

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

АВТОМАТИЗАЦИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛУШИРИНЫ И СДВИГА СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗ ОПТИКО-АКУСТИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Приводится методика, позволяющая автоматизировать процесс определения параметров контура линии поглощения (центра линии, полуширины и сдвига). Работоспособность предложенной методики подтверждается результатами численного моделирования. Приведены результаты обработки экспериментальных данных по определению параметров линии H_2O , уширенной инертными газами Ne, Ar, He, Kr и Xe.

Исследования характеристик контура линии молекулярного поглощения в газах актуальны для решения прямых и обратных задач оптики планетарных атмосфер, дистанционного зондирования распределения газовых составляющих в атмосфере и других задач.

Такие параметры спектральной линии, как полуширина (γ), сдвиг центра (δ) определяются по результатам измерений на лазерных спектрометрах высокого разрешения [1–8]. Экспериментальные данные обычно обрабатываются методом подгонки теоретической модели контура линии поглощения (чаще всего фойгтовского [3–7]) к измеренному контуру $\chi(\nu)$ при помощи метода наименьших квадратов (МНК). МНК широко применяется для такой обработки, но для его успешного использования необходимо задать нулевые приближения искомых параметров. В статье мы предлагаем использовать сглаживающий сплайн для компьютерного определения нулевого приближения искомых параметров линии поглощения из экспериментальных данных.

Результаты измерений контура линии поглощения сглаживаются при помощи сплайн-функции [9, 10]. Из полученных сглаженных значений не составляет труда определить максимальное значение K_m в центре линии и полуширину γ на уровне $0,5 K_m$.

Предположим, что сглаженный контур можно представить в виде

$$K_m \Psi(\nu, \gamma) = K_0 F(\nu, \gamma) + \varphi, \quad (1)$$

где $\Psi(\nu, \gamma)$ – форма сглаженного контура линии поглощения; $F(\nu, \gamma)$ соответствует выбранной теоретической модели линии поглощения с значением в максимуме K_0 ; φ – некоторая неселективная составляющая измерений (фон), как правило, присутствующая в ОА-измерениях [1, 2].

Если в качестве полуширины линии использовать приближенное значение γ , полученное с помощью сплайна, тогда неизвестные значения K_0 и φ легко оценить при помощи формул:

$$K_0 = K_m \frac{\Psi(\nu_1, \gamma) - \Psi(\nu_2, \gamma)}{F(\nu_1, \gamma) - F(\nu_2, \gamma)}, \quad (2)$$

$$\varphi = K_m \frac{F(\nu_1, \gamma) \Psi(\nu_2, \gamma) - F(\nu_2, \gamma) \Psi(\nu_1, \gamma)}{F(\nu_1, \gamma) - F(\nu_2, \gamma)} \quad (3)$$

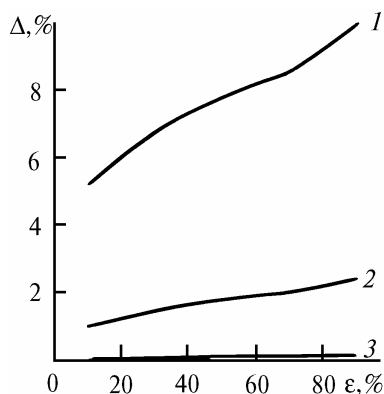


Рис. 1. Результаты численного моделирования по восстановлению центра линии поглощения ν_0 (кривая 1), полуширины γ (кривая 2) и фона (кривая 3)

