

ЛИДИЯ АНДРЕЕВНА ЛУИЗОВА

кандидат физико-математических наук, доцент, профессор кафедры информационно-измерительных систем и физической электроники физико-технического факультета ПетрГУ
alim@karelia.ru

АНАТОЛИЙ ДИАМИДОВИЧ ХАХАЕВ

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой информационно-измерительных систем и физической электроники физико-технического факультета ПетрГУ
alim@karelia.ru

НЕВОЗМУЩАЮЩИЕ МЕТОДЫ ЛОКАЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПЛАЗМЫ

Для определения локальных параметров неоднородной плазмы, таких как концентрации нормальных и возбужденных атомов и электронов, атомной и электронной температуры, большой массив экспериментальных данных должен быть собран и обработан рациональными алгоритмами, которые позволяют уменьшить влияние шумов на результаты. В статье описаны методы сбора и обработки данных, разработанные в Петрозаводском государственном университете.

Ключевые слова: алгоритмы сбора и обработки данных, атомы, диагностика неоднородной плазмы, спектроскопия, электроны

Плазма – это частично или полностью ионизованный газ, в котором плотности положительных и отрицательных зарядов практически одинаковы, а линейные размеры области, занимаемой им, значительно превосходят расстояние, на котором электрическое поле отдельной заряженной частицы исчезает вследствие экранирования другими частицами. Плазма является рабочей средой источников света, в том числе и лазеров; многих технологических процессов, например сварки, напыления тонких пленок в оптике и микроэлектронике; медицинских процедур. Плазма присутствует в атмосферах звезд и планет и в межзвездном пространстве. Регистрация и анализ спектров излучения и поглощения плазмы – одно из эффективных средств ее диагностики, то есть определения локальных и мгновенных значений основных ее параметров: концентраций электронов, атомов и молекул, входящих в состав плазмообразующей среды в основном и различных возбужденных состояниях, а также функции распределения различных

компонент плазмы по энергиям [28]. Целью диагностики является определение характеристик объектов. Построение и проверка физических и математических моделей плазмообразующей среды часто производится на основе результатов диагностики. Такие модели имеют как фундаментальное научное значение (так как плазма – это уникальная «лаборатория» элементарных процессов взаимодействия атомов, молекул и заряженных частиц), так и прикладное, поскольку понимание условий в плазме и процессов, протекающих в технологическом объекте, позволяет направленно совершенствовать его рабочие характеристики.

Данный обзор посвящен современным методам локальной спектроскопии плазмы, разрабатываемым или применяемым в Петрозаводском государственном университете по инициативе или при участии авторов этого обзора. При этом рассматриваются только методы, которые используют собственное излучение плазмы или результат ее просвечивания внешним, например, мало-

мощным несфокусированным лазерным излучением, поскольку доказано [34], что развивающиеся в последнее время приемы локальной диагностики, использующие воздействие на плазму мощного лазерного излучения [28], не гарантируют отсутствия различий параметров среды до начала и в момент выполнения измерений.

1. ОБЩАЯ СХЕМА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ. «ПРЯМАЯ» И «ОБРАТНАЯ» ЗАДАЧИ

При регистрации собственного излучения плазмы или ее просвечивании внешним излучением результат отражает свойства среды как целого, и переход к локальным характеристикам требует специальной математической обработки регистрируемых сигналов, основанной на определенных моделях изучаемого объекта, а также на модели преобразования оптического сигнала в измерительной аппаратуре.

Введем понятие «элементарный объем плазмы», понимая под этим достаточно маленький объем, в котором плазму можно считать однородной, а все процессы взаимодействия компонентов плазмы с внешним излучением – однократными. Параметры плазмообразующей среды, характерные для каждого элементарного объема, связаны известными из теории соотношениями с его оптическими характеристиками, к которым относятся:

а) Интенсивность спектральной линии.

Мощность спонтанного излучения (I), приходящаяся на единицу объема, в спектральной линии, соединяющей уровни j и k конкретного атома (иона или молекулы), называют интегральной интенсивностью спектральной линии.

$$I = N_j A_{jk} \hbar \omega_{jk}, \quad (1)$$

где N_j – заселенность верхнего уровня данного перехода, \hbar – постоянная Планка, ω_{jk} – частота, соответствующая длине волны (λ_{jk}) излучения данной линии ($\omega_{jk} = 2\pi c / \lambda_{jk}$, c – скорость света); A_{jk} – вероятность перехода в данной линии. Значения A_{jk} для многих линий можно найти в мировых базах спектроскопических данных, например [30]. В справочниках, например [11], [26], вместо величины A_{jk} приводятся значения сил осцилляторов переходов f_{jk} , связь между A_{jk} и f_{jk} дается соотношением:

$$A_{jk} = 0.67(g_k/g_j)\lambda_{jk}^{-2} f_{jk}, \quad (2)$$

где g_k , g_j – статвеса нижнего и верхнего уровней перехода соответственно, а λ_{jk} выражено в сантиметрах.

б) Контур линии спонтанного излучения.

