



รูปทรงเส้นไฮโดรเจนอัลฟาจากหลอดแกสไฮโดรเจน

3.1 ทฤษฎีของการแปลงฟูเรียร์

ในทางปฏิบัติที่เกี่ยวกับการวัดสเปกตรัม การแปลงฟูเรียร์ (Fourier transform) มีส่วนสำคัญในการวิเคราะห์และอธิบายข้อมูลที่ได้จากอุปกรณ์เป็นอย่างมาก ก่อนที่จะพิจารณาถึงรูปทรงเส้นที่ได้จากการวัด จึงขอกล่าวถึงทฤษฎีของการแปลงฟูเรียร์พอเป็นสังเขปดังต่อไปนี้

3.1.1 นิยาม การแปลงฟูเรียร์เป็นการแปลงฟังก์ชันในโดเมนหนึ่งให้เป็นฟังก์ชันในอีกโดเมนหนึ่ง โดยใช้ความสัมพันธ์ (Gray, 1976)

$$f(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) e^{2\pi i x \sigma} dx \quad (3.1)$$

เมื่อ $F(x)$ เป็นฟังก์ชันในโดเมน x ที่ถูกแปลงให้เป็นฟังก์ชัน $f(\sigma)$ ในโดเมน σ ซึ่งสามารถแปลงให้กลับไปอยู่ในโดเมน x ได้โดยใช้ความสัมพันธ์

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\sigma) e^{-2\pi i x \sigma} d\sigma \quad (3.2)$$

ตัวแปร x และ σ เรียกว่า คู่ฟูเรียร์ (Fourier pair) ในวิชาสเปกตรัมได้แก่ เวลาและความถี่ เช่น การวัดคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีขนาดเปลี่ยนแปลงตามเวลาออกมาเป็นสเปกตรัมที่มีความถี่ต่าง ๆ เป็นต้น สำหรับการวิเคราะห์ข้อมูลในงานวิจัยนี้ ใช้การแปลงฟูเรียร์ที่มีคู่ฟูเรียร์เป็นความยาว (space) และความถี่เชิงเส้น (spatial frequency)

3.1.2 การแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันที่สำคัญในวิชาสเปกตรัม เราไม่สามารถแปลงฟังก์ชันจากโดเมนหนึ่งไปอีกโดเมนหนึ่งได้ทุกฟังก์ชัน จะยกตัวอย่างการแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันที่ต้องใช้ในงานวิจัยดังต่อไปนี้

3.1.2.1 ฟังก์ชันรูปกล่อง ให้ $B(x)$ เป็นฟังก์ชันรูปกล่องที่มีความกว้าง W และความสูง 1 หน่วย

$$B(x) = \begin{cases} 0 & ; x > \frac{W}{2}, x < -\frac{W}{2} \\ 1 & ; -\frac{W}{2} \leq x \leq \frac{W}{2} \end{cases} \quad (3.3)$$

เมื่อแปลงฟูเรียร์จะได้

$$\begin{aligned} b(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} B(x) e^{2\pi i x \sigma} dx \\ &= \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} e^{2\pi i x \sigma} dx \\ &= \frac{W \sin \pi W \sigma}{\pi W \sigma} \end{aligned} \quad (3.4)$$

ตามรูปที่ 3.1 ก. ฟังก์ชัน $\frac{\sin \pi W \sigma}{\pi W \sigma}$ เรียกว่า ฟังก์ชันซิงค์ (sinc function)

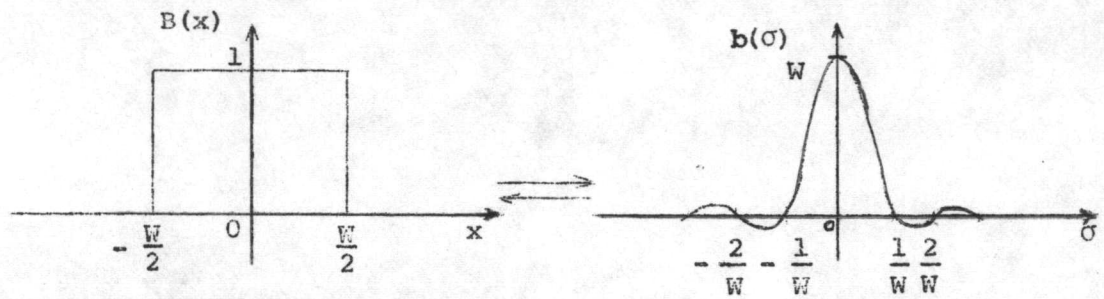
3.1.2.2 ฟังก์ชันเกาส์เซียน ให้ $G(x)$ เป็นฟังก์ชันเกาส์เซียนที่มีการกระจาย β

$$G(x) = \frac{1}{\beta \sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\beta^2}} \quad (3.5)$$

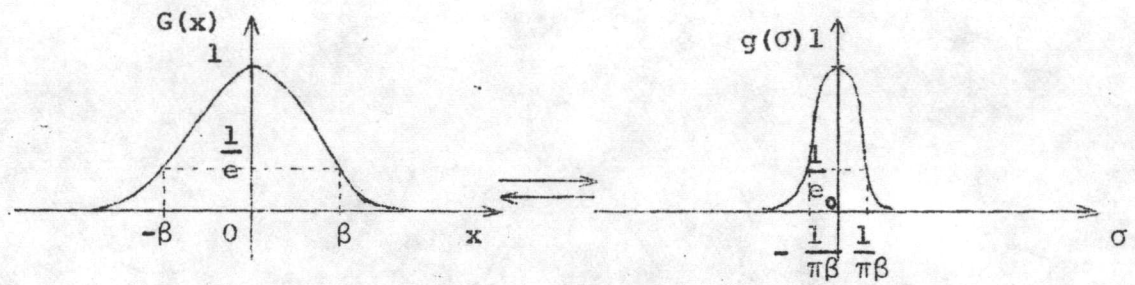
เมื่อแปลงฟูเรียร์จะได้

$$\begin{aligned} g(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\beta \sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\beta^2}} e^{2\pi i x \sigma} dx \\ &= e^{-\pi^2 \beta^2 \sigma^2} \end{aligned} \quad (3.6)$$

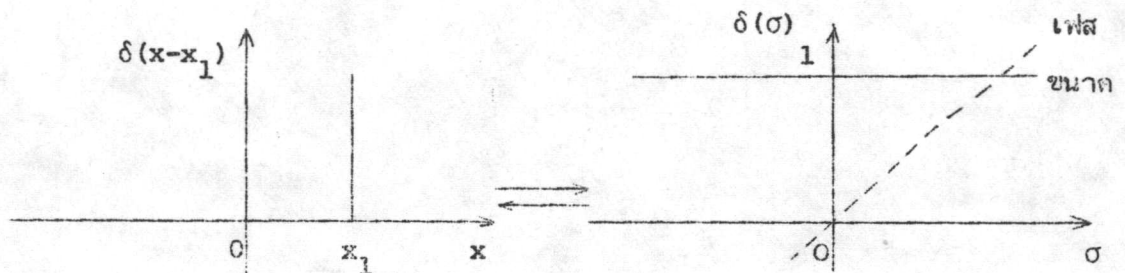
ตามรูปที่ 3.1 ข. ซึ่งก็คือฟังก์ชันเกาส์เซียนที่มีการกระจาย $\frac{1}{\pi \beta}$ นั้นเอง



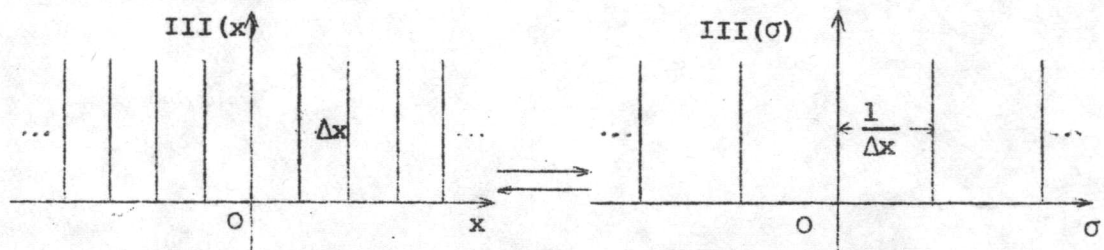
ก. การแปลงฟูเรียร์ฟังก์ชันรูปกล่องเป็นฟังก์ชันซิงค์



ข. การแปลงฟูเรียร์ฟังก์ชันเกาส์เซียนเป็นฟังก์ชันเกาส์เซียน



ค. การแปลงฟูเรียร์ฟังก์ชันเดลตา



ง. การแปลงฟูเรียร์ฟังก์ชันซาท์เป็นฟังก์ชันซาท์

รูปที่ 3.1 กราฟของฟังก์ชันที่ได้จากการแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันต่าง ๆ (Gray, 1976)

3.1.2.3 ฟังก์ชันเดลตา ให้ $\delta(x - x_1)$ เป็นฟังก์ชันเดลตาซึ่งมี

คุณสมบัติ

$$\delta(x - x_1) = 0 \text{ เมื่อ } x \neq x_1, \tag{3.7}$$

และ $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_1) dx = 1$ (3.8)

ซึ่งจะให้ $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_1) F(x) dx = F(x_1)$ (3.9)

เมื่อแปลงฟูเรียร์จะได้

$$\begin{aligned} \delta(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_1) e^{2\pi i x \sigma} dx \\ &= e^{2\pi i x_1 \sigma} \end{aligned}$$

