

Výpočet parametrů plazmatu z profilu spektrálních čar

Profily vodíkových čar

A. Brablec

katedra fyzikální elektroniky

PřF MU v Brně

Kotlářská 2, 61137 Brno

Česká republika

Obsah

- Formulace problému
- Typy rozšíření spektrálních čar
- Odpočet vlivu přístrojové funkce: Voigtova funkce, aproximace pomocí B - spline, MNČ
- Šířka spektrálních čar
- Rozšíření vodíkových čar H_{α} , H_{β}
- Závěr – výpočet n_e z profilu spektrálních čar vodíku

Formulace problému

- vliv přístrojové funkce - Fredholmova integrální rovnice 1. druhu)
- vliv detektoru (Volterrova integrální rovnice 1. druhu)
- oscilace plazmatu, Abelova transformace
- hyperjemá a multipletní struktura komponent
- vliv rozšiřujících faktorů na profil komponent

Inverzní problém: $\hat{K}\varphi = f$

Hadamardovy podmínky:

1. řešení existuje pro libovolnou funkci f
2. v daném prostoru existuje jen jediné řešení
3. závisí na $f \in G_2$ spojitě
4. spočtené řešení je stabilní

Vliv šumu, dodání netriviální informace

Typy rozšíření spektrálních čar

- přístrojové
- vlivem plazmatu
 - Dopplerovo
 - tlakové
 - Starkovo
 - van der Waals
 - rezonanční

Odpočet vlivu přístrojové funkce

$$h(\gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(\gamma - x)dx . \quad (1)$$

Voigtova funkce

$$V(x; a) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(x - t)^2 + a^2} dt, \quad x = \frac{\gamma - \gamma_0}{\alpha_D}, \quad a = \frac{\alpha_L}{\alpha_D} \quad (2)$$

$$I_D(\lambda) = I_D(\lambda_0) \exp -\left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\alpha_D}\right)^2, \quad \Delta\lambda_D = 2\alpha_D \sqrt{\ln 2} = 2\frac{\lambda_0}{c} \sqrt{\frac{2kT_n \ln 2}{M}}. \quad (3)$$

Srážková aproximace - Lorentzův profil tvar s šířkou $2\alpha_L$

$$I_L(\gamma) = \frac{I_L(\gamma_0)}{(\gamma - \gamma_0 - d)^2 + \alpha_L^2}, \quad (4)$$

srážková aproximace - rozšíření elektrony

statická aproximace - těžké ionty

V případě, že nemůžeme určit parametry plazmatu (neznáme model), lze pouze spočítat vlastní profil čáry (spektrum).

Další metody pro řešení inverzní úlohy byly navrženy i jiné metody - FFT, regularizační metody, metoda maximální entropie, a další.

<http://www.provencher.de/contin.html>

Odpočet přístrojové funkce ^a pomocí B - splinů

$$h(\gamma) = \int_a^b \sum_{i=1}^n a_i B_i(x) g(\gamma - x) dx = \sum_{i=1}^n a_i \int_a^b B_i(x) g(\gamma - x) dx. \quad (5)$$

$$S_k = \sum_{j=1}^N \left(h_j - \sum_{i=1}^n a_i \int_a^b B_i(x) g(\gamma_j - x) dx \right)^2 = \min. \quad (6)$$

$$\alpha_{ji} = \int_a^b B_i(x) g(\gamma_j - x) dx. \quad (7)$$

^aA. Brablec, D. Trunec, F. Šťastný, J. Phys. D: Appl. Phys.. **32** (1999)1870 - 1875

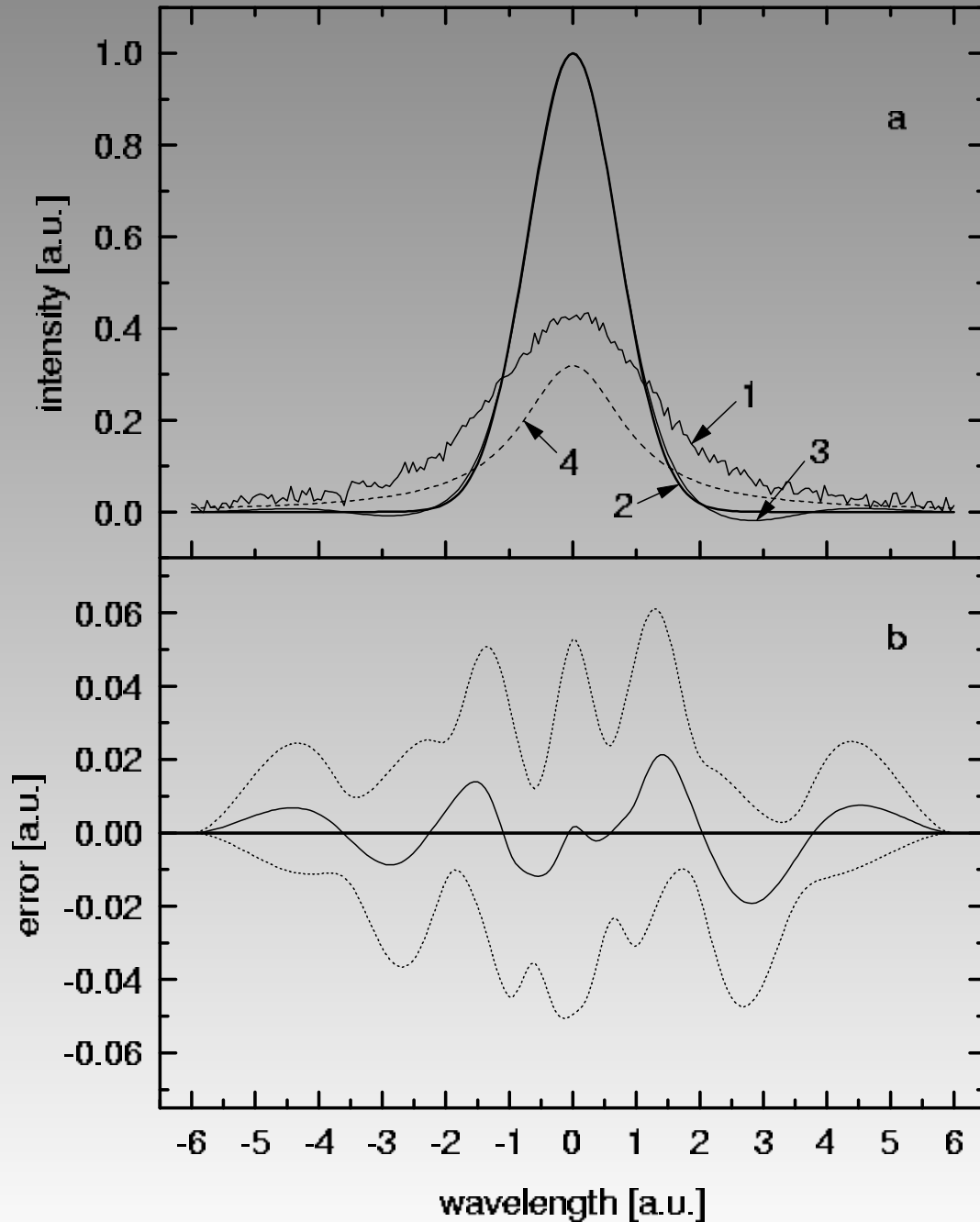
$$\sum_{i=1}^n B_i(x) a_i \pm t_{N-n+4}(\beta) \sqrt{s^2 \mathbf{b}^T \mathbf{C}_{11} \mathbf{b}}, \quad \mathbf{b}^T = (B_1(x), \dots, B_n(x)). \quad (8)$$

