

ДВУХЗОННАЯ МОДЕЛЬ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПЛАЗМЫ

С. М. Зайцев, И. Н. Крылов, А. М. Попов, Т. А. Лабути^{*}

УДК 543.42;533.9

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия;

e-mail: timurla@laser.chem.msu.ru

(Поступила 3 января 2023)

Реализован алгоритм моделирования плазмы в приближении двухзонного источника и его сопряжение с библиотекой *NLopt* для проведения многопараметрической оптимизации. Для совместной работы алгоритма моделирования спектров и библиотеки *NLopt* реализована прослойка абстракции, выполняющая инициализацию обеих библиотек в одно действие, рассчитывающая функцию потерь заданного вида и передачу ее значения алгоритму оптимизации. Корректность совместной работы этих алгоритмов проверена на модельных данных: достигается сходимость к значениям параметров плазмы, использованных для получения тестового синтетического спектра. Алгоритм *CRS2-LM* позволяет добиться самой быстрой сходимости к исходному спектру, поэтому его применяли для аппроксимации экспериментальных спектров. Показано, что использование двухзонной модели позволяет корректно описывать как ионные, так и атомные линии, в том числе подверженные самообращению при испарении алюминиевых сплавов, при этом методы “слепой” оптимизации функции потерь пригодны для оценки температуры и электронной плотности в лазерно-индуцированной плазме по ее спектрам.

Ключевые слова: лазерно-искровая эмиссионная спектроскопия, моделирование плазмы, стохастическая оптимизация.

A plasma modeling algorithm using a two-zone light source approximation has been developed and coupled with the *NLopt* library for multiparametric optimization. An abstraction layer was created to streamline the initialization of both libraries in a single step, to calculate a loss function of the specified type, and to convey its value to the optimization algorithm. The proper functioning of these combined algorithms was confirmed with model data, demonstrating convergence to the plasma parameters that were used to generate a test synthetic spectrum. The *CRS2-LM* algorithm enables the fastest convergence to the original spectrum; hence, it has been utilized for the approximation of experimental spectra. It has been demonstrated that the application of a two-zone model provides an accurate description of both ionic and atomic lines, including those that are self-reversed during the evaporation of aluminum alloys. Furthermore, “blind” optimization methods for the loss function are effective for determining temperature and electron density in laser-induced plasma from its spectra.

Keywords: laser-induced breakdown, plasma modeling, stochastic optimization.

Введение. Лазерно-искровая эмиссионная спектрометрия (ЛИЭС) — активно развивающийся метод экспрессного прямого атомно-эмиссионного анализа, основанный на регистрации излучения лазерно-индуцированной плазмы, возникающей под воздействием мощного сфокусированного на образец излучения импульсного лазера. Уникальные возможности ЛИЭС используются для предварительной оценки состава поверхности Марса на месте (марсоходы *Curiosity* и *Perseverance* [1, 2]) и океанского дна на глубинах до 3000 м [3], различных in line промышленных системах, в том числе

TWO-ZONE MODEL OF LASER-INDUCED PLASMA

S. M. Zaytsev, I. N. Krylov, A. M. Popov, T. A. Labutin^{*} (*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia; e-mail: timurla@laser.chem.msu.ru*)

^{*} Автор, с которым следует вести переписку.

для анализа расплавленного металла или шлаков [4, 5]. Поскольку во всех перечисленных приложениях (при анализе космических тел, исследовании морского дна, контроле разнообразных изделий и высокотемпературных расплавов) изготовление стандартных образцов невозможно, необходимы исследования, направленные на создание способов определения состава без образцов сравнения с помощью ЛИЭС. Существующие варианты анализа без построения градуировочной зависимости (calibration-free LIBS) требуют трудновыполнимых условий — отсутствия самопоглощения в лазерной плазме [6] или полную диагностику (томографию) лазерного факела с помощью преобразования Абеля [7] или Радона [8] с высоким пространственным разрешением, что значительно усложняет конструкцию спектрального прибора, появляется необходимость большого количества измерений плазмы. Наилучшие результаты в рамках данного подхода по определению состава достигнуты с использованием гидродинамической модели расширяющейся лазерной плазмы. Однако данная модель не дает преимуществ на практике [9], так как слишком сложна из-за большого числа параметров, связанных системой дифференциальных уравнений. Данные варианты безэталонного анализа имеют низкую правильность: погрешности часто достигают 50 % даже для основных компонентов [10]. Другой подход к анализу без использования образцов сравнения — многопараметрическая оптимизация для аппроксимации экспериментальных спектров модельными на основе статической модели гомогенной лазерной плазмы в состоянии локального термодинамического равновесия [11—15]. В этом случае в качестве варьируемых переменных выступают как параметры плазмы (температура, электронная плотность, размер), так и ее элементный состав. Существенной проблемой этой модели является принципиальная невозможность моделировать самообращение наиболее сильных линий компонентов основы, что может приводить к решению с некорректными параметрами и, как следствие, к значительной систематической погрешности.