Распределение мощности спонтанного излучения внутри контура спектральной линии принято описывать функцией $\phi(\lambda)$ или $\phi(\omega)$, норми-

рованной по площади на 1, так что мощность спонтанного излучения единицы объема, отнесенная к единичному интервалу частот (длин волн) и единице телесного угла, называется спектральным коэффициентом излучения $\epsilon(\lambda)$ и представляется в виде:

$$\begin{aligned} \epsilon(\lambda) &= (4\pi)^{-1} I \phi(\lambda), \\ \epsilon(\omega) &= (4\pi)^{-1} I \phi(\omega). \end{aligned} \quad (3)$$

При этом

$$\int \phi(\omega) d\omega = \int \phi(\lambda) d\lambda = 1; \quad (4)$$

$$\phi(\lambda) = \phi(\omega) \cdot (d\omega/d\lambda).$$

Функции $\phi(\lambda)$, $\phi(\omega)$ будем называть формой контура линии спонтанного излучения тонкого слоя. Именно эта функция может нести информацию о таких локальных параметрах плазмообразующей среды, как температура атомов и электронов, концентрация электронов, концентрация атомов в основном энергетическом состоянии, в зависимости от того, какой фактор в данных условиях вносит основной вклад в формирование контура [4], [14], [18], [28].

в) Контур коэффициента поглощения и интегральный коэффициент поглощения в линии.

Коэффициент поглощения $k(\lambda)$ определяет изменение потока монохроматического излучения $P(\lambda)$ при прохождении слоя плазмы малой толщины dx :

$$dP(\lambda) = -k(\lambda)P(\lambda)dx. \quad (5)$$

$k(\lambda)$ можно представить в виде произведения интеграла от $k(\lambda)$ в пределах контура линии (K) и функции контура $\phi_k(\lambda)$:

$$k(\lambda) = K \phi_k(\lambda). \quad (6)$$

Интегральный коэффициент поглощения K связан с заселеностями нижнего N_k и верхнего N_j уровней и вероятностью соответствующего перехода A_{ik} [14], [28]:

$$K = (g_j/g_k) \lambda_{jk}^4 A_{jk} (8\pi c)^{-1} N_k \{1 - (g_k/g_j)N_j\}, \quad (7)$$

где λ_{jk} – длина волны центра соответствующей линии.

Для простой линии (не имеющей тонкой или сверхтонкой структуры) и для линии со структурой, если заселенности подуровней нижнего и верхнего состояний подчиняются Больцмановскому распределению с одной и той же температурой, контур спонтанного излучения тонкого слоя $\phi(\lambda)$ и контур коэффициента поглощения $\phi_k(\lambda)$ в той же точке плазмообразующей среды совпадают. Это отнюдь не означает совпадения формы линий испускания и поглощения для источника в целом.

г) Спектральные коэффициенты излучения и поглощения в сплошном спектре.

Сплошной спектр излучения плазменного объекта формируется целым рядом процессов:

- наложением неразрешенных молекулярных полос;
- наложением неразрешенных сильно уширенных спектральных линий;
- тепловым излучением нагретых макроскопических тел, в том числе пылевых частиц и кластеров, электродов и других элементов конструкций, помещенных в плазму;
- процессами, формирующими вклад электронов в сплошной спектр: торможением электронов в поле иона и атома и рекомбинацией электрона и иона.

Первые два процесса поддаются количественной оценке для вполне определенных конкретных плазменных объектов, и здесь не может быть построена какая-то общая теория.

Излучение кластеров и пылевых частиц интенсивно исследуется в последнее время [23], [28]. Свечение других тел требует отдельного учета. Теория вклада электронов в сплошной спектр излучения и поглощения плазмы и использование этого спектра в задачах диагностики конкретных плазменных объектов освещены в литературе [17], [18]. Обилие факторов, формирующих сплошной спектр, сильно осложняет его использование для диагностики, поэтому, как правило, исследователи предпочитают определять параметры плазмы по излучению и поглощению в спектральных линиях.

Однако локальные спектроскопические характеристики элементарного объема не могут быть измерены непосредственно. При прохождении излучения через различные участки источника происходит его поглощение, рассеяние, наложение излучений с различными характеристиками, исходящих из разных участков плазмы.

К спектроскопическим характеристикам источника в целом относятся:

а) $b(\lambda)$ – спектральная плотность мощности излучения единичной площади поверхности источника, которое распространяется в единичном телесном угле в направлении наблюдения.

Часто эту величину называют интенсивностью излучения или яркостью [28]. Строго говоря, согласно стандарту [7], энергетическая яркость определяется через мощность излучения в направлении, перпендикулярном к поверхности источника. При диагностике плазменных объектов измеряется мощность излучения в определенном направлении, которое только при некоторых положениях объекта, например при наблюдении вдоль диаметра цилиндрического разряда, совпадает с нормалью к его поверхности. Однако величину $b(\lambda)$, которая была определена выше, проще связать с распределением локальных спектральных характеристик плазмы. В частности, для спектральной линии $b(\lambda)$ определяют контур линии излучения источника. Эта величина может

быть представлена как интеграл вдоль оси y (направления наблюдения) от мощности излучения отдельных участков плазмы в малый телесный угол, отнесенный к величине этого угла и единичному интервалу длин волн, в предположении, что спонтанное излучение элементарных объемов изотропно во всех направлениях и при распространении от каждой точки источника до его поверхности испытывает поглощение:

$$b(\lambda) = \int_0^{y_0} \frac{I(y)}{4\pi} \phi(\lambda, y) \exp[-\int_y^{y_0} K(y') \phi(\lambda, y') dy'] dy. \quad (8)$$

Здесь y_0 – размер источника вдоль направления наблюдения (во всех экспериментах предполагается известной величиной), I , K , ϕ определяются формулами (1), (4), (7) для области плазмы с координатой y .

б) $\tau(\lambda)$ – оптическая толщина плазмы.

