

高分辨 X 光光谱的数据处理

张令清 韩申生 蒋春宏 徐至展 张正泉 孙 岚

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

摘 要 给出一种高分辨光谱数据处理的普适方法, 它利用傅里叶反卷积、滤波等技术对谱仪记录的光谱进行还原, 去除实验安排中的源加宽等因素对谱分辨率的影响; 然后再进行非线性最小二乘法拟合, 突破谱仪的光谱分辨率极限, 求得光谱的精细结构. 给出了数据处理软件的基本结构框图, 及应用于镁的类 H、类 He X 光光谱求解证明了其有效性和实用性.

关键词 傅里叶反卷积, 非线性最小二乘法拟合.

1 引 言

光谱数据的高精度测量对物理、化学等各个学科领域都是十分重要的. 由于谱仪本身(如色散元件、前置光学系统等因素)的影响, 使得谱仪记录到的光谱并非辐射源发射的真实谱, 而是呈现出一种复杂性(如畸变、噪声、加宽等). 不求出其真实谱, 有时就很难对所研究的对象进行准确诊断. 本文将谱仪与傅里叶反卷积技术结合起来, 以求获得辐射源发射的真实光谱. 鉴于谱仪分辨率的限制, 其真实谱中有些线谱仍有可能迭加在一起(如激光等离子体发射的共振线及其长波伴线群). 本文利用非线性最小二乘法去拟合光谱, 进行光谱精细结构的求解. 该方法能够对各类谱仪记录的光谱进行数据处理. 为方便起见, 选择激光等离子体发射的 X 光光谱进行论述. 作为应用的一个例子, 就针孔晶体谱仪记录的光谱给出解谱结果, 并给出由此求得的 Mg 激光等离子体的电子温度, 以说明该数据处理方法的可靠性.

2 基本原理

傅里叶反卷积技术在光谱测量中的应用已有很长历史了. 其基本原理是^[1]: 谱仪记录的任一谱线均可表示为一线型函数 $G(z)$ 与真实光谱的卷积

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\Delta\lambda) f(\lambda - \Delta\lambda) d\Delta\lambda \quad (1)$$

其中, $F(\lambda)$ 为谱仪记录的光谱, $f(\lambda)$ 为激光等离子体发射的真实谱, $G(z)$ 代表单位强度的谱通过谱仪后所引起的畸变. 对(1)式两边分别进行反傅里叶变换, 有

$$I(X) = D(X) \times i(X) \quad (2)$$

其中: $I(X) = F^{-1}[F(\lambda)]$; $i(X) = F^{-1}[f(\lambda)]$; $D(X) = F^{-1}[G(\lambda)]$ 在 $G(\Delta\lambda)$ 已知的情况下, 则

$$f(\lambda) = F[i(X)] = F[I(X)/D(X)] \quad (3)$$

在实际情况下, $F(\lambda)$ 总是已知的, 只要知道 $G(z)$, 则辐射源发射的真实谱就可获得. 事实上, $G(z)$ 有时可由谱仪的几何参数精确求得, 这时, 解谱后的谱分辨率可达谱仪色散元件的分辨率极限; 在一些不能精确求得线型函数的场合, $G(z)$ 可由经验估计给出.

在实际的数据处理过程中, 所用的数据点的个数总是有限的. 设有 N 个数据 f_i , 则实际上相当于将数据函数 F 乘以一矩形窗函数 $W(i)$, 即

$$f_i = F_i W(i); \quad W(i) = 1, \quad i = 0, 1, \dots, N-1$$

因此, 对 f_i 进行快速傅里叶变换 (FFT) 的结果实际上是数据函数 F 和窗函数 W 的卷积. 窗函数对信号处理的影响除了和其宽度有关外, 还和自身的形状有关. 为了改进谱的质量, 现已提出了种种不同的窗函数^[1], 所以, 在实际的数据处理过程中, (3) 式应改为

$$f(\lambda) = F[W(X) \cdot I(X)/D(X)] \quad (4)$$

在进行了上述数据处理之后, 理论上讲可以获得辐射源发射的真实谱. 为进一步改善谱的分辨率, 采用非线性最小二乘算法来拟合部分重迭的光谱, 得到谱的高分辨结构. 其基本思想是: 在设定光谱线型和背景线型之后, 按最小二乘意义对要求解的光谱进行曲线拟合. 其中的非线性参数由高斯-牛顿法或者麦夸脱法拟合求得^[2]. 在选择了谱线线型函数和背景函数之后, 就可以构造一函数去拟合待求光谱:

$$f(\lambda) = f_b(\lambda) + \sum_{i=1}^m f_r(\lambda_{i0}) \quad (5)$$

式中 f_r 为光谱中谱线的线型函数, λ_{i0} 为各谱线的中心位置, f_b 为光谱背景函数. 在构造了合适的非线性函数 $f(\lambda)$ 之后, 就可以方便地对部分迭加的光谱中的任意一段、任意条谱线进行拟合求解, 获得光谱的精细结构以及背景参量.

