

ПОЛУЧЕНИЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ И АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ НЕСТАНДАРТНОГО ВИДА

НАЗАРОВА Е. В., канд. техн. наук, доц. НАЗАРОВ В. И.

Белорусский национальный технический университет

Со времен Ньютона, разложившего свет в спектр, Волластона, Бунзена и других, которые впервые обнаружили связь между строением вещества и его спектрами испускания и поглощения, спектроскопия прошла огромный эволюционный путь. Сегодня невозможно представить научное исследование, имеющее отношение к установлению строения вещества, в котором не затрагивались бы спектральные аспекты. С помощью спектров изучено химическое строение далеких звезд. Спектральными методами обеспечивается контроль над технологическими процессами на химических, нефтехимических и металлургических производствах.

Спектральный анализ помогает осуществлять мониторинг окружающей среды, в частности контроль за газовым составом атмосферы. Без спектроскопии немислимо производство новых промышленных материалов, лекарств, гербицидов, пестицидов и т. д. Вся наука, опирающаяся на физику, так или иначе, на некотором этапе рассмотрения своих вопросов приходит к необходимости разложения электромагнитных волн в спектр. Можно сказать, что в этом отношении спектроскопия является родоначальницей современной физики и химии. Преимущества спектральных методов исследования состоят в их высокой оперативности, дистанционности, точности и избирательности.

В мониторинге атмосферы, гидросферы, вообще окружающей среды, при контроле различных физических и технологических процессов и даже при изучении живых организмов используются различные датчики физических величин. Особое место среди них занимают оптико-спектральные датчики, с помощью которых определяется наличие или измеряется концентрация химических компонентов в некотором объеме или вдоль некоторого луча. Данные устройства представляют собой компактные спектральные приборы, настроенные на некоторый участок спектра или даже на отдельные полосы (линии) поглощения или испускания контролируемого вещества. Как и любые спектральные приборы, эти датчики

обязательно содержат некоторый диспергирующий элемент, с помощью которого исследуется необходимый участок спектра. Как и любые приборы вообще, датчики преобразовывают внешний сигнал, вносят в него некоторые искажения, и наблюдаемый на выходе датчика сигнал уже не является взаимнооднозначным отображением внешнего сигнала.

Известно, что искажения, заключающиеся в перераспределении энергии по спектру, определяются аппаратной функцией спектрального прибора.

Аппаратная функция (иначе: инструментальный контур, функция спектрального отклика) может быть определена как развернутый по управляющему параметру отклик на выходе прибора при подаче на его вход монохроматического сигнала единичной интенсивности.

Классические спектральные приборы (призмные, решеточные, работающие в одном порядке дифракции) описываются аппаратными функциями, представляющими собой более или менее уширенную монохроматическую линию (рис. 1) [1].

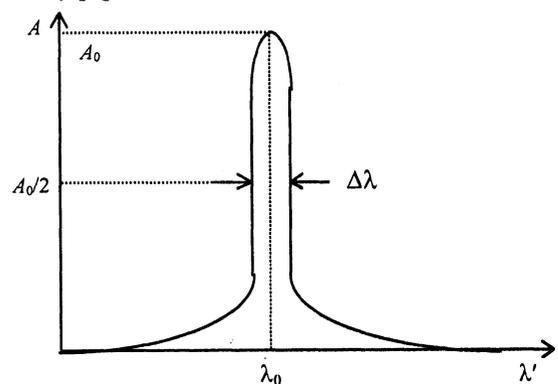


Рис. 1. Аппаратная функция классического спектрального прибора: λ' — управляющий параметр

Для таких приборов восстановление (редукция) исследуемого спектра по наблюдаемому отклику заключается лишь в уточнении ширины, интенсивностей и спектрального поглощения наблюдаемых в спектре полос и линий.

