

УДК 535.36

ОБ УЧЕТЕ АППАРАТУРНЫХ ИСКАЖЕНИЙ В СПЕКТРАХ РАССЕЯНИЯ МАНДЕЛЬШТАМА—БРИЛЛЮЭНА

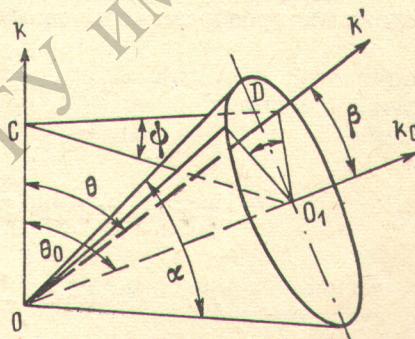
Н. Г. Преображенский, А. И. Седельников и И. Л. Чистый

Предложен метод редукции мандельштам-бриллюэнской компоненты к идеальной регистрирующей оптической системе, использующий технику регуляризации. С помощью модельных расчетов проанализирована возможность выбора оптимальных (в смысле точности восстановления) значений апертурного угла коллиматора и коэффициента отражения зеркал интерферометра.

1. Одной из наиболее важных задач исследования спектров рассеяния Мандельштама—Бринглюэна (МБ) является изучение фазовых переходов и особенностей распространения гиперзвукка в газах и конденсированных средах [1, 2]. При определенных предположениях относительно степени адиабатичности флуктуаций давления контур линии МБ оказывается дисперсионным, причем положение его максимума и значение полуширины связаны простыми соотношениями со скоростью и декрементом затухания гиперзвукка. Для проверки справедливости этих пред-

Рис. 1. Схема угловых переменных, используемых в расчетах.

Вектора k и k' направления падающего и рассеянного света, соответственно. Вектор k_0 — направление оптической оси системы регистрации рассеянного света.



положений необходимо по экспериментальным данным восстановить весь профиль истинного спектра МБ и сравнить его с расчетным. При этом приходится решать интегральное уравнение 1-го рода, т. е. иметь дело с типичной некорректной задачей [3].

Вопрос о связи истинного и искаженного контуров МБ довольно подробно рассматривался в работе [4], однако соответствующая обратная (редукционная) задача последовательного решения все же не получила. Основная трудность, как следует из [4], сопряжена с корректным учетом деформации контура, обусловленной анизотропией пучка рассеянного света на входе в регистрирующую систему. При этом из-за конечности апертуры пучка света, попадающего в коллиматор, в спектре присутствуют составляющие, которым отвечают различные углы рассеяния. На это обстоятельство, сильно усложняющее интерпретацию данных, указывалось и в более ранних работах [5–8].

Ниже предлагается способ достаточно общего решения данной задачи, причем показано, что существует возможность оптимизации самой процедуры записи спектра, выяснить которую позволяет лишь детальное математическое моделирование полной схемы редукции.

2. Пусть \mathbf{k} и \mathbf{k}' — соответственно волновые векторы облучающего света и света, рассеянного под углом θ нутри конуса с вершиной O и апертурным углом α (рис. 1). Направим по оси конуса базисный орт \mathbf{k}_0 , по отношению к которому направление вектора \mathbf{k}' будет определяться углами β и φ , причем φ отсчитывается от плоскости, образуемой векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}_0 . Согласно [6], контур линии, регистрируемой на выходе оптической системы, выражается в виде свертки аппаратной функции применяемого прибора высокой разрешающей силы (например, интерферометра Фабри—Перо) и некоторой интегральной функции $S(\omega)$, которая в наших обозначениях и в предположении однородности рассеивающего объема имеет вид

$$S(\omega) = \int_0^{\alpha/2} \int_0^{2\pi} B_1(\omega, \beta, \varphi) \sin \beta d\beta d\varphi, \quad (1)$$

где B_1 — неискаженный прибором контур МБ, соответствующий «бесконечно тонкому» лучу зрения.