Этот интеграл от коэффициента поглощения вдоль луча наблюдения по всему объему источника. Просветим плазму в направлении y монохроматическим излучением мощностью $P_0(\lambda)$. На выходе из плазмы мощность излучения будет ослаблена поглощением. Используя определение (5), в котором положим, что $P(\lambda)$ и $k(\lambda)$ являются функциями y , и граничное условие: $P(\lambda, 0) = P_0(\lambda)$, получим:

$$P(\lambda, y_0) = P_0(\lambda) \exp\left(-\int_0^{y_0} K(y) \phi(\lambda, y) dy\right). \quad (9)$$

Интеграл в показателе экспоненты и называют оптической толщиной плазмы.

Связь $b(x, z, \lambda)$, $\tau(x, z, \lambda)$ (здесь x, z – пространственные координаты в направлениях, перпендикулярных направлению наблюдения y) с локальными оптическими характеристиками полностью определяется пространственной структурой объекта, степенью его неоднородности, свойствами симметрии – все это объединяется в понятии «модель источника».

Для измерения $b(\lambda)$ (в задачах эмиссионной спектроскопии) или $P(\lambda)$, $P_0(\lambda)$ (при реализации методов абсорбционной спектроскопии) используется измерительная аппаратура, на выходе которой формируется массив отсчетов, определяемый функцией на выходе системы. В общем случае для пространственно-неоднородных и нестационарных источников связь отсчетов $Y(\lambda, x, z, t)$, даваемых прибором, с измеряемыми величинами $b(\lambda, x, z, t)$, поступающими на вход измерительной системы в определенный момент времени (t), определяется свойствами прибора («моделью прибора»). Практически диагностика возможна, только если эта модель известна, то есть установлена однозначная связь массива отсчетов с функцией на входе (определенна «аппаратная функция» прибора).

Из вышеизложенного видно, что есть два пути определения пространственных распределений параметров неоднородной плазмы:

1) Сначала, используя связь искомых локальных параметров плазмы с оптическими характеристиками (1–7) и задавшись определенной моделью источника с некоторым числом варьируемых параметров, связанных с искомыми распределениями, вычисляют пространственное распределение характеристик источника, например $b(\lambda)$ (8), для нескольких фиксированных пространственных точек (для нестационарных источников и для фиксированного момента времени). Затем, зная свойства измерительной системы, рассчитывают массив отсчетов на ее выходе и сравнивают результаты расчета с экспериментальными данными; варьируя параметры модели, добиваются наилучшего совпадения экспериментальных и рассчитанных спектров и тем самым находят распределение локальных параметров плазмы. Такой метод спектроскопической диагностики называют решением «прямой» задачи. Очевидно, достоверность полученных результатов существенно зависит от справедливости априорных предположений, лежащих в основе использованных моделей, и решения могут быть неоднозначны.

2) Собрав массив отсчетов $Y(\lambda, x, z, t)$ для каждой пространственно-временной точки, исключают аппаратные искажения, внесенные прибором, и восстанавливают распределения $b(\lambda, x, z, t)$ или $\tau(\lambda, x, z, t)$. Затем для каждой длины волны при фиксированных значениях координат и времени восстанавливают распределения параметров элементарных объемов (ε, k), в общем случае применяя методы томографии [3], [5], [19], [20]. Задача упрощается для источников с осевой симметрией. Для определения локальных параметров плазмы в одном сечении, перпендикулярном оси симметрии z , при фиксированных λ и t достаточно измерить распределение характеристики источника, например $b(\lambda)$, вдоль координаты x . Если можно пренебречь самопоглощением в плазме излучения с длиной волны λ , радиальное распределение соответствующего локального параметра $\varepsilon(\lambda, r)$ находится из решения интегрального уравнения типа:

$$b(\lambda, x) = 2 \int_x^{\infty} \frac{\varepsilon(\lambda, r) r dr}{\sqrt{r^2 - x^2}}. \quad (10)$$

Это интегральное уравнение Абеля, математическое решение которого хорошо известно:

$$\varepsilon(\lambda, r) = -\frac{1}{\pi} \int_r^{\infty} \frac{(db(\lambda, x)/dx) dx}{\sqrt{x^2 - r^2}} = R\{b(\lambda, x)\}. \quad (11)$$

Здесь r – расстояние от оси симметрии, R обозначает оператора радиального преобразования, то есть решения уравнения (10). Аналогично можно найти $k(\lambda, r) = R\{\tau(\lambda, x)\}$.

Такой метод диагностики называют решением «обратной» задачи. На первый взгляд кажется, что здесь не используются никакие априорные предположения (кроме часто применяемого предположения об аксиальной симметрии источника), и в этом преимущество метода перед решением «прямой» задачи. Однако исключение аппаратных искажений и восстановление внутренней структуры объекта по его внешним характеристикам относятся к классу так называемых «некорректных» или «некорректно поставленных» обратных задач [27]. «Некорректными» обратными задачами называют такие физические задачи, в которых некоторые параметры объекта связаны с измеряемыми величинами, известными уравнениями или системой уравнений, имеющих строгое математическое решение, однако на практике решить их и найти из эксперимента нужные параметры не удается, так как экспериментальные данные «поражены» шумами (случайными погрешностями). Для решения таких задач предложены различные алгоритмы, суть которых сводится к использованию некоторой априорной информации об искомых функциях (например, задание степени их «гладкости» [27] или описание искомых функций моделями с малым числом параметров [22]).

2. МЕТОДЫ И АППАРАТУРА ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИИ НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Системы сбора массивов отсчетов в задачах эмиссионной и абсорбционной спектроскопии принципиально не отличаются, во втором случае надо просто найти отношение спектральных плотностей мощностей излучения, прошедшего через объект (например, разрядную камеру) при наличии и отсутствии в нем плазмы.