Связь через аппаратную функцию между исследуемым спектром I и откликом спектрального прибора S выглядит следующим образом:

$$S(\lambda') = \int_0^{\infty} A(\lambda, \lambda') I(\lambda) d\lambda. \quad (1)$$

Представленное интегральное уравнение является уравнением свертки. Исследуемый внешний спектр $I(\lambda)$ представляет собой зависимость интенсивности внешнего электромагнитного сигнала от параметра разложения в спектр, например, длины волны. В принципе, речь может идти и не об интенсивности сигнала, а о чем-либо другом: напряженности электрического поля, поляризационных характеристиках и т. д. Наблюдаемый отклик $S(\lambda')$ представляет собой зависимость измеряемой физической величины (интенсивности света, силы электрического тока, степени нагрева приемной площади и т. д.) от приборного параметра развертки, или переменной сканирования.

В классических спектральных приборах, где отличие $S(\lambda')$ от $I(\lambda)$ сводится лишь к небольшому уширению узких спектральных линий, переменную сканирования λ' обычно градуируют в тех же единицах и в том же масштабе, что и параметр разложения в спектр λ . При небольших искажениях, вносимых сверткой в спектр сигнала, зависимость $S(\lambda')$ можно называть спектром сигнала. В практической спектроскопии, когда речь не идет о теории спектральных приборов или механизме получения спектра, обычно имеется в виду следующая трактовка понятия спектра: параметр разложения в спектр λ подменяется соответствующим образом проградуированной переменной сканирования λ' .

Из (1) видно, что аппаратная функция $A(\lambda, \lambda')$ является функцией двух переменных. Графически ее можно представить в виде поверхности в трехмерном пространстве. На рис. 1 – это лишь сечение поверхности некоторой плоскостью, параллельной осям A и λ' . Как видно из рис. 1, площадь под таким сечением ограничена (конечна). В целях удовлетворения закону сохранения энергии осуществляется нормировка аппаратной функции

$$\int_0^{\infty} A(\lambda', \lambda) d\lambda = 1. \quad (2)$$

Таким образом, наблюдаемому сигналу $S(\lambda')$ придают еще большее сходство с внешним спектром $I(\lambda)$; оказывается, что энергия, переносимая сигналом $I(\lambda)$:

$$\int_0^{\infty} I(\lambda) d\lambda = \int_0^{\infty} S(\lambda') d\lambda'. \quad (3)$$

Если форма $A(\lambda, \lambda')$ одинакова во всех точках спектра (как правило, для классических спектральных приборов), то ее можно представить в виде квазиодномерной функции $A(\lambda - \lambda')$, зависящей только от разности между переменной сканирования и параметром разложения в спектр. Ясно, что в этом случае переменные λ и λ' должны быть градуированы в одних единицах и одном масштабе. Вид аппаратной функции с рис. 1 в трехмерном представлении показан на рис. 2.

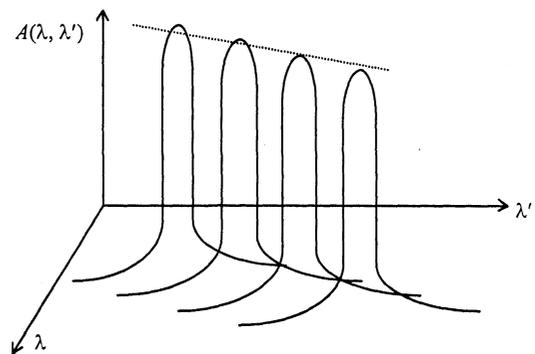


Рис. 2

Легко представить, что постепенный сдвиг края поглощения по длинам волн можно рассматривать как своеобразное сканирование спектра, однако не с выделением длины волны, а только с постепенным и последовательным изменением суммы длин волн, поступающих на приемник. Очевидно, соответствующая аппаратная функция (сканирующий отклик на внешний монохроматический сигнал) подобного, мысленного пока, спектрального прибора будет представлять собой ступеньку [1] (рис. 3), что совершенно не похоже на классические формы аппаратной функции и требует специального рассмотрения.

Исходя из изложенного выше, можно заключить, что при сканировании краем полосы поглощения уже по виду регистрируемого сигнала мы в состоянии определить истинный спектр поглощения или испускания. Поскольку

реальные края поглощения всегда несколько наклонны (переход от 100 % пропускания к 100 % поглощения происходит не мгновенно), на нашу модуляцию по частоте (сканирование) будет накладываться амплитудная модуляция.