$\int e^{2\pi i x_1 \sigma} d\sigma = \delta(x - x_1)$
(3.10)

ซึ่งมีขนาดคงที่ แต่เฟสเพิ่มขึ้นตามค่า σ ตามรูปที่ 3.1 ค

$\int e^{2\pi i x \sigma} d\sigma = \delta(x)$

พิจารณาการแปลงฟูเรียร์ของผลรวมของฟังก์ชันเดลตาที่มีระยะห่าง Δx จำนวนอนันต์

$$\therefore \text{III}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n\Delta x) \tag{3.11}$$

ซึ่งเรียกว่าฟังก์ชันชานท์ (Shah function) คือ

$$\begin{aligned} \therefore \text{III}(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n\Delta x) \right] e^{2\pi i x \sigma} dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\sigma - \frac{n}{\Delta x}\right) \end{aligned} \tag{3.12}$$

$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n \Delta x \sigma}$

เป็นฟังก์ชันชานท์เช่นเดิม แต่มีระยะห่าง $\frac{1}{\Delta x}$ ตามรูปที่ 3.1 ง

3.1.3 ประโยชน์ของการแปลงฟูเรียร์ในวิชาสเปกตรัม อุปกรณ์ทุกชนิดที่ใช้ในวิชาสเปกตรัมจะมีคุณสมบัติประจำตัวเกี่ยวกับกำลังของการแยก ดีเฟรกชันและความคลาด ซึ่งทำให้ผลการวัดสเปกตรัมรูปทรงหนึ่งแตกต่างไปจากของจริงไม่มากนักน้อย เราจะนิยามรูปทรงเส้นสเปกตรัมที่เกิดจากการนำอุปกรณ์ไปวัดเส้นสเปกตรัมจากแหล่งกำเนิดฟังก์ชันเดลตา ว่าเป็นรูปลักษณะของอุปกรณ์ (instrumental profile) $E(\lambda)$ ซึ่งจะต้องนำไปคำนวณหักออกจากรูปทรงที่ได้จากการวัดทุกครั้งที่ทำกรวัด เพื่อหารูปทรงเส้นที่แท้จริงออกมา

ในทางคณิตศาสตร์ การนำอุปกรณ์ไปวัดสเปกตรัม $F(\lambda)$ รูปทรงหนึ่งซึ่งเปรียบเสมือนผลรวมของฟังก์ชันเดลตา $\delta(\lambda - \lambda_0)$ ที่มีความสูง $F(\lambda_0)$ มากมาย

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\lambda - \lambda_0) F(\lambda_0) d\lambda_0 \quad (3.13)$$

ฟังก์ชันเดลตาเหล่านี้แต่ละชิ้นจะวัดออกมาได้เป็น $E(\lambda - \lambda_0)$ ซึ่งเลื่อนไปตามตำแหน่งของฟังก์ชันเดลตา ถ้ากำหนด

$$\int_{-\infty}^{\infty} E(\lambda) d\lambda = 1$$

ข้อมูลที่วัดได้ $D(\lambda)$ ก็จะสามารถเขียนได้เป็น

$$D(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\lambda - \lambda_0) E(\lambda - \lambda_0) F(\lambda_0) d\lambda_0 \quad (3.14)$$

เราเรียก $D(\lambda)$ ว่าเป็นคอนโวลูชัน (convolution) ของ $E(\lambda)$ กับ $F(\lambda)$ และเขียนแทนด้วย

$$D(\lambda) = E(\lambda) * F(\lambda) \quad (3.15)$$

การคำนวณหกรูปลักษณ์ของอุปกรณ์ออกจากข้อมูลที่วัดได้เพื่อหาสเปกตรัมที่แท้จริงจากสมการ (3.14) นั้น จะเห็นว่าทำได้ไม่ง่ายเลย เพราะสิ่งที่เราต้องการหาอยู่ในเครื่องหมายอินทิเกรต แต่จากการศึกษาคุณสมบัติของการแปลงฟูเรียร์จะพบว่า ถ้า $d(\sigma)$, $e(\sigma)$ และ $f(\sigma)$ เป็นฟังก์ชันที่เกิดจากการแปลงฟูเรียร์ของ $D(\lambda)$, $E(\lambda)$ และ $F(\lambda)$ ตามลำดับ เราสามารถเขียนความสัมพันธ์ (Gray, 1976)

$$d(\sigma) = e(\sigma) \cdot f(\sigma) \quad (3.16)$$

ซึ่งจะคำนวณหา $f(\sigma)$ ได้อย่างง่ายตายตัวด้วยการหารเท่านั้น และเมื่อแปลงฟูเรียร์ $f(\sigma)$ กลับก็จะได้ $F(\lambda)$ ที่ต้องการ ดังนั้นปัญหาหลักของการคำนวณหารูปทรงเส้นสเปกตรัมจากการวัดก็จะอยู่ที่การคำนวณการแปลงฟูเรียร์เท่านั้น

3.1.4 การคำนวณการแปลงฟูเรียร์ ในทางปฏิบัติเราจะวัดข้อมูลของฟังก์ชันต่อเนื่อง $D_0(\lambda)$ ออกมาได้เป็นค่า ๆ $D(\lambda)$ ที่มีระยะห่างกัน $\Delta\lambda$ ค่าหนึ่ง ซึ่งเปรียบเสมือนผลคูณของ $D_0(\lambda)$ กับฟังก์ชันซามพ์ที่มีระยะห่าง $\Delta\lambda$ นั้น

$$= \int D(\lambda) d\lambda = \int \text{III}(\lambda) D_0(\lambda) d\lambda \quad (3.17)$$

นอกจากนี้ เรายังทำการวัดได้เพียงภายในขอบเขตหนึ่งของค่าความยาวคลื่นเท่านั้นคือ

$$D(\lambda) = B(\lambda) \text{III}(\lambda) D_0(\lambda) \quad (3.18)$$

เมื่อ $B(\lambda)$ เป็นฟังก์ชันรูปกล่องที่มีความกว้างเท่ากับช่วงของความยาวคลื่นที่วัดได้

ดังนั้นการแปลงฟูเรียร์ของข้อมูลจะทำให้ได้

$$d(\sigma) = b(\sigma) * \text{III}(\sigma) * d_0(\sigma) \quad (3.19)$$

พิจารณากรณีที่ $B(\lambda)$ กว้างมากจนทำให้ $b(\sigma)$ เป็นการตล (impulse) ซึ่งจะได้ (Gray, 1976)

$$d(\sigma) = III(\sigma) * d_0(\sigma) \quad (3.20)$$

คอนโวลูชันของ $III(\sigma)$ กับ $d_0(\sigma)$ จะทำให้ได้ $d(\sigma)$ ที่ประกอบด้วย $d_0(\sigma)$ ซ้ำ ๆ กันตรงตำแหน่งที่ห่างกันเท่ากับระยะห่างของฟังก์ชันเดลตาใน $III(\sigma)$ คือ $\frac{1}{\Delta\lambda}$ ถ้า $d_0(\sigma)$ มีค่าลดลงจนเป็นศูนย์ที่ระยะ $\sigma < \frac{0.5}{\Delta\lambda}$ การเกิดซ้ำจะแยกจากกันโดยเด็ดขาด แต่ถ้า $d_0(\sigma)$ ลดลงเป็นศูนย์ที่ระยะไกลกว่านั้นจะมีการเหลื่อม (overlap) ของ $d_0(\sigma)$ คู่ที่ติดกันเกิดขึ้น เรียกว่า การเปลี่ยนแปลง (aliasing) ทำให้ได้ $d(\sigma)$ ที่ไม่อาจทราบ $d_0(\sigma)$ ที่แน่นอนได้ วิธีแก้ก็คือ ทำการวัดข้อมูลให้มีระยะห่างน้อยลงจน $d_0(\sigma)$ ที่เกิดซ้ำกันนั้นแยกห่างจากกันได้ตำแหน่งที่ $\sigma_N = \frac{0.5}{\Delta\lambda}$ นี้เรียกว่า ความถี่ตัดขาดหรือความถี่ไนควิสต์ (cut-off หรือ Nyquist frequency)

เราจะสามารถใช้ข้อมูล $D(\lambda)$ ในการคำนวณแทน $D_0(\lambda)$ ได้อย่างถูกต้องถ้าข้อมูลนั้นถี่พอและอยู่ในช่วงความยาวคลื่นที่กว้างพอ การคำนวณการแปลงฟูเรียร์ของข้อมูลชุดหนึ่ง ที่วัดได้ N จุดคือ

$$D(\lambda) \equiv D(j\Delta\lambda) \equiv D(j); \quad j = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (3.21)$$

จะใช้ผลบวกแทนฟูเรียร์อินทิกรัล

$$\begin{aligned} d(\sigma) &= \sum_{-\infty}^{\infty} D(\lambda) e^{2\pi i \lambda \sigma} \Delta\lambda \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} D(j) e^{2\pi i (j\Delta\lambda)\sigma} \Delta\lambda \end{aligned} \quad (3.22)$$

ให้ $\sigma = k\Delta\sigma$ เมื่อ $\Delta\sigma$ เป็นระยะห่างระหว่างค่า $d(\sigma)$ และ k เป็นเลขจำนวนเต็ม

$$d(k) = \sum_{j=0}^{N-1} D(j) e^{2\pi i j k \Delta\lambda \Delta\sigma} \Delta\lambda \quad (3.23)$$

