PONTIFICIA
ACADEMIA
SCIENTIARVM

ACTA
Vol. XVI - N. 8
pag. 69-76

LINEARE INTERPOLATION IM PRISMATISCHEN SPEKTRUM MIT NACHFOLGENDER KORREKTUR (*)

J. JUNKES S. I.
Accademico Pontificio Soprannumerario

SVMMARIVM — Proponitur simplex modus reducendi mensuras ad longitudines undarum in spectris prismaticis determinandas. Qui duplice absolvitur gradu: primo computantur ope linearis interpolationis valores ad interim, quibus postea quaedam adiciuntur emendationes exiguae ex apposito diagrammate pro quavis undae longitudine desumendae. Emendationes istae semper sunt negativae et in intervallis non nimis amplis (10 — 20 Å) valorem absolutum 0.1 Å non excedunt. Proponitur formula simplex qua hae emendationes facile computantur. Methodus haec maxime accurata est et aptissima videtur in absolvenda magna mensurarum copia.

Im prismatischen Spektrum besteht keine einfache Relation zwischen den Messungen s und den zugehörigen Wellenlängen λ wie im Gitterspektrum. Für genauere Wellenlängenbestimmungen sind daher graphische oder rechnerische Interpolationshilfen nötig, von denen die Interpolationsformeln von HARTMANN [1, 2] die bekanntesten sind. Im Verlauf der Arbeiten an den Spektralatlanten im Astrophysikalischen Laboratorium der Vatikanischen Sternwarte wurde vor Jahren ein einfaches Interpolationsverfahren hoher innerer Genauigkeit entwickelt [3], das sich besonders zum Anschluss einzelner Linien bewährt hat. Sind aber in einem Intervall zahlreiche neue Linien zu bestimmen, dann erweist sich auch dieses Verfahren verhältnismässig umständlich, sodass es weiter ausgebaut und für Maschinenrechnen hergerichtet wurde.

Das verbesserte Verfahren, das im folgenden kurz beschrieben und charakterisiert werden soll, besteht im wesentlichen darin, dass zuerst für alle Linien durch einfache lineare Interpolation provisorische Wellenlängen bestimmt werden, die durch kleine einem Diagramm entnommene Korrekturen verbessert werden.

(*) Nota presentata nella Riunione del 24 aprile 1955.

Theoretische Erwägungen

Der Anschluss einer unbekannten Wellenlänge λ mit der Messung s lässt sich als Integrationsprozess auffassen nach dem Schema

$$\lambda = \lambda_n + \int_{s_n}^{s} \left(\frac{d\lambda}{ds}\right) ds \quad . \tag{1}$$

$\left(\frac{d\lambda}{ds}\right)$ ist die reziproke Dispersion δ, die als Funktion von λ einen sehr gleichmässigen Verlauf zeigt und in mässig grossen Intervallen als linear betrachtet werden kann, wie in der früheren Arbeit [3] ausführlich dargelegt wurde. Dort wurde auch gezeigt, wie sie mit Hilfe einer Reihe von Standardlinien graphisch ermittelt werden kann.

Liegt nun λ zwischen den bekannten Linien λ_n und λ_{n+1} und beträgt die mittlere reziproke Dispersion in diesem Intervall

$$\bar{\delta} = \frac{\lambda_{n+1} - \lambda_n}{s_{n+1} - s_n} = \frac{\Delta\lambda}{\Delta s} \quad , \tag{2}$$

dann lässt sich δ darstellen als

$$\delta = \bar{\delta} + \varepsilon \quad , \tag{3}$$

wobei ε eine kleine Korrektur bedeutet. Damit wird (1) zu

$$\lambda = \lambda_n + \bar{\delta}(s - s_n) + \int_{s_n}^{s} \varepsilon\, ds \quad . \tag{4}$$

Die Summe der beiden ersten Glieder, also

$$\lambda' = \lambda_n + \bar{\delta}(s - s_n) \quad , \tag{5}$$

ist eine erste Näherung für das gesuchte λ, die durch eine lineare Interpolation erhalten wird; der Rest

$$\int_{s_n}^{s} \varepsilon\, ds = \eta \tag{6}$$

bedeutet die Korrektur, um die der provisorische Wert λ' zu verbessern ist.