$t_{N-n+4}(\beta)$ je β -kvantil Studentova rozdělení s $N - n + 4$ stupni volnosti

Odhad optimální hodnoty n - kritérium “cross validation”

$$C(n) = \frac{\sum_{j=1}^N (h_j - \int_a^b (\sum_{i=1}^n a_i B_i(x)) g(\gamma_j - x) dx)^2}{1 - n/N}, \quad n = 5, 6, \dots \quad (9)$$

a_i byly již určeny dříve

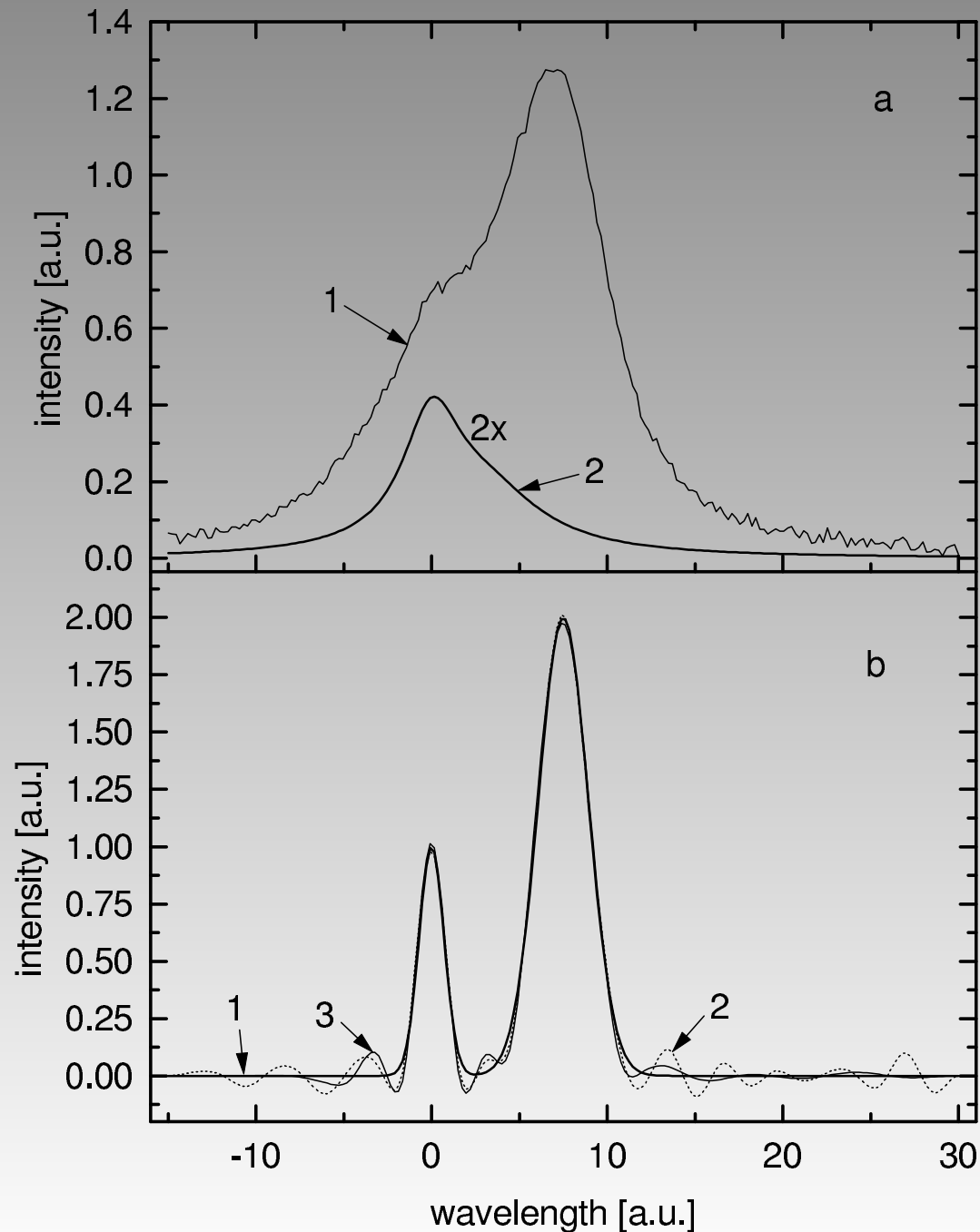


Testovací příklad č.1:

a) 1 - "exp." profil čáry, $\sigma=0.01$, 2 - teoretický Dopplerův profil, 3 - výsledek, 4 - Lorentzův profil jako přístrojová funkce. $n=11$, $N = 201$. b) pás spolehlivosti, $p = 99.7\%$.

Srovnání skutečné optimální hodnoty n_{opt} a hodnoty n_e spočtené podle kritéria pro jeden běh úlohy, p je pravděpodobnostní obsah pásu spolehlivosti pro n_{opt} , teoretický pravděpodobnostní obsah je 68.3 %.