下面给出数据处理的基本结构框图和模型谱分别如图 1、图 2 和图 3 所示

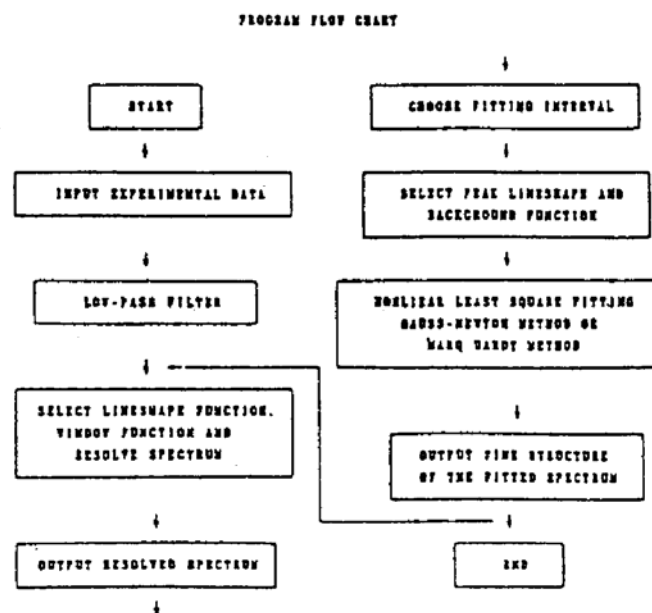


Fig. 1 Schematic diagram of numerical method

3 针孔晶体谱仪的数据处理

作为上述方法的应用, 对在 LF12[#] 高功率激光系统上由针孔晶体谱仪(PCS)^[7]记录的 Mg 激光等离子体发射的类 H、类 He 光谱进行了数据处理. 由于针孔点源的尺度是固定的, 因此 $G(z)$ 可由谱仪的几何参数精确求出. 如图 3 所示, 单色光 $I(\lambda) = \delta(\lambda - \lambda_0)$ 由线源入射到

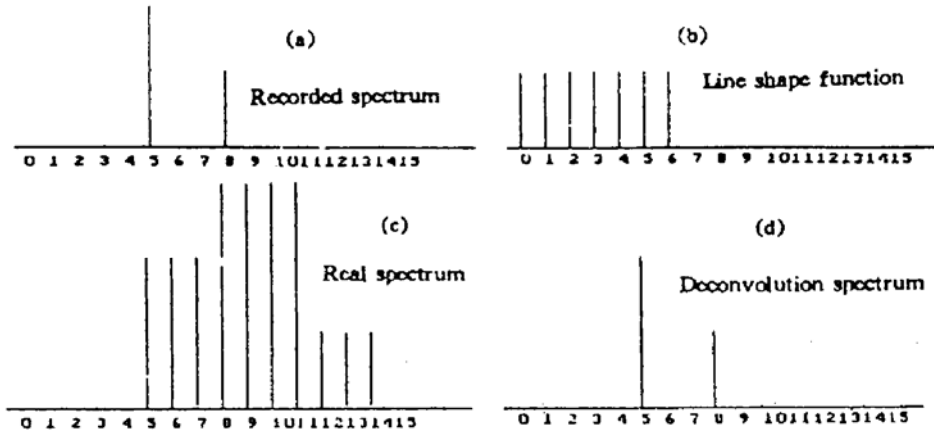


Fig. 2 Model spectra of resolving real spectra

(a) real spectrum; (b) lineshape function; (c) recorded spectrum; (d) deconvolution spectrum