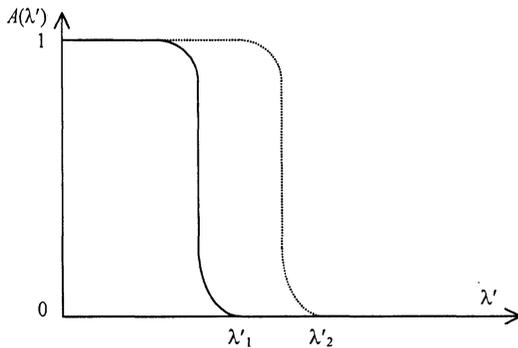


Рис. 3. Аппаратная функция нестандартного вида

Таким образом, при сканировании краем полосы поглощения уже по виду наблюдаемого сигнала мы можем судить о наличии вредных примесей в исследуемом объекте окружающей среды.

Модуляцию по длине волны (сканирование) представим как движение края поглощения (заслонки) по спектру в горизонтальном направлении [2]. В таком случае движение наклонного края (фронта) поглощения можно разложить на две составляющие: рассмотренное горизонтальное движение и движение «по вертикали» в спектре. Второй случай представляет собой не что иное, как чисто амплитудную модуляцию. Постепенному ослаблению (или, наоборот, усилению) подвергаются все длины волн и при наличии в исследуемом диапазоне каких-то линий испускания или поглощения в исследуемом внешнем сигнале. Мы не можем ничего сказать ни об их положении в спектре, ни об их интенсивности (о последней можно судить, сравнивая полученный сигнал с чисто фоновым).

Рассмотренная проблема имеет для нас значение по двум аспектам. Во-первых, таким образом регулируемое поглощение (пропускание) рабочей среды может быть использовано только для амплитудной модуляции — как в стандартных модуляторах. Во-вторых, при рассмотрении реальных сред надо уметь разделять получаемые изменения (сдвиги) полос поглощения, их краев и максимумов на перемещения по длине волны и изменения по интенсивности.

Надежность любых методов решения, особенно в случаях, когда математическое доказа-

тельство справедливости решения не известно, может быть обеспечена рассмотрением специальных примеров с известными результатами решения. В таком сложном случае, как решение уравнения свертки, результат будет заранее известен тогда, когда сама свертка составляется из двух заданных функций. Такую операцию составления свертки мы будем называть моделированием свертки (относя эту операцию на случай эксперимента, получаем модель регистрограммы, т. е. наблюдаемого сигнала) [3]. Уже на стадии моделирования можно многое сказать о характеристиках исследуемого метода: насколько сильно различаются регистрограммы для разных внешних сигналов, как сильно искажают один и тот же внешний сигнал ступенчатые аппаратные функции разного вида, какое влияние оказывают систематические и случайные погрешности и т. д. Отработав операцию моделирования, можно с большей уверенностью приступить к эксперименту.

Основная цель моделирования заключается в том, что в разрабатываемый численный (итерационный) метод решения уравнения свертки в качестве входных данных вводится смоделированная регистрограмма и рассматриваемая аппаратная функция, а на выходе метода должен получиться исходный внешний спектральный сигнал (истинный спектр). Если он получается, то все хорошо; если нет, то ищутся новые пути решения.

ВЫВОДЫ

1. Физические спектральные приборы могут описываться аппаратными функциями самых разных видов.
2. Впервые вводятся в рассмотрение типы аппаратных функций.
3. Модифицировано понятие аппаратной функции; нами она относится только к физической части спектрального прибора. При этом предполагается, что эффективность работы «виртуальной» части спектрального прибора зависит не столько от конструкции прибора, сколько от доскональности разработанного математического обеспечения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Отчет по НИР № 1999496. — Мн.: МЭУ, 1999.
2. Зайдель А. Н., Островская Г. В., Островский Ю. И. Техника и практика спектроскопии. — М.: Наука, 1972. — 376 с.
3. Физическая энциклопедия. — М.: Большая Российская энциклопедия, 1994. — Т. 4. — С. 611–615.