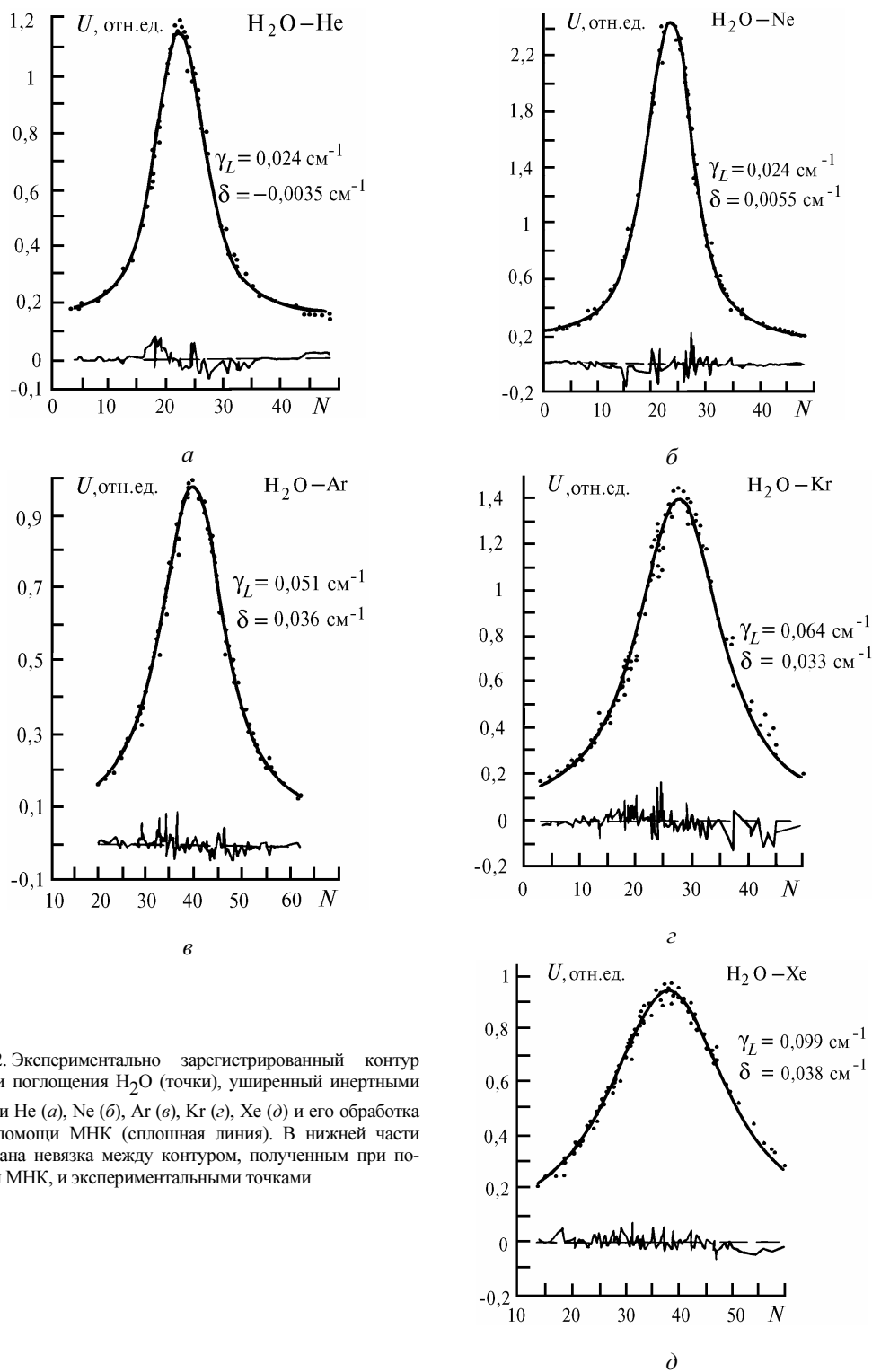


Рис. 2. Экспериментально зарегистрированный контур линии поглощения H₂O (точки), уширенный инертными газами He (а), Ne (б), Ar (в), Kr (г), Xe (д) и его обработка при помощи МНК (сплошная линия). В нижней части показана невязка между контуром, полученным при помощи МНК, и экспериментальными точками

Найденные таким образом значения K_0 , ν_0 , γ и ϕ можно использовать в качестве нулевого приближения для МНК-подгонки теоретической модели под экспериментальные данные.