Цель данной работы — проверка адекватности представления градиентов температуры и электронной плотности в лазерно-индуцированной плазме в виде двух гомогенных зон, каждая из которых имеет определенные размеры, и оценка возможности использования данной модели для аппроксимации экспериментальных спектров лазерной плазмы.

Методы. Для реализации возможности моделирования спектров двухзонного источника излучения модифицирован алгоритм, описанный ранее [13]. Как и оригинальная версия алгоритма, он реализован в динамической библиотеке, разработанной на языке C++. Библиотека экспортирует определения классов, функционал которых скрыт от пользователя, функции для вспомогательных операций (например, извлечение необходимых данных о переходах атомов и ионов из базы) и расчетов, а также структуры данных, в которых хранятся параметры плазмы, аппаратуры и результаты вычислений. При этом функционал модифицирован таким образом, что в алгоритм передается количество зон z ($z \geq 1$), описывающих источник, радиусы полуэллипсов r_1 и r_2 , которые определяют границы зон, и значения температур T , электронных плотностей n_e в них (рис. 1). По высоте (вдоль оси лазерного пучка) плазма разбивается на заданное количество s горизонтальных участков (слоев) одинаковой толщины $h = r_2/s$. Элементный состав (массив массовых долей элементов $\omega = \{\omega_k\}$) принимается одинаковым во всех точках плазмы. Внутри каждого i -го слоя ($i = 1, \dots, s$) вдоль оси наблюдения рекуррентно интегрируется уравнение переноса излучения [16] для одномерного источника:

$$\begin{cases} I_{i,1} = B_\lambda(T_z)(1 - e^{-\kappa_z(\lambda)\Delta x_{i,1}}), \\ I_{i,l} = I_{i,l-1}e^{-\kappa_{|z-l|+1}(\lambda)\Delta x_{i,l}} + B_\lambda(T_{|z-l|+1})(1 - e^{-\kappa_{|z-l|+1}(\lambda)\Delta x_{i,l}}), \quad l \geq 2, \quad l \in N, \end{cases} \quad (1)$$

где l — номер отрезка оптического пути, заключенного между границами зон или зоны ($l = 1, \dots, 2z_i - 1$, z_i — количество зон, которые пересекает i -й слой); $\Delta x_{i,l}$ — длина этого отрезка (м), $\kappa_{|z-l|+1}(\lambda)$ — зависящий от длины волны λ коэффициент поглощения (м^{-1}); $B_\lambda(T_{|z-l|+1})$ — интенсивность излучения абсолютно черного тела ($\text{Вт}/(\text{см} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{м})$), задаваемая законом Планка [16]; $I_{i,l}$ — интенсивность излучения после прохождения l -го отрезка ($\text{Вт}/(\text{см} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{м})$). Результат усредняется по всем слоям для получения конечного значения интенсивности: $I = \Sigma I_i / s$. Таким образом моделируем плазму одной, двумя или большим количеством зон с определенными параметрами.

При упрощении модели до одномерного случая ($s = 1$) расчет переноса излучения ведется только вдоль основания эллипсов и итоговая интенсивность $I = I_1$ (рис. 1), а число параметров модели сокращается на число зон. Таким образом, для многозонной модели плазмы заданного состава имеем $4 \times z$ параметров в общем случае или $3 \times z$ параметров в упрощенном случае.

