

О МЕТОДАХ КОРРЕКТНОЙ ОБРАБОТКИ
КОНТУРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙС. Л. Изотова, Н. Г. Преображенский,
Б. Э. Тамбовцев и М. С. Фриш

Рассматривается серия обратных задач, являющихся характерными этапами обработки экспериментально получаемых контуров спектральных линий с целью диагностики плазмы. Эти задачи, как правило, оказываются некорректными, по Адамару, и для их решения необходимо применять те или иные способы регуляризации. При этом рациональным является выбор таких диагностических схем, в которых искомый физический параметр находится в результате прохождения минимального числа звеньев полной цепи математической обработки контура. Экспериментально исследован контур резонансной линии изотопа Rb^{87} λ 794.7 нм с применением простого и сложного интерферометров Фабри—Перо, а также одночастотного газового лазера для нахождения полной аппаратной функции прибора. Обработка контуров производилась на ЭВМ с помощью методов статистической регуляризации и наименьших квадратов. Найдена температура атомов рубидия в безэлектродной высокочастотной лампе типа Белла—Блюма.

Введение

При нахождении параметров плазмы по контурным характеристикам спектральных линий часто не удается объективно оценить эффективность и точность используемой диагностической процедуры, поскольку непосредственному извлечению того или иного параметра обычно предшествует целая цепь операций, являющихся источниками плохо контролируемых погрешностей. В значительной степени эти трудности бывают обусловлены следующим обстоятельством. В процессе обработки спектра приходится решать совокупность обратных задач, в общем виде описываемых уравнением

$$K\varphi = f, \quad (1)$$

где $\varphi \in G_1$ — искомая, а $f \in G_2$ — заданная (со случайной погрешностью) функции, G_1 и G_2 — некоторые метрические пространства, K — компактный оператор с областью определения G_1 и областью значений G_2 .

Согласно Адамару [1], обратная задача может считаться поставленной корректно, если решение а) существует для любого $f \in G_2$, б) единственно в G_1 , в) непрерывно зависит от $f \in G_2$. В спектроскопии плазмы условие а) обычно выполняется. Что же касается условий б) и в), то их нарушение — явление довольно распространенное, так что часто не существует определенного и непрерывного во всем пространстве G_2 обратного оператора K^{-1} . К тому же чисто формальное выполнение условий корректности, по Адамару, еще не гарантирует от значительной потери точности при обработке полученных экспериментально «входных данных» [2] (в нашем случае контурных характеристик).

В связи со сказанным представляет интерес проследить за основными этапами расчета, ведущего к нахождению первоначальных спектральных распределений (например, доплеровского или штарковского профилей), уже непосредственно связанных с локальными параметрами плазмы: температурой атомов, плотностью электронов и т. п. Описываемые далее эксперименты иллюстрируют эффективность этих расчетов и позволяют

в известной степени дополнить последние информацией, обеспечивающей единственность решения и необходимую узость коридора ошибок, определяемого соответствующей ковариационной матрицей.

Х а р а к т е р н ы е о б р а т н ы е з а д а ч и с п е к т р о с к о п и и в ы с о к о г о р а з р е ш е н и я

Ограничимся для простоты рассмотрением оптически тонкой плазмы, обладающей осевой или центральной симметрией, и рассмотрим типичную последовательность расчетных операций, производимых над полученным экспериментально участком спектрального распределения $I_0(\nu, x)$. Здесь ν — частота, x — кратчайшее расстояние от оси или центра симметрии до выбранного «луча зрения».

1. Р е д у к ц и я к и д е а л ь н о м у с п е к т р а л ь н о м у п р и б о р у (исключение аппаратной функции $A(\nu)$). Эта классическая задача, поставленная еще Релеем, обычно формулируется с помощью интеграла свертки с разностным ядром

$$\int_0^{\infty} A(\nu - \nu') I_1(\nu', x) d\nu' = I_0(\nu, x). \quad (2)$$

Как известно, стремление восстановить контур $I_1(\nu, x)$ со всеми деталями структуры в центре линии и особенно на ее краях в данном случае наталкивается на препятствие в виде неустойчивости алгоритма, что отражает нарушение условия корректности в). Исследование этой задачи с помощью современных вычислительных методов [3, 4] заставляет отдать предпочтение процедуре статистической регуляризации с дополнением обычного алгоритма схемой учета неотрицательности иско- мой функции.