In mässig grossen Intervallen ist δ, und damit auch ε praktisch eine lineare Funktion von λ, sodass sich ansetzen lässt:

$$\varepsilon = \alpha + \beta\lambda^* \quad . \tag{7}$$

Dabei soll λ^* für $\lambda - \lambda_n$ stehen und in dem betrachteten Intervall $(\lambda_n - \lambda_{n+1})$ von o bis zum Intervallende $\Delta\lambda = \lambda_{n+1} - \lambda_n$ laufen. Unter Beachtung, dass $ds/d\lambda = 1/\delta$ ist, geht (6) über in

(8) $$\eta(\lambda^*) = \int_0^{\lambda^*} \frac{\alpha + \beta\lambda^*}{\delta}\, d\lambda \,.$$

Für eine erste Näherung lässt sich δ als Konstante betrachten und durch den Mittelwert $\bar{\delta}$ ersetzen, sodass sich (8) einfach integriert zu

(9) $$\eta_1(\lambda^*) = \frac{1}{\bar{\delta}}\left(\alpha\lambda^* + \frac{\beta}{2}\lambda^{*2}\right).$$

β ist die Steigung der Funktion $\delta = f(\lambda)$, also

(10) $$\beta = \frac{d\delta}{d\lambda} = \frac{\delta_1 - \delta_0}{\Delta\lambda}\,,$$

wenn δ_0 und δ_1 beziehentlich die reziproken Dispersionen an den Intervallgrenzen $\lambda^*_0 = 0$ und $\lambda^*_1 = \Delta\lambda$ bedeuten.

α ist zwar durch (7) schon festgelegt, da für λ^*_0

$$\delta_0 = \bar{\delta} + \alpha$$

werden muss, sodass also

(11) $$\alpha = -(\bar{\delta} - \delta_0)$$

ist. Für die Näherung (9) aber ist es zweckmässig α so anzusetzen, dass die Korrektur η_1 an den Intervallgrenzen verschwindet. Damit wird

(12) $$\alpha_1 = -\frac{\beta}{2}\Delta\lambda\,,$$

sodass also

(13) $$\eta_1(\lambda^*) = -\frac{\beta\lambda^*}{2\bar{\delta}}(\Delta\lambda - \lambda^*)\,.$$

Die Korrektur η_1 ist negativ und erreicht in der Intervallmitte den Extremwert

(14) $$\eta_1\left(\frac{\Delta\lambda}{2}\right) = -\frac{\beta\Delta\lambda^2}{8\bar{\delta}}\,.$$

Die mit dieser einfachen Formel (13) erreichte Genauigkeit ist trotz der etwas willkürlich behandelten Grössen δ und α ausserordentlich gut, wie ein Vergleich mit dem streng abgeleitetem Wert für die Korrektion η zeigt.

Wird nämlich in (8) unter Beachtung von (11)

$$\delta = \delta_0 + \beta\lambda^* \tag{15}$$

gesetzt, dann führt die strenge Integrierung von (8) zu

$$\eta(\lambda^*) = \lambda^* - \frac{\bar{\delta}}{\beta}\ln\left(1 + \frac{\beta\lambda^*}{\delta_0}\right). \tag{16}$$

Da $\beta\lambda^*/\delta_0$ kleiner als 1 ist, lässt sich der Logarithmus nach dieser Grösse entwickeln, wobei wir zur Vereinfachung $\beta\lambda^*/\delta_0 = \sigma$ setzen. Es findet sich dann

$$\eta(\lambda^*) = \lambda^*\left(1 - \frac{\bar{\delta}}{\delta_0}\right)\left(1 - \frac{\sigma}{2} + \frac{\sigma^2}{3} - \frac{\sigma^3}{4} + - \ldots\right) \tag{17}$$

