

М.Ю. Катаев, О.Ю. Никифорова, И.В. Пташник

Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Часть 3. Влияние искажения центральной части контура линии поглощения при регистрации

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 1.09.2004 г.

На основе численного моделирования исследована погрешность восстановления параметров спектральной линии в условиях, когда в обработке отсутствует центральная часть контура (ЦЧК) (сильное поглощение). Приведены оценки значений случайного шума и ширины включаемого в обработку спектрального интервала, при которых влияние ЦЧК на восстанавливаемые параметры мало.

Введение

При экспериментальной регистрации спектра центральная часть контура наиболее сильных линий может быть искажена или даже полностью исключена из обработки вследствие сильного поглощения (оптическая толщина $> 4-5$). В качестве примера можно привести недавние работы [1–3], посвященные экспериментальному исследованию поглощения водяного пара методом Фурье-спектроскопии. Расширение динамического диапазона измерений в сторону охвата более сильных линий в таких случаях может быть экономически невыгодным ввиду необходимости конструирования дополнительных более коротких ячеек. Использование буферного газа с целью дополнительного уширения и, соответственно, снижения коэффициента поглощения в центре сильных линий исключено при необходимости изучения спектров самоуширения. Тем не менее, как показано, например, в [3], параметры таких (усеченных) линий могут быть восстановлены при подгонке оставшейся части контура линии, без использования искаженного центрального участка в обработке. При этом, однако, нам неизвестны работы, в которых бы проводились исследования погрешности восстановления параметров таких линий.

В [4, 5] на основе численного моделирования нами было изучено влияние величины шума измерений, фона и крыла соседней линии на погрешность восстановления центральной частоты, интенсивности и полуширины линии из фрагмента спектра поглощения или его производной по частоте. В данной статье мы исследуем погрешность восстановления параметров спектральной линии (центра, полуширины и интенсивности) в зависимости от ширины участка центральной части контура, исключенной из подгонки. В качестве варьируемых параметров рассматриваются также случайный шум и ширина включаемого в обработку спектрального интервала.

1. Моделирование фрагмента спектра

Линия поглощения располагалась в центре модельного фрагмента спектра. Центральная частота линии $\nu_0 = 7,5$ усл. ед. Масштаб частотной оси соответствовал шкале обратных сантиметров. Контур линии предполагался фойгтовским. Расчеты проведены для линии с интенсивностью $S = 1$, доплеровской полушириной $\gamma_D = 0,022 \text{ см}^{-1}$ и двух значений лоренцевской полуширины $\gamma_L = 0,022$ и $0,5 \text{ см}^{-1}$, соответствующих преимущественно доплеровскому и лоренцевскому типам контура. Модельный фрагмент рассчитан с равным шагом по частоте $\Delta\nu = 0,01 \text{ см}^{-1}$ (для $\gamma_L = 0,022 \text{ см}^{-1}$) и $0,1 \text{ см}^{-1}$ (для $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$), так что на полуширину моделируемой линии приходилось 4 и 5 точек соответственно.

На модельный фрагмент спектра наложен случайный шум, составляющий 0,5; 1 и 2% от уровня поглощения в центре линии. Относительные погрешности восстановления интенсивности и лоренцевской полуширины приведены в долях единицы, относительные погрешности центральной частоты — в долях лоренцевской полуширины:

$$\delta\nu_0 = \frac{\nu_{0 \text{ восст.}} - \nu_{0 \text{ мод.}}}{\gamma_{L \text{ мод.}}},$$

$$\delta S = \frac{S_{\text{восст.}} - S_{\text{мод.}}}{S_{\text{мод.}}},$$

$$\delta\gamma_L = \frac{\gamma_{L \text{ восст.}} - \gamma_{L \text{ мод.}}}{\gamma_{L \text{ мод.}}}.$$

При восстановлении центра линии поглощения наряду с относительной погрешностью $\delta\nu_0$ была рассчитана также абсолютная погрешность восстановления центральной частоты линии $\Delta\nu_0$ в обратных сантиметрах.