เราต้องการ $d(k)$ N จุดในช่วง $(-\sigma_N, +\sigma_N)$ เท่านั้น เพราะนอกเหนือจากช่วงนี้จะเป็นค่าซ้ำ ดังนั้นระยะห่างของ $d(k)$ จะเป็น

$$\Delta\sigma = \frac{2\sigma_N}{N} = \frac{2}{N} \frac{1}{2\Delta\lambda} = \frac{1}{N\Delta\lambda} \quad (3.24)$$

หรือจะได้
$$\Delta\sigma\Delta\lambda = \frac{1}{N} \quad (3.25)$$

ซึ่งทำให้ได้
$$d(k) = \sum_{j=0}^{N-1} D(j) e^{2\pi ijk/N} \Delta\lambda$$

$$= \Delta\lambda \sum_{j=0}^{N-1} D(j) e^{2\pi ijk/N} \quad (3.26)$$

เป็นรูปที่ใช้ในการคำนวณการแปลงฟูเรียร์ของข้อมูลทีทราบเป็นค่า ๆ (Discrete Fourier Transform หรือ DFT) โดยแปลงกลับได้เป็น

$$D(j) = \sum_{k=0}^{N-1} d(k) e^{-2\pi ijk/N} \Delta\sigma$$

$$= \frac{1}{\Delta\lambda N} \sum_{k=0}^{N-1} d(k) e^{-2\pi ijk/N} \quad (3.27)$$

3.1.5 การคำนวณการแปลงฟูเรียร์แบบเร็ว (Fast Fourier Transform

หรือ FFT) การคำนวณการแปลงฟูเรียร์โดยตรงจากสมการ (3.26) สำหรับข้อมูลชุดหนึ่งซึ่งมีอยู่ N ค่า เราต้องคำนวณผลบวก N เทอมของผลคูณเป็นจำนวนถึง N ครั้ง นั่นคือเราต้องทำการคูณถึง N^2 ครั้ง ถ้า N มีจำนวนมากการคำนวณก็จะสิ้นเปลืองเวลามาก ในปี 1964 คูเลย์ (Cooley) และทูคี (Tukey) ได้คิดเทคนิคที่จะทำให้การคำนวณการแปลงฟูเรียร์ได้รวดเร็วขึ้น โดยใช้คุณสมบัติของการเป็นคาบของฟังก์ชัน เอกซ์โพเนนเชียลของเลขเชิงซ้อนมาช่วยลดจำนวนการคูณให้น้อยลงโดยตัดการคำนวณที่ซ้ำกันออกไป หลักการก็มีอยู่ว่า ถ้าเราแบ่งการแปลงฟูเรียร์ N จุดออกเป็น $\frac{N}{2}$ จุด 2 ครั้ง จะสามารถลดการคูณลงเหลือ $2\left(\frac{N}{2}\right)^2 = \frac{N^2}{2}$ ครั้ง ดังนั้น ถ้าเรายังไม่คำนวณการแปลง

$\frac{N}{2}$ จุด แต่แบ่งการแปลงแต่ละครั้งออกไปอีก เป็นการแปลง $\frac{N}{4}$ จุด 4 ครั้ง และแบ่งต่อไปเรื่อย ๆ ในที่สุดจะเหลือเพียงการแปลง 1 จุด N ครั้ง ซึ่งต้องการคำนวณเพียง $N \log_2 N$ ครั้งเท่านั้น (Higgins, 1976)

พิจารณาริธีการทางคณิตศาสตร์ของการแบ่งการแปลง N จุด ออกเป็นการแปลง $\frac{N}{2}$ จุด 2 ครั้ง

$$\text{จาก } d(k) = \Delta\lambda \sum_{j=0}^{N-1} D(j) e^{2\pi ijk/N} \quad (3.28)$$

เราแบ่งข้อมูล $D(j)$ ออกเป็นเทอมคู่และเทอมคี่โดยให้

$$y_j = D(2j) \quad (3.29)$$

$$\text{และ } z_j = D(2j+1); \quad j = 0, 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1 \quad (3.30)$$

เพื่อความสะดวกเรานิยมให้ $\Delta\lambda = 1$ ดังนั้น

$$\begin{aligned} d(k) &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \left[y_j e^{4\pi ijk/N} + z_j e^{2\pi i(2j+1)k/N} \right] \\ &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} y_j e^{4\pi ijk/N} + e^{2\pi ik/N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} z_j e^{4\pi ijk/N}; \\ & \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\text{ให้ } d(k) = B_k + W_k C_k; \quad 0 \leq k < \frac{N}{2} \quad (3.32)$$

$$\text{เมื่อ } B_k = \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} y_j e^{4\pi ijk/N}$$

$$C_k = \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} z_j e^{4\pi ijk/N}$$

และ $W_k = e^{2\pi ik/N}$

จะเห็นว่า B_k และ C_k มีลักษณะเป็นคาบในครึ่งช่วง นั่นคือ

$$d(k + \frac{N}{2}) = B_k - W_k C_k \quad ; \quad 0 \leq k < \frac{N}{2} \quad (3.33)$$

ดังนั้น การหา $d(k)$ ในครึ่งช่วงหลังจะสามารถใช้ B_k และ C_k ค่าเดิมได้โดยไม่ต้องคำนวณใหม่

จาก B_k และ C_k ซึ่งเป็นการแปลง $\frac{N}{2}$ จุด เราสามารถแบ่งข้อมูล y_j และ z_j ออกเป็นเทอมคู่และเทอมคี่ในทำนองเดียวกัน จะได้

$$B_k = B'_k + W_{k1} C'_k \quad (3.34)$$

และ $C_k = B''_k + W_{k1} C''_k \quad ; \quad 0 \leq k < \frac{N}{4} \quad (3.35)$

เมื่อ $B'_k = \sum_{j=0}^{\frac{N}{4}-1} y'_j e^{8\pi ijk/N} \quad ; \quad y'_j = y_{2j}$

$$C'_k = \sum_{j=0}^{\frac{N}{4}-1} z'_j e^{8\pi ijk/N} \quad ; \quad z'_j = y_{2j+1}$$

$$B''_k = \sum_{j=0}^{\frac{N}{4}-1} y''_j e^{8\pi ijk/N} \quad ; \quad y''_j = z_{2j}$$

$$C''_k = \sum_{j=0}^{\frac{N}{4}-1} z''_j e^{8\pi ijk/N} \quad ; \quad z''_j = z_{2j+1}$$

และ $w_{kl} = e^{4\pi i k/N}$

ทั้ง B'_k , C'_k , B''_k และ C''_k ต่างก็มีลักษณะเป็นคาบในครึ่งช่วงเช่นเดียวกัน เราสามารถหา B_k และ C_k ในครึ่งช่วงหลังได้จาก

$$B_k + \frac{N}{4} = B'_k - w_{kl} C'_k \quad (3.36)$$

$$\text{และ } C_k + \frac{N}{4} = B''_k - w_{kl} C''_k \quad ; \quad 0 \leq k < \frac{N}{4} \quad (3.37)$$

การหา $d(k)$ โดยแบ่งออกเป็นกรการแปลง $\frac{N}{4}$ จุด 4 ครั้ง เราก้เพียงแต่หา $d(k)$ ใน $\frac{1}{4}$ ช่วงแรกจาก

$$d(k) = (B'_k + w_{kl} C'_k) + w_k (B''_k + w_{kl} C''_k) \quad ; \quad 0 \leq k < \frac{N}{4} \quad (3.38)$$

ส่วนที่เหลือจะหาจากความสัมพันธ์ (3.33), (3.34) และ (3.35) คือ

$$d(k + \frac{N}{4}) = (B'_k - w_{kl} C'_k) + w_k (B''_k - w_{kl} C''_k) \quad (3.39)$$

$$d(k + \frac{N}{2}) = (B'_k + w_{kl} C'_k) - w_k (B''_k + w_{kl} C''_k) \quad (3.40)$$

$$\text{และ } d(k + \frac{3N}{4}) = (B'_k - w_{kl} C'_k) - w_k (B''_k - w_{kl} C''_k); \quad 0 \leq k < \frac{N}{4} \quad (3.41)$$