Nun lässt sich die mittlere reziproke Dispersion $\bar{\delta}$, die auch in den Gleichungen (9) und (13) auftritt, als Funktion von δ_0 und $\sigma_1 = \beta\Delta\lambda/\delta_0$ ausdrücken, wodurch sich dann der Vergleich der Gleichungen (9) und (13) mit Gleichung (17) übersichtlich gestaltet. Es ist nämlich laut Definition (2) $\bar{\delta} = \Delta\lambda/\Delta s$. Auf der anderen Seite lässt sich Δs aus einer Integration von $ds/d\lambda$ über das ganze Intervall gewinnen:

$$\Delta s = \int_0^{\Delta\lambda} \frac{1}{\delta}\,d\lambda = \int_0^{\Delta\lambda} \frac{1}{\delta_0 + \beta\lambda^*}\,d\lambda = \frac{\Delta\lambda}{\delta_0}\left(1 - \frac{\sigma_1}{2} + \frac{\sigma_1^2}{3} - \frac{\sigma_1^3}{4} + - \ldots\right). \tag{18}$$

So erhält man schliesslich

$$\bar{\delta} = \frac{\delta_0}{1 - \frac{\sigma_1}{2} + \frac{\sigma_1^2}{3} - \frac{\sigma_1^3}{4} + -} = \delta_0\left(1 + \frac{\sigma_1}{2} - \frac{\sigma_1^2}{12} + \frac{\sigma_1^3}{24} - + \ldots\right) \tag{19}$$

Wird (19) in (17) und (13) eingesetzt, dann ergeben sich

$$\eta(\lambda^*) = \left(\frac{\sigma - \sigma_1}{2} - \frac{4\sigma^2 - 3\sigma\sigma_1 - \sigma_1^2}{12} + \frac{6\sigma^3 - 4\sigma^2\sigma_1 - \sigma\sigma_1^2 - \sigma_1^3}{24} - + \ldots\right) \tag{17a}$$

und

$$\eta_1(\lambda^*) = \lambda^*\left(\frac{\sigma - \sigma_1}{2} - \frac{\sigma\sigma_1 - \sigma_1^2}{4} + \frac{\sigma\sigma_1^2 - \sigma_1^3}{6} - + \ldots\right), \tag{13a}$$

und die Differenz der beiden Korrekturen ist

$$(20)\qquad \eta(\lambda^*)-\eta_1(\lambda^*)=-\lambda^*\left(\frac{2\sigma^2-3\sigma\sigma_1+\sigma_1^2}{6}-\frac{6\sigma^3-4\sigma^2\sigma_1-5\sigma\sigma_1^2+3\sigma_1^3}{24}+-\right).$$

Kehren wir zur ursprünglichen Bedeutung von σ und σ_1 zurück und beschränken uns auf das quadratische Glied, dann ist

$$(21)\qquad \eta(\lambda^*)-\eta_1(\lambda^*)\doteq-\frac{\lambda^*}{6}\left(\frac{\beta}{\delta_0}\right)^2(2\lambda^{*2}-3\lambda^*\Delta\lambda+\Delta\lambda^2).$$

Die Differenz $\eta-\eta_1$ verschwindet für die Intervallgrenzen $\lambda^*=0$ und $\lambda^*=\Delta\lambda$, aber auch für die Intervallmitte $\Delta\lambda/2$, wie sich leicht nachprüfen lässt. In der ersten Intervallhälfte ist ihr Wert negativ, in der zweiten positiv, und erreicht ungefähr bei $\Delta\lambda/4$ und $3\Delta\lambda/4$ (genauer bei $\Delta\lambda\left(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{6}\sqrt{3}\right)$, worauf näher einzugehen sich aber hier erübrigt) die Extreme

$$(23)\qquad \eta\left(\frac{\Delta\lambda}{4}\right)-\eta_1\left(\frac{\Delta\lambda}{4}\right)=-\frac{\Delta\lambda}{64}\left(\frac{\beta\,\Delta\lambda}{\delta_0}\right)^2$$

und

$$(24)\qquad \eta\left(\frac{3\Delta\lambda}{4}\right)-\eta_1\left(\frac{3\Delta\lambda}{4}\right)=+\frac{\Delta\lambda}{64}\left(\frac{\beta\,\Delta\lambda}{\delta_0}\right)^2.$$

Damit dürfte die ausserordentliche Güte der Näherung zur Genüge dargetan sein.