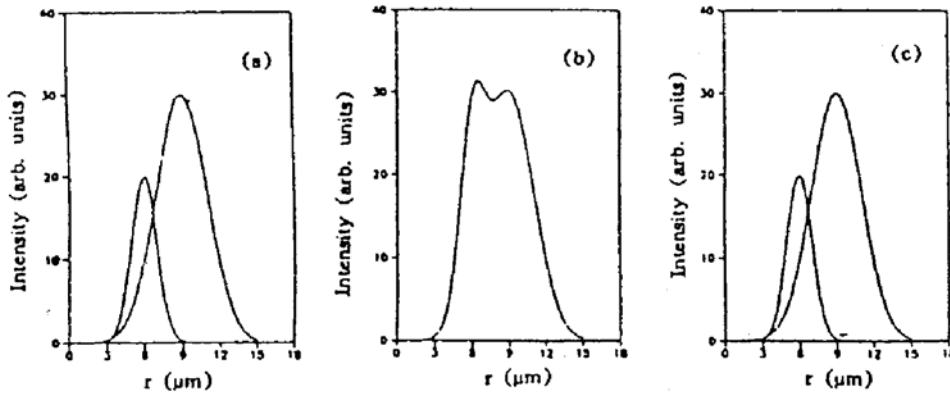


Fig. 3 Model spectra of fitting fine structure of spectra

(a) real spectra; (b) recorded spectra; (c) nonlinear least square fitting spectra

针孔晶体谱仪后表现为一宽度为 2Δ 的矩形谱, 即:

$$G(\lambda) = \begin{cases} 1 & |\lambda - \lambda_0| < \Delta \\ 0 & |\lambda - \lambda_0| > \Delta \end{cases} \quad (6)$$

$$\Delta = (dD/f) [\sqrt{1 + (\lambda/2d)^2 \sin^2 \alpha} + (\lambda/2d) \cos \alpha] [1 - (\lambda/2d)^2]$$

$$f = P_1 P_2 \{ \text{ctg} [\alpha + \sin^{-1}(\lambda_1/2d)] - \text{ctg} [\alpha + \sin^{-1}(\lambda_2/2d)] \}^{-1}$$

式中 f 为平晶谱仪的色散关系. $P_1 P_2$ 是波长 λ_2 和 λ_1 的相对位置, α 是晶面和底片的夹角, $2d$ 是晶格常数. 针孔晶体谱仪中, 针孔的法向与晶面平行. 由此可推得针孔直径在入射角为 $\theta_b = \text{arc sin}(\lambda/2d)$ 时在底片上的投影. D 为针孔直径.

窗函数选为哈明窗^[1]. 将以上函数式代入(1)、(2)、(3)式, 对谱仪记录的 Mg 激光等离子体发射的光谱进行了解谱数据处理, 结果如图 5 所示.

由于谱仪分辨率的限制, 从图 5 中可见, Mg 的类 H、类 He 的共振线和其长波伴线部分迭加在一起. 这可能会给 Mg 的激光等离子体的参数 (如电子温度、电子密度等) 诊断带来较

大的误差^[6]. 因此, 有必要进行光谱高精细结构数据处理.

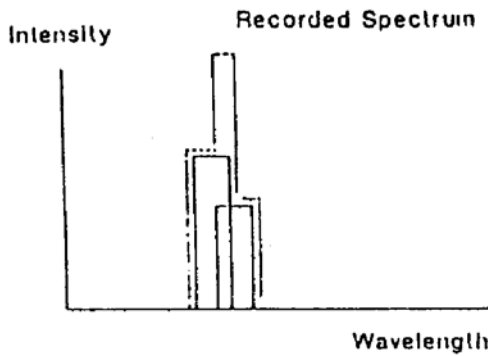


Fig. 4 Source broadening of pinhole in PCS

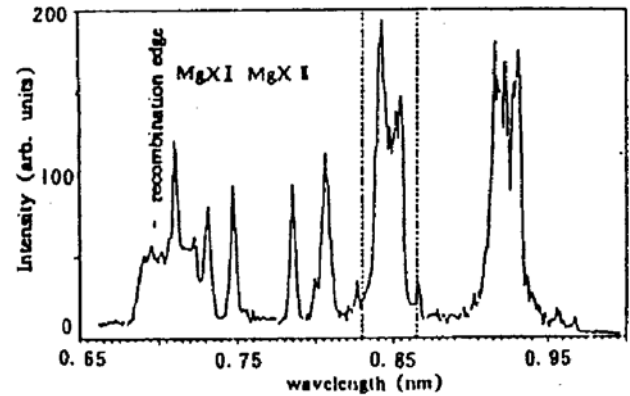


Fig. 5 X-ray spectrum of Mg laser plasma

激光等离子体产生的 X 光光谱包括连续辐射和线辐射, 连续辐射谱中的韧致辐射和复合辐射成分都有相同的随频率而指数变化的规律. 在较小的频率间隔以内, 这种变化不大, 本文采用低幂次多项式拟合. X 光光谱中的线辐射的线型, 根据理论和实验的分析结果, 在允许的误差范围内, 可以用高斯函数^[3,4]

$$y = P \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_i)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (7)$$