При использовании одноэлементного приемника излучения необходимо сканирование по спектру и пространственным координатам с программным или аппаратным выделением момента регистрации для изменяющихся во времени источников. В работах [8], [9] описан разработанный и применяемый в ПетрГУ в научных и учебных целях программно-аппаратный спектроскопический комплекс, построенный на основе дифракционного спектрометра ДФС-12 (линейная дисперсия – 0,5 нм/мм), модулей спектрального и пространственного стробирования, приборного интерфейса КАМАК [12] и программной среды LabVIEW [10]. Программные и аппаратные модули удовлетворяют требованиям унификации, стандартизации и переносимости. Спектральное оборудование, модули фотоэлектрического преобразования и модули пространственного стробирования могут быть заменены, а программы сбора, протоколирования, отображения и обработки информации практически останутся неизменными и могут функционировать в среде различных операционных систем при минимальных усилиях по их

адаптации к конкретному оборудованию и операционной системе. Комплекс позволяет регистрировать спектры в диапазоне 360–800 нм с шагом по длине волн 0.015 нм в различных пространственных точках (минимальный шаг пространственного стробирования равен 0.0076 мм в диапазоне 3 см) и в 8 фазах переменного тока промышленной частоты.

Использование фотоприемных линеек и матриц позволяет сократить число переменных, по которым необходимо сканирование. Приборы, позволяющие регистрировать спектры одновременно в различных пространственных точках источника, получили название «спектрометров изображения». В работах [1], [33] описаны разработанные и применяемые в ПетрГУ спектрометры изображения на основе интерференционных приборов – Фурье-спектрометра и интерферометра Фабри – Перо.

3. РАЦИОНАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Предположим, что исследуется сечение осесимметричного источника, и для определенной спектральной линии и фиксированного момента времени собран массив отсчетов $Y(\lambda_i, x_k)$, соответствующих настройке спектрального прибора на длину волны λ_i и системы пространственного сканирования на точку, отстоящую на расстояние x_k от оси симметрии. Даже если считать, что отсчет регистрирующей системы пропорционален мощности излучения, попадающей на фотоприемник (это всегда должно быть предварительно проверено), этот отсчет еще не дает точной информации о величине $b(\lambda_i, x_k)$, так как любая измерительная система обладает конечным разрешением, то есть собирает излучение с некоторого участка пространства и в некотором интервале длин волн и усредняет его по некоторому промежутку времени. В большинстве случаев техническими средствами удается достичь необходимого пространственного и временного разрешения, то есть можно пренебречь различием $b(\lambda_i, x_k)$ в пространственно-временных точках, излучение из которых интегрируется прибором. Но добиться пренебрежимо малого влияния прибора на спектральное распределение при использовании методов диагностики, основанных на анализе формы контуров спектральных линий, как правило, не удается. Поэтому влияние аппаратных искажений спектра необходимо учитывать. При соблюдении определенных условий (пропорциональность отсчетов мощности излучения, попадающего в прибор, и постоянство характера аппаратных искажений в интервале длин волн, соответствующем контуру исследуемой линии) сигнал на выходе прибора для фиксированных значений x есть свертка сигнала на входе и некоторой характеризующей свойства прибора функции $g(\lambda)$, называемой аппаратной функцией или импульсным откликом прибора:

$$Y(\lambda') = \eta \int b(\lambda) \cdot g(\lambda - \lambda') d\lambda = C \{b(\lambda), g(\lambda)\}, \quad (12)$$

где C – оператор свертки. Коэффициент пропорциональности η должен быть постоянен по крайней мере в пределах контура одной спектральной линии и может быть определен с помощью эталонного источника [14].

Обратный оператор, который позволяет найти $b(\lambda)$ по известным $Y(\lambda)$, $g(\lambda)$ путем решения интегрального уравнения, (12) обозначим C^{-1} . $g(\lambda)$ можно оценить теоретически [14] или определить экспериментально, осветив прибор источником (например, лазером), ширина линии излучения которого заранее много меньше ширины функции $g(\lambda)$.

Таким образом, чтобы получить распределение $\varepsilon(\lambda, r)$ для определенного момента времени в определенном сечении осесимметричной плазмы, надо подвергнуть двумерный массив отсчетов $Y(\lambda_i, x_k)$ следующим операциям:

1) Для каждого значения x_k решить уравнение (12). Опуская постоянный коэффициент η , получим:

$$b(\lambda, x_k) = C^{-1} \{Y(\lambda, x_k)\}. \quad (13)$$

Один из методов решения состоит в использовании известной «теоремы о свертке»: $W(\omega) = B(\omega) \cdot G(\omega)$, где $W(\omega)$, $B(\omega)$, $G(\omega)$ – Фурье-образы функций Y , b и g соответственно. Однако на практике сигнал на выходе измерительной системы описывается не формулой (12), а содержит слагаемое $\zeta(\lambda')$ – шум или погрешность измерения:

$$Y(\lambda') = \int b(\lambda) \cdot g(\lambda - \lambda') d\lambda + \zeta(\lambda'),$$

откуда $W(\omega) = B(\omega) \cdot G(\omega) + S(\omega).$ (14)

Поделив Фурье-образ измеренного сигнала на Фурье-образ аппаратной функции, мы получим два слагаемых: Фурье-образ сигнала на входе: $B(\omega)$ и отношение Фурье-образов шума $S(\omega)$ и аппаратной функции $G(\omega)$. Так как Фурье-образ шума, как правило, много «шире» Фурье-образа аппаратной функции, это отношение становится очень большим в области высоких частот, что и ведет при обратном Фурье-преобразовании к результату, подчас лишенному физического смысла, то есть исключение аппаратных искажений – типичная некорректная задача.