Praktische Bemerkungen

Das vorgelegte Interpolationsverfahren verlangt als Vorbereitung zunächst eine Aufteilung des Messbereiches in zweckmässig angelegte Intervalle und die Erstellung der für die einzelnen Intervalle gültigen individuellen Korrektionskurven.

Zur Vermeidung eines unnötigen Rechenaufwandes wird man bestrebt sein, im Rahmen der verfügbaren Standardlinien die Intervalle so gross als möglich zu wählen. Ihre Grösse ist allerdings nach obenhin beschränkt. Zunächst muss dafür Sorge getragen werden, dass in den betreffenden Intervallen die β praktisch noch als lineare Funktionen von λ angesehen werden können. Denn auf dieser Voraussetzung beruht die Berechtigung der in den vorausgehenden Überlegungen und Ableitungen zugelassenen Vereinfachungen. Sodann soll die Korrektur noch handlich bleiben, eine Forderung, die als erfüllt angesehen werden kann, wenn die maximalem Korrekturen nicht mehr als zwei signifikative Stellen aufweisen. Bei einer erstrebten Genauigkeit der λ-Bestimmungen auf 0.001 Å z.B. bedeutet das, dass die maximalen Korrekturen nicht über 0.1 Å gehen. Hiermit ergeben sich unter Benützung der Gl. (14) die optimalen Intervallbreiten überschlagsmässig zu

$$\Delta \lambda_{max} = \sqrt{\eta_{max} \frac{8\bar{\delta}}{\beta}}$$

Zwei Zahlenbeispiele aus dem Sichtbaren und dem UV mögen das eben Gesagte noch erläutern. Dabei möge nur eine Maximalkorrektur von 0.1 Å zugelassen werden.

1) Im Gebiet von 4480 — 4500 Å wurden $\bar{\delta} = 4.616$ Å/mm und $\beta = 0.0055$ gefunden, woraus sich eine optimale Intervallbreite von ungefähr 26 Å errechnet.

2) Im Gebiet von 2370 — 2390 Å wurden $\beta = 1.1905$ Å/mm und $\beta = 0.002235$ festgestellt, woraus sich die optimale Intervallbreite zu etwa 21 Å ergibt.

In beiden Fällen, die doch ziemlich verschiedene Verhältnisse aufweisen, erscheint die optimale Intervallbreite in praktisch der gleichen Grösse von etwa 20 Å, sodass man diese Grösse im allgemeinen als gangbar betrachten könnte. Damit dürften meist auch genügend Eisenstandardlinien für diese Intervalle zur Verfügung stehen.

Sind nach den eben gegebenen Regeln die Standardlinien für den Messbereich festgelegt worden, dann werden die zur Berechnung der Korrekturen benötigten δ und β bestimmt: δ nach Gl. (2); die β aus einer graphischen Darstellung des Verlaufes der δ mit λ. Zur Darstellung dieser Funktion genügt es, die mittleren reziproken Dispersionen δ den Intervallmitten zuzuordnen, wie in der früheren Arbeit [3] ausführlich dargelegt wurde.

Zur Aufstellung der Korrektionskurven werden nun die Korrekturen η_1 nach Gl. (13) — die sich vielleicht für diese Zwecke noch etwas handlicher zurichten lässt — für ausgewählte Punkte der einzelnen Intervalle berechnet, wobei man sich auf ganzzahlige λ^* beschränken kann. Die erhaltenen Werte η_1 werden dann im entsprechenden Massstab als Funktion der eigentlichen λ aufgetragen, sodass sich die Kurven für alle Spektrogramme der gleichen Minimumlage benützen lassen.

Um einen anschaulichen Begriff zu geben von der Genauigkeit dieser genäherten Korrekturen η_1 mögen für die beiden angeführten Beispiele noch die Maximalabweichungen von den streng berechneten Korrekturen nach den Gleichungen (22) und (23) angeführt werden. Im ersten Falle betragen sie bei einer Intervallbreite von 26 Å $\pm$ 0.00039 Å, im zweiten bei einer Intervallbreite von 21 Å $\pm$ 0.00051. Wird der Messfehler im allgemeinen mit etwa $\pm$ 0.001 mm angesetzt, dann lässt sich im ersten Falle bei einer Dispersion von 4.616 Å/mm höchstens eine Genauigkeit der Wellenlängenbestimmung von $\pm$ 0.0046 Å erhoffen; der in der Korrektur zugelassene Fehler von 0.00039 Å liegt also eine ganze Grössenordnung tiefer. Im zweiten Falle wird man mit einer Genauigkeit von etwa $\pm$ 0.0012 Å rechnen können, wobei der Maximalfehler der Korrektur von $\pm$ 0.0005 Å immerhin als noch erträglich betrachtet werden kann.