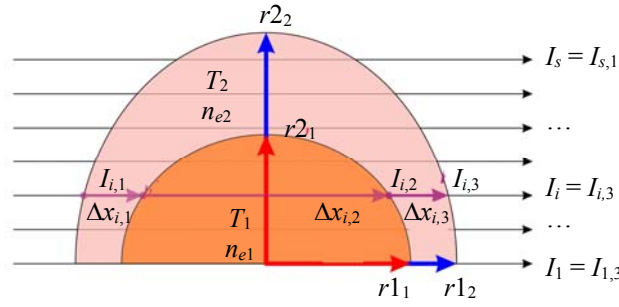


Рис. 1. Модель двухзонной лазерно-индуцированной плазмы при наблюдении сбоку: границы зон — полуэллипсы радиусами r_1, r_2 и с параметрами плазмы в каждой зоне (T, n_e)

Коэффициенты поглощения $\kappa(\lambda)$ в определенной зоне зависят от объемных концентраций атомов и ионов, которые можно рассчитать, совместно решая систему уравнений Саха [17] для каждого элемента и уравнение электронейтральности плазмы [13]:

$$Vn_e = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{J_k} j\beta_{kj}(n_e, T)N_k = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{J_k} j\beta_{kj}(n_e, T) \frac{m\omega_k}{M_k} N_A = mN_A \sum_{k=1}^K \frac{\omega_k}{M_k} \sum_{j=1}^{J_k} j\beta_{kj}(n_e, T), \quad (2)$$

где V — объем (см^3); n_e — электронная плотность (см^{-3}); m — масса зоны плазмы (г); N_A — постоянная Авогадро (моль^{-1}); N_k — число частиц элемента k в зоне плазмы; M_k — молярная масса элемента k (г/моль); j — заряд иона, $\beta_{kj}(n_e, T)$ — относительное содержание иона элемента k с зарядом j в зоне плазмы, рассчитанное из системы уравнений Саха. Выразив объем зоны плазмы как отношение правой части уравнения (2) и n_e , можно рассчитать объемную концентрацию частиц ($n_k, \text{см}^{-3}$) элемента k :

$$n_k = \frac{N_k}{V} = \frac{n_e \omega_k}{M_k \sum_{k=1}^K \frac{\omega_k}{M_k} \sum_{j=1}^{J_k} j\beta_{kj}(n_e, T)}. \quad (3)$$

Число частиц в единице объема необходимо для расчета спектров коэффициента поглощения отдельных спектральных линий и суммарного спектра поглощения (с учетом поправки на вынужденное излучение):

$$\kappa(\lambda, n_e, T, \omega) = \sum_{k,j,m} \frac{\lambda_m^4}{8\pi c} A_{mn}^{(k,j)} \beta_{kj}(n_e, T) 10^6 n_k \frac{g_m^{(k,j)}}{Z^{(k,j)}(T)} \left(e^{-E_n^{(k,j)}/T} - e^{-E_m^{(k,j)}/T} \right) P_m^{(k,j)}(\lambda, n_e, T), \quad (4)$$

где λ_m — центральная длина волны перехода (м) (индексы k и j для λ_m опущены); c — скорость света в среде (м/с); A_{mn} — вероятность перехода (с^{-1}); g_m — статистический вес верхнего уровня; $Z^{(k,j)}$ — сумма по состояниям элемента k в ионном состоянии j ; E_m и E_n — энергии верхнего и нижнего уровней (эВ); T — температура плазмы (эВ); $P_m(\lambda)$ — профиль Фойгта спектральной линии (м^{-1}), учитывающий доплеровское и штарковское уширения.

По формулам (3) и (4) рассчитаны объемные плотности частиц и спектры поглощения в каждой зоне. Если предположить, что плазма обладает осевой симметрией относительно оси лазерного пучка, можно вычислить объем центральной зоны (индекс “1”)

$$V_1 = \frac{2}{3} \pi r_1^2 r_2 \quad (5)$$

и остальных зон (индекс “ $p > 1$ ”)

$$V_p = \frac{2}{3} \pi (r_1^2 r_2 - r_{p-1}^2 r_{p-2}), \quad (6)$$

а также из (2) найти массу атомизованного вещества в каждой зоне.

На последней стадии алгоритма проведены свертка спектра с аппаратной функцией спектрографа и электронно-оптического преобразователя (ЭОП), а также усреднение спектра в соответствии со спектральной шириной пикселя ПЗС-матрицы (конечное число точек в модельном спектре равно ширине матрицы в пикселях).