2) По найденным для каждой длины волны λ_i распределениям $b(\lambda_i, x_k)$ найти $\varepsilon(\lambda_i, r)$, решив интегральное уравнение (10). «Некорректность» этой задачи связана с наличием под интегралом производной от распределения яркости. Ясно, что наличие шумов приводит к нарушению «гладкости» регистрируемого распределения, и при конкретном значении λ_i производная может непредсказуемо менять знак. Отметим, что операторы R и C^{-1} линейны и действуют на разные переменные, поэтому порядок их применения может быть изменен.

Ниже описан оригинальный алгоритм обработки массивов спектральной информации [29], в котором используется только одно очевидное априорное предположение: пространственные распределения коэффициентов излучения для различных длин волн внутри контура одной линии не являются независимыми. Алгоритм, обеспечивающий устойчивость к шумам результатов решения одновременно двух «некорректных» обратных задач: исключения аппаратных искажений распределений $b(\lambda)$ при фиксированных «х» и решения уравнения Абеля для фиксированной длины волны, основан на использовании метода главных компонент (МГК) [31].

Для реализации алгоритма необходим массив отсчетов Y_{ik} . $Y_{ik} = Y(\lambda_i, x_k)$ ($i = 1, 2, \dots, n$, $k = 1, 2, \dots, m$; n – полное число точек по спектру, m – число пространственных точек, в которых выполнена регистрация яркости). Необходимо также путем p повторных измерений при одних и тех же значениях λ_i и x_k получить оценку дисперсии воспроизведимости отсчета.

$$S_Y^2 = \frac{\sum_{v=1}^p (Y_v - \bar{Y})^2}{p-1}. \quad (15)$$

Предположим, что погрешности всех отсчетов одинаковы и независимы.

Представим массив Y_{ik} в виде таблицы, где каждая строка соответствует определенной длине волны (на языке МГК это «объект»), а каждый столбец соответствует определенной координате (на языке МГК это «признак»). Каждый объект – это точка в m -мерном пространстве признаков, но она окружена «сферой» возможных погрешностей. Корреляция между отсчетами при различных x_k ведет к тому, что область, занятая объектами, только в некоторых направлениях выходит за пределы «сфер» погрешностей. Только эти направления, называемые «главными компонентами», несут полезную информацию об объекте. Каждый объект может быть представлен средним значением отсчетов для каждого x_k («центр тяжести» области в m -мерном пространстве) и проекциями на главные направления, которые являются собственными векторами U_p ковариационной матрицы A массива отсчетов

$$A_{k,j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_{i,k} - \bar{Y}_k)(Y_{i,j} - \bar{Y}_j); \\ \bar{Y}_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_{i,k}. \quad (16)$$

В дальнейшем учитываются только векторы U_p , отвечающие собственным значениям, превосходящим оценку дисперсии отсчета S_Y^2 (обозначим число этих значимых векторов q , оно сущес-

твенно меньше m). Только эти векторы и средний вектор \bar{Y} несут информацию о пространственном распределении отсчетов и должны быть подвергнуты радиальному преобразованию.

Информация о спектральных характеристиках содержится в проекциях $M_{i,p}$ спектральных распределений на векторы U_p , и аппаратные искажения исключаются из этих проекций.

$$M_{i,p} = \sum_{k=1}^m (Y_{i,k} - \bar{Y}_k) U_{p,k}; L_p(\lambda_i) = C^{-1} \{ M_p(\lambda_i) \}. \quad (17)$$

В результате получаем искомые контуры в различных точках плазмы, согласно соотношению:

$$\epsilon(\lambda, r) = R \{ \bar{Y}_k \} + \sum_{p=1}^q L_p(\lambda) R \{ U_p \}. \quad (18)$$

Таким образом, существенно сокращается число операций решения интегральных уравнений: вместо исключения аппаратных искажений из каждого профиля (m операций) и радиального преобразования каждой спектральной компоненты (n операций) выполняется всего q исключений аппаратных искажений и $q+1$ радиальное преобразование. Но главное, что каждая операция совершается над распределением, полученным путем усреднения значительного числа отсчетов, что существенно повышает устойчивость результатов к шумам эксперимента.

Примером приложения алгоритма к реальным объектам может служить его использование при диагностике дугового разряда тока промышленной частоты в парах ртути с добавкой иодида таллия [29], которая потребовалась при разработке металлогалоидных ламп. Измерения выполнялись на автоматизированном комплексе на основе дифракционного спектрометра ДФС-12 [9]. Контуры линий излучения регистрировались в центральном сечении цилиндрической разрядной трубки вдоль диаметра разряда ($x_k = 0$) и еще в восьми положениях x_k . Аппаратная функция определена путем регистрации контуров линий излучения разряда низкого давления в парах ртути и кадмия и аппроксимирована гауссианой с шириной 0.08 нм. Для радиального преобразования использована замена интегрального уравнения (13) системой 10 алгебраических уравнений без какой-либо дополнительной регуляризации.

Для исключения аппаратных искажений применено деление Фурье-образа проекции на Фурье-образ аппаратной функции с умножением результата перед обратным Фурье-преобразованием на функцию аподизации, которая постоянна в интервале частот Ω от $-0.8\omega_{max}$ до $0.8\omega_{max}$, а вне этого интервала равна 0 [24].