2. И с к л ю ч е н и е и с к а ж е н и й, в н о с и м ы х с к а н и р у ю щ е й п р и е м н о й с и с т е м о й. Учет отсутствия мгновенной реакции на изменение сигнала, связанного с инерционностью любого приемно-регистрирующего устройства, очень часто можно произвести по следующей схеме, приводящей к решению интегрального уравнения Вольтера 1-го рода [5, 6]

$$\int_{-\infty}^t \varphi(t') \frac{d}{dt} H(t-t') dt' = f(t). \quad (3)$$

Здесь $f(t)$ — регистрируемый сигнал, $H(t)$ — переходная функция, характеризующая реакцию системы на единичный импульс, а по Фурье-трансформанте $\varphi(t)$ можно однозначно определить корректировочную функцию $\chi(\nu)$, находя затем, согласно формуле

$$I_2(\nu, x) = \chi(\nu) I_1(\nu, x), \quad (4)$$

«исправленное на сканирование» распределение $I_2(\nu, x)$. Если не принять специальных мер [7], то погрешность в ядре уравнения (3) может возрасти настолько, что восстановление $\varphi(t)$ и расчет $\chi(\nu)$ окажутся беспредметными. Произведенные оценки показывают, что на практике выгоднее ограничивать скорость сканирования спектра сверху, налагая условие

$$0.9 \leq \chi(\nu) \leq 1.1 \quad (5)$$

для всей восстанавливаемой области частот.

3. У ч е т к о л е б а н и й п л а з м ы и р а д и а л ь н о г о р а с п р е д е л е н и я и н т е н с и в н о с т и в и с т о ч н и к а х. Известны удобные экспериментальные способы измерения плотности вероятности $\Phi(x)$ отклонения оси (центра) источника от некоторого фиксированного положения [8]. При этом переход от $I_2(\nu, x)$ к «исправленному на

колебания» кросс-распределению $I_3(\nu, x)$ описывается уравнением Фредгольма 1-го рода ($x \in [-R, R]$)

$$I_2(\nu, x) = \int_{-R}^R \Phi(x-x') I_3(\nu, x') dx'. \quad (6)$$

Хотя все сказанное относительно уравнения (2) в принципе справедливо и в данной ситуации, неустойчивость алгоритма выражена значительно слабее в силу конечных пределов интегрирования и характерных особенностей ядра. Поэтому можно, как это, например, сделано в [9], решать уравнение (6) после его дискретизации методом взаимных градиентов. В этом методе достаточно тривиально учитывается неотрицательность искомой функции I_3 , а минимизацией дисперсии

$$D^{(n)} = \frac{1}{N-n} \sum_{i=0}^N \left| \sum_{j=0}^N \Phi_{ij} I_{3j}^{(n)} - I_{2i} \right|^2 \quad (7)$$

(N — число дискретных интервалов) можно ограничить число итераций n , что следует расценивать как неявную регуляризацию решения.

Переход к обычно встречающемуся радиальному распределению интенсивности осуществляется с помощью известного преобразования Абеля

$$I_4(\nu, r) = \begin{cases} -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \int_r^R \frac{x I_3(\nu, x)}{\sqrt{x^2 - r^2}} dx, \\ -\frac{1}{\pi} \int_r^R \frac{dx}{\sqrt{x^2 - r^2}} \frac{d}{dx} I_3(\nu, x). \end{cases} \quad (8)$$

Стремление предотвратить большую потерю точности в процессе абелевой инверсии, связываемую как с аналитическими свойствами самого преобразования, так и с погрешностями дифференцируемой исходной функции, стимулировало в последнее время целый ряд исследований. Отметим, что ошибки в расчете $I_4(\nu, r)$ могут катастрофически возрасти, если в центральной области искомая функция имеет минимум. В работах [10, 11] предложен алгоритм, основанный на статистической регуляризации решения и обеспечивающий достаточно узкий коридор ошибок восстанавливаемой функции, который практически не чувствителен к положению экстремумов последней.