Анизотропия контура B_1 фактически обусловлена углом θ , поэтому целесообразно произвести замену переменных (β, φ) на (θ, ψ) , где ψ — угол между плоскостями, образованными парами векторов \mathbf{k} , \mathbf{k}' и \mathbf{k} , \mathbf{k}_0 . Указанные углы связаны соотношениями

$$\begin{aligned} \cos \beta &= \cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos \psi, \\ \cos \theta &= \cos \beta \cos \theta_0 + \sin \beta \sin \theta_0 \cos \varphi, \end{aligned} \quad (2)$$

θ_0 — угол между \mathbf{k} и \mathbf{k}_0 . Эта замена переменных, очевидно, эквивалентна переходу от одной сферической системы координат к другой с неизменным центром O и полярным радиусом OD . Поскольку функция B_1 от угла ψ не зависит, то по ψ можно выполнить интегрирование. В результате после несложных преобразований вместо (1) получаем

$$S(\omega) = \int_{z_1}^{z_2} F(z) B_2(\omega, z) dz, \quad (3)$$

где

$$z = \sin \frac{\theta}{2}, \quad z_1 = \sin \left(\frac{\theta_0}{2} - \frac{\alpha}{4} \right), \quad z_2 = \sin \left(\frac{\theta_0}{2} + \frac{\alpha}{4} \right),$$

$$F(z) = 8z \arccos \left[\frac{\cos \frac{\alpha}{2} - \cos \theta_0 (1 - 2z^2)}{2 \sin \theta_0 z \sqrt{1 - z^2}} \right],$$

$$B_2(\omega, z) = B_1(\omega, \beta, \varphi).$$

В функции $B_2(\omega, z)$ зависимость от угла θ проявляется как через частотный сдвиг $\Omega(\theta)$, так и через полуширину $\delta(\theta)$ линии МБ. Как показано в [1], условие надежного разрешения спектра МБ на фоне интенсивной линии релеевского рассеяния имеет вид

$$\Omega(\theta) \gg \delta(\theta), \quad (4)$$

откуда легко заключить, что угол θ влияет на вид $B_2(\omega, z)$ в основном через сдвиг Ω , входящий в аргумент в виде комбинации $(\omega \pm \Omega)$, где знак $(-)$ соответствует стоксовой, а знак $(+)$ — антистоксовой компоненте. Поэтому целесообразно произвести еще одну замену переменной, а именно $\Omega = \mu z^1$ для стоксовой и $\Omega = -\mu z$ для антистоксовой компоненты, где

$$\mu = 2n\omega_0 v/c$$

(n — показатель преломления, ω_0 — частота возбуждающего света, c — скорость света в вакууме, v — скорость гиперзвука). Используя приве-

¹ В соответствии с физическим смыслом более точная замена переменных должна иметь вид $\Omega = \mu z (1 - \delta^2/(4\mu^2 z^2))^{1/2}$, однако в силу (4) вносимая при этом поправка пре-небрежимо мала.

денное выше выражение для Ω , а также зависимость $\delta = \mu_D z^2$ [1] (μ_D определяется декрементом затухания гиперзвука), можно показать, что с точностью до членов порядка $\alpha^2/4$ имеем для приращений $\Delta\Omega$ и $\Delta\delta$ соотношения $2\Delta\Omega = \Omega_0 \operatorname{ctg}(\theta_0/2)$ [8],

$$\Delta\delta = \alpha\delta_0 \operatorname{ctg}(\theta_0/2), \quad \epsilon = \Delta\delta/\Delta\Omega = 2\delta_0/\Omega_0,$$

где параметры с индексом O относятся к значениям при $\theta = \theta_0$. Если в рассматриваемом интервале θ пренебречь зависимостью δ от θ , то с точностью порядка ϵ можно $B_2(\omega, z)$ заменить функцией $B(\omega - \Omega)$ и вместо (3) получим

$$S(\omega) = \int_{\Omega_1}^{\Omega_2} A_0(\Omega) B(\omega - \Omega) d\Omega, \quad (5)$$

причем

$$A_0(\Omega) = F(m\Omega/\mu) \mu^{-1} m,$$

$m=1$ для стоковой и $m=-1$ для антистоковой компоненты.

Необходимо отметить, что в силу симметричности приращений $\Delta\delta$ относительно δ_0 при $\Delta\theta = \pm\alpha/2$ и сравнительно слабой асимметрии функции A_0 порядок чувствительности функции $S(\omega)$ к принятому упрощению будет существенно меньше ϵ .