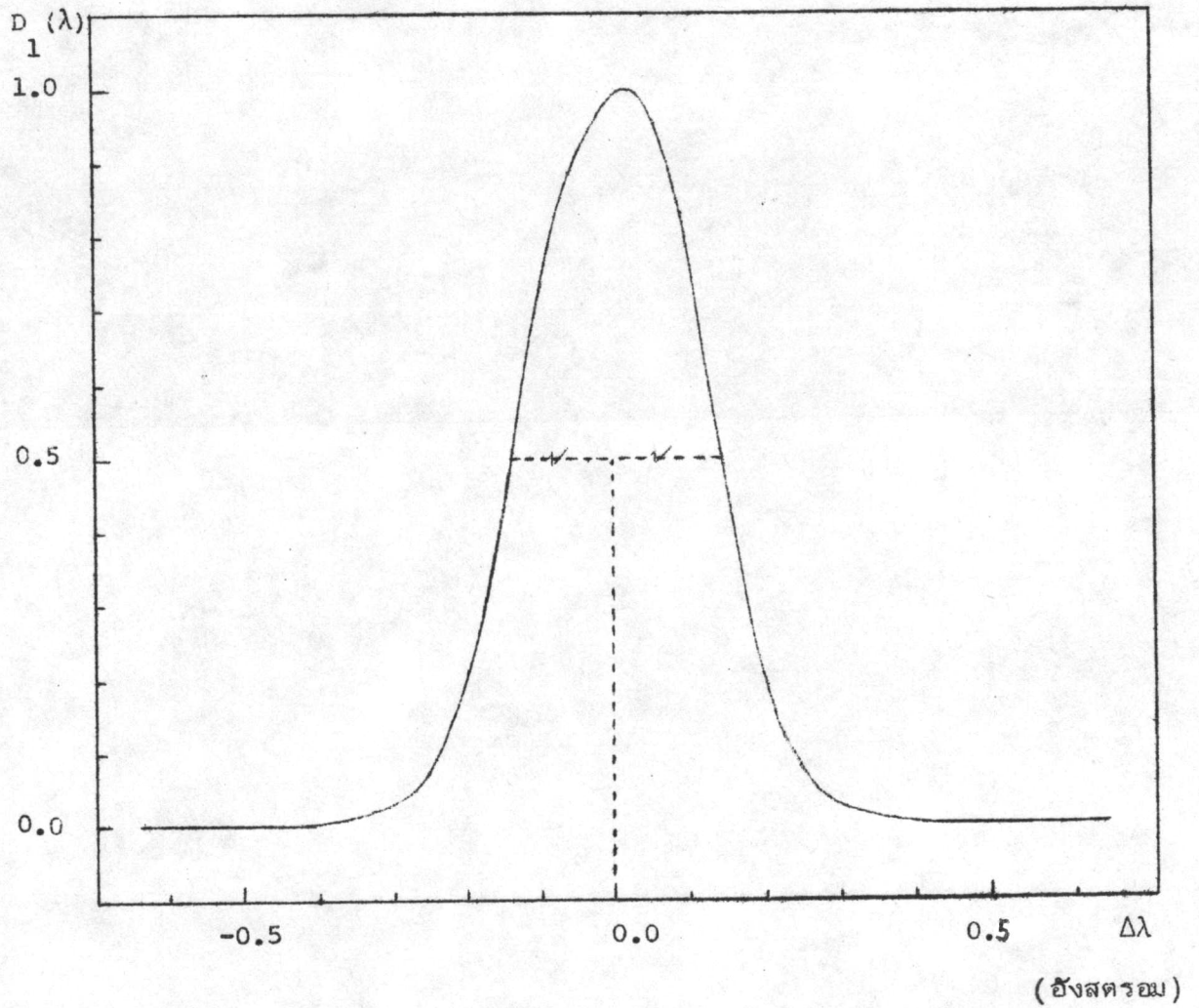
ดังนั้น ถ้าเราแบ่ง B'_k , C'_k , B''_k และ C''_k ออกไปอีก และแบ่งต่อไปเรื่อย ๆ ในทำนองเดียวกันนี้ ในที่สุดเราจะหาเพียง $d(k)$ ที่ $k = 0$ ตัวเดียว ส่วนที่เหลือจะคำนวณได้โดยเปลี่ยนเครื่องหมายเทอมบางเทอมที่ใช้คำนวณ $d(k)$ ตัวแรกเท่านั้นเอง

เบรนเนอร์ (Brenner) ได้นำหลักการนี้มาเขียนเป็นโปรแกรมย่อยภาษาฟอร์แทรน สำหรับคำนวณการแปลงฟูเรียร์แบบเร็วในเครื่องคอมพิวเตอร์ (ดูภาคผนวก ก.) โดยข้อมูลที่นำเข้าต้องเรียงเป็นเลขเชิงซ้อน 1 มิติ และจำนวนข้อมูลต้องเป็น 2^n โดย n เป็นเลขจำนวนเต็มใด ๆ เมื่อคำนวณเสร็จ ค่าที่แปลงได้จะกลับออกมาแทนที่ข้อมูลที่นำเข้าไปนั่นเอง การแปลงฟูเรียร์ในงานวิจัยจะใช้โปรแกรมนี้ในการคำนวณ

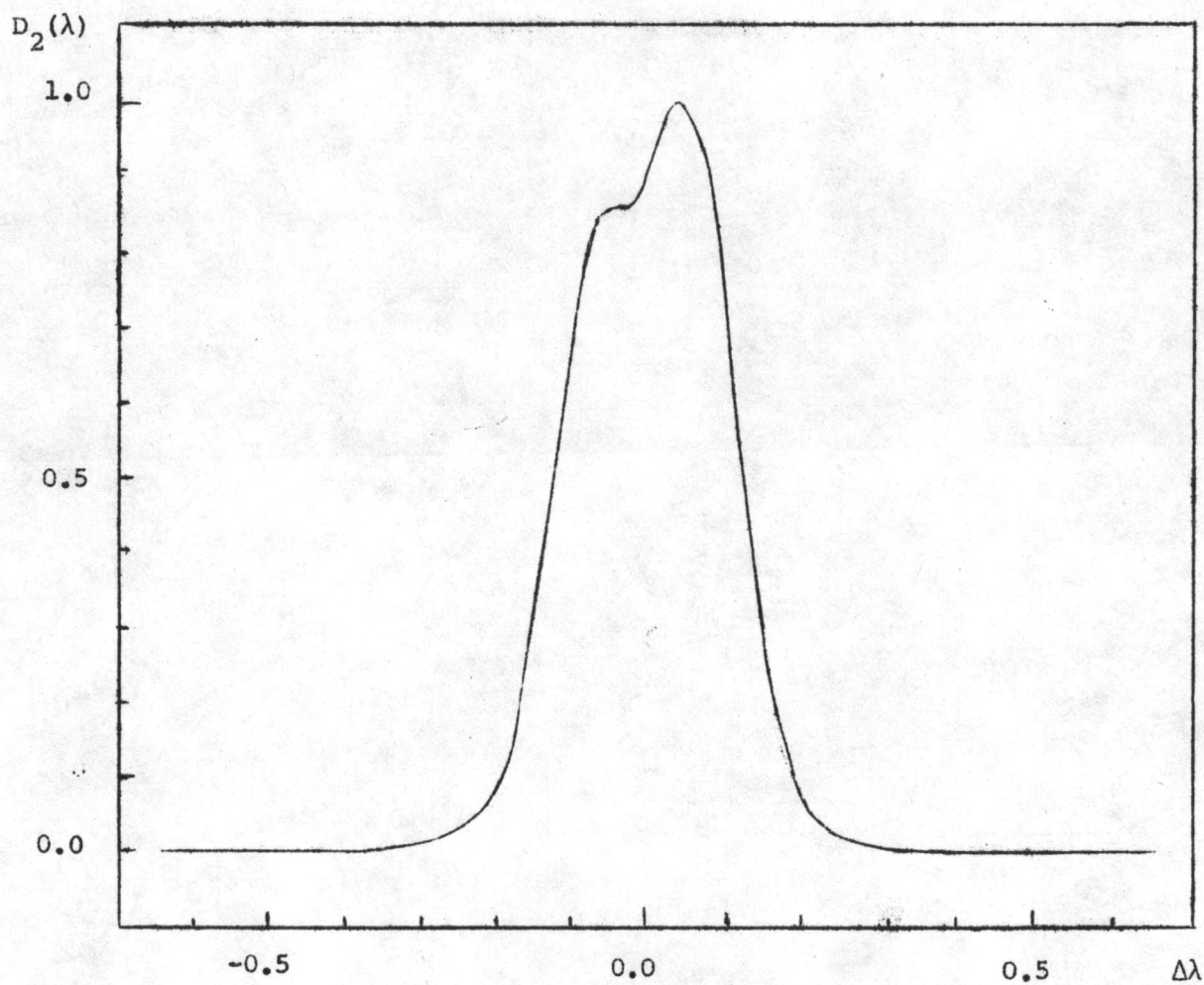
3.2 รูปทรงเส้นไฮโดรเจนอัลฟาจากการวัด

ในการสังเกตรูปทรงเส้นสเปกตรัม เมื่อเราวัดข้อมูลของรูปทรงเส้นได้แล้ว ยังต้องทำการหารูปลักษณะของอุปกรณ์ที่ใช้วัดข้อมูลให้ได้ด้วย จากนั้นจึงใช้การแปลงฟูเรียร์มาช่วยในการคำนวณหารูปลักษณะของอุปกรณ์ออกจากข้อมูลที่วัดได้เพื่อหารูปทรงเส้นที่แท้จริงออกมา

3.2.1 รูปทรงเส้นจากข้อมูลดิบ ข้อมูลดิบที่นำมาวัดรูปทรงเส้นไฮโดรเจนอัลฟาเป็นข้อมูลที่ได้จากการวัดสเปกตรัมของหลอดแกสไฮโดรเจนความดันต่ำโดย ดร.ประพนธ์ ไชวเจริญสุข ซึ่งวัด ณ ห้องปฏิบัติการภาควิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยเพนซิลเวเนียสเตต ข้อมูลถูกบันทึกลงบนกระดาษกราฟมีลักษณะเป็นรูปทรงเส้นสว่างที่แจกแจงความเข้มตามแนวแกน Y และความยาวคลื่นต่าง ๆ ตามแนวแกน X การวัดค่าความเข้มได้กำหนดให้ค่าความเข้มต่ำสุดของรูปทรงหนึ่งเป็นค่าความเข้มสูงของรูปทรงนั้น และให้จุดกลางของรูปทรงเส้น (line center) อยู่ตรงจุดแบ่งครึ่งของช่วงความยาวคลื่นที่มีค่าความเข้ม เป็นครึ่งหนึ่งของความเข้มสูงสุด ดังรูปที่ 3.2 ก. การวัดความเข้มเริ่มวัดจากจุดกลางนี้ออกไปทั้งสองข้างให้มีระยะห่าง 0.020 อังสตรอมเท่า ๆ กัน ไปจนถึงค่าความยาวคลื่น ± 0.640 อังสตรอมจากจุดกลาง ซึ่งความเข้มได้ลดลงจนเป็นศูนย์แล้ว จะได้ข้อมูลของรูปทรงเส้นเป็นจำนวน 65 จุด ได้ทำการวัดข้อมูลด้วยวิธีเดียวกันนี้จากรูปทรงเส้นไฮโดรเจนอัลฟาที่เกิดจากการปรับค่าความต่างศักย์ที่ผ่านหลอด 2 ค่า เป็นจำนวนทั้งหมด 10 รูป คือ ที่ความต่างศักย์ประมาณ 2500 โวลต์ 4 รูป และ 700 โวลต์ 6 รูป แล้วปรับค่าความเข้มสูงสุดของแต่ละรูปให้เป็น 1 นำค่าความเข้มที่ความยาวคลื่นต่าง ๆ ที่แต่ละความต่างศักย์มาเฉลี่ยได้รูปทรงดังรูปที่ 3.2 ก. และ ข. ตามลำดับ