σ	n_e	n_{opt}	p [%]
5×10^{-2}	19	11	71
1×10^{-2}	13	11	38
5×10^{-3}	19	11	49
1×10^{-3}	15	11	8
5×10^{-4}	15	17	97
1×10^{-4}	19	17	51
1×10^{-5}	19	19	20



Testovací příklad č.2:

a) 1 - "experimentální" profil čáry zatížený šumem s normálním rozdělením $\sigma=0.01$, 2 - přístrojová funkce - dělená 2. b) 1 - teoretický profil čáry, 2 - výsledek výpočtu, uzly jsou rozděleny rovnoměrně, 3 - výsledek výpočtu, nerovnoměrné rozdělení uzlů. Dimenze prostoru splinů je $n=32$, počet "experimentálních" bodů je $N = 200$.

Voigtův profil - výpočet

$$z = x + i.y, w(z) = v(z) + i.u(z), w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{z - t} dt \quad (10)$$

$$\frac{\partial v(x, y)}{\partial x} = 2(yu(x, y) - xv(x, y)), \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = 2(xu(x, y) + yv(x, y) - 1/\sqrt{\pi}). \quad (11)$$

$$g(\gamma) = Re \sum_{k=1}^m \frac{\alpha_k + i\beta_k}{\gamma + x_k + iy_k}, \quad (12)$$

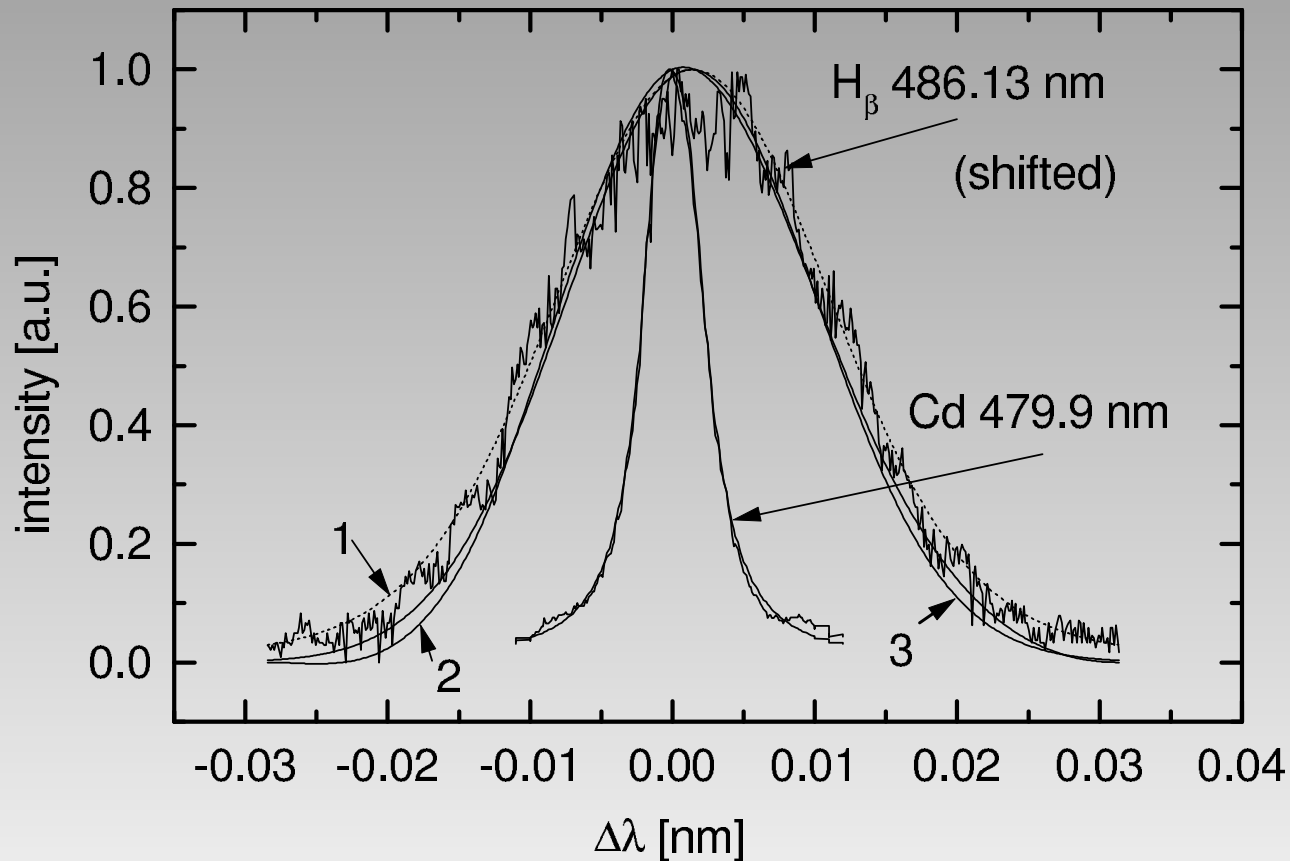
kde γ je nezávisle proměnná, $\alpha_k, \beta_k, x_k, y_k$ jsou reálné koeficienty (které známe nebo je musíme určit jinak, např. MNČ), můžeme přímo získat pro měřený profil

