

Экономичные аппроксимации контуров Фойгта и Раутиана–Собельмана

В.П. Кочанов*

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 20.12.2010 г.

Получены достаточно точные аппроксимации интеграла вероятностей от комплексного аргумента, на основе которого рассчитываются контуры Фойгта и Раутиана–Собельмана. Предложен эффективный метод сглаживания экспериментальных спектров.

Ключевые слова: аппроксимация, контуры Фойгта, Раутиана–Собельмана, сглаживание спектра; approximation, Voigt and Rautian–Sobel'man line profiles, spectrum smoothing.

Введение

В массовой количественной обработке спектров атомов и молекул стандартными моделями контуров спектральных линий являются контуры Фойгта (см., например, [1]):

$$k_V(\Omega) = \frac{S}{\sqrt{\pi k \bar{v}}} \operatorname{Re} w(z), \quad z = \frac{\Omega + i\gamma}{k \bar{v}}, \quad (1)$$

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

и Раутиана–Собельмана [2]:

$$k_{RS}(\Omega) = \frac{S}{\sqrt{\pi k \bar{v}}} \operatorname{Re} \frac{w(z)}{1 - \sqrt{v_h} w(z) / k \bar{v}}, \quad (2)$$

$$z = \frac{\Omega + i v_t}{k \bar{v}}, \quad v_h = \alpha \gamma, \quad v_t = \gamma + v_h,$$

где $w(z)$ – интеграл вероятности от комплексного аргумента [3]; Ω – отстройка частоты от центра линии; S и γ – интенсивность и однородная полуширина линии; v_h – число упругих столкновений в единицу времени, приводящих к изменению скорости на величину порядка среднетепловой скорости \bar{v} ; v_t – частота ухода интеграла столкновений; α – безразмерный параметр столкновительного сужения линий Дике [4]; k – волновое число.

Коэффициенты поглощения (1) и (2) определяются функцией $w(z)$, которая обычно рассчитывается с применением алгоритмов, приведенных в работах [5, 6], с погрешностью порядка 10^{-5} . В настоящей статье представлены простые алгебраические аппроксимации интеграла вероятности от комплексного аргумента, точность которых порядка или больше пяти значащих цифр, а время расчета значительно меньше.

Скорость и качество обработки эксперимента наряду с применением простых аппроксимаций формы линии можно повысить с помощью сглаживания зашумленных экспериментальных спектров. Это позволяет использовать меньшее число точек в процессе применения метода наименьших квадратов, что значительно уменьшает время расчетов и лучше выявляет из шумов линии с малой интенсивностью, а также разность между экспериментом и теорией. Характерный вид спектров, содержащих как перекрывающиеся, так и далеко разнесенные по частоте линии, делает сглаживание на основе сплайнов нерациональным.

В настоящей статье предложено более соответствующее специфике спектров сглаживание на основе их аппроксимации суммой лорентцевских контуров, возведенных в различные степени, определяемые из подгонки к эксперименту.

1. Аппроксимация $w(z)$

Основой аппроксимации является разложение функции $w(z)$ в непрерывную дробь [3]:

$$w(z) = \frac{i}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{z} \frac{1/2}{z} \frac{1}{z} \frac{3/2}{z} \frac{2}{z} \dots \quad (3)$$

Ограничение дроби (3) порядком M и ее сведение к виду обычной дроби с одним числителем и одним знаменателем приводят к виду аппроксимации Паде порядка $(M-1, M)$ с известными коэффициентами, являющимися целыми числами. Однако численные расчеты показывают, что при $|z| \sim 1$ для обеспечения требуемой точности необходимо брать $M \gg 1$. Предлагаемая аппроксимация заключается в том, что M выбирались небольшими, $M = 4$ и 6 , а коэффициенты Паде полагались неизвестными параметрами, которые находились из подгонки приведенной дроби к точным значениям

* Виктор Павлович Кочанов (koch@iao.ru).

$w(z)$. Далее числитель и знаменатель разлагались на элементарные множители $z + c_n$, $z + b_n$ и дробь раскладывалась на сумму

$$w_a(z) = \sum_{n=1}^M \frac{a_n}{b_n + z}, \quad M = 4 \text{ и } 6, \quad (4)$$