2. Влияние «пропущенных точек» на качество восстановления параметров линии

Модельный фрагмент спектра содержал 100 точек, т.е. около 25 полуширин при $\gamma_L = 0,022 \text{ см}^{-1}$ (полуширина фойгтовского контура $\approx 0,04 \text{ см}^{-1}$) и 20 полуширин при $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$. При обработке последовательно удалялись точки в центральной части контура, от одной до 20, начиная от центра линии. Модельный фрагмент спектра, нормированный на значение коэффициента поглощения в центре линии k_{\max} , для $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$ (соответствующий лоренцевскому контуру) и уровня шума 2% с нумерацией расположения точек приведен на рис. 1. Уровень обрезки y_{\max} определялся относительно поглощения в центре линии, $y_{\max} = 1$ соответствует необрезанному контуру, $y_{\max} = 0,8$ означает, что удалены все точки с $k(v) > 0,8k(v_0)$ (их пять) и т.д. Параметры линии определялись подгонкой фойгтовского контура к модельному фрагменту спектра по методу Левенберга–Маркварта.

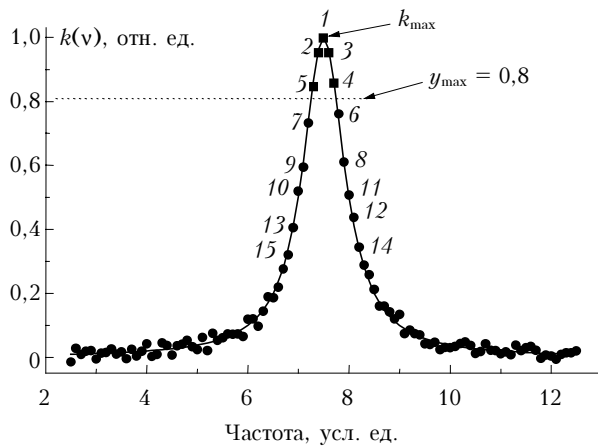


Рис. 1. Модельный фрагмент спектра для лоренцевского контура линии с 2%-м случайным шумом

Погрешности восстановления параметров линии в зависимости от уровня обрезки центральной части для преимущественно доплеровского и лоренцевского типов контура представлены на рис. 2 и 3. Видно, что погрешности восстановления параметров линии пропорциональны уровню шума измерений и слабо зависят от уровня обрезки при обрезке менее чем половины контура линии по высоте. Более значительная обрезка центральной части контура приводит к резкому росту погрешностей восстановления параметров линии. Так, погрешность восстановления центра линии из фрагмента спектра с 2%-м шумом для доплеровского контура при обрезке до уровня $0,7k_{\max}$ не превосходит $0,001 \text{ см}^{-1}$ и утраивается при обрезке до уровня $0,25k_{\max}$. Для лоренцевского контура в тех же условиях значения погрешности восстановления центра линии значительно выше и составляют $0,01 \text{ см}^{-1}$

при обрезке до уровня $0,7k_{\max}$ и утраиваются к уровню $0,2k_{\max}$.

При обрезке контура появляется тенденция к недооценке значения интенсивности линии и завышению полуширины, и погрешности определения этих параметров для более узких линий значительно выше.