Функцию $A_0(\Omega)$ следует считать аппаратной функцией коллиматора. Через параметр $\mu A_0(\Omega)$ зависит от скорости гиперзвука v , которая априори обычно не известна. Однако в качестве первого приближения можно принять $\mu_1 = \Omega_1 \sin^{-1}(\theta_0/2)$, где Ω_1 — положение точки максимума функции $S(\omega)$ относительно некоторой реперной частоты возбуждающего света. В $(i+1)$ -м приближении Ω_i отвечает положению максимума решения B уравнения (5), полученного методом регуляризации в i -м приближении. Признаком выхода из итерационного процесса может служить малое отличие Ω_i от Ω_{i+1} .

Наконец, принимая во внимание аппаратную функцию интерферометра $A_1(\omega)$ и учитывая известные свойства свертки, запишем окончательное выражение, связывающее регистрируемый $U(\omega)$ и истинный $B(\omega)$ контуры МБ.

$$\int_{\{\omega_2\}} A_1(\omega - \omega_2) \int_{\{\omega_1\}} A_0(\omega_2 - \omega_1) B(\omega_1) d\omega_1 d\omega_2 = U(\omega). \quad (6)$$

3. Если исследование спектров МБ производится на установке типа использованной в работе [5], то шумы, искажающие полезный сигнал, являются следствием флуктуаций в фотоприемнике и электрической схеме. Определяющими при этом являются тепловой (ϵ_1) и дробовой (ϵ_2) шумы [9]. Весьма распространенной в экспериментальной практике является приемно-регистрирующая система с экспоненциальной переходной функцией. Для этого случая шумы ϵ_1 и ϵ_2 характеризуются корреляционными функциями [10],

$$\left. \begin{aligned} Q_1(\omega_1, \omega_2) &= \frac{\eta_1}{2\pi} \exp\left[-\frac{|\omega_1 - \omega_2|}{w\tau}\right], \\ Q_2(\omega_1, \omega_2) &= \frac{\eta_2}{2\pi} U \min\{\omega_1, \omega_2\} \exp\left[-\frac{|\omega_1 + \omega_2|}{w\tau}\right], \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

где τ — постоянная времени системы, w — скорость сканирования (обычно $w\tau \ll 1$), η_1 , η_2 — положительные константы.

Поскольку при обработке экспериментальных контуров на ЭВМ приходится оперировать с дискретным набором значений U_i ($i=1, 2, \dots, N$), то шаг разбиения по переменной ω в силу малости $w\tau$ оказывается больше, нежели характерный интервал корреляции функций Q_1 и Q_2 . Вследствие этого имеем диагональные корреляционные матрицы

$$Q_{1ij} = q_1 \delta_{ij}, \quad Q_{2ij} = q_2 U_i \delta_{ij}, \quad (8)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, q_1 , $q_2 > 0$ — константы.

Шумовой фон дискретного сигнала сводится в этом случае к сумме двух дискретных белых шумов $\{\varepsilon_{1i}\}, \{\varepsilon_{2i}\}$, $i=1, 2, \dots, N$ с дисперсиями $s_{1i}^2 = q_1$ и $s_{2i}^2 = q_2 U_i$. В силу статистической независимости ε_1 и ε_2 для суммарной дисперсии i -го отсчета имеем

$$s_i^2 = q_1 + q_2 U_i. \quad (9)$$

Отсюда видно, что при увеличении U_i отношение сигнал / шум $U_i/\sqrt{q_1 + q_2 U_i}$ монотонно возрастает или, иными словами, относительный уровень шума правой части уравнения (6) уменьшается. Стремление же обеспечить по возможности узкие аппаратные функции A_1 и A_0 и тем самым приблизить $U(\omega)$ к $B(\omega)$ неизбежно связано с уменьшением U_i и ухудшением отношения сигнал/шум. Следовательно, существует некоторый оптимальный режим проведения эксперимента, позволяющий с привлечением методов регуляризации получить наилучшие результаты. Для определения такого режима на модельной задаче была осуществлена серия расчетов при различных соотношениях полуширины функций A_1 , A_0 и B .

4. В качестве точного модельного решения уравнения (6) был выбран дисперсионный профиль

$$B_0(\omega) = \delta_0^2 \frac{1}{(\omega - \Omega_0)^2 + \delta_0^2} \quad (10)$$

с полушириной $\delta_0 = 0.5$ ГГц и частотным сдвигом $\Omega_0 = 4$ ГГц. Аппаратурный контур A_1 моделировался функцией Эйри с коэффициентом отражения R ($0.8 \leq R \leq 0.98$) и дисперсионной областью 12.8 ГГц. Для задания функции $A_0(\omega)$ использовались параметры $\theta_0 = 80^\circ$, $\mu = \Omega_0/\sin(\theta_0/2)$, $6^\circ \leq \alpha \leq 38^\circ$. Значения полуширины аппаратной функции δ_A (в ГГц), определяемой в результате расчета свертки A_1 и A_0 , приведены в таблице.