4. Разрешение сложной мультиплетной или сверхтонкой структуры. При решении типичных задач спектроскопии высокого разрешения может возникнуть необходимость выделить профили частично перекрывающихся m -компонентов локального спектрального распределения $I_4(\nu, r)$

$$I_4(\nu, r) = \sum_{i=1}^m I_{5i}(\nu, r). \quad (9)$$

Характерная априорная информация в данном случае включает в себя знание числа m и положений центров компонентов ν_i . Кроме того, нормируя на единицу профиль искомого i -го компонента $P_{5i}(\nu, r)$, часто бывает можно считать одинаковыми для всех i полуширины δ и некоторые формфакторы γ_k [12] (сами значения δ и γ_k неизвестны). В результате приходим к системе алгебраических уравнений вида

$$I_{4i} = \sum_{j=1}^m I_{5i}^{(0)} P_{5ij}, \quad j = 1, 2, \dots, m+k+1. \quad (10)$$

Систему (10) часто можно линеаризовать, но в общем случае она все же является плохо обусловленной и нуждается в применении тех или иных

методов регуляризации. Анализ этой задачи [13] показывает, что неустойчивость соответствующих алгоритмов весьма тесно связана с числом $(m+k+1)$ неизвестных параметров: $I_{5i}^{(0)}$, γ_k , δ .

Каждый из выделенных профилей I_{5i} может представлять собой еще достаточно сложную функцию частоты ν вследствие комбинации нескольких уширяющих факторов. Исследование процедуры окончательной сепарации I_{5i} [13] показывает, что с точки зрения условий корректности Адамара в данной задаче можно столкнуться с нарушением всех трех требований: существования, единственности и непрерывности решения. Анализ необходимой априорной информации позволяет выделить здесь четыре основных группы данных:

а) о возможности осуществления операции свертки (символ *)

$$I_{5i} = I_{6i} * I_{7i} * I_{8i} \dots, \quad (11)$$

т. е. о степени статистической зависимости сомножителей автокорреляционной функции амплитуды световой волны (см., например, [14]);

б) о числе свертываемых профилей, когда соотношение (11) оправдано;

в) о частотной зависимости I_{6i} , $I_{7i} \dots$ [15];

г) об аддитивных составляющих полуширин профилей I_{6i} , $I_{7i} \dots$ (таких, как вандерваальсова, штарковская и резонансная для профиля типа Коши, доплеровская и «турбулентная» [16] для профиля типа Гаусса и т. п.).

Отметим, что даже решение одной из простейших по постановке сепаративных задач, а именно задачи о выделении доплеровского и дисперсионного компонентов полуширины фойгтовского профиля, сопряжено с заметными осложнениями. Описанные в литературе приемы типа [17-19] нельзя, вообще говоря, признать удовлетворительными, поскольку они не позволяют по заданной ковариационной матрице для профиля, аппроксимлируемого функцией Хьертинга, определить погрешности искомых полуширин.

Таким образом, даже при заведомо упрощенных предположениях о свойствах исследуемого объекта имеется много факторов, способных сильно исказить результаты обработки контура линии. Отсюда вытекает необходимость, во-первых, тщательного выбора метода решения каждой из рассмотренных выше обратных задач и, во-вторых, использования таких диагностических схем, которые вели бы к цели, т. е. к нахождению искомого физического параметра быстрейшим путем без прохождения всех звеньев цепи: $I_0 \rightarrow I_1 \rightarrow I_2 \dots$. Условия проведения эксперимента, описываемого ниже, подбирались как раз с учетом указанных требований.