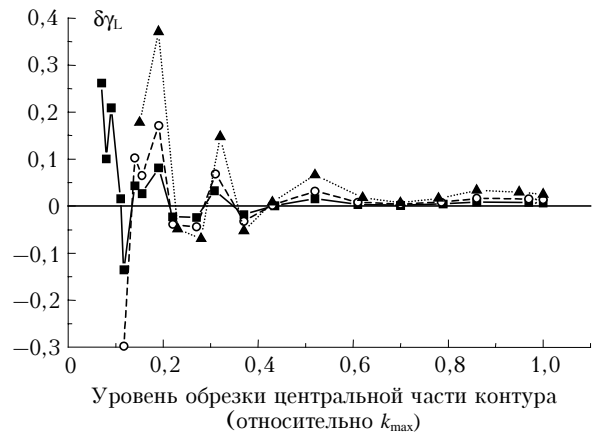
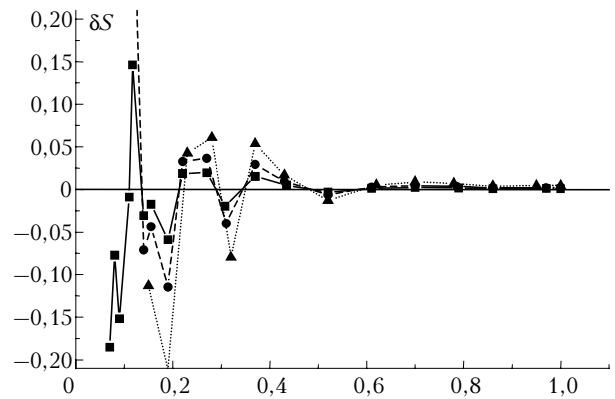
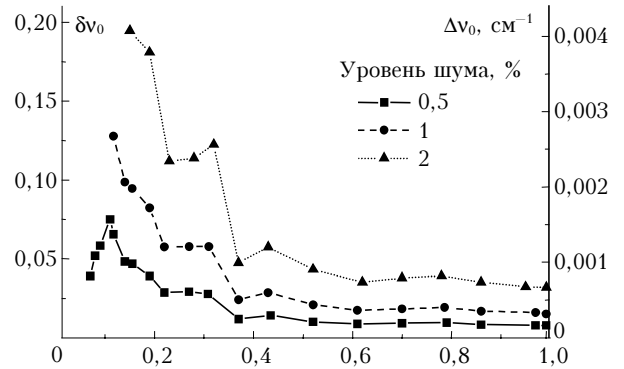


Рис. 2. Зависимость погрешностей восстановления параметров линии от уровня обрезки центральной части для преимущественно доплеровского типа контура ($\gamma_D = \gamma_L = 0,022 \text{ см}^{-1}$)

Так, мы получили втрое большую относительную погрешность восстановления интенсивности и почти вчетверо большую погрешность полуширины для контура с полушириной $\gamma \approx 0,04 \text{ см}^{-1}$ ($\gamma_D = \gamma_L = 0,022 \text{ см}^{-1}$) по сравнению с $\gamma \approx 0,5 \text{ см}^{-1}$ ($\gamma_D = 0,022 \text{ см}^{-1}$ и $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$). Возможно, это связано

с меньшим количеством точек в центральной части для преимущественно доплеровского контура с $\gamma_D = \gamma_L = 0,022 \text{ см}^{-1}$ (4 точки на полуширине линии, ширина фрагмента 25 полуширин), чем для лоренцевского контура с $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$ (пять точек на полуширине линии, ширина фрагмента 20 полуширин) – в первом случае лишь 12 точек лежат выше 20%-го уровня, а во втором – 20.

