

М.Ю. Катаев, О.Ю. Никифорова

Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Часть 2. Влияние фона и соседних линий в спектре

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 1.09.2004 г.

Численно исследовано влияние фоновой составляющей и крыла соседней линии в спектре на качество восстановления параметров исследуемой линии поглощения при наличии случайного шума. Расчеты произведены для спектра поглощения и его первой производной по частоте. Проанализировано влияние характера частотной зависимости и параметров фона на погрешность восстановления положения центра исследуемой линии, ее полуширины и интенсивности. Установлено, что введение линейного фона в модель позволяет уменьшить погрешности определения параметров линии, обусловленные наличием соседней линии в спектре.

Восстановление параметров спектральных линий из зарегистрированного спектра поглощения является задачей многих приложений спектроскопии и оптики атмосферы и развивается уже длительное время [1–6]. Тем не менее в большинстве работ, посвященных определению параметров линий, хотя и описаны применяемые методы обработки экспериментальных данных, почти не уделяется внимания методическим вопросам, таким как влияние соседних спектральных линий [1, 2] или фоновой составляющей [1, 3–5]. Однако при восстановлении центральной частоты, полуширины и интенсивности исследуемой линии из зарегистрированного экспериментально фрагмента спектра (или его производной) точность определения параметров линии зависит от величины шума измерений, наличия и характера частотной зависимости фоновой составляющей, удаленности и интенсивностей соседних линий и других характерных особенностей экспериментальных данных. На этом основании результаты применения того или иного метода обработки существенно зависят от особенностей обрабатываемого фрагмента спектра (числа линий в спектре, их возможного перекрытия, наличия фона и т.п.).

В первой части статьи [7] на основе численного эксперимента проведен анализ изменения погрешностей определения параметров спектральной линии в зависимости от шума измерений при наличии в спектре линейного или квадратичного фона. Целью данной работы является оценка влияния фоновой составляющей на погрешность определения параметров исследуемой линии при наличии случайного шума. Фоновая составляющая при моделировании фрагмента спектра описывалась линейной

функцией частоты в виде $b(x) = a_0 + a_1x$ или была обусловлена наличием соседней линии, центр которой находился за пределами обрабатываемого фрагмента спектра. Исследована зависимость погрешностей определения параметров исследуемой линии поглощения от параметров линейного фона, интенсивности и удаления соседней линии (полуширины линий предполагались равными).

1. Построение модельного фрагмента спектра

Расчеты проводились для фойгтовского контура линии с интенсивностью $S = 1$ и доплеровской полушириной $\gamma_D = 0,022 \text{ см}^{-1}$. Значения лоренцевской полуширины γ_L составляли $0,001 \text{ см}^{-1}$ (доплеровский контур линии) и $0,1 \text{ см}^{-1}$ (лоренцевский контур). Частота центра линии ν_0 при моделировании составляла 3 усл. ед. Масштаб частотной оси соответствовал шкале обратных сантиметров. Ширина модельного фрагмента составляла $0,5 \text{ см}^{-1}$ для доплеровского контура и 4 см^{-1} для лоренцевского. Шаг по частоте составлял, соответственно, $0,001$ и $0,008 \text{ см}^{-1}$. К полученному фрагменту спектра добавлялись линейная фоновая составляющая или крыло соседней линии и случайный шум 2 или 5% от коэффициента поглощения в центре исследуемой линии k_{\max} .

Примеры модельных фрагментов спектра и его производной по частоте для уровня шума 5% представлены сплошной линией на рис. 1. Пунктирные линии иллюстрируют искажения модельного фрагмента спектра, обусловленные линейной фоновой составляющей с предельными значениями параметров, использованными в расчетах (для наглядности

при расчетах модельного фрагмента для рис. 1 лоренцевский контур и его производная были нормированы и при построении пунктирных кривых опущен случайный шум, хотя в действительности при расчетах шум всегда присутствовал и нормировка не производилась).

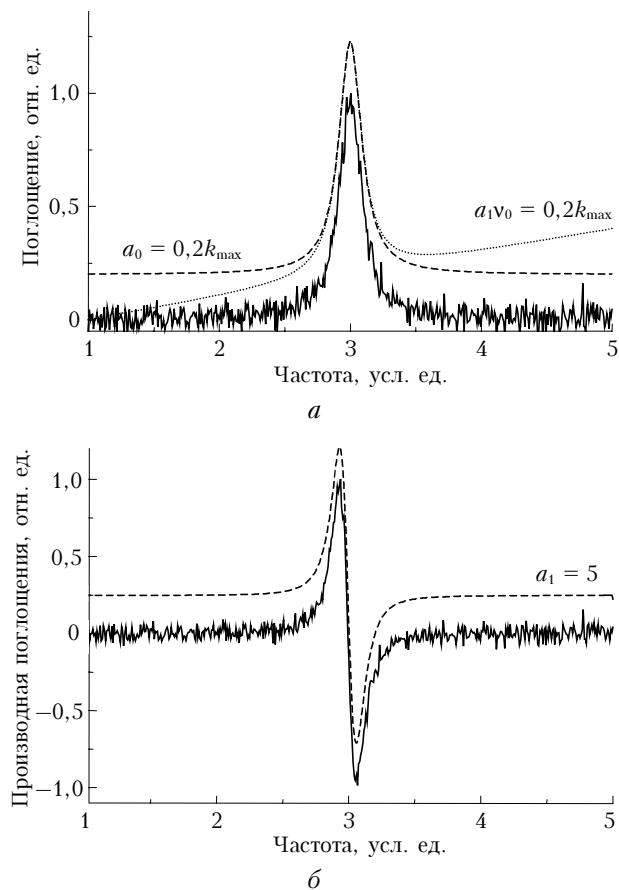


Рис. 1. Пример модельного фрагмента спектра (а) и производной спектра (б) с 5%-м случайным шумом и линейным фоном