拟合, 背景选用多项式, 则拟合函数(5)式变为:

$$f(\lambda) = \sum_{i=1}^m B_i \lambda^{i-1} + \sum_{j=1}^n P_j \exp\left[-\frac{(\lambda_j - \lambda_{j_0})^2}{2\sigma_j^2}\right] \quad (8)$$

其中, m 为多项式幂次, B_i 为多项式系数, P_j 为第 j 个高斯线型的峰高, λ_{j_0} 为第 j 个高斯峰的中心位置, σ_j 为第 j 个高斯峰的半高半宽度.

在实际拟合中, B_i 、 P_j 、 λ_{j_0} 、 σ_j 选作待拟合的初始非线性参数. 连续谱线型选择低幂次多项式(线性或二次多项式), λ_{j_0} 由可分辨的线谱结合可辨认的波长粗略给出, P_j 、 σ_j 由对应的谱线估计给出, 换言之, 除拟合背景的多项式系数外, 所选取的每个非线性参数都具有明确的物理意义. 在拟合过程中, 对一定范围的初始参数选取, 只要收敛, 拟合总能给出相同的结果, 且具有适合的物理意义.

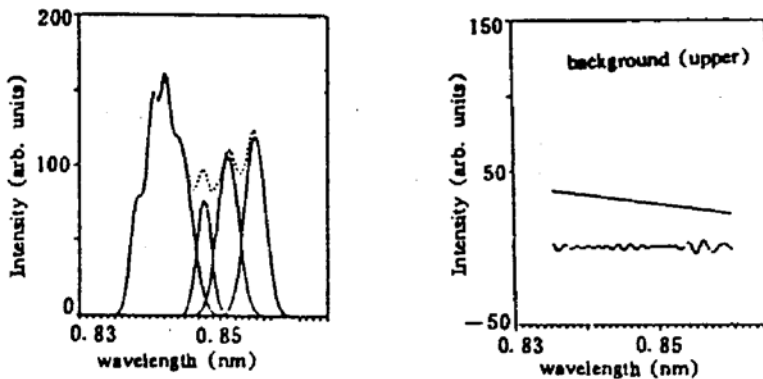


Fig. 6 Nonlinear least square fitting peaks of Mg spectra in Fig. 4;

(b) The background and error in fitting Fig. 5(a)

另外, 为拟合光谱图中的复合边^[5], 还选用 e 指数函数作背景. 这样拟合出的非线性参

数中就直接给出了激光等离子体的电子温度.

对图 5 中的两段光谱进行了精细结构数据处理: 其一为 Mg 的类 H 共振线及其伴线群 (图 5 中虚线之间的一段光谱, 背景选为多项式), 其二为复合边 (背景选为 e 指数), 结果如图 6,7 所示.

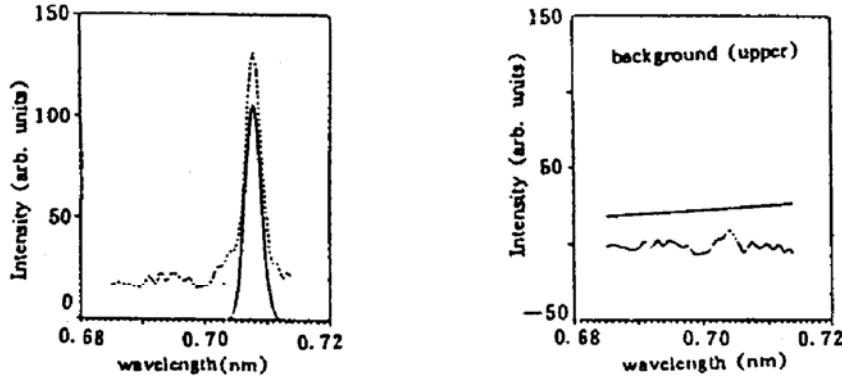


Fig. 7 (a) The free-bind recombination of Mg laser plasma and the fitting peak of 3p-1s ; (b) The fitting background and error of recombination of Mg XI

图 6(a)为待拟合的光谱轮廓(虚线)和拟合解出的各个谱线峰, 图 6(b)为拟合得到的背景和拟合误差. 从图中显见, 数据处理可以方便地将光谱峰与背景分开, 这一点是很有意义的.