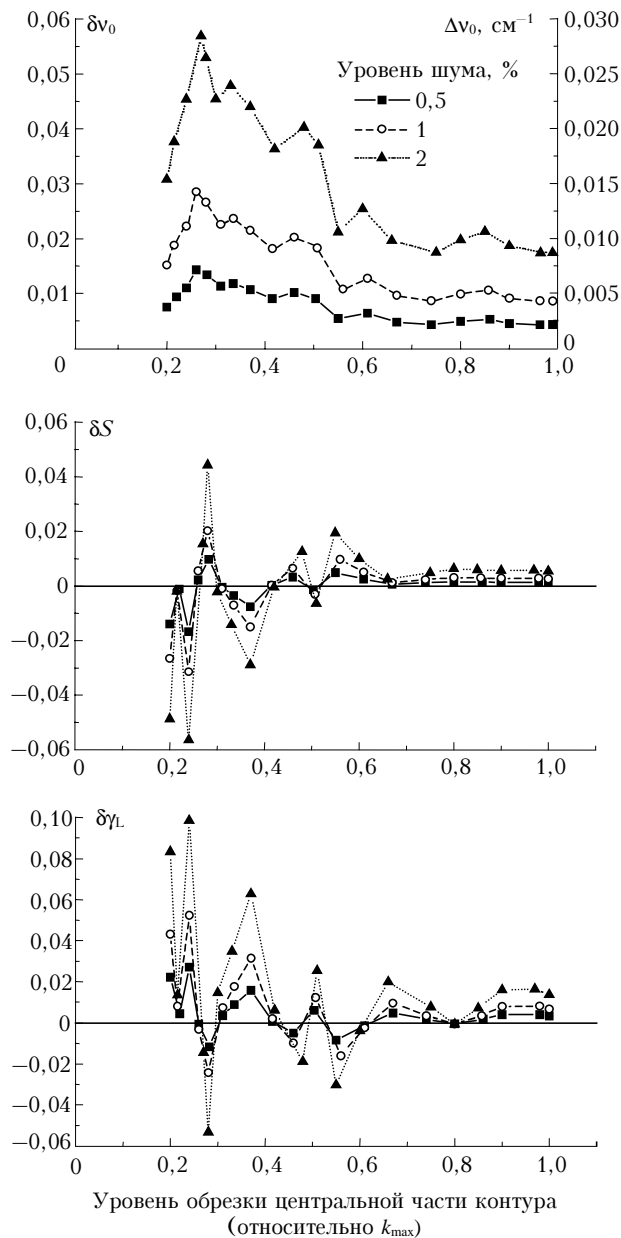


Рис. 3. Зависимость погрешностей восстановления параметров линии от уровня обрезки центральной части для лоренцевского типа контура ($\gamma_D = 0,022 \text{ см}^{-1}$, $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$)

Однако следует отметить, что относительная погрешность восстановления интенсивности из фрагмента спектра, соответствующего лоренцевскому контуру линии, даже при обрезке до уровня $0,2 k_{\max}$ при шуме не более 2% не превосходила 6%.

Это подтверждает возможность определения значений интенсивности даже усеченных при измерениях линий с приемлемой точностью. При сильной обрезке узких линий полученное при подгонке значение полуширины можно рассматривать лишь как оценочное, поскольку его относительная погрешность при 2%-м шуме измерений может достигать 40%.

3. Влияние ширины фрагмента спектра на качество восстановления параметров линии

Из рис. 1 видно, что хотя крылья линии к нулю не опускаются, значительная часть точек относится к крыльям линии. Например, после удаления 20 точек в центре (весь фрагмент содержит 100 точек) остаются крылья на уровне 20% от максимума, т.е. в модельном фрагменте только около 20% точек приходится на центральную часть. На рис. 4 приведена зависимость относительной погрешности восстановления параметров линии от ширины фрагмента спектра (в полуширинах) для $\Delta\nu = 0,1 \text{ см}^{-1}$, $\gamma_L = 0,5 \text{ см}^{-1}$ без удаления точек в центральной части контура.

Из рис. 4 видно, что погрешность определения центральной частоты линии не зависит от ширины фрагмента, а погрешности определения полуширины и интенсивности при ширине фрагмента менее 14 полуширин (по 7 полуширин в каждую сторону от центра линии) начинают возрастать при уменьшении ширины спектрального интервала, участвующего в обработке, по крайней мере при шуме измерений более 1%.