При сопоставлении экспериментальных спектров с модельными проведены линейная интерполяция экспериментального спектра, чтобы устранить фактор нелинейной калибровки по длинам волн любых экспериментальных данных, а также вычет фона по минимальному значению и нормировка

интенсивности на максимум, так что безразмерные значения экспериментального (y) и модельного (\hat{y}) спектров лежали в диапазоне $[0; 1]$. Задачу регрессии решили с помощью библиотеки алгоритмов нелинейной многопараметрической оптимизации NLOpt [18], минимизируя сумму квадратов остатков (SSE):

$$SSE = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (7)$$

где i — номер точки в спектре.

Дополнительно рассчитано среднее относительное отклонение между y и \hat{y} :

$$rSSE = \sqrt{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 / \sum_i y_i^2}. \quad (8)$$

Библиотека содержит большое количество градиентных и безградиентных алгоритмов оптимизации, а также предоставляет унифицированный интерфейс к ним. Для совместной работы алгоритма моделирования спектров и библиотеки NLOpt реализована прослойка абстракции, выполняющая инициализацию обеих библиотек в одно действие, рассчитывающая функцию потерь заданного вида и передачу ее значения алгоритму оптимизации.

Результаты и их обсуждение. Важнейшая задача при многопараметрической оптимизации — минимизация времени расчетов, т. е. нахождение компромисса между минимумом функции потерь и необходимым для его достижения числом итераций при поиске оптимальных параметров плазмы. Для выбора наилучшего алгоритма все доступные в библиотеке NLOpt алгоритмы глобальной безградиентной оптимизации применены к экспериментальному спектру нержавеющей стали, полученному ранее [13], в относительно узком спектральном диапазоне 392—412 нм. Для описания спектра применяли самую простую модель (одна зона плазмы, один слой), элементный состав плазмы задавали равным составу образца и оптимизировали параметры T , $\lg n_e$ и $r1 = r2$. Только алгоритмы DIRECT [19] и CRS2-LM [20, 21] достигали сходимости менее чем за 1000 итераций при $SSE \sim 0.6$ (для 1390 точек в спектре).

Алгоритм DIRECT рассматривает гиперкуб в пространстве параметров и последовательно делит его на гиперпараллелепипеды, в центре каждого из которых вычисляет значение функции. На каждой итерации из множества имеющихся гиперпараллелепипедов выбирают те, которые могут потенциально содержать оптимум (т. е. значения меньше других гиперпараллелепипедов и/или имеющие достаточно большие еще не исследованные области), после чего делят их дальше до выполнения критериев остановки. Оригинальная версия DIRECT в ряду последовательных запусков могла необъяснимо заикливаться и возвращать значения, не имеющие физического смысла, поэтому от данного алгоритма пришлось отказаться.

Алгоритм CRS2 [19] работает с популяцией точек в пространстве параметров, изначально выбираемой случайно (для параметров N обычно берут $10(N + 1)$ точек). На каждой итерации выбирают точку, в которой значение минимизируемой функции является наибольшим, и отражают эту точку относительно центроида популяции подобно симплекс-методу. В модификации с “локальной мутацией” [20], если отражение относительно центроида не привело к уменьшению значения функции, точку с наибольшим значением функции пытаются отразить относительно точки с наименьшим значением функции со случайными весами при каждой координате. В конечную популяцию попадает точка с наименьшим из двух полученных значений. В алгоритме CRS2-LM отсутствует недостаток, свойственный алгоритму DIRECT, что позволило перейти к его апробации для аппроксимации спектров в рамках более сложных моделей плазмы.

Для проверки корректности решения обратной задачи в рамках двухзонной модели (“горячее” ядро и “холодная” периферия плазмы), т. е. способности достигать сходимости для параметров T_1 , T_2 , $\lg n_{e1}$, $\lg n_{e2}$, $r1_1$, $r1_2 - r1_1$, $r2_1$ и $r2_2 - r2_1$, протестирован алгоритм оптимизации на модельном спектре алюминиевого сплава (мас. %): Cu 3.6, Li 1.06, Mg 0.59, Ag 0.4, Sc 0.1, Mn 0.06, полученном для заданных параметров (табл. 1) в диапазоне 233—467 нм (рис. 2), содержащем ярко выраженные самопоглощенные и самообращенные резонансные линии алюминия (переходы из возбужденных $3s^2ns$ - и $3s^2md$ -состояний в основное $3s^23p$ -состояние [22], где $n \geq 4$, $m \geq 3$), а также менее интенсивные линии остальных элементов (~300 линий). Контуры линий с известными параметрами штарковского уширения рассчитывались индивидуально, для оставшихся использовано значение 0.006 нм при $n_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Из расчета исключались слабые линии (10^{-5} относительно самой интенсивной линии без учета самопоглощения), порог для расчета крыльев линии составлял 10^{-7} относительно ее максимума. Полная ширина на полувысоте инструментальной функции спектрометра с параметрами [13] составляла ~0.065 нм. Плазма по вертикальной координате разбивалась на $s = 40$ слоев (рис. 1).