В качестве примера на рис. 1а, б приведены результаты применения алгоритма к массиву контуров линии таллия 552.7 нм (переход $9^2P_{3/2} \rightarrow 7^2S_{1/2}$) в момент времени, соответствующий максимуму тока.

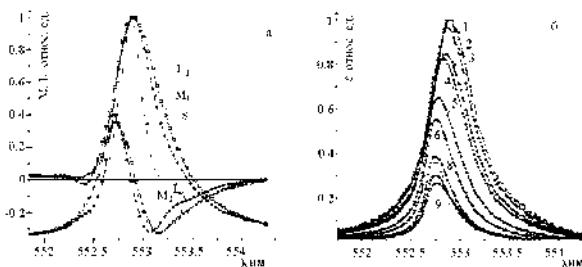


Рис. 1. а – коэффициенты разложения контуров линий таллия 555.7 нм по собственным векторам ковариационной матрицы до исключения аппаратных искажений (M_1 , M_2) и после исключения (L_1 , L_2); s – аппаратный контур; б – контуры той же линии для различных расстояний x_k от оси разряда ($1 - x_k = 0$, $9 - x_k = 0.32$ см)

Эта линия испытывает, в основном, штарковское уширение [4], что дает возможность найти радиальное распределение концентрации электронов. Эффективность алгоритма иллюстрируется рис. 2.

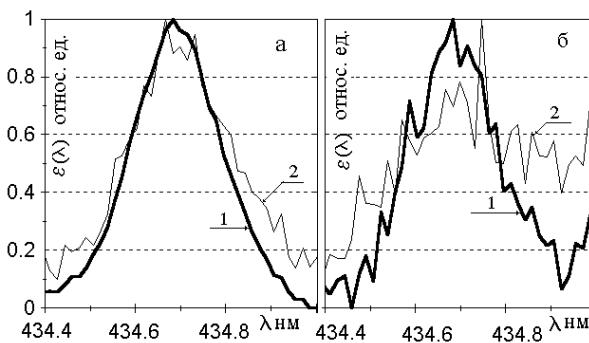


Рис. 2. Контуры линии ртути 434.7 нм (71D2–61P1) в центре разряда в моменты, когда ток максимальен (а) и минимальен (б), восстановленные описанным алгоритмом (линия 1) и путем исключения аппаратных искажений для каждой пространственной точки и радиального преобразования для каждой длины волн (2)

Если не выполняется условие постоянства дисперсии для всех элементов массива, то небольшое усложнение алгоритма заключается в том, что разложение элементов массива осуществляется не по собственным векторам матрицы \mathbf{A} (18), а по собственным векторам матрицы \mathbf{AD}^{-1} , где \mathbf{D} – ковариационная матрица погрешностей эксперимента, определенная по p повторным измерениям в одинаковых условиях.

$$\mathbf{D}_{k,j} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_{i,k} - \bar{\mathbf{Y}}_k)(\mathbf{Y}_{i,j} - \bar{\mathbf{Y}}_j). \quad (19)$$

Здесь i – номера отсчетов при постоянной длине волны; j , k – номера пространственных точек. В этом случае учитываются только собственные векторы матрицы \mathbf{AD}^{-1} , соответствующие собственным значениям, большим 1.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИСТОЧНИКА ПРИ РЕШЕНИИ «ПРЯМОЙ» ЗАДАЧИ

Предполагая определенное распределение характеристик плазмы и описав эти распределения моделями с некоторым числом параметров, можно рассчитать либо профили спектральной энергетической яркости отдельных линий, либо распределение интегральных интенсивностей линий в широком участке спектра. Эти параметры можно определить, добиваясь путем изменения параметров модели наилучшего совпадения расчета и эксперимента. Очень актуальна задача определения электронной концентрации и функции распределения электронов по энергиям внутри плазменно-пылевой структуры. Стандартные зондовые методы в этом случае неприменимы, но распределение интенсивностей линий с различными потенциалами ионизации и абсолютные значения этих интенсивностей могут быть рассчитаны при заданных значениях электронной концентрации и определенной форме функции распределения на основе уравнений баланса заселенностей энергетических уровней и сравнены с результатами измерений этих величин. Таким способом, в частности, можно оценить электронную концентрацию и температуру и обнаружить влияние пылевых структур на параметры плазмообразующей среды [6]. Однако реализация таких моделей требует использования большого объема априорной информации о параметрах элементарных процессов в плазме и атомных константах (вероятностях переходов между многими уровнями), которой мы, как правило, не располагаем, и поэтому их трудно использовать в целях диагностики.

Более надежные результаты можно получить, моделируя контуры спектральных линий.

Если оптическая толщина в центре линии $\tau(\lambda_0)$ достаточно велика и коэффициент поглощения возрастает от центра к краю источника, линия излучения самообращена, то есть спектральная яркость в ее центре меньше, чем в некоторых точках на крыльях. Самообращенные линии давно используются в целях диагностики неоднородной плотной плазмы [21], [32]. При этом, как правило, моделируется функция источника $S(\xi)$, зависящая от одного «параметра неоднородности», реже – от нескольких параметров, причем они подбираются до достижения наилучшего совпадения экспериментального и рассчитанного с этими параметрами контуров.