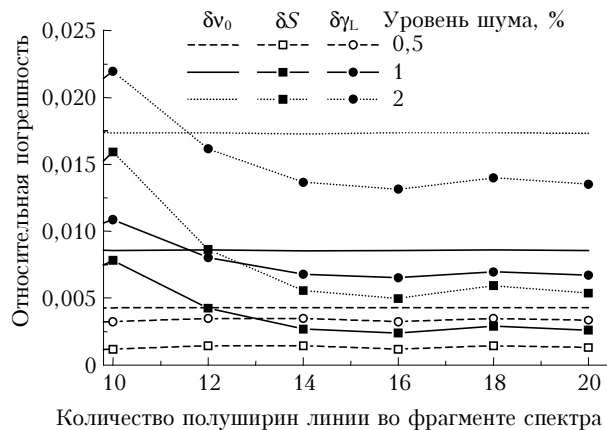


Рис. 4. Зависимость погрешностей восстановления параметров линии от ширины фрагмента спектра, участвующего в обработке

Подобная зависимость погрешностей восстановления полуширины и интенсивности линии от ширины спектрального интервала была получена нами в [5], где было обнаружено, что в зависимости от способа учета фоновой составляющей наблюдается рост погрешностей полуширины и интенсивности для фрагментов менее 8 или даже 5–6 полуши-

рин при 5%-м шуме измерений. Однако эти результаты были получены для другой полуширины линии, при значительно большей плотности точек во фрагменте спектра (в [5] при расчетах было 12 точек на полуширину линии, а в данной работе – 5) и фоновой составляющей, линейно зависящей от частоты.

Косвенной иллюстрацией влияния ширины фрагмента спектра на погрешности восстановления параметров линии являются различия в погрешностях, полученных для преимущественно доплеровского (см. рис. 2) и лоренцевского (см. рис. 3) контуров линии, фрагменты которых составляли 25 и 20 полуширин соответственно, однако, возможно, в этом случае наряду с разной шириной фрагментов проявились различия в форме контуров.

На рис. 5 показаны зависимости погрешностей восстановления параметров линии от уровня обрезки центральной части контура для фрагментов в 10, 15, и 20 полуширин при уровне шума 1%.

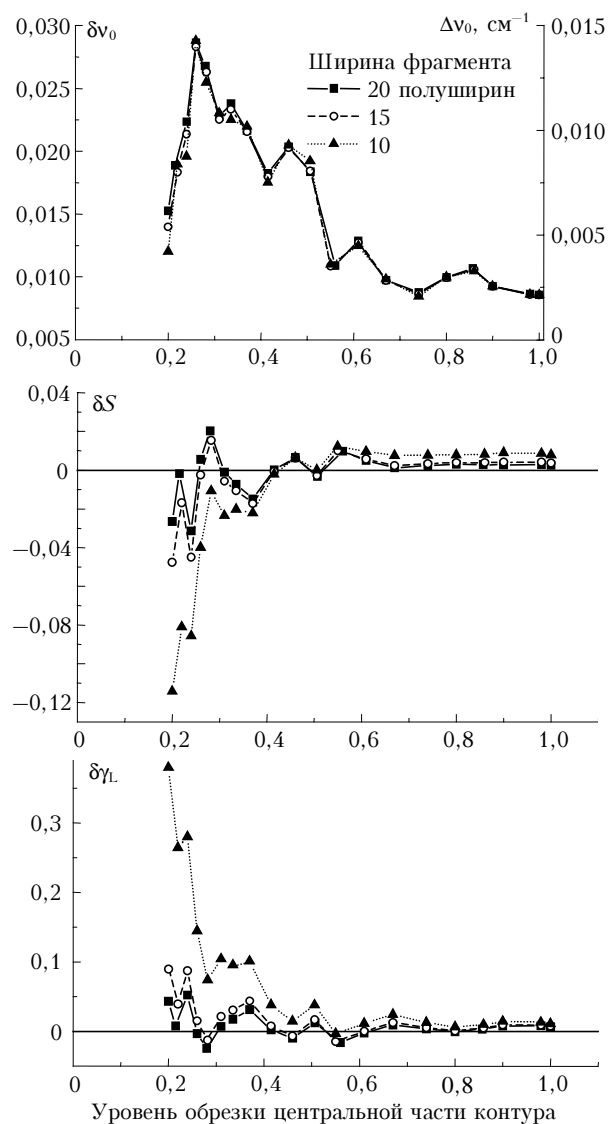


Рис. 5. Зависимость погрешностей восстановления параметров линии от уровня обрезки центральной части и ширины фрагмента спектра для лоренцевского контура