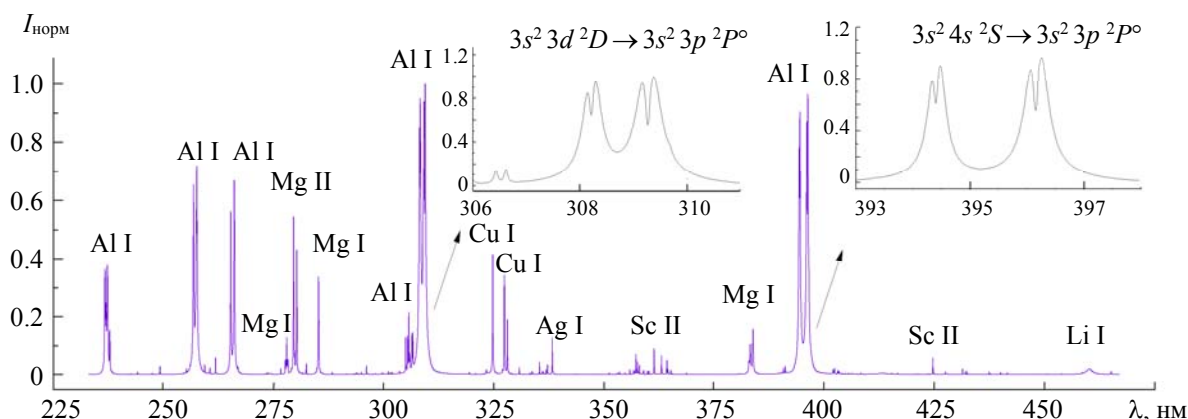


Рис. 2. Модельный (тестовый) спектр алюминиевого сплава; показаны наиболее интенсивные линии, на вставках — самообращенные линии Al I

За 30000 итераций достигнуты практически идеальное совпадение спектров ($SSE = 1 \cdot 10^{-5}$, $rSSE = 3 \cdot 10^{-4}$), а также сходимость в заданных пределах параметров внутренней зоны T_1 , $\lg n_{e1}$, r_{11} и внешней зоны T_2 , $\lg n_{e2}$. Среднее время расчета одного спектра 0.56 с (на одном ядре процессора AMD Ryzen 2600X 3.8 ГГц). Однако размеры плазмы $r_{12}-r_{11}$, r_{21} и $r_{22}-r_{21}$ не сошлись к заданным значениям, что свидетельствует о неоднозначности решения использовать усредненный по слоям и нормированный спектр. Поэтому апробирована также модель с одним слоем, и в этом случае достигнуто хорошее совпадение значений нормированной интенсивности ($SSE = 4 \cdot 10^{-3}$, $rSSE = 5 \cdot 10^{-3}$), все параметры достигли установленных пределов сходимости за 5815 итераций, среднее время расчета одного спектра сократилось до 0.21 с. Температуры, а также электронная плотность во внутренней зоне сошлись к заданным значениям (табл. 1, последний столбец), но во внешней зоне n_e оказалась заниженной на 35 %. Размеры вдоль основания плазмы (рис. 1, нижний слой) также разошлись, особенно толщина внешней зоны (больше на 130 %). Вероятно, это следствие компенсации отсутствующих в расчетах слоев только внешней зоны (участок $(r_{21}; r_{22})$ по высоте плазмы). Отметим, что функция потерь достигает $SSE = 4 \cdot 10^{-3}$ за ~2700 итераций при 40 слоях, при этом значения T_1 , $\lg n_{e1}$, T_2 , $\lg n_{e2}$ и r_{11} не отличаются от заданных априори более чем на 3 %. Алгоритм продолжает варьировать параметры $r_{12}-r_{11}$, r_{21} и $r_{22}-r_{21}$ и может не достичь критериев сходимости по ним. Следовательно, в случае 2D-модели с несколькими слоями следует использовать с осторожностью полученные данные по размерам плазмы, поскольку решение относительно них нестабильно.