图 7(a)为待拟合的光谱轮廓(虚线)和拟合得到的谱峰, 图 7(b)为背景和拟合误差, 背景曲线的斜率就给出镁激光等离子体的电子温度.

图 8 给出了利用图 6 和图 7 的拟合结果, 用两种方法求得的 Mg 激光等离子体的电子温度, 其一为利用 Mg¹¹⁺ 离子的伴线和共振线的强度比; 其二为利用 Mg¹⁰⁺ 离子的复合吸收边的斜率, 两种方法得到了相近的结果 (离靶面远处两种结果有偏差, 原因是类 H Mg 离子的伴线强度在远离靶面处时很快降为零, 造成第一种方法求得的电子温度离靶面越远产生的误差越大), 并和 Boiko 得到的结果可比^[6].

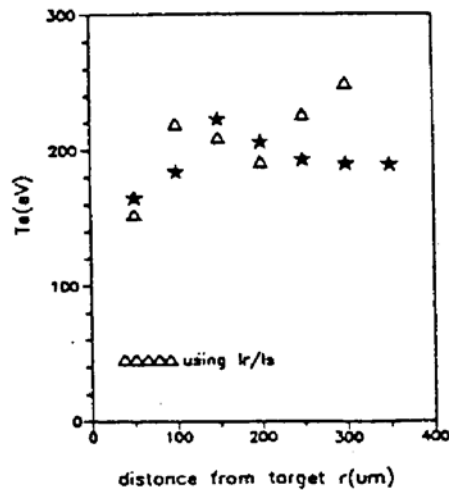


Fig. 8 Electron temperature profile obtained by lr/lb of Mg X and the recombination edge of Mg XI

结 论 基于傅里叶反卷积技术和低通滤波技术, 给出的数据处理方法可以对谱仪记录的光谱进行还原, 以消除由谱仪的光学系统引起的加宽和畸变等影响光谱质量的不利因素. 理论上讲, 经这样处理的光谱可以达到谱仪分辨率的极限. 此间产生的误差在于对各个影响光谱质量的因素考虑的是否周全和精密. 本文较好地处理了这一问题. 用适当的线型函数拟合光谱的谱线和背景, 该数据处理方法能够求解光谱的精细结构. 这等效于提高了谱仪的光谱分辨率. 而精确地构造适合各类光谱谱峰的线型则是提高拟合光谱精度的关键.

该数据处理方法正广泛应用于对各类靶物质产生的激光等离子体诊断参数 (电子温度、电子密度等) 的求解.

参 考 文 献

- [1] 宗孔德, 胡广书, 数字信号处理, 北京, 清华大学出版社, 1988, 37~116, 200~208
- [2] D. W. Marquardt, An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *J. Soc. Ins. Appl. Math.*, 1963, 11(2): 431~441
- [3] P. J. Statham, A comparative study of techniques for quantitative analysis of the x-ray spectra obtained with a Si (Li) detector. *X-Ray Spectrometry*, 1976, 5: 16~28
- [4] P. Van Espen, H. Nullens, F. Adams, A Computer analysis of X-Ray fluorescence spectra. *Nuclear Instruments and Methods*, 1977, 142: 243~250
- [5] C. De Michells, M. Mattiolo, Soft X-ray spectroscopic diagnostics of laboratory plasmas. *Nuclear Fusion*, 1981, 21(6): 704~708
- [6] V. A. Boiko, S. A. Pikuz, A. Ya Faenov, The determination of laser plasma electron density by k spectra of multicharged ions. *J. Phys. (B) Atom. Molec. Phys.*, 1979, 12(11): 1889~1910
- [7] S. S. Han, Lan Sun, Zhizhan Xu *et al.*, A pinhole crystal spectrometer (PCS) and applications in X-ray laser experimental research. *Inst. Phys. Conf. Ser.*, 1992, 125: Section 7, 383~386

A Numerical Method for Obtaining High-Resolved X-Ray Spectra

Zhang Lingqing Han Shensheng Jiang Chunhong Xu Zhizhan
Zhang Zhengquan Sun Lan

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800)

(Received 16 July 1993; revised 30 August 1993)

Abstract A numerical method based on the techniques of inverse Fourier convolution and nonlinear least square algorithm, etc. is presented for obtaining high-resolved spectra of radiation sources. This method can eliminate broadenings induced by radiation sources and spectrographs, and can improve the spectral resolution of spectrographs. As an example, the method is successfully applied to the analysis of laser plasma spectra of Mg ions recorded by pinhole crystal spectrograph.

Key words inverse Fourier convolution, nonlinear least square algorithm