Полуширина аппаратной функции A (δ_A) в ГГц и среднеквадратичная погрешность правой части s в %

α , град		R				
		0.98	0.95	0.90	0.85	0.80
6	δ_A	0.128	0.166	0.253	0.356	0.473
	s	14.1	8.73	6.20	5.14	4.61
14	δ_A	0.235	0.254	0.315	0.402	0.509
	s	5.28	3.56	2.73	2.26	2.01
18	δ_A	0.317	0.329	0.379	0.457	0.554
	s	3.96	2.72	2.00	1.72	1.55
22	δ_A	0.391	0.401	0.445	0.512	0.601
	s	3.21	2.24	1.66	1.40	1.26
30	δ_A	0.523	0.529	0.561	0.617	0.694
	s	2.43	1.71	1.25	1.06	0.95
38	δ_A	0.661	0.667	0.696	0.745	0.811
	s	2.01	1.39	1.02	0.87	0.77

Регуляризованное решение выбиралось в слоистом ансамбле гладких функций со стабилизатором 2-го порядка. Применялся вариант метода регуляризации, использующий преобразование Фурье, что в свою очередь налагает условие стационарности на шум функции $U(\omega)$, так как вместо дисперсии в этом случае используется спектральная плотность случайного процесса [11]. Именно берется соотношение

$$s^2 = s_1^2 + s_2^2 = q_1 + q_2 U_m, \quad (11)$$

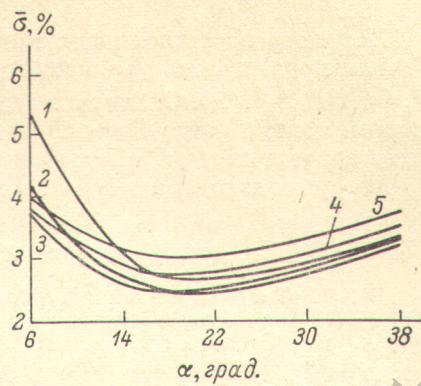
т. е. в расчетах фигурирует дисперсия, несколько большая, чем в (9) (U_m — максимум функции U).

Для «предельного» случая, отвечающего самой узкой полной аппаратной функции

$$A(\omega) = \int A_0(\omega - \omega_1) A_1(\omega_1) d\omega_1$$

($R_0=0.98$; $\alpha_0=6^\circ$), а следовательно, и наивысшему уровню шумов, принималось $s_{10}=s_{20}=10\%$. Тогда для любых значений R и α имеем

Рис. 2. Зависимость погрешности восстановления контура линии МБ от апертурного угла α при значениях коэффициента отражения R зеркал интерферометра: 0.98 (1), 0.95 (2), 0.90 (3), 0.85 (4), 0.80 (5).



$$s_1 = \frac{\sqrt{q_1}}{U_m} = s_{10} \frac{U_{m0}}{U_m}; \quad s_2 = \sqrt{\frac{q_2}{U_m}} = s_{20} \sqrt{\frac{U_{m0}}{U_m}}, \quad (12)$$

где U_{m0} — максимум U при $R=R_0$, $\alpha=\alpha_0$.

В таблице приводятся значения $\bar{s}=(s_1^2+s_2^2)^{1/2}$, а на рис. 2 семейство кривых, описывающих зависимость погрешности восстановления кон-