Высокая информативность массива самообращенных контуров, зарегистрированных при наблюдении вдоль хорд, проходящих на разных расстояниях от центра осесимметричного неоднородного источника, позволяет непосредственно определить по ним большое число параметров, описывающих пространственные распределения компонент плазмы [15], [25]. В частности, для диагностики дугового разряда переменного тока в закрытой ртутной дуге с добавкой иода

таллия использованы самообращенные контуры резонансных линий таллия 377 нм (переход $7^2S_{1/2}$ – $6^2P_{1/2}$) и 535 нм (переход $7^2S_{1/2}$ – $6^2P_{3/2}$), зарегистрированные в различных фазах тока разряда, в различных сечениях разряда при наблюдении вдоль диаметра цилиндрической разрядной трубы и вдоль хорд, проходящих на различных расстояниях от оси разряда. Оценки показывают, что в данном случае форма контура излучения (9) зависит от распределения вдоль луча зрения: концентрации излучающих атомов (Tl в состоянии $7^2S_{1/2}$), определяющей $I(y)$; концентрации поглощающих атомов (Tl в состоянии $6^2P_{1/2}$, для $\lambda = 377$ нм и $6^2P_{3/2}$ для $\lambda = 535$ нм), определяющих $K(y)$; концентрации нормальных атомов ртути, которая, в свою очередь, зависит от давления в объеме дуги и поля атомной температуры $T_a(y)$, и концентрации электронов $N_e(y)$. Контур излучения в элементарном объеме $\phi(\lambda, y)$ формируется в основном ван-дерваальсовским взаимодействием с ртутью, а для осевой области разряда следует учесть также и штарковское уширение [4].

Разряд предполагается аксиально-симметричным, и каждое из перечисленных выше радиальных распределений описывается моделью типа:

$$Z(r) = Z(0) - [Z(0) - Z(r_0)] \cdot (r/r_0)^\rho, \quad (20)$$

где r – расстояние от центра разряда, r_0 – радиус границы плазмы, $Z(r_0)$ – значение величин на границе источника, $Z(0)$ – в центре, ρ – варьируемый параметр.

К числу варьируемых параметров относится также давление в разряде. С учетом того, что все температуры на границе разряда принимаются одинаковыми, а концентрация электронов – равной 0, общее число варьируемых параметров модели для одной спектральной линии равно 10. Это число нельзя считать слишком большим, так как обрабатывается одновременно до 10 экспериментальных контуров, относящихся к разным линиям и разным направлениям наблюдения. В каждом из контуров было не менее 100 отсчетов. Подбор параметров до наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных контуров осуществляется с использованием последовательного симплекс-метода [16]. Минимизируется общая по всем контурам одной линии сумма квадратов отклонений экспериментальных и расчетных контуров. При этом все контуры нормируются на единицу по максимуму (рис. 3). Таким путем были определены радиальные распределения нормальных атомов таллия и ртути и атомов таллия, возбужденных в состояния $7^2S_{1/2}$ и $6^2P_{3/2}$. Эти результаты были использованы для оптимизации температурных режимов закрытого дугового разряда и, в конечном счете, для достижения максимального к. п. д. при преобразовании электрической энергии в световую.

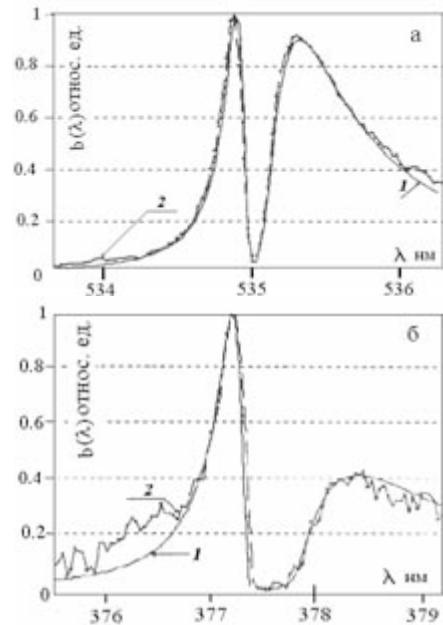


Рис. 3. Смоделированные (1) и экспериментальные (2) контуры линий таллия при наблюдении вдоль хорды, проходящей на расстоянии от оси, равном половине радиуса разрядной трубы:
а – линия 377 нм, б – 535 нм

Рассмотренные в данной статье методы диагностики неоднородной плазмы сложного состава в настоящее время становятся доступными для широкого круга академических, вузовских и заводских лабораторий, решающих широчайший круг проблем: от фундаментальных проблем науки об атомах и молекулах, проблем газоразрядных лазеров, плазмохимии, плазмотронной техники и технологий, разработки и создания высокоэффективных источников света общего и специального назначения до проблем плазменной энергетики, плазменной гидродинамики, управляемого термоядерного синтеза. Обусловлено это возможностями аппаратной базы современного приборостроения, мощностью средств вычислительной техники.

Еще более 20 лет назад программно-аппаратный комплекс «Свет» (разработка ПетрГУ, отмеченная золотой медалью ВДНХ в 1980 году), созданный на основе авторского свидетельства [13], позволил в сотни раз уменьшить время, необходимое для получения информации о параметрах плазмы закрытой дуги сложного состава [2], по сравнению с временем достижения тех же результатов традиционными для тех лет методами при несравненно большей надежности и объективности данных.

