ изменяются в интервале $[a, b]$. q и p (весовые коэффициенты) принимаются равными единице.

Система линейных алгебраических уравнений (11) решалась видоизмененным методом Жордана. Ее решение проводилось многократно при различных значениях α. Величина α выбиралась как $\alpha_{k+1} = \alpha_k \Delta$, где $k=0, 1, 2, \ldots$, $\alpha_0 \Delta$ — исходная информация. Изменением Δ можно было добиться того, чтобы $|\varepsilon^2 - \delta^2| \leqslant \varepsilon_1$, где ε_1 — любое наперед заданное малое число.

В результате решения рассмотренной задачи получается усеченный контур в виде совокупности значений ординат. В случае линий комбинационного рассеяния полуширина контура находится как его ширина на половине высоты по интерполяционной формуле Эйткена. Интегральная интенсивность пропорциональна площади контура и определяется по формуле трапеции. Полученный усеченный контур с помощью графиков [2] приводится к полному.

Параметры линии 513 см$^{-1}$ в спектре комбинационного рассеяния $CHCl_2CHCl_2$, вычисленные аналитическим методом (аппроксимация функцией произведения) и методом регуляризации

Наименование параметров	Наблюдаемый контур		Эталон (802 см$^{-1}$)		Линия возбуждения 4358 Å	Вычисленный истинный контур	
	усеченный на 5δ	исправленный на усечение	усеченный на 5δ	исправленный на усечение		аналитический метод	метод регуляризации
J_0	102	108	464	483	76	96	97
δ	73	76	54	56	18	52	54
J_∞	9600	12864	32206	42511	2106	9161	9235

Примечание. Параметры даны в условных единицах.

В качестве примера использования метода регуляризации проведен расчет параметров линии 513 см в спектре комбинационного рассеяния $CHCl_2CHCl_2$. Результаты расчета в таблице сравниваются с соответствующими данными, полученными аналитическим методом [3]. Между ними наблюдается вполне хорошее согласие.

Литература

[1] М. М. Сущинский. ЖЭТФ, *25*, 87, 1953.
[2] М. М. Сущинский. Тр. ФИАН СССР, *12*, 54, 1960.
[3] И. Д. Морозова, И. Ф. Ковалев. Опт. и спектр., *27*, 930, 1969.
[4] И. Д. Морозова, И. Ф. Ковалев. Опт. и спектр., *28*, 69, 1970.
[5] И. Ф. Ковалев, И. Д. Молоденкова. Изв. вузов, физика, *7*, 142, 1970.
[6] А. Е. Болдескул, Г. П. Буян, И. И. Кондиленко, В. Н. Новиченко, Е. В. Погорелов. Опт. и спектр., *31*, 579, 1971.
[7] И. Д. Молоденкова. Сб. «Вычислительные методы и программирование», 14. Изд. Саратовского унив., Саратов, 1970.
[8] А. Н. Тихонов. ДАН СССР, *151*, 501, 1963.
[9] А. Н. Тихонов, В. Б. Гласко. ЖВМ и МФ, *4*, 3, 564, 1964.
[10] А. Н. Тихонов. Сб. «Вычислительные методы и программирование», 3. Изд. МГУ, М., 1964.

Поступило в Редакцию 14 июля 1972 г.