$$h(\gamma) = Re \sum_{k=1}^m (\beta_k - i\alpha_k)w(z'_k), \quad (13)$$

kde k-tý člen je roven

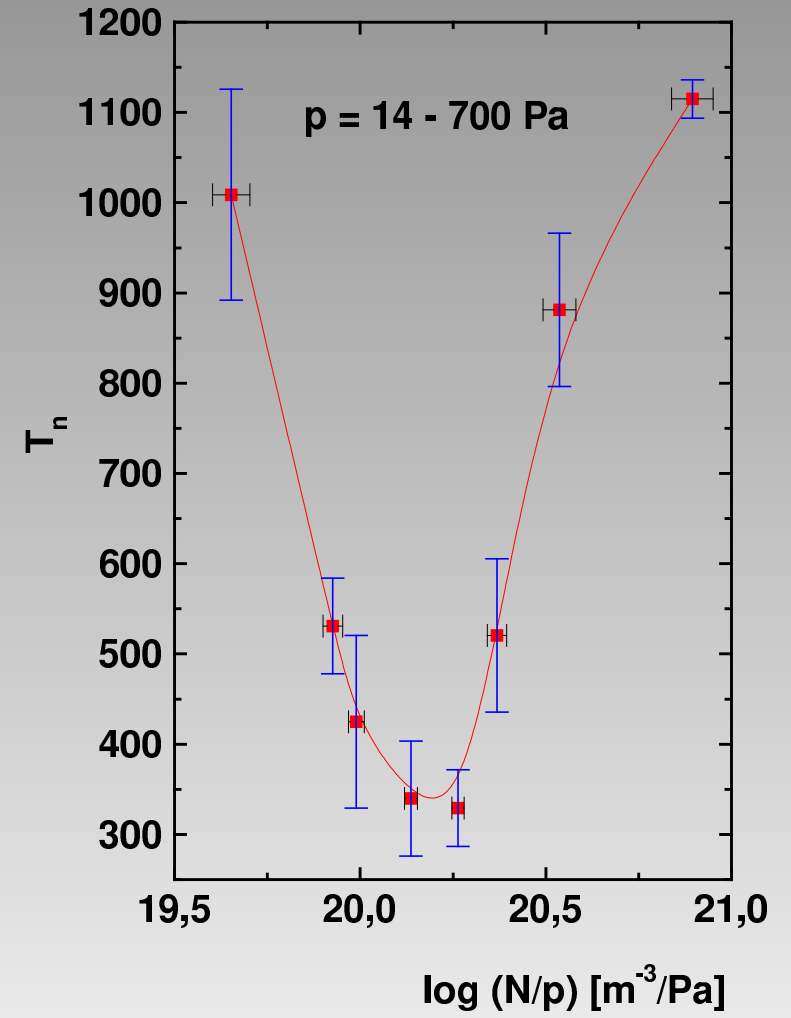
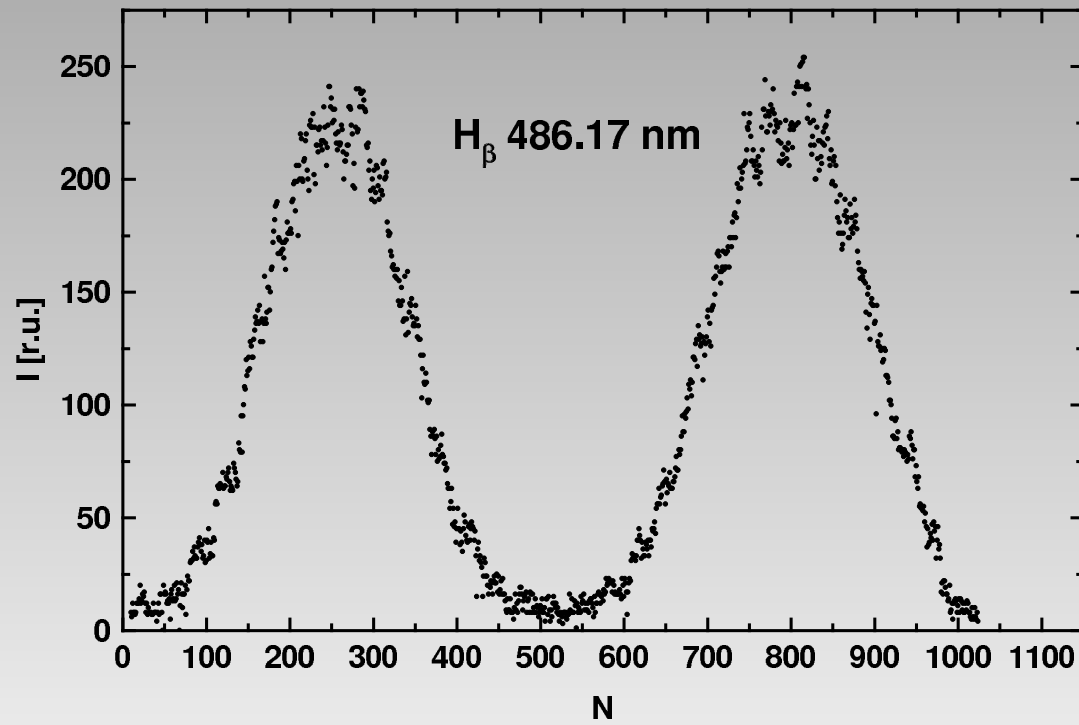
$$z'_k = x'_k + i.y'_k, x'_k = \frac{\gamma - \gamma_0 + x_k}{\alpha_D}, y'_k = \frac{\alpha_L + y_k}{\alpha_D} \sqrt{\ln 2} \quad (14)$$

Srovnání odečtení přístrojové funkce pomocí B-splinů a metody nejmenších čtverců



Experiment - vf výboj v parách vody za sníženého tlaku, FPI RC150 Burleigh:

Vlastní profil čáry H_β - Voigtova funkce: 1 - aproximace měřených dat kubickými B-spliny ($n=7$), 2 - spočtený vlastní profil čáry pomocí B-splinů, 3 - metody nejmenších čtverců, vlastní profil čáry - Voigtova funkce. Přístrojová funkce (Cd 479.9 nm) - 2 členy racionálně lomené funkce.