รูปที่ 3.2 ก. รูปทรงเส้นของข้อมูลดิบที่ความต่างศักย์ประมาณ 2500 โวลต์



(สังเคราะห์)

รูปที่ 3.2 ข. รูปทรงเส้นของข้อมูลดิบที่ความต่างศักย์ประมาณ 700 โวลต์

เนื่องจากช่วงข้อมูลที่เรารวได้ยังไม่ถี่พอ และเราไม่สามารถวัดให้ถี่กว่านี้ได้ จึงนำข้อมูลของรูปทรงเส้นเจ็ลลี่ทั้งสองรูปมาอินเทอร์โพลेट (interpolate) โดยใช้โปรแกรมในเครื่องคำนวณเลขพี -97 หาข้อมูลออกมาเป็นจำนวน 256 จุดที่มีความยาวคลื่นห่างกัน 0.005 อังสตรอม ซึ่งเมื่อเรียงลำดับค่าตามความยาวคลื่นตั้งแต่ -0.640 อังสตรอม เป็นต้นไป ก็จะได้ข้อมูลที่พร้อมสำหรับนำไปคำนวณหกรูปลักษณะของอุปกรณเพื่อหารูปทรงเส้นที่แท้จริงต่อไป

3.2.2 รูปลักษณะของอุปกรณ เนื่องจากเราไม่มีแหล่งกำเนิดแสงสีเดียวที่แท้จริงที่มีสเปกตรัมเป็นฟังก์ชันเดลตาสำหรับให้อุปกรณ์วัดออกมาเป็นรูปลักษณะของอุปกรณได้ จึงจำเป็นต้องนำเส้นสเปกตรัมที่แคบที่สุดของปรอทที่วัดด้วยอุปกรณที่ใช้วัดข้อมูลซึ่งมีความแคบมากมาใช้แทน โดยสมมติว่ารูปลักษณะของอุปกรณไม่ขึ้นกับค่าความยาวคลื่น เราทำการวัดความเข้มของรูปทรงเส้นปรอทนี้ด้วยวิธีเดียวกับที่วัดข้อมูล แต่วัดที่ระยะห่างกัน 0.002 อังสตรอมในช่วงความยาวคลื่น ± 0.030 อังสตรอมจากจุดกลาง ได้รูปทรงเส้นที่ปรับความเข้มสูงสุดเป็น 1 ดังรูปที่ 3.3 เนื่องจากมีสเปกตรัมเส้นอื่นมารบกวนส่วนฐานของรูปทรงเส้น จึงตัดรูปทรงเส้นไว้เพียงเท่าที่แสดงในรูป

จากการสังเกตลักษณะของรูปทรงเส้น พบว่ามีความคล้ายคลึงกับฟังก์ชันเกาส์เซียน เมื่อทดลองหาฟังก์ชันเกาส์เซียนที่มีการกระจายค่าต่าง ๆ เปรียบเทียบดู ปรากฏว่าได้ฟังก์ชัน

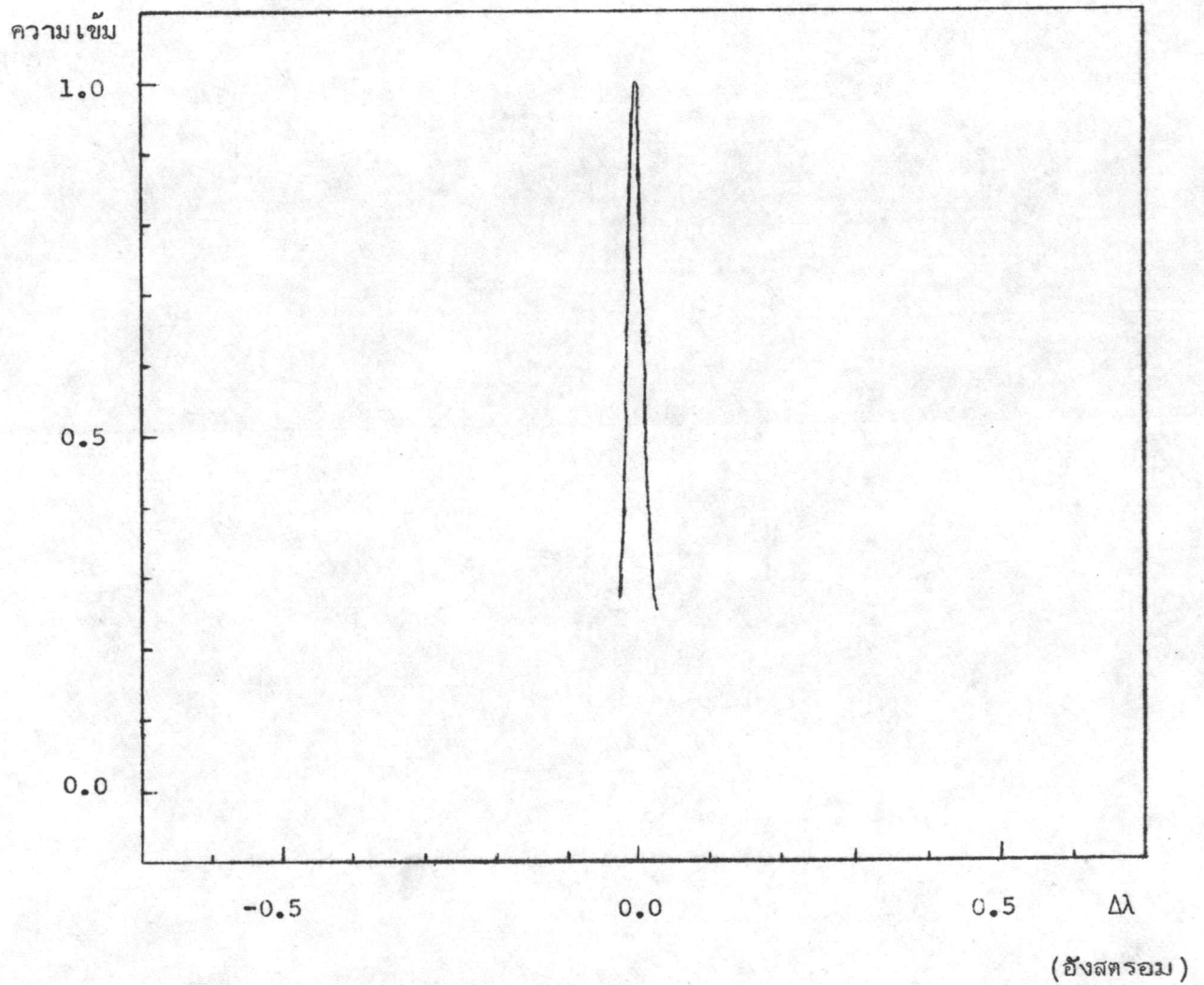
$$E(\lambda) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{0.013}\right)^2} \quad (3.42)$$