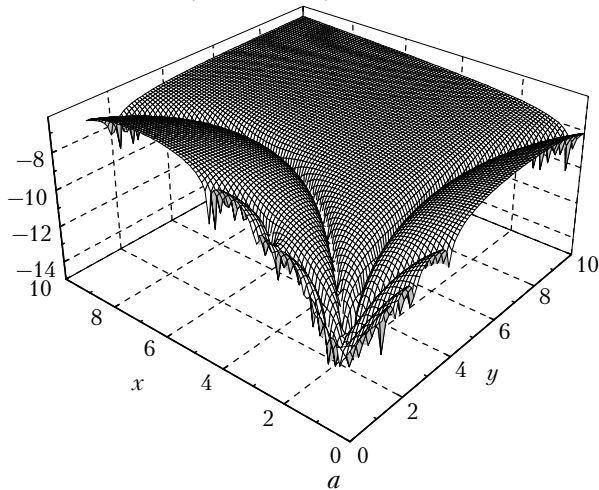
представляющую конечный результат аппроксимации. Комплексные коэффициенты a_n и b_n приведены в таблице.

Расчетная погрешность аппроксимаций (4) в сравнении с точными значениями функции $w(z)$ представлена на рис. 1 и составляет менее шестой значащей цифры в случае $M = 6$ и четвертой – для $M = 4$ во всем диапазоне значений z при $\text{Im } z > 0$. В области $|z| < 2$, наиболее существенной для обработки спектров, погрешность примерно на три порядка меньше. Среднее время расчета функции $w_a(z)$ (4) в 33 ($M = 6$) и в 50 ($M = 4$) раз меньше, чем время расчета точной функции $w(z)$.

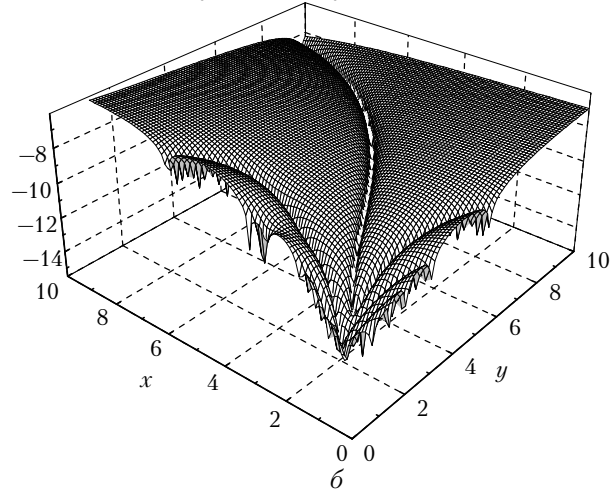
Параметры a_n и b_n для аппроксимаций $w(z)$ (4)

M	n	a_n	b_n
6	1	$-0,05211401840823116 + 0,0003456274128399508 i$	$-2,202137594489422 + 1,7617409842934335 i$
	2	$0,8821478539987956 + 0,3250098013190268 i$	$-1,3840051115670835 + 1,815878063693693 i$
	3	$-2,4268851379483554 - 2,9002337097791298 i$	$-0,6786310070029026 + 1,8211984045812444 i$
	4	$0,5609724629394014 + 5,189424779184198 i$	$0,002952977671691485 + 1,7784231116089055 i$
	5	$1,300047290374259 - 2,142744693364249 i$	$0,7245716698265852 + 1,6859739842469321 i$
	6	$-0,26417705095694927 + 0,09241240182928095 i$	$1,5821736769718555 + 1,5380747276250106 i$
4	1	$0,15269784972008846 - 0,01429059277879871 i$	$-1,638566939130925 + 1,390393937133246 i$
	2	$-1,022455279362302 - 0,5341298895517378 i$	$-0,7327122194675937 + 1,4139283787114099 i$
	3	$0,6543564876039407 + 1,5745917089047585 i$	$0,10206925308122759 + 1,3554420881163243 i$
	4	$0,2156138105591975 - 0,46143197880686115 i$	$1,0446775963500718 + 1,2115613850263882 i$

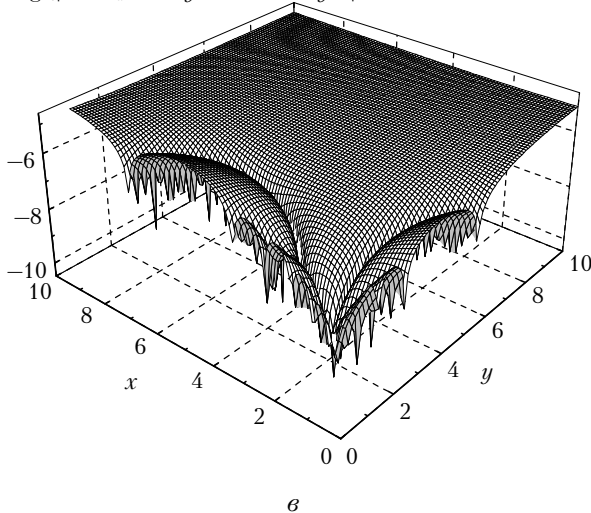
$\log_{10}|\text{Re}(w_a(x + iy) - w(x + iy))|$