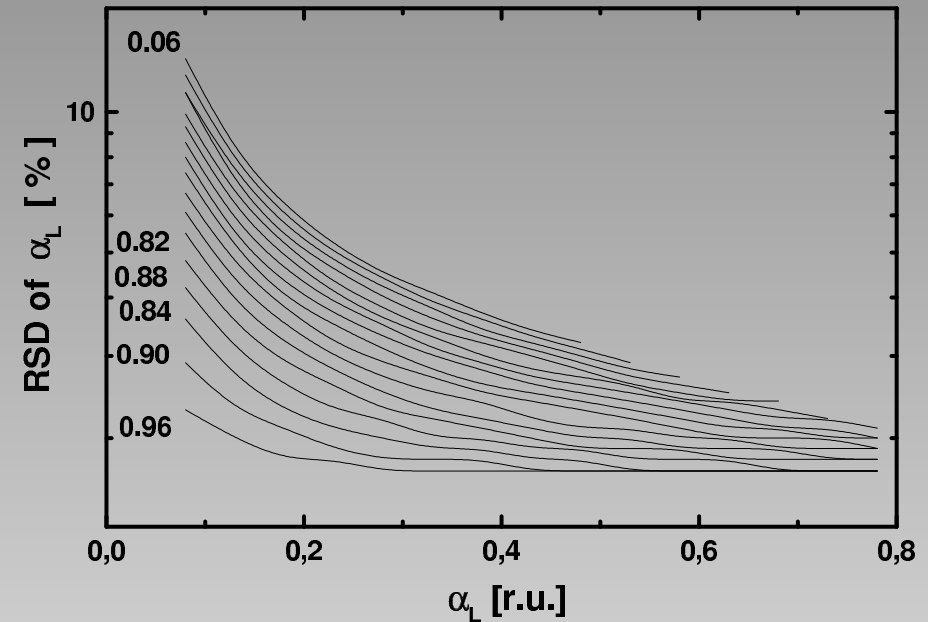
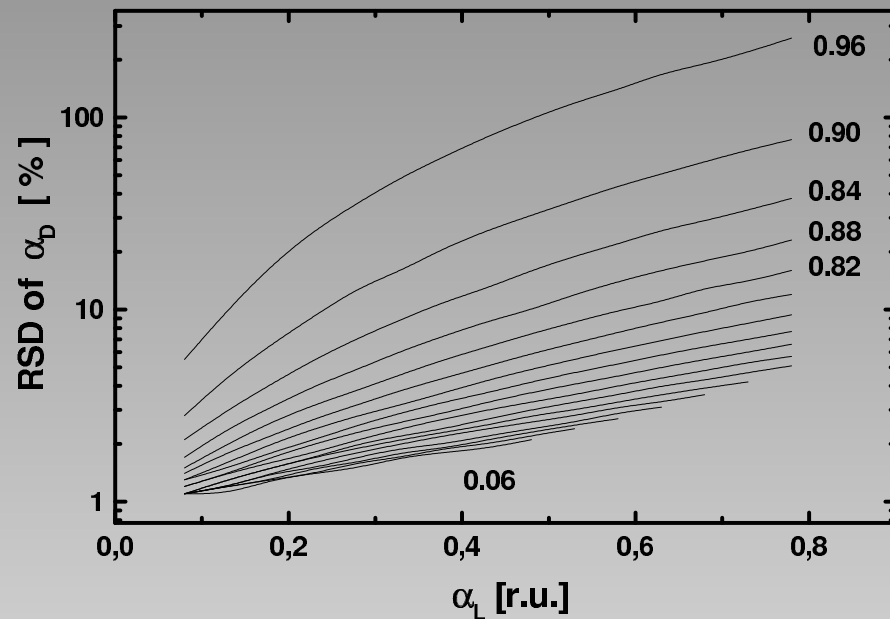
Citlivost α_D, α_L

$$\Delta_j = \sqrt{\frac{S_0}{N-p} D_{jj}}, \quad (15)$$

kde S_0 je součet čtverců odchylek, N je počet použitých dvojic bodů, p je počet určovaných parametrů, D_{jj} je diagonální prvek kovarianční matice, která se vypočte jako inverzní matice k hessianu

$$H_{jl} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial I_p(\lambda_i)}{\partial q_j} \frac{\partial I_p(\lambda_i)}{\partial q_l}, \quad j, l = 1, \dots, L \quad (16)$$

kde $I_p(\lambda_i)$ se spočte jako konvoluce Voigtovy funkce a racionálně lomené funkce (aproximace přístrojové funkce racionálně lomenou funkcí).



Závislost relativní standardní odchyly (RSD) Dopplerova a Lorentzova rozšíření na Lorentzově rozšíření α_L pro konstantní pološířku přístrojové funkce (0.01) pro různé hodnoty Dopplerova rozšíření (od hodnoty 0.06 s krokem 0.05 - z levého dolního rohu obrázku nahoru).

Šířka izolovaných spektrálních čar

$H\beta$ 4861 \AA° , $T = 10^4$ K, $T = 4 \times 10^4$ K, $n_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

$w_s \text{ \AA}^\circ$ 0.42 48 0.42 50

$w_D \text{ \AA}^\circ$ 0.35 0.35 0.70 0.7

OI 7254 \AA° , $T = 10^4$ K, $T = 4 \times 10^4$ K, $n_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

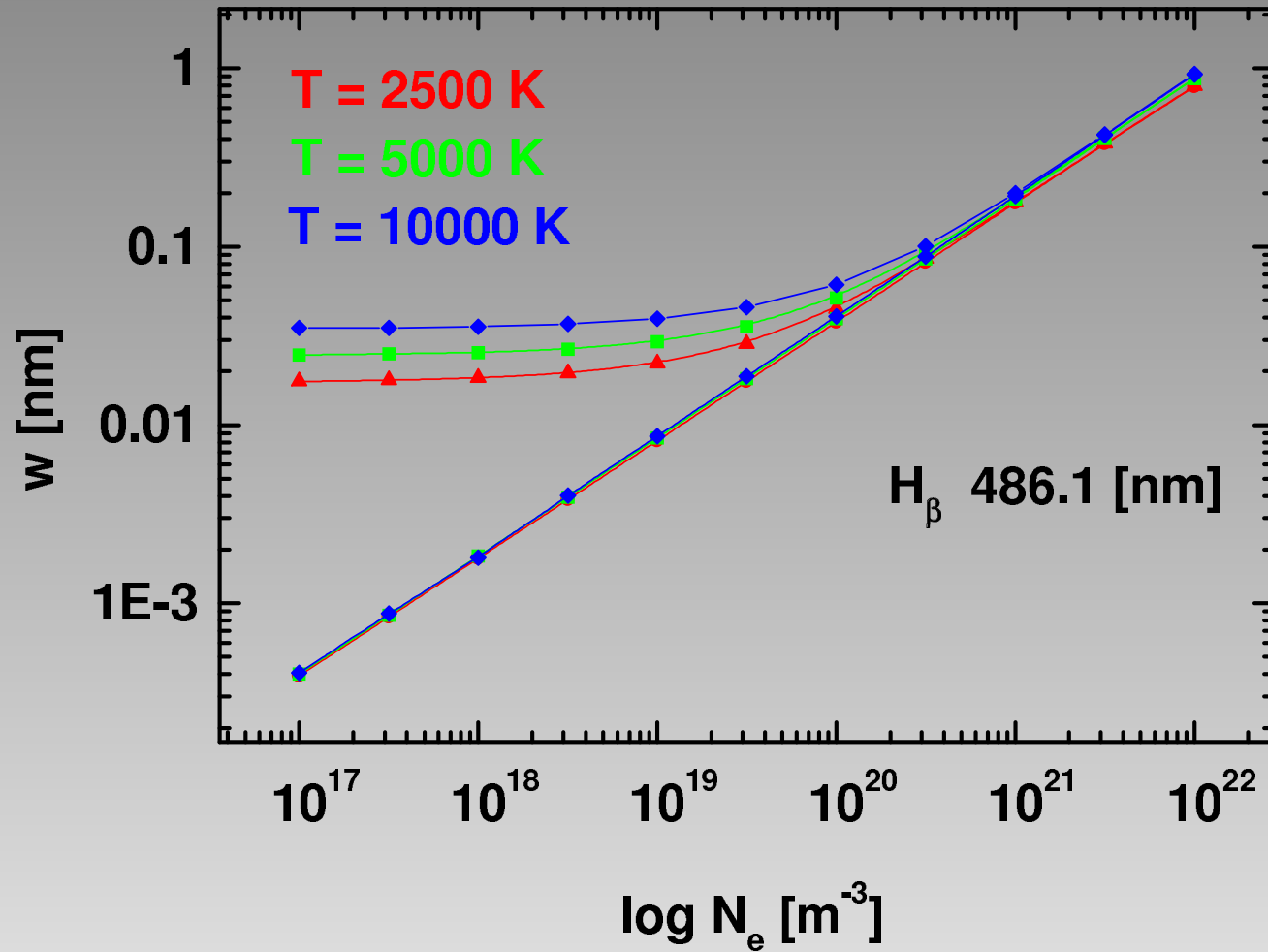
$w_s \text{ \AA}^\circ$ 0.015 16 0.021 23.4