เมื่อ λ เป็นค่าความยาวคลื่นที่วัดจากจุดกลางเส้นหน่วยเป็นอังสตรอม

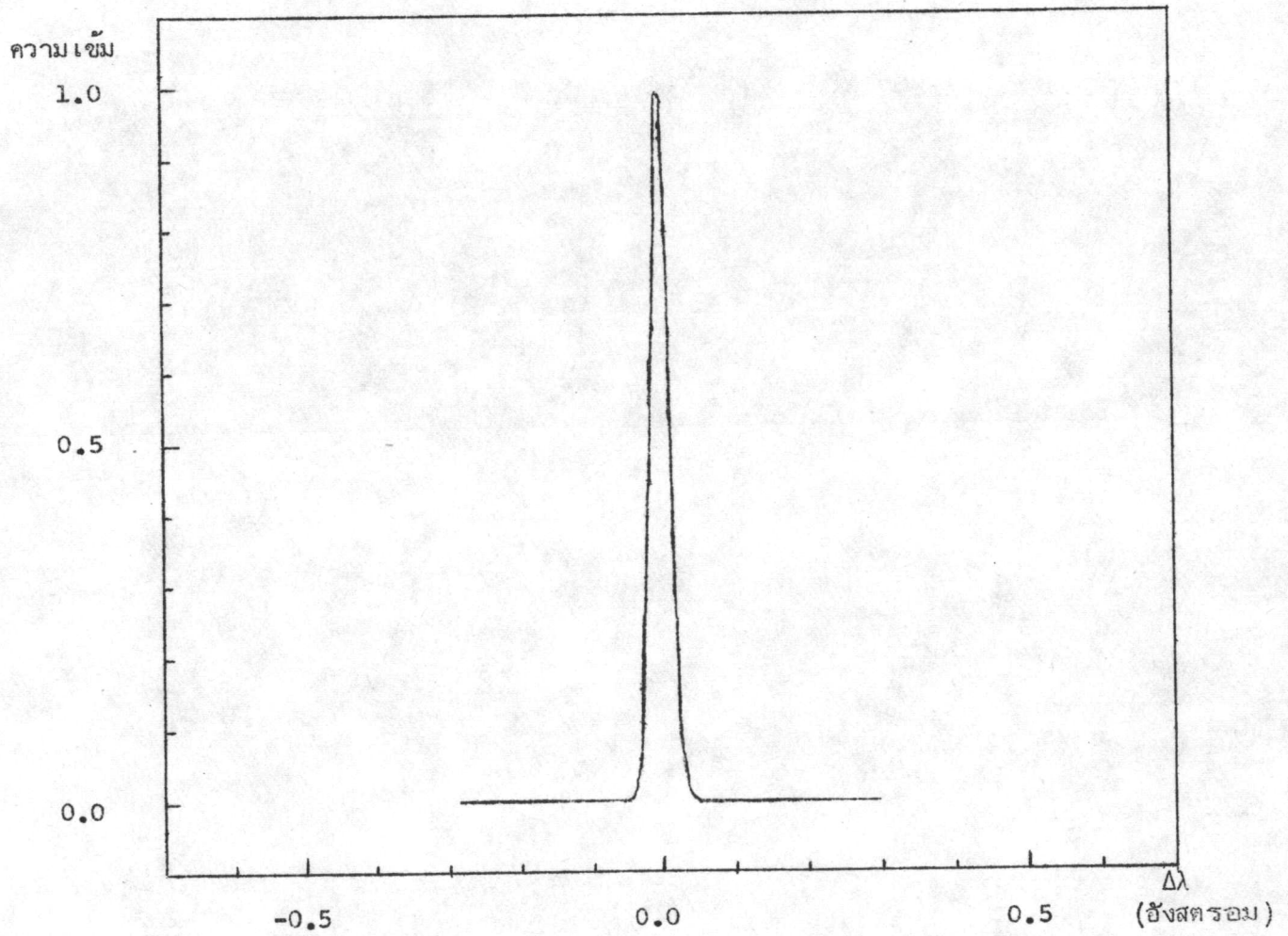
ซึ่งมีความเข้มสูงสุดเป็น 1 ตรงจุดกลางเส้น ตามรูปที่ 3.4 มีลักษณะใกล้เคียงที่สุด จึงใช้ฟังก์ชันเกาส์เซียนนี้แทนรูปลักษณะของอุปกรณ โดยจะคำนวณจาก

$$E(\lambda) = E(n\Delta\lambda) = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{-0.640+0.005n}{0.013}\right)^2\right], \quad n = 0, 1, 2, \dots, 255 \quad (3.43)$$

ในเครื่องคอมพิวเตอร์ เพื่อให้รูปลักษณะของอุปกรณมีค่าเรียงลำดับตามความยาวคลื่น เช่นเดียวกับข้อมูล



รูปที่ 3.3 รูปทรงเส้นปรอทที่ใช้แทนรูปลักษณะของอุปกรณ์



รูปที่ 3.4 กราฟของฟังก์ชัน เกาส์เซียนที่ใกล้เคียงกับรูปทรงเส้นปรอหมากที่สุด

3.2.3 รูปทรงเส้นจากการวัด | เมื่อได้ข้อมูลและรูปลักษณะของอุปกรณ์แล้ว เราก็ำเข้าไปแปลงฟูเรียร์ในเครื่องคอมพิวเตอร์เพื่อคำนวณหารูปทรงที่แท้จริง (รายละเอียดของโปรแกรมอยู่ในภาคผนวก ก.) ในการแปลงฟูเรียร์นั้น ถึงแม้ว่าข้อมูลของเราจะเป็นค่าจริงทั้งหมด แต่เมื่อแปลงแล้วจะได้เลขเชิงซ้อนเสมอ ดังนั้นค่าที่แปลงได้จะต้องเขียนเป็น

$$d(\sigma) = d_R(\sigma) + id_I(\sigma) \quad (3.44)$$

$$e(\sigma) = e_R(\sigma) + ie_I(\sigma) \quad (3.45)$$

และ $f(\sigma) = f_R(\sigma) + if_I(\sigma) \quad (3.46)$

เมื่อ $f_R(\sigma) = \frac{d_R(\sigma)e_R(\sigma) + d_I(\sigma)e_I(\sigma)}{e_R^2(\sigma) + e_I^2(\sigma)}$

และ $f_I(\sigma) = \frac{d_I(\sigma)e_R(\sigma) - d_R(\sigma)e_I(\sigma)}{e_R^2(\sigma) + e_I^2(\sigma)}$

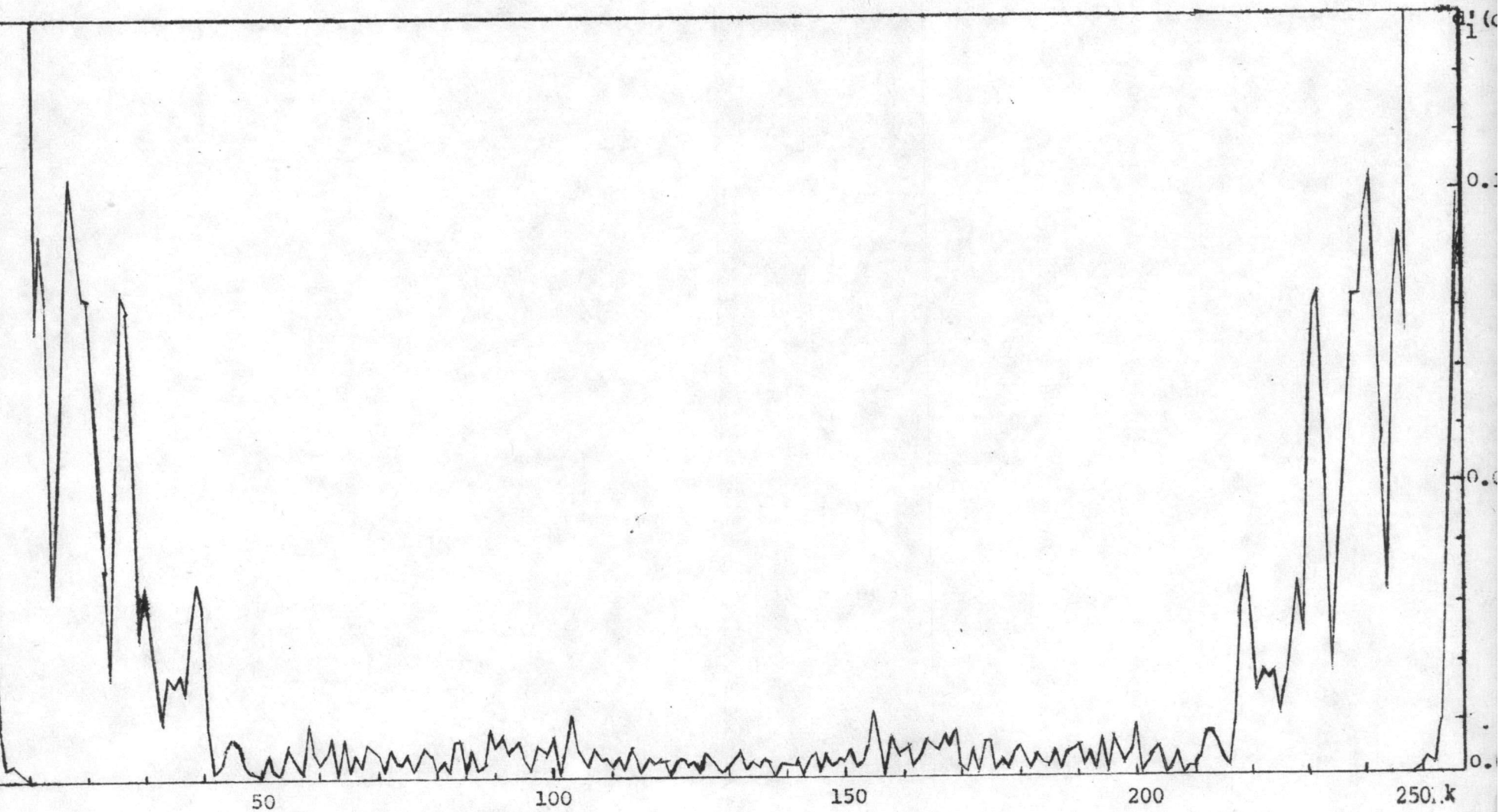
สำหรับข้อมูลและรูปลักษณะของอุปกรณ์ เมื่อแปลงฟูเรียร์เป็น $d(\sigma)$ และ $e(\sigma)$ แล้วคิดเฉพาะขนาด จะได้รูปที่ 3.5 ก, ข และ 3.6 ตามลำดับ จะมีสัญญาณรบกวนที่เกิดจากการบิดเศษในเครื่องคอมพิวเตอร์เล็กน้อยรวมอยู่กับ $d(\sigma)$ และ $e(\sigma)$ แต่ใน $d(\sigma)$ ยังมีสัญญาณรบกวนจากการวัดสเปกตรัมซึ่งมีค่ามากกว่ารวมอยู่ด้วย ข้อมูลที่แปลงได้ต้องเขียนเป็น