Редукция к идеальному прибору при обработке результатов записи резонансной линии рубидия

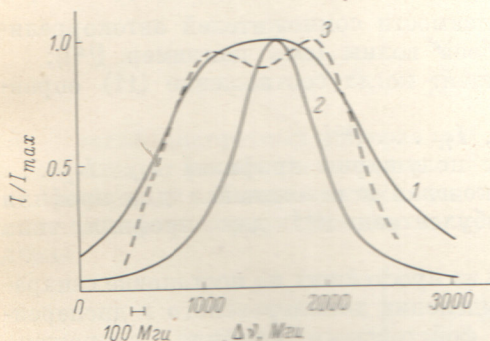
В качестве исследуемого источника излучения использовалась безэлектродная высокочастотная лампа типа Белла—Блюма, содержащая изотоп рубидия Rb^{87} [20-23]. Макроскопические колебания в источнике в данном случае были не существенны. Отпадала и необходимость в проведении абелевой инверсии, поскольку проверка показала применимость так называемого приближения локального возбуждения [25, 26], причем излучение узкого пристеночного слоя практически не поглощалось (были сделаны оценки по критерию оптической прозрачности [27]).

Контур резонансной линии рубидия $\lambda=794.7$ нм ($5^2S_{1/2}-5^2P_{1/2}$) регистрировался с помощью сканирующего интерферометра Фабри—Перо с интервалом свободной дисперсии 12 500 Мгц. Сверхтонкое расщепление нижнего состояния $^2S_{1/2}$ выбранной линии равняется 6834 Мгц, верхнего состояния $^2P_{1/2}$ —819 Мгц. В первой серии опытов спектральный прибор позволял разрешить лишь структуру, соответствующую расщеплению по нижнему состоянию, и для дальнейшей обработки выбирался длинноволновый компонент полученного распределения. Этот компонент пред-

ставлял собой результат наложения двух равноинтенсивных составляющих, теоретическое расстояние между которыми соответствует величине расщепления уровня ${}^2P_{1/2}$.

Поскольку в данном случае условие на скорость сканирования (5) было выполнено, аппаратную функцию прибора в целом можно было считать сверткой аппаратных функций интерферометра Фабри—Перо и сканирующей приемной системы. Для регистрации аппаратного контура применялся одночастотный гелий-неоновый лазер (419 Laser, Spectra—Physics), стабилизированный по лэмбовскому провалу.

Редукция контура длинноволнового компонента осуществлялась по методу статистической регуляризации [3]. В данной ситуации имел место наиболее трудный и неблагоприятный случай, когда полуширины исследуемой сложной структуры и аппаратного контура были близки друг



1 — контур длинноволнового компонента резонансной линии излучения Rb^{87} , зарегистрированный с использованием интерферометра Фабри—Перо; 2 — аппаратный контур установки (экспериментальная кривая); 3 — восстановленный контур по методу статистической регуляризации контура излучения источника.

к другу. На рисунке представлен зарегистрированный контур (структура совершенно не разрешена) и результат редукции, произведенный с помощью ЭВМ. Наблюдаемое отклонение от равноинтенсивности компонентов можно объяснить, по-видимому, наложением на коротковолновую компоненту Rb^{87} слабого излучения примеси изотопа Rb^{85} .

Наряду с этими экспериментами были предприняты дополнительные измерения, в которых использовался сложный интерферометр (мультиплекс) с отношением толщин 1 : 8. Особенности работы с этим прибором и, в частности, соответствующая ему аппаратная

функция обсуждаются в [4]. Отметим лишь, что интенсивность вторичных максимумов не превышала 2—3% от пиковой интенсивности основных максимумов, фаз между порядками был существенно ниже, а общий коэффициент контрастности выше, чем в случае работы с одним интерферометром Фабри—Перо. Суммарный аппаратный контур мультиплекса и сканирующей системы не превосходил (150 ± 10) Мгц, благодаря чему становилась возможной прямая регистрация расщепления длинноволнового компонента по верхнему состоянию ${}^2P_{1/2}$. Спектральное распределение, полученное с использованием мультиплекса, совпало с контуром, восстановленным по методу статистической регуляризации в пределах погрешностей обоих методов.

Наконец, процедура выделения профиля каждой из составляющих производилась методом наименьших квадратов. С помощью того же метода было установлено, что оба выделенных профиля хорошо (с точностью 3÷5%) аппроксимируются функцией Гаусса с шириной (770 ± 50) Мгц. Это и понятно, так как основным уширяющим фактором должен быть эффект Доплера, а уширение за счет столкновений излучающих атомов с атомами буферного газа (в данном случае криптона при давлении 3÷4 тора) становится существенным только в далеких крыльях линии. Температура атомов рубидия, определенная по доплеровской ширине, оказалась равной $(710 \pm 50)^\circ$ К.