Вместо линейной фоновой составляющей для лоренцевской линии к модельному контуру добавлялось крыло соседней линии, которое также рассчитывалось для фойгтовского контура с теми же значениями полуширин. Интенсивность соседней линии менялась от 0,1 до 3 (т.е. составляла от 10 до 300% интенсивности исследуемой линии), расстояние между центрами линий составляло от 2 до 14 полуширин. Граница включаемого в обработку фрагмента спектра со стороны соседней линии соответствовала минимуму между исследуемой и соседней линиями, а вторая граница оставалась неизменной, т.е. фрагмент спектра был несимметричным и содержал переменное количество точек в зависимости от удаленности линий. При сближении линий минимум между линиями исчезает и их контуры сливаются в общий контур, при этом требуется совместное определение параметров обеих линий, поэтому расчеты при расстоянии между линиями менее двух полуширин не проводились.

2. Результаты и обсуждение

При определении параметров линии из полученного фрагмента спектра характер частотной зависимости фоновой составляющей предполагался неизвестным и расчеты проводились четырьмя способами: 1) подгонкой фойгтовского контура линии без учета фона; 2) с предварительным удалением линейной фоновой составляющей; 3) с предварительным удалением квадратичной фоновой составляющей; 4) с определением параметров фона при подгонке одновременно с параметрами исследуемой линии. Предварительное определение параметров линейного фона осуществлялось усреднением нескольких точек (около 5% от общего числа) в начале и в конце фрагмента, при предварительном определении параметров квадратичного фона использовались все точки фрагмента.

Относительные погрешности восстановления полуширины и интенсивности линии выражены в процентах, а относительная погрешность центральной частоты — в процентах полуширины линии (γ_L для лоренцевского контура и γ_D для доплеровского).

2.1. Влияние параметров линейного фона

При моделировании фрагмента спектра значения параметров фоновой составляющей изменялись в следующих пределах: $a_0 = 0 \div 0,2k_{\max}$, $a_1 v_0 = 0 \div 0,2k_{\max}$, причем только один из коэффициентов изменялся при расчете, а второй был равен нулю. При моделировании производной спектра максимальное значение коэффициента a_1 составляло 20% от максимального значения производной. Относительные погрешности определения центральной частоты, полуширины и интенсивности для доплеровского и лоренцевского контуров из фрагмента спектра с уровнем шума 5% в зависимости от параметров фоновой составляющей a_0 и a_1 представлены на рис. 2 и 3.

Номера кривых соответствуют описанным выше способам определения параметров. Для сравнения на рис. 3 представлены также результаты определения параметров линии (в зависимости от наклона фоновой составляющей a_1) из фрагмента спектра лоренцевского контура с 2%-м шумом. Из рис. 3 видно, что уровень шума наиболее существенно влияет на погрешность восстановления центральной частоты при слабом наклоне фоновой составляющей, а погрешность определения полуширины и интенсивности обусловлена главным образом выбранным способом обработки.

Из рис. 2, 3 видно, что максимальные погрешности определения полуширины и интенсивности, естественно, соответствуют подгонке без учета фона (кривые 1), предварительное удаление фоновой составляющей позволяет уменьшить погрешность в 1,5–3 раза, причем использование линейной модели фона (2), как правило, приводит к лучшим результатам, чем квадратичного фона (3), однако наилучшие результаты дает подгонка постоянной состав-

ляющей и наклона линейного фона одновременно с параметрами исследуемой линии (4). Для не зависящей от частоты фоновой составляющей в модельном спектре использование при подгонке модели «фойгтовский контур + константа» (т.е. $a_1 = 0$ при подгонке в отличие от способа 4) также дает хорошие результаты (не представлено на рис. 2, 3), однако при $a_1 \neq 0$ результаты значительно хуже.

Погрешность определения центральной частоты для выбранного диапазона изменения параметров фоновой составляющей оказалась наименьшей

при предварительном удалении линейного фона и составила $\approx 1,2\% \gamma_L$ ($0,001 \text{ см}^{-1}$) для лоренцевского контура и менее $0,0001 \text{ см}^{-1}$ для доплеровского при вкладе фоновой составляющей не более $15\% k_{\max}$ и 5%-м уровне шума. Относительные погрешности определения полуширины и интенсивности из лоренцевского фрагмента спектра при использовании способов 1–3 оказались несколько выше, чем для доплеровского, и близки для обоих типов контуров при одновременной подгонке параметров линии и фона (способ 4).