$$d'(\sigma) = d(\sigma) + n(\sigma) \quad (3.47)$$

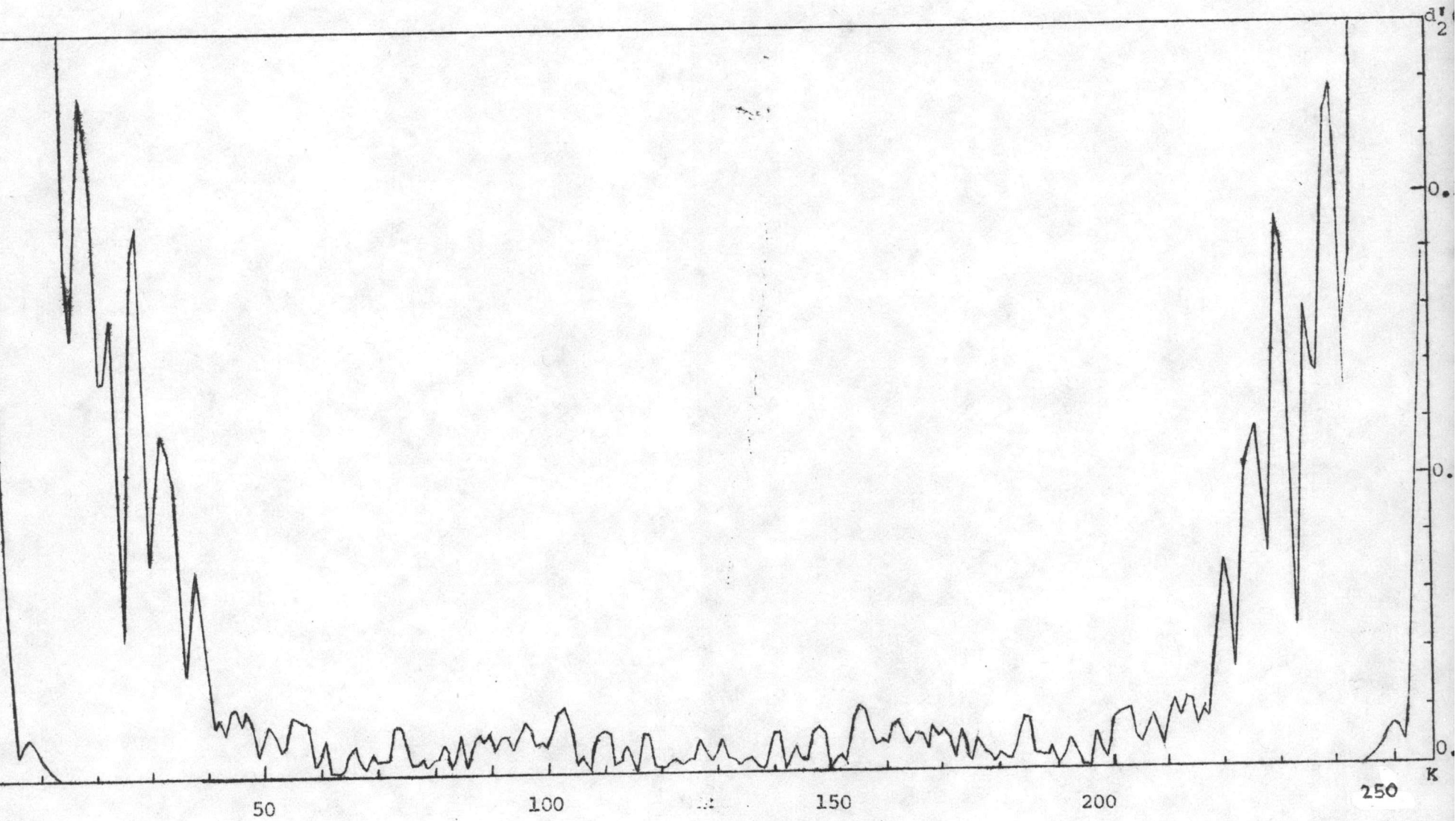
เมื่อ $n(\sigma)$ เป็นสัญญาณรบกวน

เมื่อเอา $e(\sigma)$ ไปหารจะได้

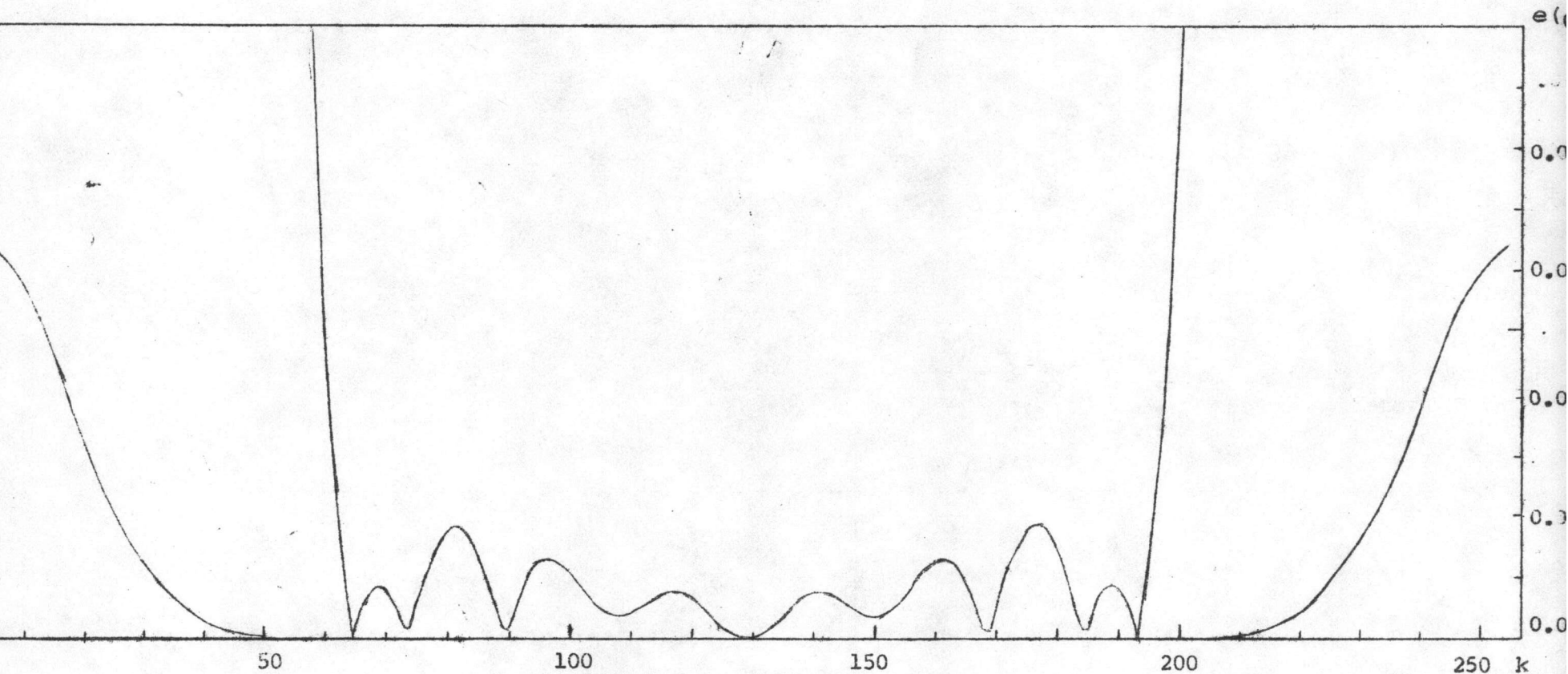
$$f'(\sigma) = \frac{d(\sigma)}{e(\sigma)} + \frac{n(\sigma)}{e(\sigma)} \quad (3.48)$$



3.5 ก. รูปทรงเส้นที่ได้จากการแปลงฟูเรียร์ข้อมูลดิบที่ความต่างศักย์ประมาณ 2500 โวลต์ รูปที่ $k < 10^4$ และ $k > 247$ ใช้มาตราส่วนทางซ้าย
 นอกนั้นใช้มาตราส่วนทางขวา



3.5 ข. รูปทรงเส้นที่ได้จากการแปลงฟูเรียร์ข้อมูลดิบที่ความต่างศักย์ประมาณ 700 โวลต์ รูปที่ $k < 16$ และ $k > 244$ ใช้มาหาส่วนทางซ้าย นอกนั้นใช้มาหาส่วนทางขวา



3.6 รูปทรงเส้นที่ได้จากการแปลงฟูเรียร์รูปลักษณะของอุปกรณ์ รูปที่ $k < 55$ และ $k > 202$ ใช้มาตราส่วนทางซ้าย นอกนั้นใช้มาตราส่วนทางขวา

ที่มีสัญญาณรบกวนรวมอยู่ด้วย โดยเฉพาะที่ σ ค่าสูง ๆ $e(\sigma)$ มีค่าต่ำกว่า $n(\sigma)$ สัญญาณรบกวนจะถูกขยายขึ้นมาก รูปทรงเส้นที่ได้จากการแปลงฟูเรียร์ $f'(\sigma)$ กลับทันทีจึงไม่ถูกต้อง เราต้องกำจัดสัญญาณรบกวนนี้ออกไปเสียก่อน วิธีกำจัดสัญญาณรบกวนเราทำได้โดยหาตัวกรอง (filter) $\phi(\sigma)$ ที่เหมาะสมมาคูณเพื่อให้ $f''(\sigma) = \frac{d'(\sigma)}{e(\sigma)} \phi(\sigma)$ มีค่าที่แตกต่างจาก $\frac{d(\sigma)}{e(\sigma)}$ น้อยที่สุด นั่นคือถ้าให้

$$\varepsilon = \frac{d(\sigma)}{e(\sigma)} - \frac{d'(\sigma)}{e(\sigma)} \phi(\sigma)$$