$\log_{10}|\text{Im}(w_a(x + iy) - w(x + iy))|$



$\log_{10}|\text{Re}(w_a(x + iy) - w(x + iy))|$



$\log_{10}|\text{Im}(w_a(x + iy) - w(x + iy))|$

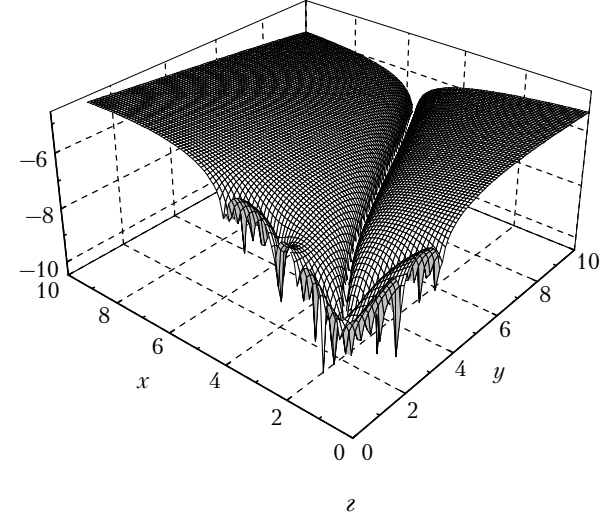


Рис. 1. Разности между приближенной (4) и точной (1) функциями $w(z)$ для $M = 6$ (а, б) и $M = 4$ (в, г)

2. Сглаживание спектра

Для сглаживания применялась функция

$$F(x) = \sum_{n=1}^N \frac{S_n}{\{1 + [(x - x_n^0) / g_n]\}^{h_n}}. \quad (5)$$

Количество контуров в сумме (5) подбиралось исходя из вида экспериментального спектра, а параметры S_n , x_n^0 , g_n и h_n находились из подгонки функции (5) к эксперименту. Результаты подгонки представлены на рис. 2 в сравнении с результатами сглаживания, проведенного с помощью кубических сплайнов.

В качестве примера был взят спектр поглощения метана, уширенного неонем при общем давлении 48,27 торр и комнатной температуре. Соотношение парциальных давлений метана и неона составляло 1:13,62. Запись спектра произведена с помощью оптико-акустического спектрометра на основе диодного перестраиваемого по частоте лазера. При использовании аппроксимации (5) бралось девять членов суммы с числом параметров 36. Время обработки составило 4,01 с. Сглаживание сплайнами

проводилось с разбиением спектра на 25 неравных отрезков, число параметров составляло 100 и время обработки – 1,73 с.

Как видно из рис. 2, качество сглаживания в обоих случаях примерно одинаковое, а различия между экспериментальным и сглаженными спектрами, в среднем составляющие 0,14%, не обнаруживают заметных трендов. Таким образом, применение функции (5) для сглаживания спектров, состоящих более чем из 10 линий, вследствие значительного сокращения числа параметров более предпочтительно, чем использование кубических сплайнов.

3. Обсуждение и выводы

Отметим, что приближенное представление функции $w(z)$ (1) в виде выражения (4) для $|z| \gg 1$ дается также квадратурной функцией Гаусса–Эрмита [7], которая совпадает с выражением (4) при умножении правой части последнего на i/π и изменении знака b_n . Параметры b_n , взятые со знаком минус, являются корнями полиномов Эрмита, а параметры $\pi a_n/i$ есть соответствующие веса.