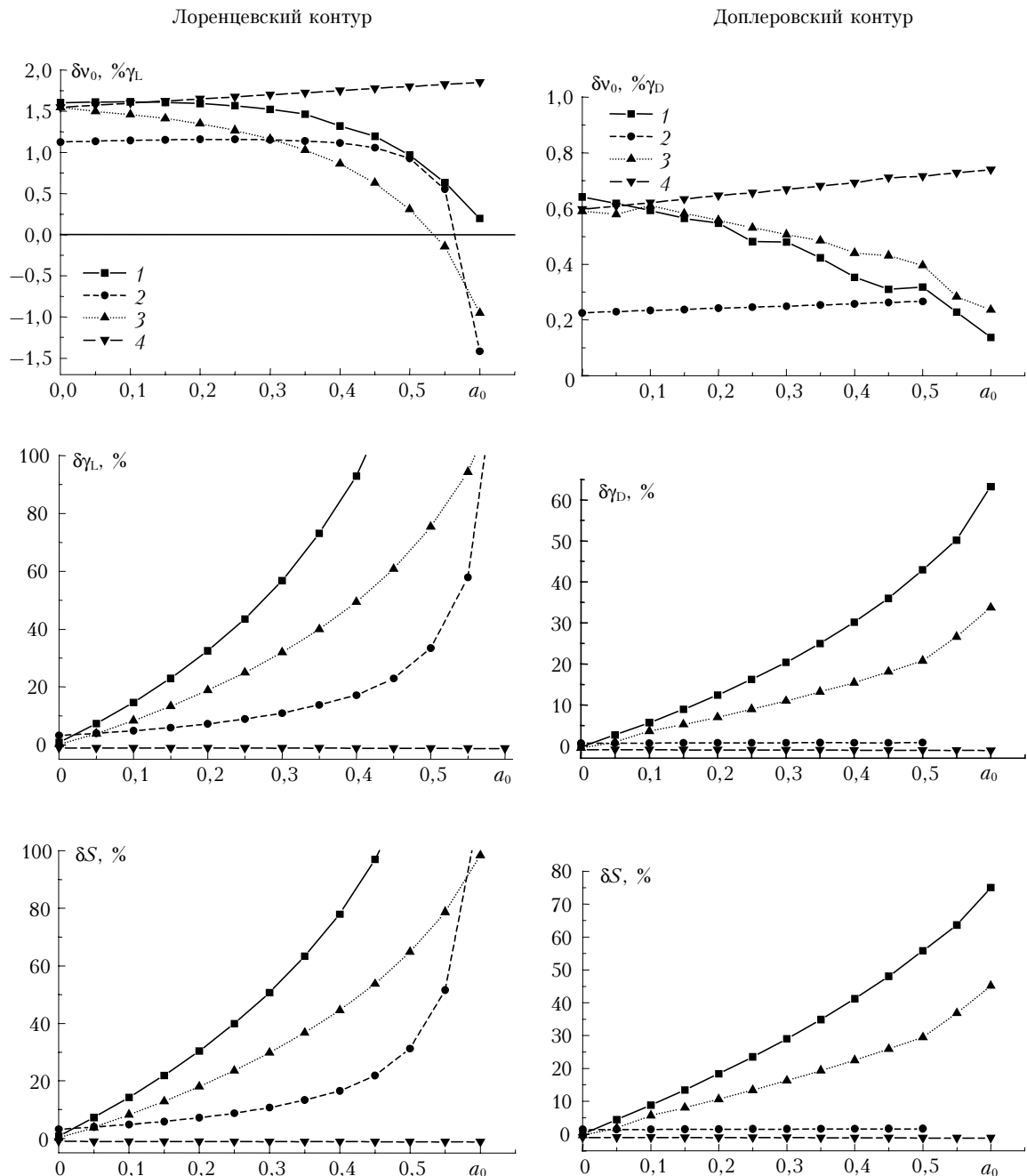


Рис. 2. Зависимость относительных погрешностей восстановления параметров линии из фрагмента спектра от величины постоянной составляющей фона a_0