Авторы благодарны Н. И. Калитеевскому за поддержку работы и полезные обсуждения.

Литература

- [1] J. H a d a m a r d. Le problème de Cauchy et les équations aux dérivées partielles hyperboliques. Hermann, Paris, 1932.
- [2] R. B e l l m a n, R. K a l a b a, J. L o c k e t t. Numerical inversion of the Laplace transform. Amer. Elsevier, New York, 1966.

- [3] Н. Г. Преображенский, Б. З. Тамбовцев. *Опт. и спектр.*, 35, 946, 1973.
- [4] В. Ф. Турчин, Л. С. Туровцева. *Опт. и спектр.*, 36, 280, 1974.
- [5] D. Steinhilber, H. Crosswhite, G. Dieke. *J. Opt. Soc. Am.*, 41, 299, 1954; *Spectrochim. Acta*, 5, 436, 1953.
- [6] S. Brodersen. *J. Opt. Soc. Am.*, 43, 1216, 1953.
- [7] Л. П. Грабарь. *ЖВМ и МФ*, 7, 1375, 1967.
- [8] А. С. Аньшаков, Г. Ю. Даутов, А. П. Петров. Сб. «Генераторы низкотемпературной плазмы», 394. Изд. «Энергия», М., 1969.
- [9] Н. Г. Колесников, Л. Т. Ларькина, В. С. Энгельшт. Изв. СО АН СССР, сер. техн. наук, № 3, 31, 1974.
- [10] В. В. Пикалов, Н. Г. Преображенский, Б. З. Тамбовцев. Сб. «Аэрофизические исследования», 2, 35. Новосибирск, 1973.
- [11] В. В. Пикалов, Н. Г. Преображенский. *Физика горения и взрыва*, № 6, 1974.
- [12] Г. Кофферман. *Ядерные моменты*. ИЛ, М., 1960.
- [13] Н. Г. Преображенский. Тр. Всесоюзного симпозиума «Исследование пространственно-неоднородной плазмы по контурам спектральных линий». Петрозаводск, 1974.
- [14] С. Г. Раутиан, И. И. Собельман. *Усп. физ. наук*, 90, 209, 1966.
- [15] Н. Г. Преображенский. *Опт. и спектр.*, 24, 12, 1968.
- [16] A. Unsöld. *Physik der Sternatmosphären*. Springer-Verlag, Berlin, 1955.
- [17] H. C. van de Hulst, J. J. M. Reesink. *Astrophys. J.*, 106, 121, 1947.
- [18] E. A. Ballik. *Appl. Optics*, 5, 170, 1966.
- [19] В. И. Иванов, И. С. Фишман. *Опт. и спектр.*, 35, 1175, 1973.
- [20] W. Bell, A. Bloom, J. Lynch. *Rev. Sci. Instrum.*, 32, 688, 1961.
- [21] R. Brewer. *Rev. Sci. Instrum.*, 32, 1356, 1961.
- [22] V. Budic, R. Novick, A. Lurio. *Appl. Optics*, 4, 229, 1965.
- [23] С. Л. Изотова, М. С. Фриш. *Опт. и спектр.*, 33, 798, 1972.
- [24] С. Л. Изотова, А. И. Канцеров, М. С. Фриш. Тр. Всесоюзного симпозиума «Исследование пространственно-неоднородной плазмы по контурам спектральных линий». Петрозаводск, 1974.
- [25] Tj. Hollander, H. P. Broida. *Combust. Flame*, 13, 63, 1969.
- [26] B. J. Jansen, Tj. Hollander, L. P. L. Franken. *Spectrochim. Acta*, 29B, 37, 1974.
- [27] Н. Г. Преображенский, Т. А. Шарпова. *ТВТ*, 9, 493, 1971.

Поступило в Редакцию 30 октября 1974 г.