$w_D \text{ \AA}^\circ$ 0.13 0.13 0.26 0.26

ArII 4806 \AA° , $T = 10^4$ K, $T = 4 \times 10^4$ K, $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

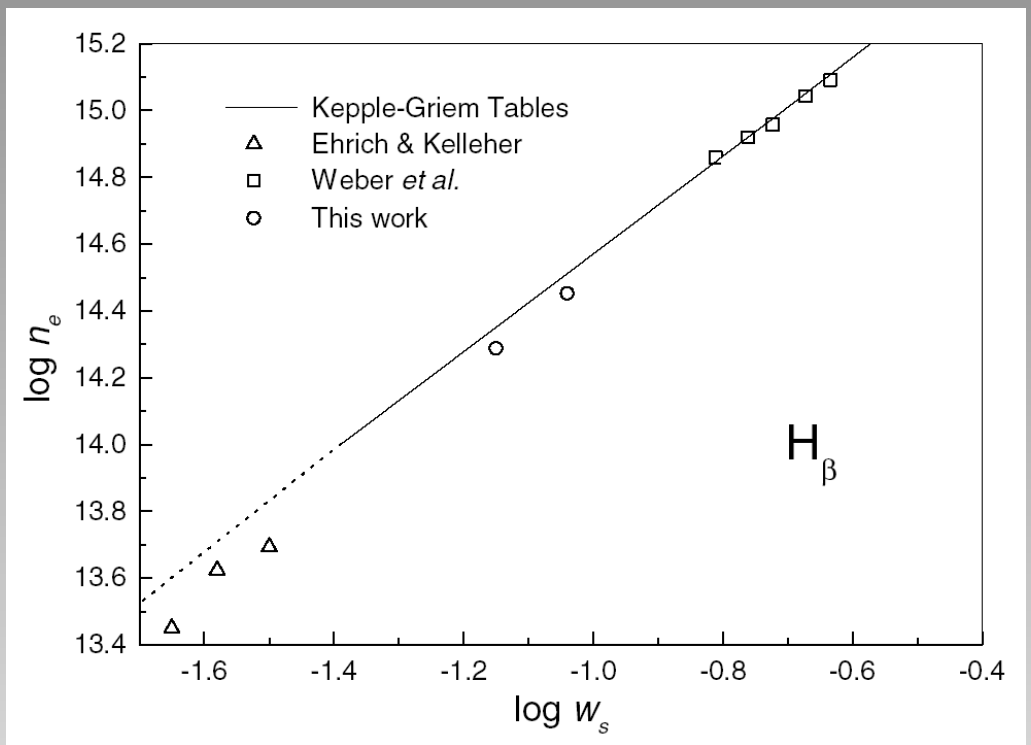
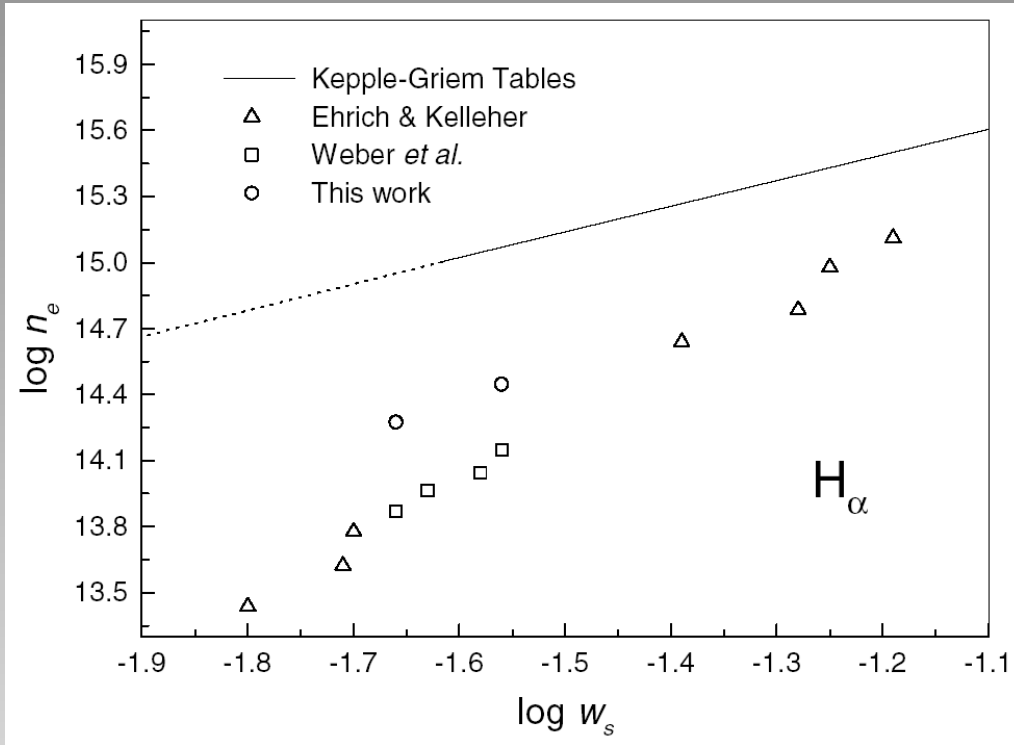
$w_s \text{ \AA}^\circ$ 0.0014 1.4 0.002 2.1