Nach diesen Vorbereitungen können dann die Messungen rasch und sicher ausgewertet werden.

Die Berechnung der provisorischen Wellenlängen λ' gestaltet sich sehr einfach, wenn eine gute Rechenmaschine zur Verfügung steht. In diesem Falle wird z.B. die untere Intervallgrenze λ_n ins Resultatwerk gesetzt, die zugehörige Messung s_n ins Zählwerk. Die mittlere reziproke Dispersion δ_n kommt in die Tastatur. Werden nun die einzelnen Messungen s in diesem Intervall mit der Additionstaste aufgebaut, dann erscheinen im Resultatwerk die richtigen λ'. Der Prozess kann ununterbrochen weitergeführt werden, wenn nur dafür gesorgt wird, dass an den jeweiligen Intervallgrenzen die reziproken Dispersionen in der Tastatur entsprechend geändert werden.

Sind alle λ' bestimmt, dann werden aus den Korrektionskurven die jedem λ zukommenden Korrekturen entnommen und zu λ' hinzugefügt. Dass man hierbei mit λ' in die Korrektionskurven eingeht statt mit den eigentlich zu berechneneden λ, ist wegen der Kleinheit der Korrekturen vollkommen belanglos.

Auf ähnliche Weise lassen sich die Messungen auch anderer Aufnahmen derselben Minimumgegend auswerten, ohne dass dafür neue Korrektionskurven angelegt zu werden brauchen. Denn die neuen Messungen unterscheiden sich von den ursprünglichen (die für die vorbereitenden Arbeiten benutzt wurden) nur durch eine additive, von der eigenen Messlage herrührende Konstante, der automatisch Rechnung getragen werden kann, wenn wenigstens für eine Standardlinie Messungen in beiden Aufnahmen vorliegen.

Zum Schluss möge noch zugestanden werden, dass die Herrichtung der benötigten Korrektionskurven einen gewissen Arbeitsaufwand bedeutet, der nur dort sich rechtfertigt, wo es sich um die Bewältigung zahlreicher Bestimmungen von Wellenlängen handelt, wobei die Messgenauigkeit voll ausgewertet werden soll. Für bescheidenere Ansprüche reichen einfachere Interpolationsverfahren vollkommen aus.

ZUSAMMENFASSUNG

Auch im prismatischen Spektrum lassen sich auf einfache Weise sehr genaue Wellenlängenmessungen vornehmen, wenn man in mässig grossen Wellenlängenbereichen von etwa 10 - 20 Å zunächst vorläufige Werte linear interpoliert und nachträglich verbessert. Die zu jeder Wellenlänge gehörige Korrektur kann leicht unter 0.1 Å gehalten werden und wird Diagrammen entnommen, die für jedes Intervall eigens aufzustellen sind. Zu diesem Zwecke wird eine einfache Näherung hoher Genauigkeit angegeben. Der zur Erstellung dieser Korrektionskurven nötige Arbeitsaufwand lohnt sich allerdings nur in Gegenden mit ausreichend grosser Dispersion, wenn ein umfangreiches Material bearbeitet werden muss.

LITERATUR

[1] J. Hartmann, *Über eine einfache Interpolationsformel für das prismatische Spektrum.* « Publ. Atsrophys. Obs. », Potsdam, *12* (1898).

[2] J. Hartmann, *Über die Ausmessung und Reduktion der photographischen Aufnahmen von Sternspektren.* « Astr. Nachr. », *155*, 81-118 (1901).

[3] J. Junkes, *Ein praktisches Interpolationsverfahren für relative Wellenlängenmessungen im prismatischen Spektrum.* « Ric. Spettr. », *1*, 25-54 (1939).