Работоспособность предложенного нами подхода была проверена путем численного моделирования. Качество восстановления параметров линии приведено на рис. 1, где представлены результаты восстановления параметров модельной фойгтовской линии с $\gamma = 0,5 \text{ cm}^{-1}$ при

уровне фона 10% от максимального значения функции. По оси абсцисс отложена погрешность измерения ε (в процентах от уровня фона), по оси ординат – погрешность восстановления параметров Δ контура (ν_0 , γ и φ). Из рисунка видно, что даже при значительном зашумлении исходных данных полученные начальные приближения позволяют определять искомые параметры достаточно точно.

Для апробации предложенной методики нами были обработаны результаты измерений контуров линии поглощения H_2O с центром $\nu_0 = 14397,364 \text{ см}^{-1}$, уширенной инертными газами Ne, Ar, He, Kr и Xe. Измерения проводились на двухканальном ОА-спектрометре. Процедура таких измерений детально описана в [2, 7]. Суть ее состоит в том, что две ОА-ячейки располагаются последовательно одна за другой на оси лазерного пучка. Одна из них заполняется чистым водяным паром при давлении в несколько Торр, а другая – смесью водяного пара с буферным газом при давлении $P_{\text{буф}} \gg P_{\text{H}_2\text{O}}$. Измерения в первой ОА-ячейке дают доплеровский контур линии поглощения, а измерения во второй – контур той же линии, но уширенной давлением буферного газа.

Результаты измерений приведены на рис. 2, а– д. На рисунках по оси абсцисс отложено количество длин волн генерации лазера N , попадающих в область контура линии поглощения, по оси ординат – величина отклика прибора U в относительных единицах. Точками отмечены экспериментальные данные, а сплошной линией – контур, полученный при помощи метода наименьших квадратов.

Проведенные исследования позволяют заключить, что предложенный полностью автоматизированный способ обработки может быть использован в целях автоматизации определения полуширины γ и сдвига из ОА-измерений.

Авторы благодарят Ю.Н. Пономарева и А.А. Мицеля за ценные замечания и интерес к работе.

Работа была выполнена при поддержке специального фонда для выплаты персональных стипендий и грантов талантливым молодым ученым СО РАН по проекту А1. 06.

1. Антипов А.Б., Капитанов В.А., Пономарев Ю.Н., Сапожникова В.В. Оптико-акустический метод в лазерной спектроскопии молекулярных газов. Новосибирск: Наука, 1984. 128 с.
2. Агеев Б.Г., Пономарев Ю.Н., Тихомиров Б.А. Нелинейная оптико-акустическая спектроскопия молекулярных газов. Новосибирск, 1987. 128 с.
3. Avetisov V.G., Nadezhdinskii A.N., et al. // JMS, 1993. V. 160. P. 326–334.
4. Grossman B.E., Browell E.W. // JMS, 1989. V. 136. P. 264–294.
5. Grossman B.E., Browell E.W. // JQSRT, 1991. V. 45. P. 339–348.
6. Humlicek J. // Folia prirodoyd. fak. UJEP Brne, 1984. V. 25. 91 P.
7. Зуев В.Е., Макушкин Ю.С., Пономарев Ю.Н. Спектроскопия атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1987. Т. 3. 247 с.
8. Вуков А.Д., Капитанов В.В., et al. // Atmospheric spectroscopy applications workshop. Moscow, 1990. P. 67–75.
9. Воскобойников Ю.Е., Преображенский Н.Г., Седельников А.И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1984. 240 с.
10. Катаев М.Ю., Мицель А.А. // Деп. Изв. Вузов. Физика. 1992. N 10. Пер. N 4063–99.

Институт оптики атмосферы
СО РАН, Томск

Поступила в редакцию
15 июля 1994 г.

M.Yu. Kataev, V.V. Lazarev, O.Yu. Nikiforova, I.V. Ptashnik. Automation of the Procedure on Determining Spectral Line Halfwidth and Shift from Optoacoustic Measurements.

In this paper we propose a technique for automation of the procedure on determining the parameters of spectral lines based on search of the initial approximation for the least squares method using spline functions. Some results of numerical simulations and data of processing actual lines of water vapor recorded with a dual channel optoacoustic laser spectrometer are also presented in the paper.