$w_D \text{ \AA}^\circ$ 0.08 0.08 0.15 0.15



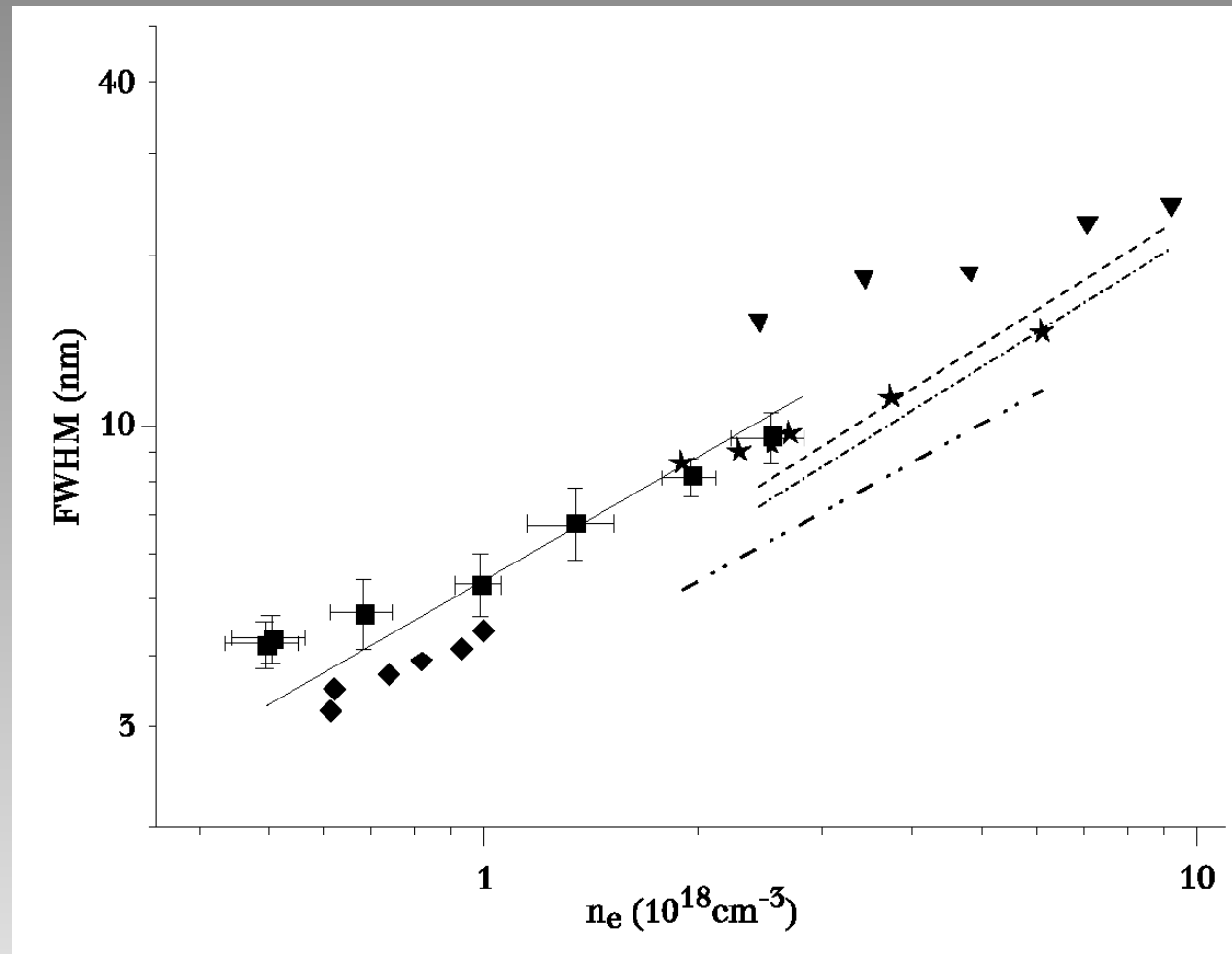
celková šířka H_β : aproximace VCS, převzato ^a

^aC. R. Vidal, J. Cooper, E. W. Smith, *Astrophys. J. Suppl.* **214** (1973) 37



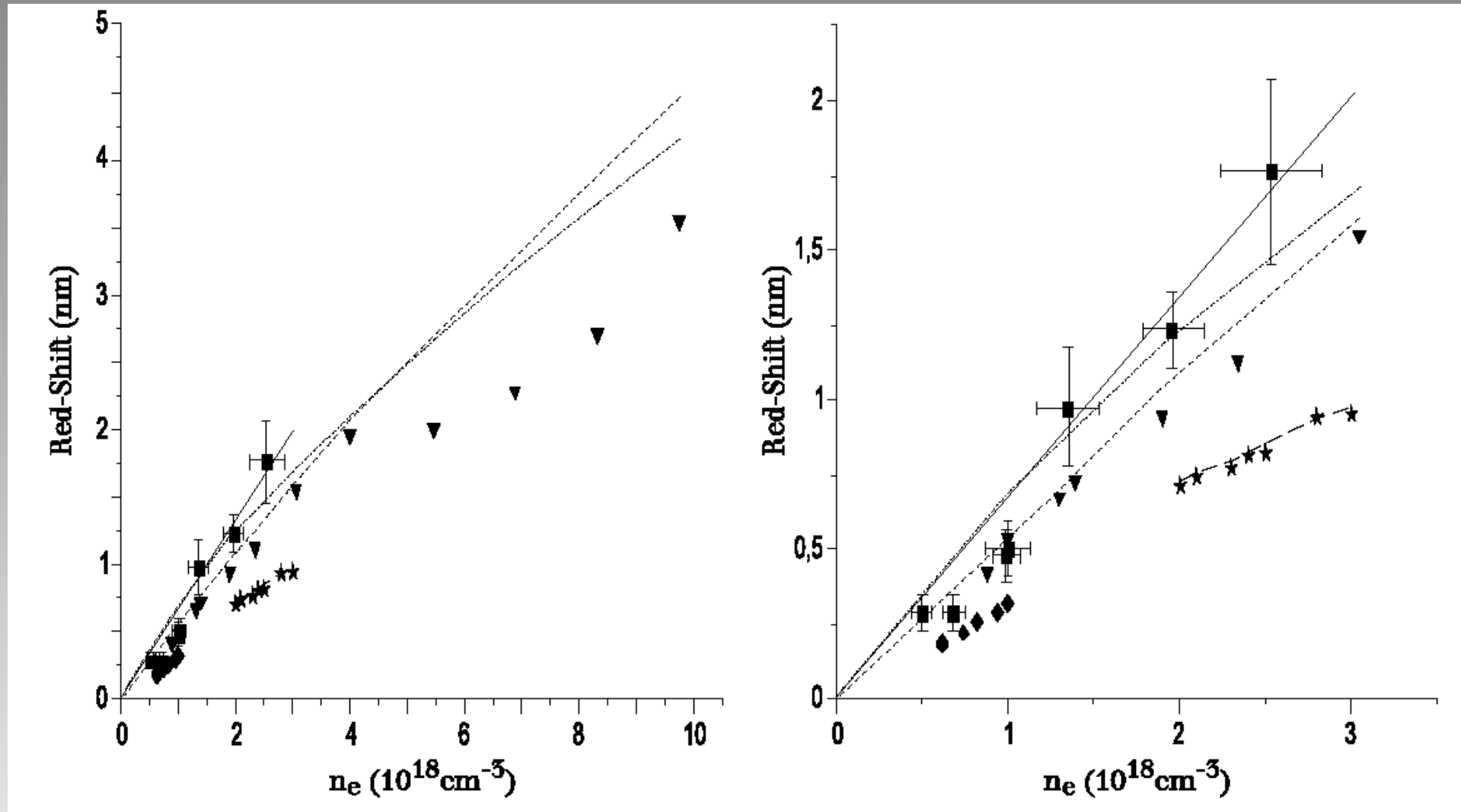
H_α , H_β - započtení dynamiky iontů, převzato ^a