Т а б л и ц а 1. Тестовые параметры для модельного спектра и результаты его аппроксимации

Параметр	Заданное значение (40 слоев)	Нижняя граница поиска	Верхняя граница поиска	Критерий сходимости	Оптимизированное значение (40 слоев)	Относительное отклонение, %	Оптимизированное значение (один слой)
T_1 , К	8120	4640	23210	10	8120	<0.1	8120
T_2 , К	3480	1160	11600	10	3550	2.0	3450
$\lg(n_{e1}, \text{см}^{-3})$	16.900	15.000	18.000	0.001	16.899	<0.006	16.897
$\lg(n_{e2}, \text{см}^{-3})$	14.300	13.000	18.000	0.001	14.298	-0.014	14.109
r_{11} , мм	1.00	0.01	3.00	0.01	1.005	<1	0.81
$r_{12}-r_{11}$, мм	1.00	0.01	3.00	0.01	1.61	61	2.29
r_{21} , мм	1.00	0.01	3.00	0.01	0.54	-46	—
$r_{22}-r_{21}$, мм	2.00	0.01	3.00	0.01	0.64	-68	—

Алгоритм аппроксимации CRS2-LM апробирован для аппроксимации экспериментального спектра алюминиевого сплава (390—400 нм), полученного на воздухе при задержке регистрации 2 мкс после лазерного импульса, в котором присутствуют самообращенные резонансные линии Al I (рис. 3), в рамках однозонной и двухзонной моделей с пятью слоями. Как и ожидалось, однозонная модель не позволяет провести аппроксимацию контура самообращенных линий ($rSSE = 0.14$), что приводит к завышению температуры на 1200 К и электронной плотности в 1.3 раза относительно “горячей” зоны в двухзонной модели (табл. 2). В результате этого контур малоинтенсивной ионной линии Al II 390.07 нм описывается некорректно однозонной моделью (рис. 3).

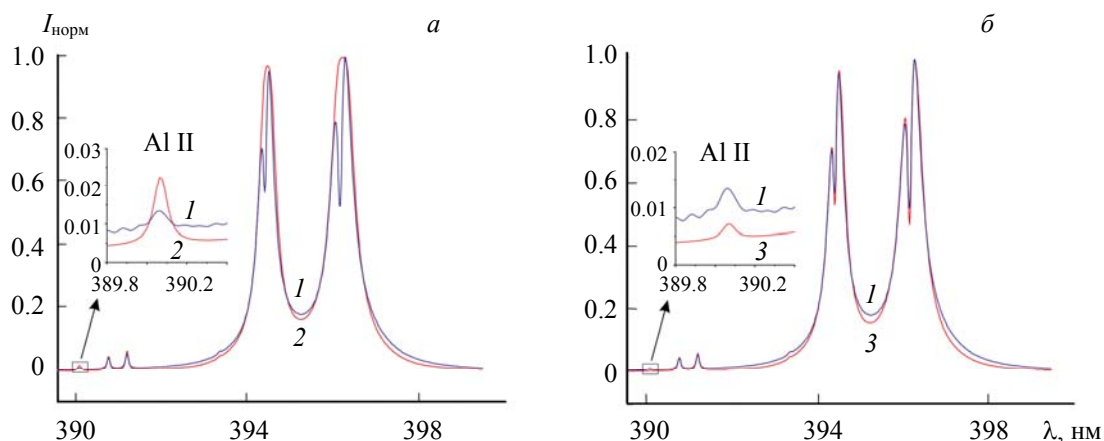


Рис. 3. Спектр алюминиевого сплава (задержка регистрации 2 мкс) с самообращенными линиями Al I 394.40 и 396.15 нм и его аппроксимация одно- (а) и двухзонной (б) моделями: *I* — эксперимент, *2* — модель (1 зона), *3* — модель (2 зоны), на вставках — слабая линия Al II 390.07 нм