Заметно, что при обрезке центральной части контура более чем на половину высоты тенденция к получению завышенных значений полуширины и заниженных значений интенсивности линии при уменьшении ширины фрагмента спектра проявляется значительно сильнее. Вместе с тем относительная погрешность восстановления интенсивности линии при 1%-м шуме измерений для лоренцевского контура остается не хуже 10% даже при ширине фрагмента 10 полуширин и уровне обрезки $0,2k_{\max}$, хотя погрешность определения полуширины при этих условиях увеличивается почти до 40%, т.е. близка к значениям, полученным для фрагмента вдвое большей ширины и вдвое большего уровня случайного шума.

Выводы

Результаты проведенных расчетов позволяют сделать следующие выводы:

1. При обрезке центральной части контура не более чем наполовину погрешности определения параметров линии практически не зависят от степени обрезки и не превосходят 1–2% при уровне шума до 2%. При отсутствии большей доли центральной части контура погрешность определения параметров линии начинает расти с увеличением степени обрезки, обуславливая систематическое *занижение* восстанавливаемых значений интенсивности и *завышение* значений полуширины линии. При уровне обрезки 0,2 погрешность восстановления параметров линии может достигать 10–12% даже при 1%-м шуме.

2. Полученные значения относительных погрешностей восстановления параметров линии для доплеровского контура в среднем в 2–3 раза выше, чем для контура Лоренца. Вероятно, это связано с большей для лоренцевского контура долей точек в центральной части (по отношению к крылу), чем для доплеровского.

3. Влияние центральной части контура линии на восстановление ее параметров тем сильнее, чем уже фрагмент спектра, используемый в обработке. Найденное в работе оптимальное значение составило 14–15 полуширин. При использовании в обработке меньшего фрагмента спектра погрешности восстановления полуширины и интенсивности линии резко возрастают даже при неискаженной центральной части контура.

1. Belmiloud D., Schermaul R., Smith K.M., Zobov N.F., Braut J.W., Learner R.C., Newnham D.A. and Tennyson J. New studies of the visible and near-infrared absorption by water vapour and some problems with the HITRAN database // Geophys. Res. Lett. 2000. V. 27. P. 3703–3706.
2. Smith K.M., Ptashnik I.V., Newnham D.A., Shine K.P. Absorption by water vapour in the 1 to 2 μm region // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2004. V. 83. P. 735–749.
3. Ptashnik I.V., Smith K.M., Shine K.P. and Newnham D.A. Laboratory measurements of water vapour

continuum absorption in spectral region 5000–5600 cm⁻¹: Evidence for water dimers // *Quant. J. Roy. Meteorol. Soc.* 2004, in press.

4. Катаев М.Ю., Никифорова О.Ю. Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Часть 1. Влияние фона и шума измерений // *Оптика*

атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 11. С. 992–997.

5. Катаев М.Ю., Никифорова О.Ю. Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Часть 2. Влияние фона и соседних линий в спектре // *Оптика атмосф. и океана.* 2004. Т. 17. № 11. С. 959–967.

M.Yu. Kataev, O.Yu. Nikiforova, I.V. Ptashnik. Error of retrieval of spectral line parameters from the absorption spectrum. Part 3. Effect of distortion of the central part of the absorption line profile upon recording.

The error of retrieval of spectral line parameters has been studied based on numerical simulation for the conditions when the central part of the line profile is absent from processing (strong absorption). The values of the random noise and the width of the spectral range included in processing, at which the influence of the central part of the line profile on the parameters to be retrieved is low, have been estimated.