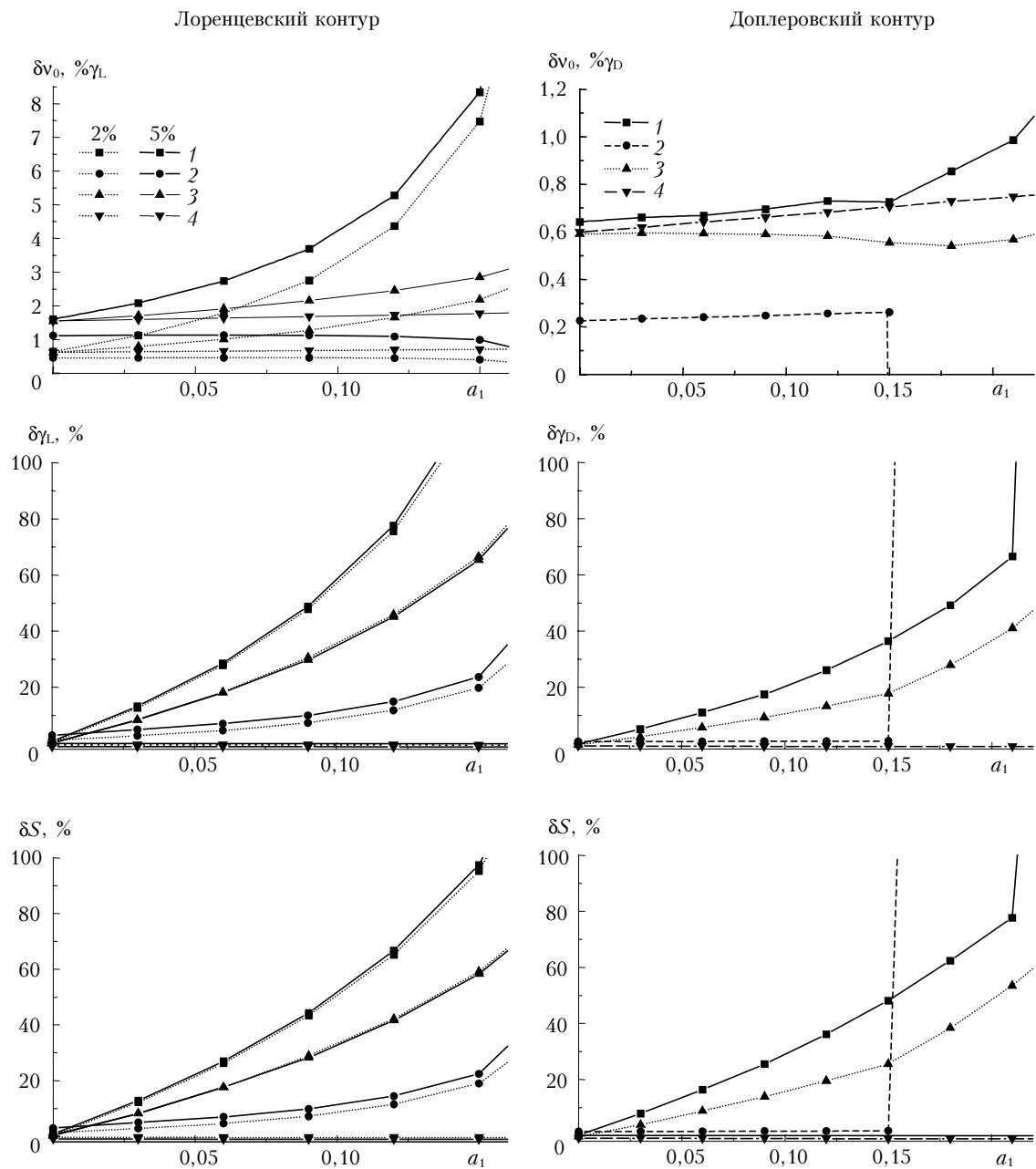


Рис. 3. Зависимость относительных погрешностей восстановления параметров линии из фрагмента спектра от наклона фоновой составляющей a_1

Относительные погрешности определения параметров линии из фрагмента производной спектра по частоте с уровнем шума 5% были определены только в зависимости от угла наклона фона в спектре (рис. 4), так как вклад постоянной составляющей при дифференцировании исчезает.

Значения погрешностей восстановления полуширины и интенсивности из фрагмента производной спектра оказались не более 2% для любого метода определения параметров линий и слабо зависели от величины a_1 (в случае восстановления параметров из спектра близкие значения погрешностей, слабо зависящие от параметров фона, были

получены только при подгонке параметров линии и фона одновременно, а для остальных методов сильно зависели от параметров фона).

Однако погрешность восстановления центральной частоты из производной спектра для всех методов оказалась выше, чем при использовании спектра.

Изрезанный характер кривых на рис. 4 свидетельствует о том, что при определении параметров линии из фрагмента производной спектра случайный шум оказывает большее влияние на получаемые значения параметров, чем при использовании спектра.