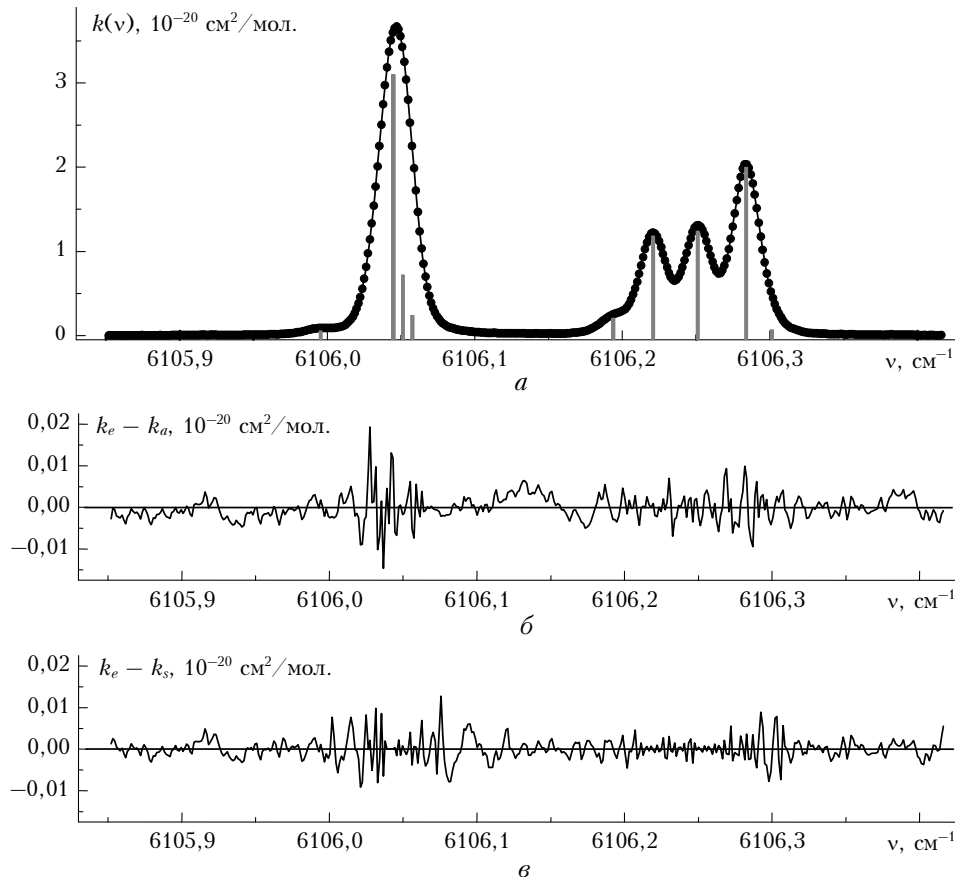


Рис. 2. Пример сглаживания спектра: *a* – эксперимент (точки), расчетный спектр (сплошная линия), сглаженный при помощи функции (5) и кубических сплайнов; вертикальные линии обозначают положения x_n^0 и амплитуды S_n слагаемых в сумме (5), определенные из подгонки функции (5) к экспериментальному спектру методом наименьших квадратов; *б*, *в* – разности между экспериментальным спектром и спектром, сглаженным с помощью аппроксимационной функции (5) (*б*) и кубических сплайнов (*в*)

На этой основе с некоторой модификацией в работе [6] построены аппроксимации функции $w(z)$ при ограничении суммирования в выражении, аналогичном формуле (4), количеством слагаемых M от 8 до 20. Для $M = 12$ приводимая в работе [6] погрешность расчета действительной части $w(z)$ возрастает от 10^{-8} при $\text{Im}z = 1,2$ до $3 \cdot 10^{-5}$ при $\text{Im}z = 0,1$ (см. рис. 2 [6]). Сравнение данной погрешности с погрешностью, приведенной на рис. 1, показывает, что полученные в настоящей статье аппроксимации (4) с $M = 4$ и 6 обладают лучшей точностью в области $|z| < 1$ и, по-видимому, являются предельно простыми для данной точности.

Автор признателен В.А. Капитанову за предоставление экспериментального спектра метана.

Работа выполнена при поддержке грантов CRDF Project RUG1-2954-TO-09 и РФФИ № 09-05-92508-ИК_а.

1. *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1963. 640 с.
2. *Раутиан С.Г., Собельман И.И.* Влияние столкновений на доплеровское уширение спектральных линий // Успехи физ. наук. 1966. Т. 90, № 2. С. 209–236.
3. *Справочник по специальным функциям* / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 830 с.
4. *Кочанов В.П., Пташник И.В.* Аппроксимация ширины суженного столкновениями контура линии // Оптика и спектроскопия. 2000. Т. 89, № 5. С. 736–742.
5. *Drayson S.R.* Rapid computation of the Voigt profile // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1976. V. 16, N 7. P. 611–614.
6. *Humlíček J.* An efficient method for evaluation of the complex probability function: the Voigt function and its derivatives // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1979. V. 21, N 4. P. 309–313.
7. *Фаддеева В.Н., Терентьев Н.М.* Таблицы значений интеграла вероятностей от комплексного аргумента. М.: Гостехиздат, 1954. 268 с.

V.P. Kochanov. Efficient approximations for the Voigt and Rautian–Sobel’man line profiles.

Simple and sufficiently accurate approximations for complex probability function are obtained which allow calculation of the Voigt and Rautian–Sobel’man line profiles. An effective method for smoothing experimental spectra is suggested.