^aJ. M. Luque, M. D. Calzada, M. Saez, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36** (2003) 1573 - 1584



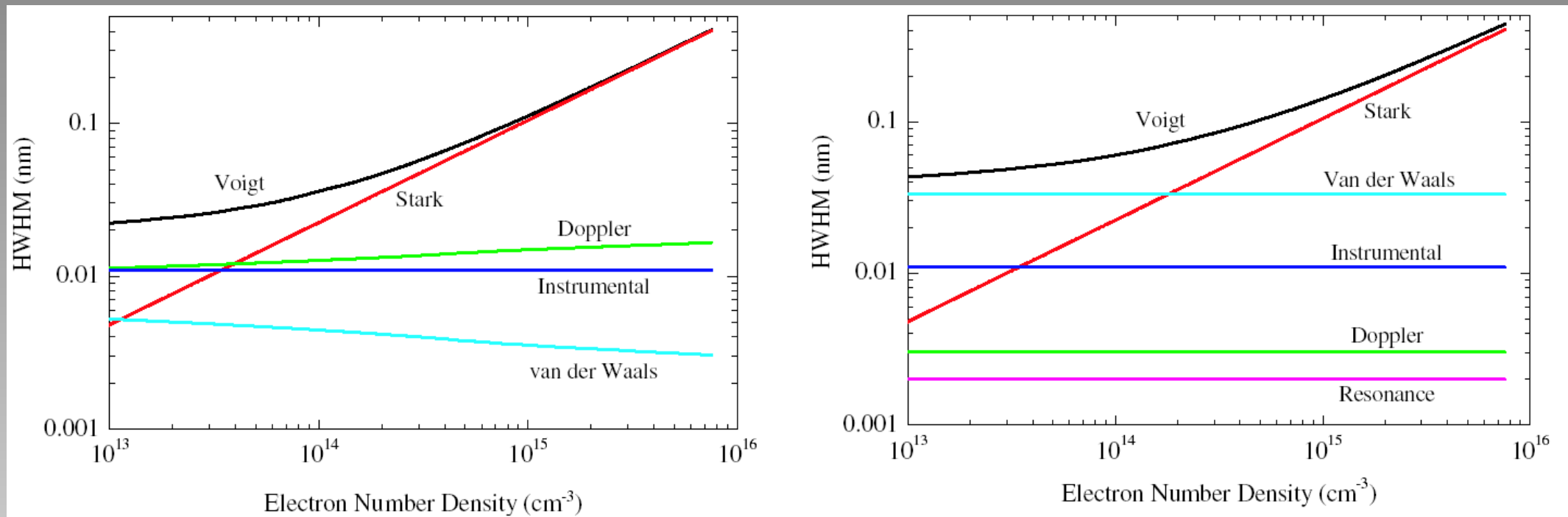
H_α : pro $0.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} < n_e < 2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ a $6 \text{ eV} < kT_e < 10.5 \text{ eV}$, převzato ^a

^aS. Buscher, Th. Wrubel, S. Ferri, H-J. Kunze, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35** (2002) 2889 - 2897



červený posuv H_α : pro $0.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} < n_e < 2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ a $6 \text{ eV} < kT_e < 10.5 \text{ eV}$, převzato ^a

^aS. Buscher, Th. Wrubel, S. Ferri, H-J. Kunze, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35** (2002) 2889 - 2897



H_{β} , přístrojová funkce 0.011 nm: vzduch při atmosférickém tlaku a) LTE (rezonanční rozšíření $< 2 \times 10^{-4}$ nm), b) non - LTE ($T_g = 300$ K), převzato ^a.

HWHM v nm, P tlak v atm, T_g v K, n_e v cm^{-3} , X_H podíl atomů H v mol

$$\Delta\lambda_{Stark} = 1.0 \times 10^{-11} (n_e)^{0.668}, \quad \Delta\lambda_{rez} = 30.2 \times X_H (P/T_g), \quad \Delta\lambda_{Waals} = 1.8 \times P/T_g^{0.7},$$

$$\Delta\lambda_{Natural} = 3.1 \times 10^{-5}, \quad \Delta\lambda_{Doppler} = 1.74 \times 10^{-4} T_g^{0.5}.$$

^aC. O. Laux, T. G. Spence, Plasma Sources Sci. Technol. **12** (2003) 125 - 138

Závěr

1. C. R. Vidal, J. Cooper, E. W. Smith, *Astrophys. J. Suppl.* **214** (1973) 37.
2. H. R. Griem, *Spectral Line Broadening by Plasmas*, Academic Press, New York (1974).
3. H. R. Griem, *Principles of Plasma Spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge (1997).
4. C. Stehle, *Astronom. Astrophys. Suppl. Ser.* **104** (1994) 509 - 527.
5. M. A. Girgos, V. Cardenoso, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** (1996) 4795 - 4838.
6. M. Lemke, *Astronom. Astrophys. Suppl. Ser.* **122** (1997) 285 - 292.
7. C. Stehle, R. Hutcheon, *Astronom. Astrophys. Suppl. Ser.* **140** (1999) 93 - 97.