F7100 Diagnostické metody 1 - písemná část

Rozšíření spektrálních čar, A. Brablec

1. Vyjmenujte Hadamardovy podmínky, které musí být splněny při řešení inverzní úlohy ve spektroskopii (např. odpočet vlivu přístrojové funkce na měřený profil naměřeného profilu spektrální čáry).

Z matematického hlediska je třeba vždy řešit inverzní problém (řadu inverzních problémů), které lze obecně popsat operátorovou rovnicí:

$$\hat{K}\varphi = f\,, \tag{1}$$

kde $\varphi \in G_1$ je neznámá a $f \in G_2$ je měřená funkce (a je proto zatížená chybami měření). G_1 a G_2 značín odpovídající metrické prostory. $\hat{K}$ je příslušný operátor (lze ukázat, že se v těchto případech jedná o konvoluci).

Inverzní problém je přitom korektně zadán, jestliže jsou splněny známé Hadamardovy podmínky:

1. řešení inverzního problému existuje pro libovolnou funkci f
2. v daném prostoru G_1 existuje jen jediné řešení φ
3. řešení φ závisí na $f \in G_2$ spojitě
4. spočtené řešení je stabilní, tj. malá změna ve vstupních datech způsobí také malou změnu v hledananém řešení.

Ve spektroskopii je první podmínka obvykle splněna. Další jsou však často porušeny. Dokonce i v případě, že jsou všechny Hadamardovy podmínky splněny, může se stát, že přesnost řešení inverzního problému může být velice malá, jestliže jako vstupní data použijeme reálné experimentální hodnoty.

Množství informace, které lze získat z profilu spektrální čáry, může být přitom principiálně omezeno, např. nestabilitou přístrojové funkce (např. FPI) nebo zářením samotného plazmatu.

Tyto vlivy jsou při řešení inverzního problému obvykle zahrnuty do neznámé náhodné funkce, která se bere jako šum. To ovšem znamená, že operátor $\hat{K}$ není ohraničený a tedy inverzní problém je zadán nekorektně a tudíž musíme přidat nějakou netriviální informaci (a priori), jenž umožní úlohu vůbec vyřešit, např. známe analytický tvar jednotlivých komponent v měřeném profilu nebo známe některé parametry v těchto funkcích, zda-li je možné vůbec provést konvoluci, apod. Řešení f inverzního problému (dekonvoluce - inverzní úloha konvolučního integrálu) musí splňovat tzv. Hadamardovy podmínky:

2. Uveďte analytický tvar funkce, kterou dostaneme při konvoluci Dopplerova a Lorentzova rozšíření a spočtěte velikost Dopplerova rozšíření pro atom vodídku, který emituje fotony čáry H_β (486,1 nm) a teplotě 10000 K.

Konvoluce Dopplerova a Lorentzova profilu je popsána Voigtovou funkcí $V(x,a)$, která je definována následovně: $V(x,a) = \frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{a^2+(x-t)^2}\mathrm{d}t$, kde x je relativní veličina $x = \frac{\gamma-\gamma_0}{\alpha_D}$, a je parametr $a = \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$, γ je nezávislá měřená veličina vyjádřená ve vhodných jednotkách. γ_0 je poloha čáry, α_D je parametr Dopplerova rozšíření, α_L je parametr Lorentzova rozšírení. Dopplerovo rozšíření vzniká v důsledku tepelného pohybu cástic emitujících světlo. V případě maxwelovského rozdělení rychlostí je emitující záření izotropní a profil čáry symetrický: $I_D(\lambda) = I_D(\lambda_0)\mathrm{e}^{-(\frac{\lambda-\lambda_0}{\alpha_D})^2}$ kde α_D je rozširující parametr vztažený k šířce čáry $\Delta\lambda_D = 2\alpha_D\sqrt{\ln 2} = \frac{2\lambda_0}{c}\sqrt{\frac{2kT_n \ln 2}{M}}$ kde M je atomová hmotnost zárícího atomu, T_n je teplota (zvaná též jako kinetická teplota).

Pro čáru H_β a teplotu T_n 10000 K je šířka čáry $\Delta\lambda_D$ rovna 0,3468 A.

3. Mějme dva profily popsané Gaussovou funkcí charakterizované celkovou šířkou čáry w_1, w_2 (šířka čáry v polovině maximální intenzity čáry). Ukažte, že konvolucí obou profilů dostaneme profil popsaný opět Gaussovou funkcí a že pro výslednou celkovou šířku takového profilu w platí: $w^2 = w_1^2 + w_2^2$.

Použijte následující vztahy:

konvoluce dvou funkcí: $F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F_1((t).F_2(t-x)\mathrm{d}t$

Gaussův profil čáry: $F_1(x) = A_1 e^{-(\frac{x}{a_1})^2}$, $F_2(x) = A_2 e^{-(\frac{x}{a_2})^2}$, kde $w_1 = 2\sqrt{\ln 2}a_1$ a $w_2 = 2\sqrt{\ln 2}a_2$

Dále platí obecně: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{a^2t^2-bt}\mathrm{d}t = \frac{\sqrt{\pi}}{a}e^{\frac{b^2}{4a^2}}$ pro kladné hodnoty a