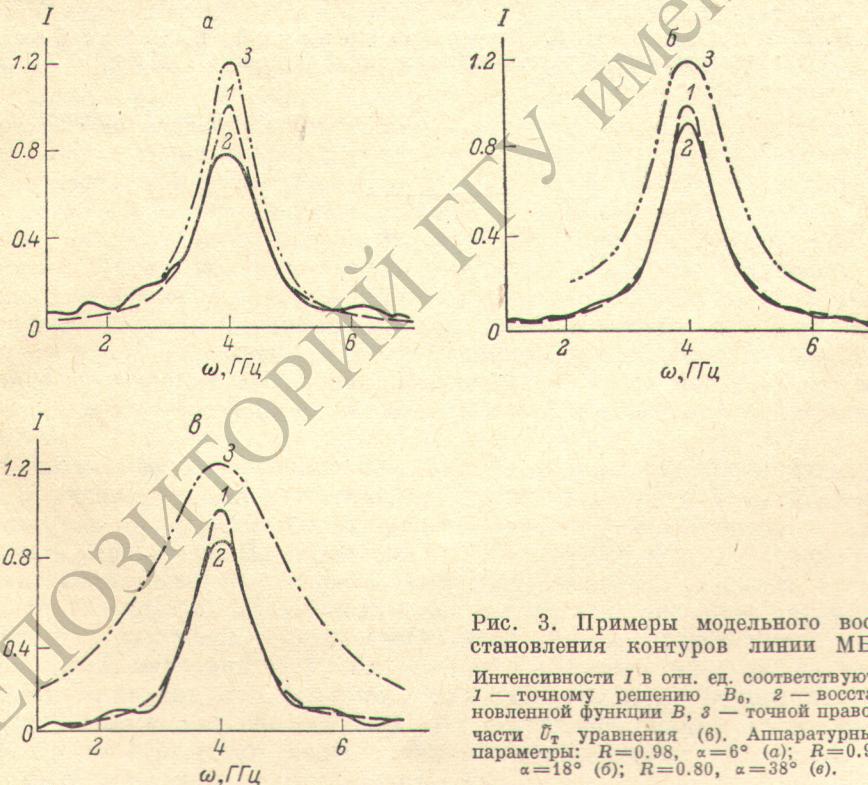


Рис. 3. Примеры модельного восстановления контуров линии МБ.

Интенсивности I в отн. ед. соответствуют:
1 — точному решению B_0 , 2 — восстановленной функции B , 3 — точной правой части \tilde{U}_t уравнения (6). Аппаратурные параметры: $R=0.98$, $\alpha=6^\circ$ (a); $R=0.95$, $\alpha=18^\circ$ (b); $R=0.80$, $\alpha=38^\circ$ (c).

тура МБ от апертурного угла α при нескольких значениях R . Указанная погрешность рассчитана по формуле

$$\sigma = B_0^{-1}(\Omega) \left(N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right)^{1/2}, \quad (13)$$

причем σ_i — дисперсия i -го отсчета ряда B_i , определяемая по известным соотношениям в методе статистической регуляризации [12]. Видно, что для заданного уровня шумов рационально выбирать параметры $R \approx 0.95$; $\alpha \approx 18^\circ$.

Характер восстановления контура линии МБ иллюстрируется рис. 3. Точная правая часть уравнения (6) приведена в относительных единицах: $\tilde{U}_t = 1.2 U_t B^{-1} (\Omega)$. Сравнение случаев a , b и e показывает, что восстановленный контур наилучшим образом совпадает с исходным при «оптимальных» значениях R и α , указанных выше.

Авторы благодарны В. Ф. Китаевой за полезные обсуждения.

Литература

- [1] И. Л. Фабелинский. Молекулярное рассеяние света. «Наука», М., 1965.
- [2] И. Л. Фабелинский, И. Л. Чистый. Усп. физ. наук, 179, 487, 1976.
- [3] А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. «Наука», М., 1974.
- [4] R. Vacher, L. Bouge. Rev. Phys. Appl., 11, 689, 1976.
- [5] И. Л. Чистый, В. Ф. Китаева, В. В. Осиоко, Н. Н. Соболев, Б. И. Стариков, М. П. Тимошечкин. ФТТ, 17, 886, 1969.
- [6] Y. Yeh. Appl. Opt., 8, 1254, 1969.
- [7] H. G. Danielmeier. J. Acoust. Soc. Am., 47, 154, 1970.
- [8] В. М. Рысаков. Опт. и спектр., 36, 1201, 1974.
- [9] В. Б. Давенпорт, В. Л. Рут. Введение в теорию случайных сигналов и шумов. ИЛ, М., 1960.
- [10] А. Г. Величко, М. Л. Кац, В. И. Цой. Опт. и спектр., 35, 759, 1973.
- [11] А. А. Свешников. Прикладные методы теории случайных функций. «Наука», М., 1968.
- [12] В. В. Пикалов, Н. Г. Преображенский, Б. З. Тамбовцев. В сб.: Некорректные обратные задачи атомной физики, 17. ИТПМ СО АН ССР, Новосибирск, 1976.

Поступило в Редакцию 16 января 1978 г.