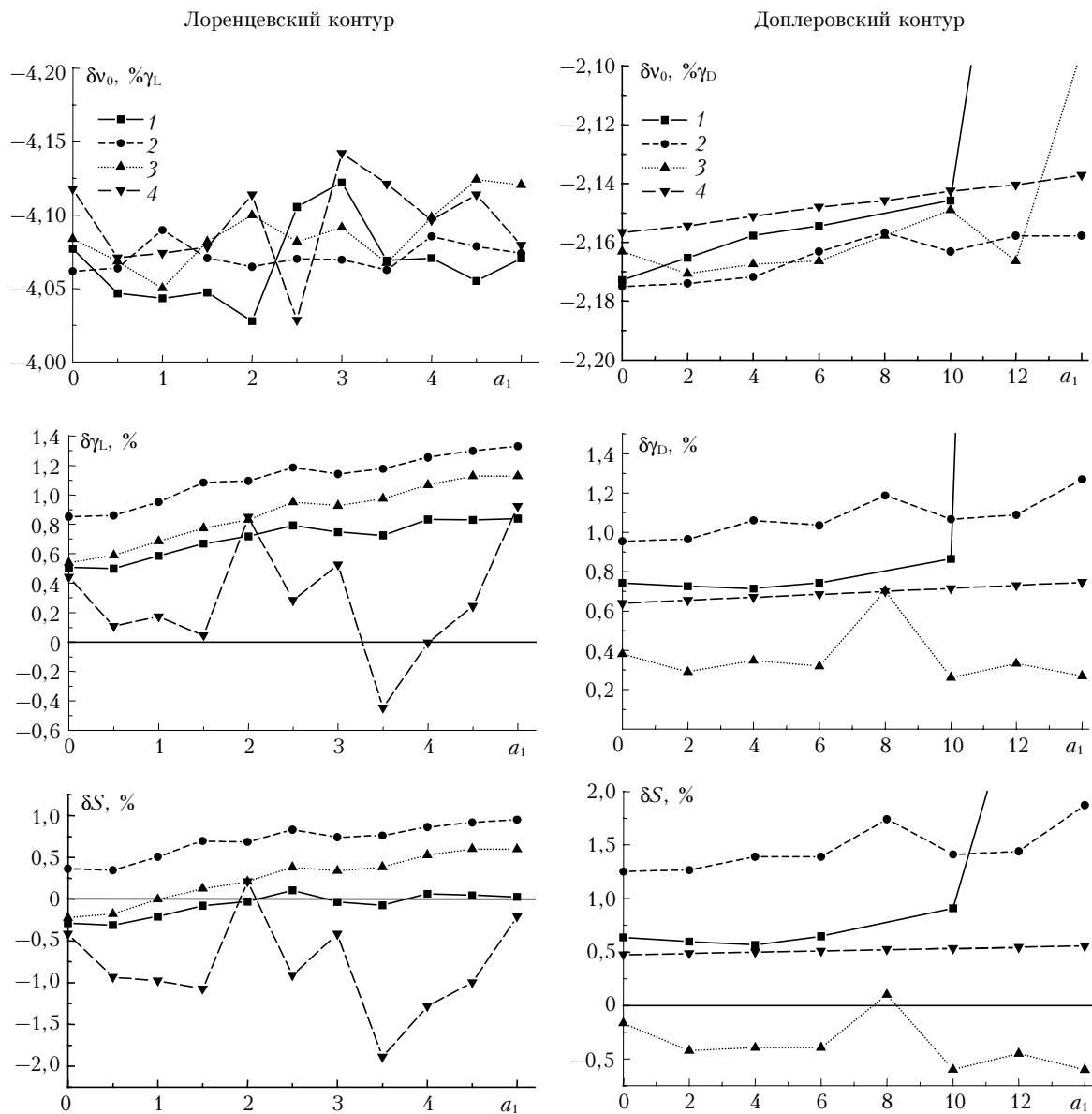


Рис. 4. Зависимость относительных погрешностей восстановления параметров линии из фрагмента производной спектра от наклона фоновой составляющей a_1

2.2. Влияние ширины фрагмента спектра

Для исследования влияния ширины фрагмента спектра на погрешности определения параметров спектральной линии из модельного фрагмента лоренцевского контура с 5%-м уровнем шума без фоновой составляющей последовательно вырезались участки в 2, 4, 6, ..., 20 полуширин, симметричные относительно центральной частоты исследуемой линии. Относительные погрешности восстановления параметров исследуемой линии из спектра и его производной в зависимости от ширины спектрального интервала представлены на рис. 5.

Параметры линии определялись без предварительного удаления фона (кривые 1 на рис. 5), с предварительным удалением квадратичного фона (2) и с определением параметров фона при подгонке одновременно с параметрами линии (3).

Близость результатов, полученных при предварительном удалении квадратичного фона и без удаления фона для фрагмента спектра, демонстрирует, что предварительное удаление фона в тех случаях, когда он в действительности отсутствует в спектре, не оказывает заметного влияния на погрешности восстановления параметров, в то время как определение параметров фона при подгонке в этом случае может приводить к несколько большим погрешностям определения полуширины и интенсивности линии при небольшой ширине фрагмента.

При восстановлении параметров линии из производной спектра предварительное удаление фона не влияет на погрешность определения центральной частоты, но может приводить к определению полуширины и интенсивности с большими погрешностями.

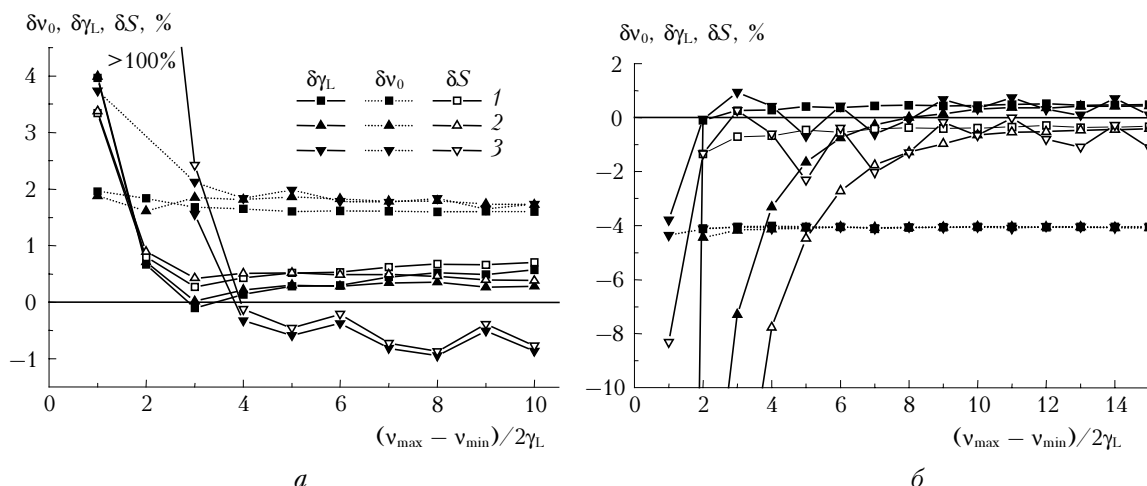


Рис. 5. Зависимость относительной погрешности восстановления параметров исследуемой линии из спектра (а) и его производной (б) в зависимости от ширины фрагмента спектра

Из рис. 5 видно, что ширина фрагмента спектра не оказывает влияния на погрешности определения параметров линии независимо от использованного метода обработки, если представлен спектральный участок не менее 8–10 полуширин линии (по 4–5 в каждую сторону от центра). При использовании меньшего спектрального интервала наблюдается заметный рост погрешностей восстановления полуширины и интенсивности линии. Следует отметить, что при обработке более узких фрагментов спектра погрешности восстановления полуширины и интенсивности при подгонке параметров фона больше, чем при его предварительном удалении, в то время как при обработке более узких участков производной спектра предварительное удаление фона наименее корректно.

При определении параметров фона при подгонке рост погрешностей восстановления полуширины и интенсивности наблюдается для фрагментов спектра менее 8 полуширин, если же параметры фона не включены в подгоняемые параметры, сужение фрагмента до 5–6 полуширин не приводит к росту погрешности восстановления параметров исследуемой линии. При использовании производной спектра заметного роста погрешностей восстановления полуширины и интенсивности не наблюдается даже при сужении фрагмента до четырех полуширин как без учета фона, так и при подгонке его параметров, однако предварительное удаление фона ухудшает результаты для фрагментов меньше чем в 14–15 полуширин. Это позволяет сделать вывод, что при обработке спектра предпочтительнее удалять фоновую составляющую предварительно, а для производной спектра – подгонять параметры линии и фона одновременно.