Двухзонная модель, напротив, хорошо описывает самообращенный контур линий алюминия, как и профили других малоинтенсивных линий ($rSSE = 0.06$). Параметры плазмы, при которых достигается сходимость модели к экспериментальному спектру (табл. 2), также хорошо согласуются с существующими представлениями о лазерно-индуцированном факеле на поверхности твердой мишени: небольшая горячая область в центре окружена остывающим облаком разлетающейся плазмы, температура и электронная плотность в котором существенно ниже. Нами оценена электронная плотность плазмы по линии H- α 656.3 нм по формуле $w_S = 4.63 \cdot 10^{-12} n_e^{2/3}$ [23] и получено $\lg n_e = 17.15$, что близко к оптимизированному значению 17.28 для внутренней зоны в двухзонной модели (табл. 2). Как и следовало ожидать, время расчета одного спектра в узком спектральном интервале на порядок ниже (0.02 с), чем в синтетической задаче, однако число итераций по-прежнему может быть велико (до 25000) из-за неоднозначности решения для размеров плазмы, особенно r_2 . Оценены также случайные погрешности аппроксимации на основании 50 параллельных запусков с рандомизацией интенсивности в каждой точке экспериментального спектра в пределах погрешности измерений (для спектра на рис. 3 $RSD \sim 3\%$). Как видно из табл. 2, хорошая стабильность сходимости параметров в двухзонной модели достигается только для параметров T_1 и $\lg n_{e1}$, удовлетворительная — для T_2 , $\lg n_{e2}$, r_{11} и r_{12} , а для r_{21} и r_{22} ожидаемо плохая.

Т а б л и ц а 2. Результаты аппроксимации экспериментального спектра алюминиевого сплава (рис. 3)

Зона	T_1 , К	T_2 , К	$\lg n_{e1}$	$\lg n_{e2}$	r_{11} , мм	r_{12} , мм	r_{21} , мм	r_{22} , мм
1	11510±60	—	17.397±0.008	—	1.46±0.07	—	6±4	—
2	10300±700	3800±800	17.28±0.04	14.4±0.9	1.4±0.7	3.9±0.7	1.2±0.9	2.7±1.6

Дополнительно адекватность описания лазерной плазмы с помощью двухзонной модели проверена при аппроксимации экспериментальных спектров, полученных при различных временах задержки. В этом случае изменение оптимальных параметров (T , n_e), получаемых при аппроксимации двухзонной моделью, соответствует физическому процессу разлета и остывания лазерного факела (рис. 4). Таким образом, двухзонная модель — хорошее приближение, позволяющее описывать градиент температуры и электронной плотности в плазме (получать оценку их значений в центре и на периферии) и с высокой точностью аппроксимировать экспериментальные спектры, в том числе самообращенные линии.

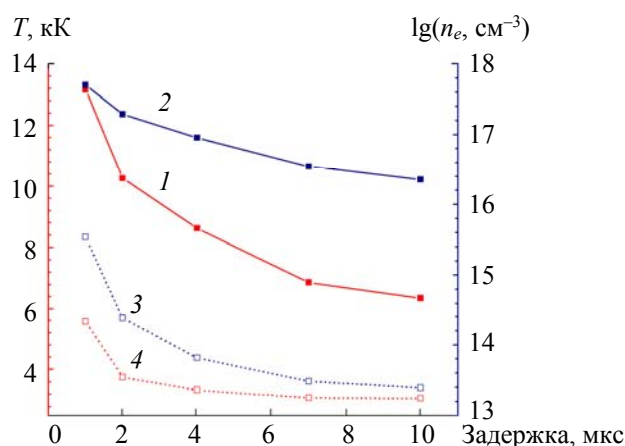


Рис. 4. Изменение оптимальных параметров при аппроксимации спектров алюминиевого сплава, полученных при различных задержках: T_1 (1), $\lg n_{e1}$ (2), $\lg n_{e2}$ (3) и T_2 (4)

Заключение. На модельных спектрах с использованием двухзонной модели показана сходимость решения задачи многопараметрической оптимизации параметров лазерно-индуцированной плазмы к заданным значениям. Использование данных алгоритмов для определения свойств правомерно. При этом быстрее всего удастся добиться сходимости при использовании алгоритма CRS2-LM из семейства методов “случайный поиск”. Использование двухзонной модели позволяет корректно описывать как ионные, так и атомные линии, в том числе подверженные самообращению. Методы “слепой” оптимизации функции потерь пригодны для оценки температуры и электронной плотности в лазерно-индуцированной плазме по ее спектрам.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-5513.2021.6.