Современная техника и усовершенствованные алгоритмы сбора и обработки данных позволяют еще более ускорить получение надежной, объективной, полной, хранимой и переносимой информации о плазменной среде, что дает возможность осуществлять многие исследования в реальном масштабе времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баженова М. Е., Луизова Л. А., Чугин В. П. Многоканальный Фурье-колориметр // Оптика и спектроскопия. 1996. Т. 80. Вып. 1. С. 173–176.
2. Босенко А. Г., Луизова Л. А., Хахаев А. Д., Штивельман Я. Е. Автоматизированный комплекс для спектроскопических исследований // Известия АН СССР. Сер. физическая. 1984. Т. 48. Вып. 4. С. 796–801.
3. Бульба А. В., Луизова Л. А., Хахаев А. Д. Обучение принципам компьютерной томографии для решения задач диагностики плазмы // Исследовано в России: [Электронный ресурс]. 2006. 68. С. 677–686. <http://zhurnal.apr.relatarn.ru/articles/2006/068.pdf>.
4. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Физматгиз, 1979. 320 с.
5. Вишняков Г. И., Левин Г. Г. Оптическая томография плазменных объектов // Опт. и спектр. 1982. Т. 53. Вып. 4. С. 731–736.
6. Власов Д. В., Депутатова Л. В., Луизова Л. А., Подрядчиков С. Ф., Торчинский В. М., Хахаев А. Д. Материалы ФНТП-2001. Т. 2. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ, 2001. С. 124.
7. ГОСТ 26148-84. Фотометрия, термины и определения.
8. Екимов К. А., Луизова Л. А., Приходченко Р. В., Соловьев А. В., Хахаев А. Д. Лабораторные работы по спектроскопии с использованием виртуальных инструментов и удаленного доступа. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ, 2003. 62 с.
9. Екимов К. А., Луизова Л. А., Приходченко Р. В., Хахаев А. Д. Использование программной среды LabVIEW в спектроскопическом эксперименте // Известия ВУЗов. Приборостроение. 2004. Т. 47. № 6. С. 51–56.
10. Жарков Ф. П., Карапаев В. В., Никифоров В. Ф., Панов В. С. Использование виртуальных инструментов LabView. М.: Радио и связь, 1999. 268 с. (см. также: <http://www.labview.ru>).
11. Касабов Г. А., Елисеев В. В. Спектроскопические таблицы для низкотемпературной плазмы: Справочник. М.: Атомиздат, 1973. 160 с.
12. Курочкин С. Системы КАМАК-ВЕКТОР. М.: Энергоиздат, 1981. 232 с.
13. Кюльмясу И. И., Попов Э. Т., Хахаев А. Д. Устройство для автоматической регистрации коэффициентов излучения и поглощения пространственно-неоднородных изменяющихся во времени источников излучения: А. с. № 399738; опубл. 03.10.73. Бюлл. № 39.
14. Луизова Л. А. Оптические методы диагностики плазмы. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ, 2003. 148 с.
15. Луизова Л. А., Патров А. В., Хахаев А. Д. Формирование самообращенных контуров спектральных линий в закрытой ртутной дуге с добавкой йода таллия // Изв. Академии наук. Сер. физ. 1999. Т. 63. № 11. С. 2291.
16. Математическая теория планирования эксперимента. М.: Наука, 1983. 344 с.
17. Методы исследования плазмы / Под ред. В. Лохте-Хольтгревена. М.: Мир, 1971. 551 с.
18. Очкун В. Н. Спектроскопия низкотемпературной плазмы. М.: Физматгиз, 2006. 471 с.
19. Пикалов В. В. Прикладные аспекты эмиссионной томографии плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Сер. Б. Т. V-1. Ч. 2. М.: Изд-во Янус-К, 2006. С. 285–301.
20. Пикалов В. В., Мельникова Т. С. Томография плазмы. Новосибирск: Наука, 1995. 228 с.
21. Преображенский Н. Г. Спектроскопия оптически плотной плазмы. Новосибирск: Наука, Сиб. отд., 1971. 178 с.
22. Сизиков В. С. Математические методы обработки результатов измерений. СПб.: Политехника, 2001. 240 с.
23. Смирнов Б. М. Кластерная плазма // УФН. 2000. Т. 170. Вып. 5. С. 495–534.
24. Соловьев А. В. Аппаратные искажения: Моделирование и исключение. [Электронный ресурс]. <http://dms.karelia.ru/distort>.
25. Соловьев А. В. Программа моделирования контура спектральной линии. [Электронный ресурс]. <http://plasma.karelia.ru/contour/>.
26. Справочник констант элементарных процессов с участием атомов, ионов, электронов, фотонов / Под ред. А. Г. Жиглинского. СПб.: Изд-во СПбГУ, 1994. 335 с.
27. Тихонов А. И., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 285 с.
28. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В. Е. Фортова. Вводный том. Кн. 2. М.: Наука, 2000. 635 с.
29. Екимов К., Луизова Л., Соловьев А., Хахаев А. Data array acquisition and joint processing in local plasma spectroscopy // J. of Quant. Spectr. & Radiat. Trans. 2005. Vol. 96. P. 513–523.
30. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>.
31. Jackson J. E. A User's Guide to Principal Component. N.-Y.: John Wiley & Sons, 1991. 571 p.
32. Karabourniotis K., J. van der Mullen. Numerical validation of a self-absorption model for plasma radiation // Journal of Physics D: Applied Physics. 2005. Vol. 38. P. 3016–3027.
33. Kravchenko A. A., Luizova L. A., Soloviev A. V. High resolution local spectroscopy of inhomogeneous plasma structures // XVI International Conference on Gas Discharges and their Applications, Xi'an, China, September 11–13, 2006. Vol. 2. 2006. P. 649–652.
34. Murphy A. B. Electron heating in the measurement of electron temperature by Thomson scattering // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. 25002.