Погрешности определения центральной частоты значительно более устойчивы как к ширине фрагмента, так и к способу учета фона, лишь подгонка параметров фона при обработке спектра

с шириной фрагмента менее 6 полуширин линии вызывает увеличение погрешности по сравнению с остальными способами.

Результаты подобных расчетов зависимости погрешностей восстановления параметров линии от ширины фрагмента спектра представлены нами в работе [8]. Расчеты были проведены для лоренцевского фрагмента спектра без фоновой составляющей с 2%-м случайным шумом. При подгонке использовалась модель «фойгтовский контур + константа» с определением величины не зависящего от частоты фона при подгонке одновременно с параметрами линии. В этом случае ширина фрагмента влияла на погрешности восстановления параметров при обработке спектральных участков менее 14–15 полуширин (в отличие от ≈ 8 полуширин в настоящей работе). Разница в минимальной ширине фрагмента, начиная с которой погрешность не уменьшается при увеличении ширины участка спектра, вероятно, обусловлена тем, что при расчетах в работе [8] спектр содержал значительно меньшее количество точек (5 точек на полуширине линии), а в данной работе для лоренцевского спектра приходится 12 точек на полуширину. Кроме того, имеется разница в использованной модели фона: в данной работе наклон фона являлся подгоняемым параметром наряду с постоянной составляющей.

2.3. Влияние соседней линии

Погрешности восстановления параметров исследуемой линии (интенсивность S , центральная частота ν_0) из фрагмента спектра в зависимости от интенсивности и удаления соседней линии (интенсивность S_m , центральная частота ν_1) для лоренцевского контура с 5%-м уровнем случайного шума без дополнительного добавления фоновой составляющей представлены на рис. 6. Определение параметров исследуемой линии проводилось всеми четырьмя описанными выше методами.

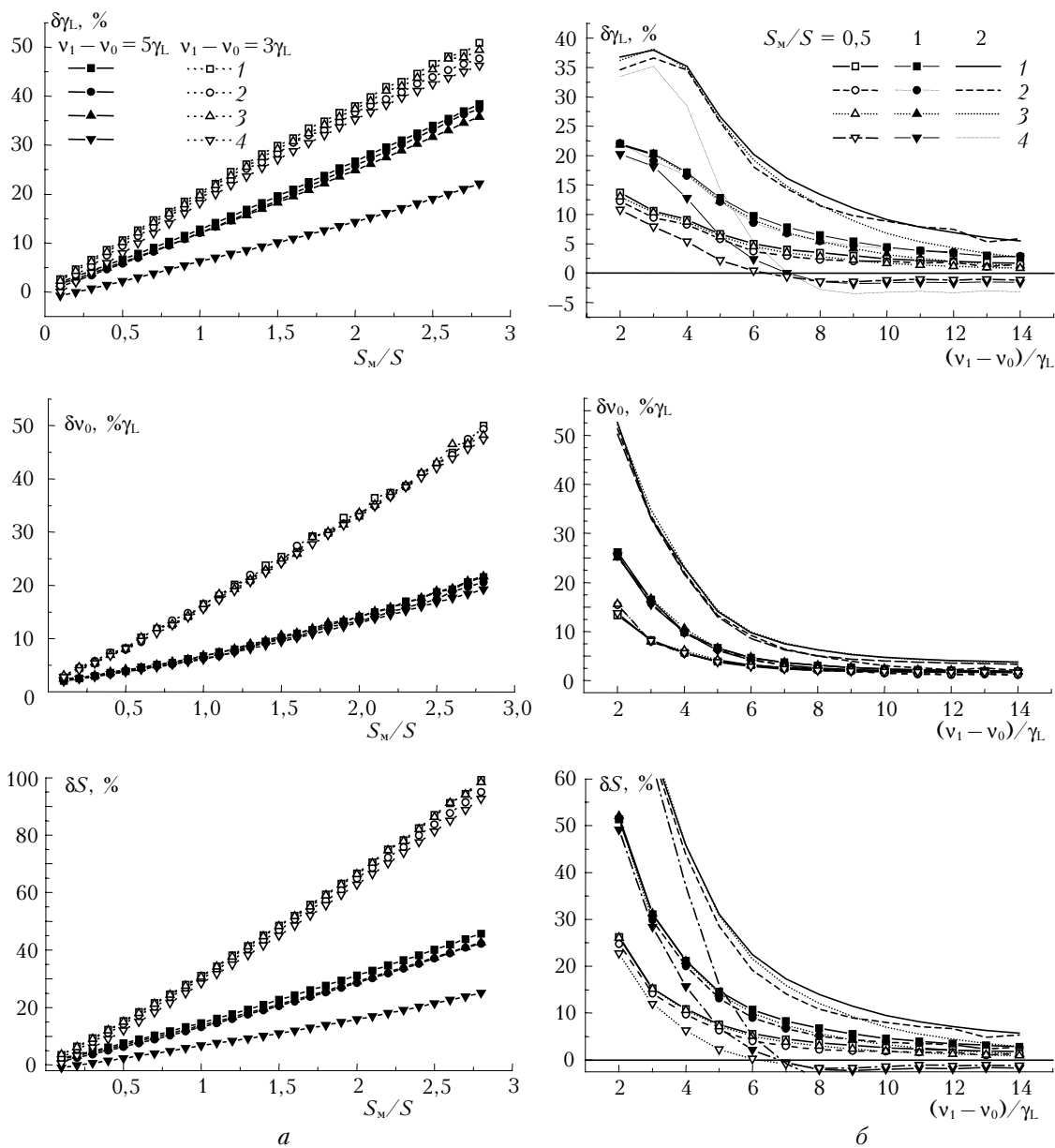


Рис. 6. Погрешности восстановления параметров исследуемой линии из фрагмента спектра в зависимости от интенсивности (а) и удаления (б) соседней линии