- [1] C. Fabre, S. Maurice, A. Cousin, R. C. Wiens, O. Forni, V. Sautter, D. Guillaume. Spectrochim. Acta B, **66** (2011) 280—289
- [2] A. Cousin, V. Sautter, C. Fabre, G. Dromart, G. Montagnac, C. Drouet, P.Y. Meslin, O. Gasnault, O. Beyssac, S. Bernard, E. Cloutis, O. Forni, P. Beck, T. Fouchet, J. R. Johnson, J. Lasue, A. M. Ollila, P. De Parseval, S. Gouy, B. Caron, J. M. Madariaga, G. Arana, M. Bo Madsen, J. Laserna, J. Moros, J. A. Manrique, G. Lopez-Reyes, F. Rull, S. Maurice, R. C. Wiens. Spectrochim. Acta B, **188** (2022) 106341
- [3] B. Thornton, T. Takahashi, T. Sato, T. Sakka, A. Tamura, A. Matsumoto, T. Nozaki, T. Ohki, K. Ohki. Deep-Sea Res. I, **95** (2015) 20—36
- [4] R. Noll, C. Fricke-Begemann, S. Connemann, C. Meinhardt, V. Sturm. J. Anal. At. Spectrom., **33** (2018) 945—956
- [5] K. Leosson, S. K. Padamata, R. Meirbekova, G. Saevarsdottir, S. H. Gudmundsson. Spectrochim. Acta B, **190** (2022) 106387
- [6] E. Tognoni, G. Cristoforetti, S. Legnaioli, V. Palleschi. Spectrochim. Acta B, **65** (2010) 1—14
- [7] S. Merk, A. Demidov, D. Shelby, I. Gornushkin. Appl. Spectrosc., **67** (2013) 851—859
- [8] S. Eschlböck-Fuchs, A. Demidov, I. B. Gornushkin, T. Schmid, R. Rössler, N. Huber, U. Panne, J. D. Pedarnig. Spectrochim. Acta B, **123** (2016) 59—67
- [9] S. V. Shabanov, I. B. Gornushkin. Spectrochim. Acta B, **100** (2014) 147—172

-
- [10] **E. Tognoni, G. Cristoforetti, S. Legnaioli, V. Palleschi, A. Salvetti, M. Mueller, U. Panne, I. Gornushkin.** *Spectrochim. Acta B*, **62** (2007) 1287—1302
- [11] **P. Yaroshchuk, D. Body, R. J. S. Morrison, B. L. Chadwick.** *Spectrochim. Acta B*, **61** (2006) 200—209
- [12] **K. K. Herrera, E. Tognoni, I. B. Gornushkin, N. Omenetto, B. W. Smith, J. D. Winefordner.** *J. Anal. At. Spectrom.*, **24** (2009) 426—438
- [13] **S. M. Zaytsev, A. M. Popov, T. A. Labutin.** *Spectrochim. Acta B*, **158** (2019) 105632
- [14] **J. Hermann, A. Lorusso, A. Perrone, F. Strafella, C. Dutouquet, B. Torralba.** *Phys. Rev. E*, **92** (2015) 053103
- [15] **P. B. Hansen, S. Schröder, S. Kubitza, K. Rammelkamp, D. S. Vogt, H.-W. Hübers.** *Spectrochim. Acta B*, **178** (2021) 106115
- [16] **J. Richter.** In: *Plasma Diagnostics*, Ch. 1, Ed. W. Lochte-Holtgreven, New-York, AIP Press (1995)
- [17] **H. R. Griem.** *Principles of Plasma Spectroscopy*, Cambridge University Press (1997)
- [18] **S. G. Johnson.** The NLOpt Nonlinear-Optimization Package [эл. ресурс], <http://ab-initio.mit.edu/nlopt>
- [19] **D. R. Jones, C. D. Perttunen, B. E. Stuckman.** *J. Optim. Theor. Appl.*, **79** (1993) 157—181
- [20] **W. L. Price.** *J. Optim. Theor. Appl.*, **40** (1983) 333—348
- [21] **P. Kaelo, M. M. Ali.** *J. Optim. Theor. Appl.*, **130** (2006) 253—264
- [22] **A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader.** NIST Atomic Spectra Database, ver. 5.10 [Online], <https://physics.nist.gov/asd> [2023, May 22]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2023), doi: 10.18434/T4W30F
- [23] **R. Fantoni, S. Almagia, L. Caneve, F. Colao, A. M. Popov, G. Maddaluno.** *Spectrochim. Acta B*, **87** (2013) 153—160