Из рисунка видно, что погрешности определения параметров исследуемой линии пропорциональны интенсивности соседней линии. Зависимость погрешностей определения параметров исследуемой линии от удаления линий носит нелинейный характер. Влияние соседней линии не удается компенсировать предварительным удалением даже квадратичного фона, и результаты, полученные с предварительным удалением фона и без учета фона, близки, однако дополнительное введение линейного фона в модель и определение его параметров при подгонке одновременно с параметрами исследуемой линии позволяют уменьшить погрешность определения полуширины и интенсивности почти вдвое по сравнению с другими методами для расстояния между линиями 5 полуширин, но при более близком расположении линий эта разница

уменьшается. Таким образом, введение линейного фона при подгонке позволяет частично компенсировать влияние соседней линии при ее достаточной удаленности, однако при сближении линий необходима совместная подгонка параметров обеих линий.

Наличие соседней линии с половинной интенсивностью на расстоянии около четырех полуширин вносит погрешность определения центральной частоты до 5% полуширины, для интенсивности и полуширины погрешности составляют 7–10%.

Аналогичные расчеты были проведены для фрагмента производной спектра, и их результаты представлены на рис. 7. Из рис. 6, 7 видно, что при использовании производной абсолютные значения погрешностей параметров меньше, чем при использовании спектра.

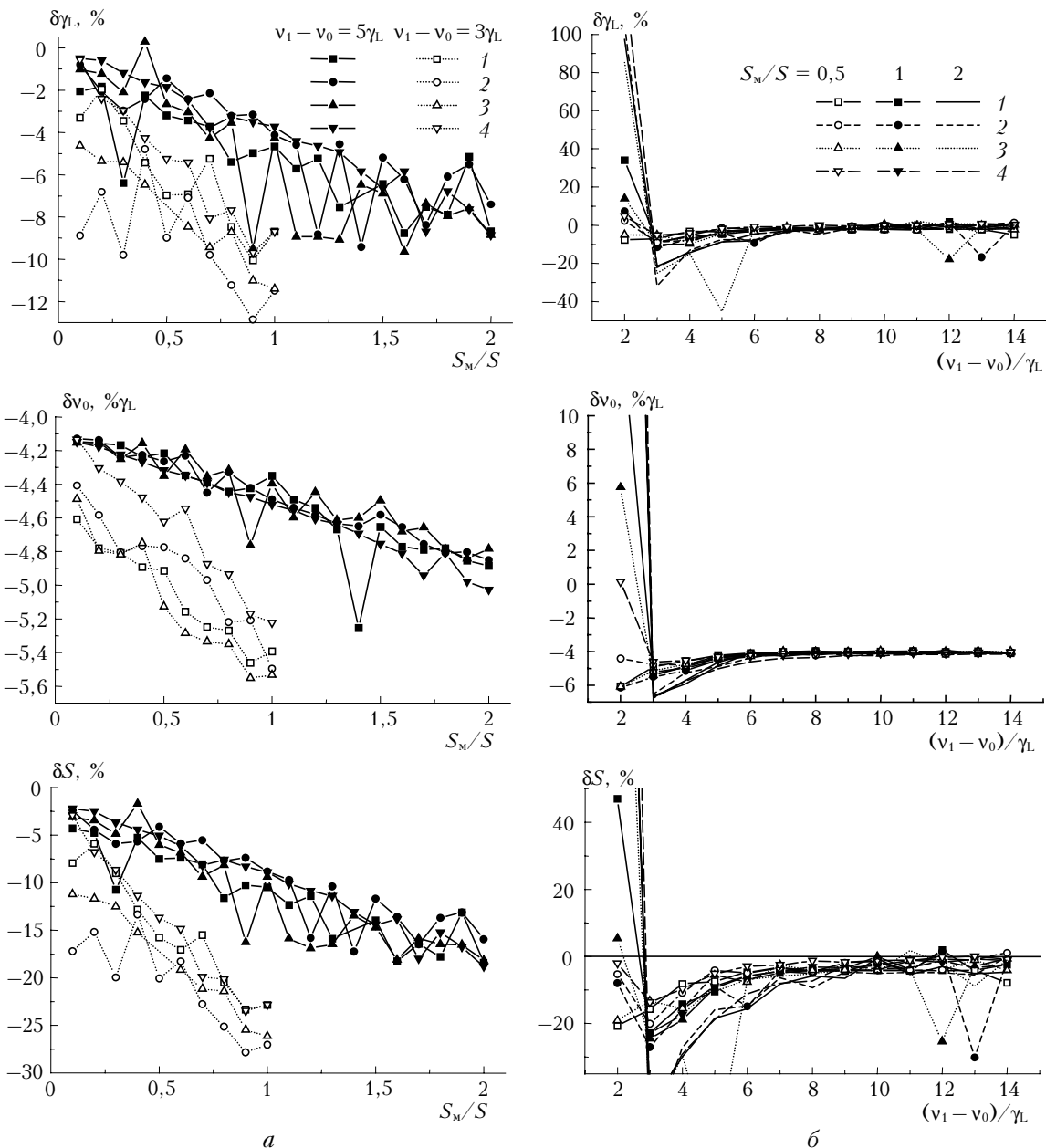


Рис. 7. Погрешности восстановления параметров исследуемой линии из фрагмента производной спектра в зависимости от интенсивности (а) и удаления (б) соседней линии

Характер зависимости погрешностей от интенсивности соседней линии также близок к линейному, и погрешности восстановления параметров резко возрастают при уменьшении расстояния между линиями меньше 5–6 полуширин. Как и в предыдущих случаях, при обработке производной спектра 1) заметно влияние случайного шума на получаемые значения параметров линии и 2) определение параметров фона при подгонке дает наилучшие результаты, а предварительное удаление фоновой составляющей гораздо менее эффективно.

Выводы

1. Неучет фоновой составляющей при определении параметров линий из спектра поглощения

может приводить к погрешности в определении интенсивности и полуширины до 100% для лоренцевского контура и до 80% для доплеровского при уровне фона в области центра линии до 20% от величины поглощения в центре линии в случае 5%-го случайного шума в спектре.

2. При неизвестном характере фоновой составляющей предварительное удаление линейного фона или, особенно, добавление линейной функции в модель при подгонке позволяют уменьшить погрешности определения параметров спектральной линии до 1–2% даже при 5%-м шуме и 20%-м уровне фона.

3. Погрешности определения параметров линии из производной спектра слабо зависят от способа

учета фоновой составляющей при обработке и не превосходят 1,5–2% для интенсивности и полуширины в описанных выше условиях, однако при определении центра линии могут возникать погрешности систематического характера.

4. Уменьшение ширины фрагмента спектра до менее чем 8 полуширин для спектра приводит к увеличению погрешности восстановления полуширины и интенсивности при одновременной подгонке параметров фона, однако при предварительном удалении фоновой составляющей допустимо сужение спектрального интервала до шести полуширин без заметного увеличения погрешностей определения полуширины и интенсивности.

5. Для производной спектра погрешность определения интенсивности без использования коррекции фона растет при сужении фрагмента спектра менее 10 полуширин, однако введение линейного фона в модель при подгонке позволяет определить интенсивность и полуширину с точностью не хуже 3% вплоть до ширины фрагмента около четырех полуширин.

6. Точность определения центральной частоты исследуемой линии слабо зависит от ширины используемого фрагмента спектра.

7. Наличие крыла слабой (с более чем вдвое меньшей интенсивностью) линии в зарегистрированном спектре приводит к погрешности определения параметров исследуемой линии не более 2–3% при расстоянии между линиями более чем пять полуширин и до 5% — при расстоянии в три полуширины.

8. Погрешность определения параметров исследуемой линии из фрагмента спектра пропорциональна интенсивности мешающей линии и достигает 50% для полуширины, 50% полуширины для центральной частоты и 100% для интенсивности при соотношении интенсивностей мешающей и исследуемой линий 3:1 при удалении мешающей линии на 3σ .

9. При наличии мешающей линии в спектре предварительное удаление фоновой составляющей

малоэффективно, однако добавление линейного фона к модели контура линии при подгонке позволяет уменьшить погрешности определения полуширины и интенсивности в 1,5–2 раза, по крайней мере для расстояния между линиями не меньше 4–5 полуширин.

10. Использование фрагмента производной спектра по частоте для определения параметров спектральной линии позволяет получить параметры с меньшей (в 2–2,5 раза) погрешностью, однако искусственное введение фоновой составляющей не компенсирует влияния мешающей линии.

1. Dana V., Mandin J.Y. New improvements in the determination of line parameters from FTS data // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1992. V. 48. N 5/6. P. 725–731.
2. Varghese P.L., Hanson R.K. Collisional narrowing effects on spectral lineshapes measured at high resolution // Appl. Opt. 1984. V. 23. N 14. P. 2376–2385.
3. Bel-Bruno J.J., Zughil M.B., Gelfand J., Rabitz H. Analysis of collisional-broadened and overlapped spectral lines to obtain individual line parameters // J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 87. P. 560–568.
4. Chang Y.S., Shaw J.H. A nonlinear least squares method of determining line intensities and half-widths // Appl. Spectrosc. 1977. V. 31. N 3. P. 213–220.
5. Shaw J.H., Tu N., Agresta D.L. Sources systematic errors in the line intensities // Appl. Opt. 1985. V. 24. N 15. P. 2437–2441.
6. Homann T., Vogel A., Orphal J., Burrows J.P. Ground-based atmospheric spectroscopy for determination of trace gas amounts // Atmosph. Spectrosc. Appl. Reims, 1999. P. 67–70.
7. Катаев М.Ю., Никуфорова О.Ю. Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Ч. 1. Влияние фона и шума измерений // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 11. С. 992–997.
8. Катаев М.Ю., Никуфорова О.Ю., Пташник И.В. Погрешность восстановления параметров линий из спектра поглощения. Ч. 3. Влияние искажения центральной части контура линии поглощения при регистрации // Оптика атмосф. и океана (в печати).

M.Yu. Kataev, O.Yu. Nikiforova. Error of retrieval of spectral line parameters from the absorption spectrum. Part 2. Effect of background and neighboring spectral lines.

The effect of the background component and a wing of a neighboring spectral line on the quality of retrieving the parameters of the line under study in the presence of random noise has been investigated numerically. The computations have been performed for the absorption spectrum and its frequency derivative. It has been analyzed how the character of the frequency dependence and parameters of the background affect the error of retrieval of the line position, half-width, and intensity. The addition of a linear background to the model has been shown to reduce the errors due to the presence of a neighboring spectral line in determination of line parameters.