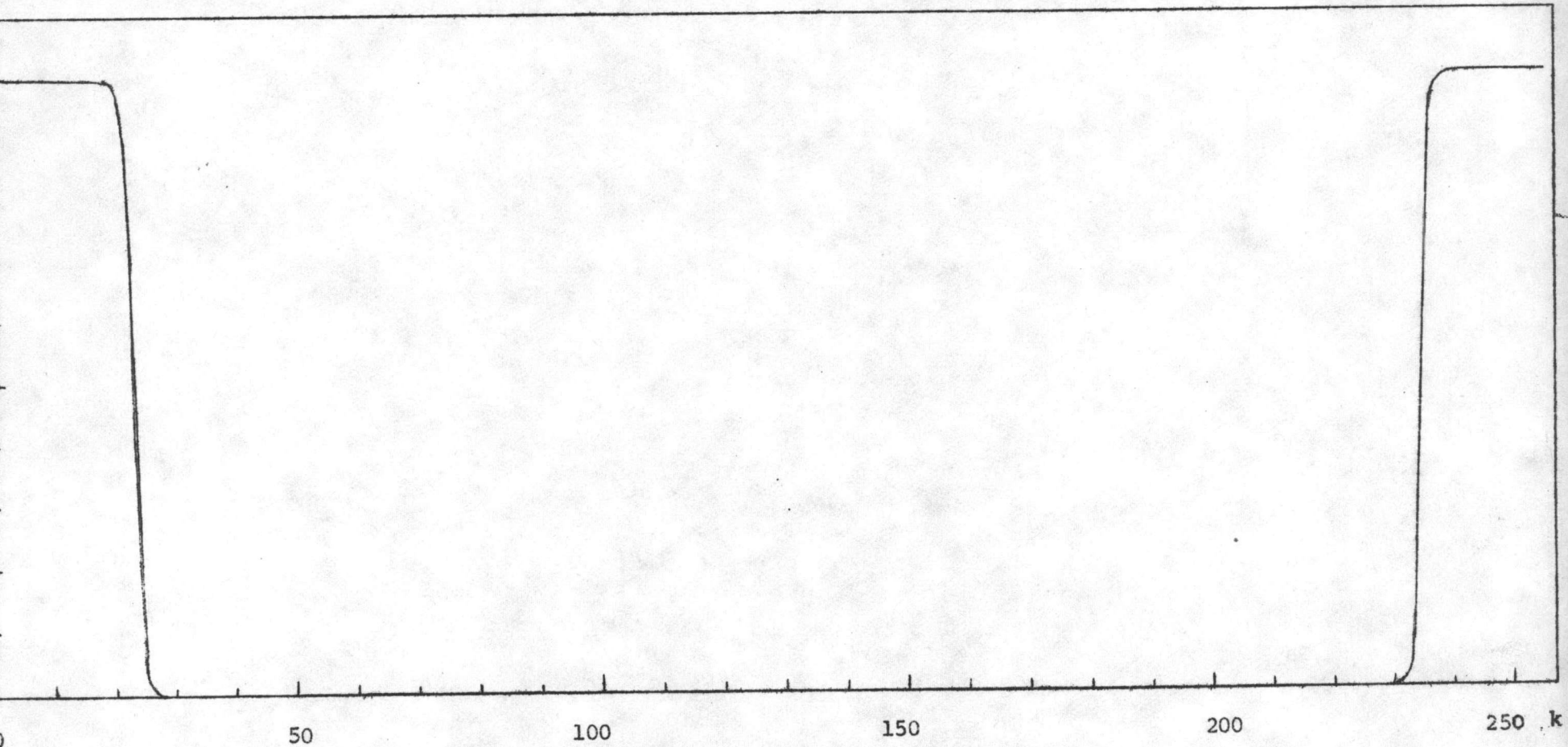
เราต้องหา $\phi(\sigma)$ ที่ทำให้ $\int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^2 d\sigma$ มีค่าต่ำสุด ซึ่งพบว่ามีความสัมพันธ์กับสัญญาณรบกวนและข้อมูลที่วัดได้ดังนี้ (Brault and White, 1971)

$$\phi(\sigma) = \frac{1}{1 + \left[\frac{n(\sigma)}{d(\sigma)} \right]^2} \quad (3.49)$$

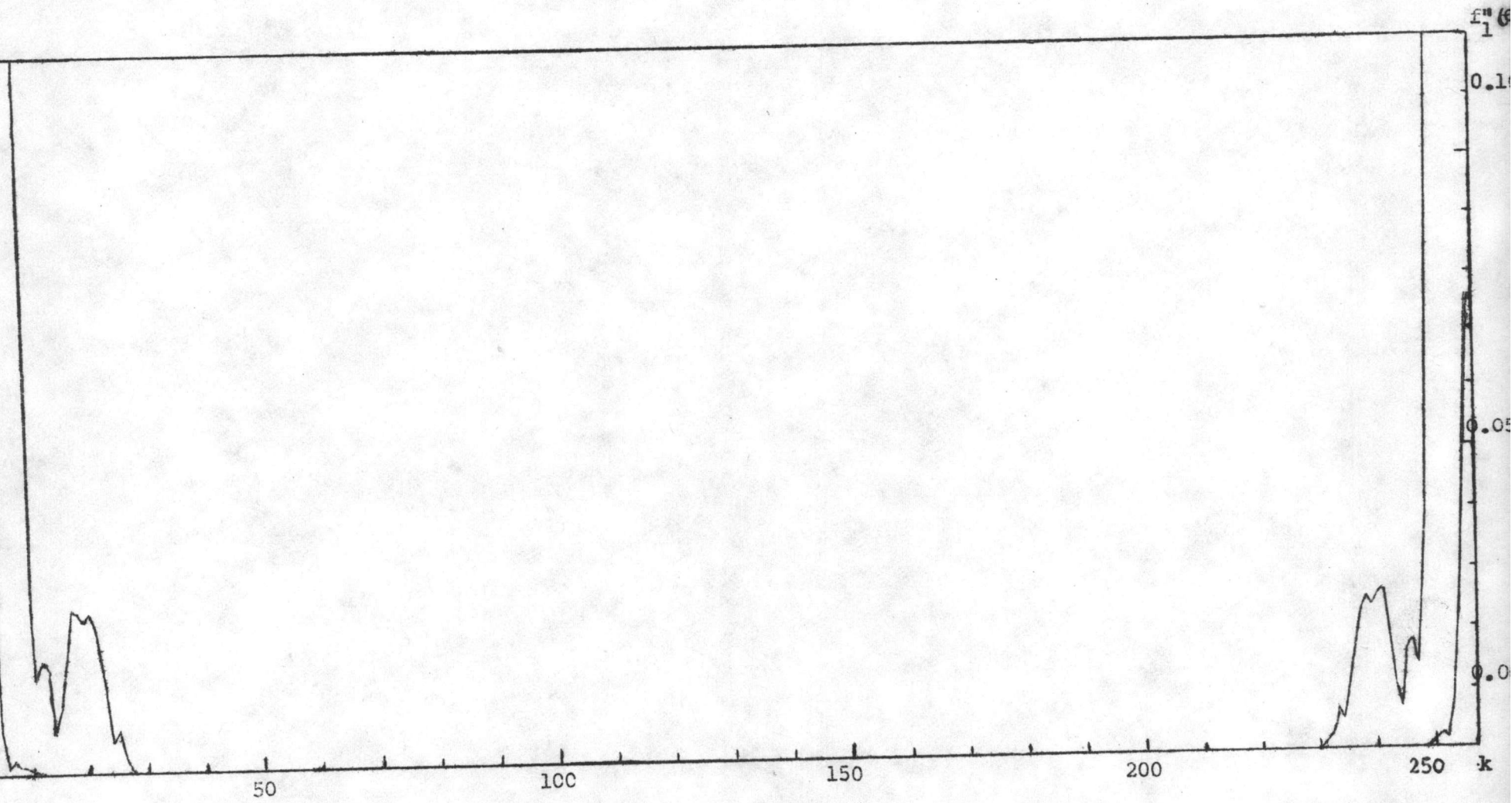
สำหรับในงานวิจัยเพื่อให้การคำนวณ $\phi(\sigma)$ ทำได้อย่างสะดวก จึงหาฟังก์ชันเกาส์เซียนที่ใกล้เคียง $d(\sigma)$ มากที่สุดที่จะทำให้ตัดสัญญาณรบกวนที่ไม่ต้องการออกได้หมดแทน $d(\sigma)$ และคิดสัญญาณรบกวนมีค่าคงที่ $= 10^{-4}$ เทียบกับค่าสูงสุดของ $d(\sigma)$ จะได้

$$\begin{aligned} \phi(\sigma) = \phi(k\Delta\sigma) &= \frac{1}{1 + \left[10^{-4} e^{(0.13k)^2} \right]^2} \quad \text{เมื่อ } k \leq 128 \\ &= \frac{1}{1 + \left[10^{-4} e^{(0.13(256-k))^2} \right]^2} \quad \text{เมื่อ } k > 128 \quad (3.50) \end{aligned}$$

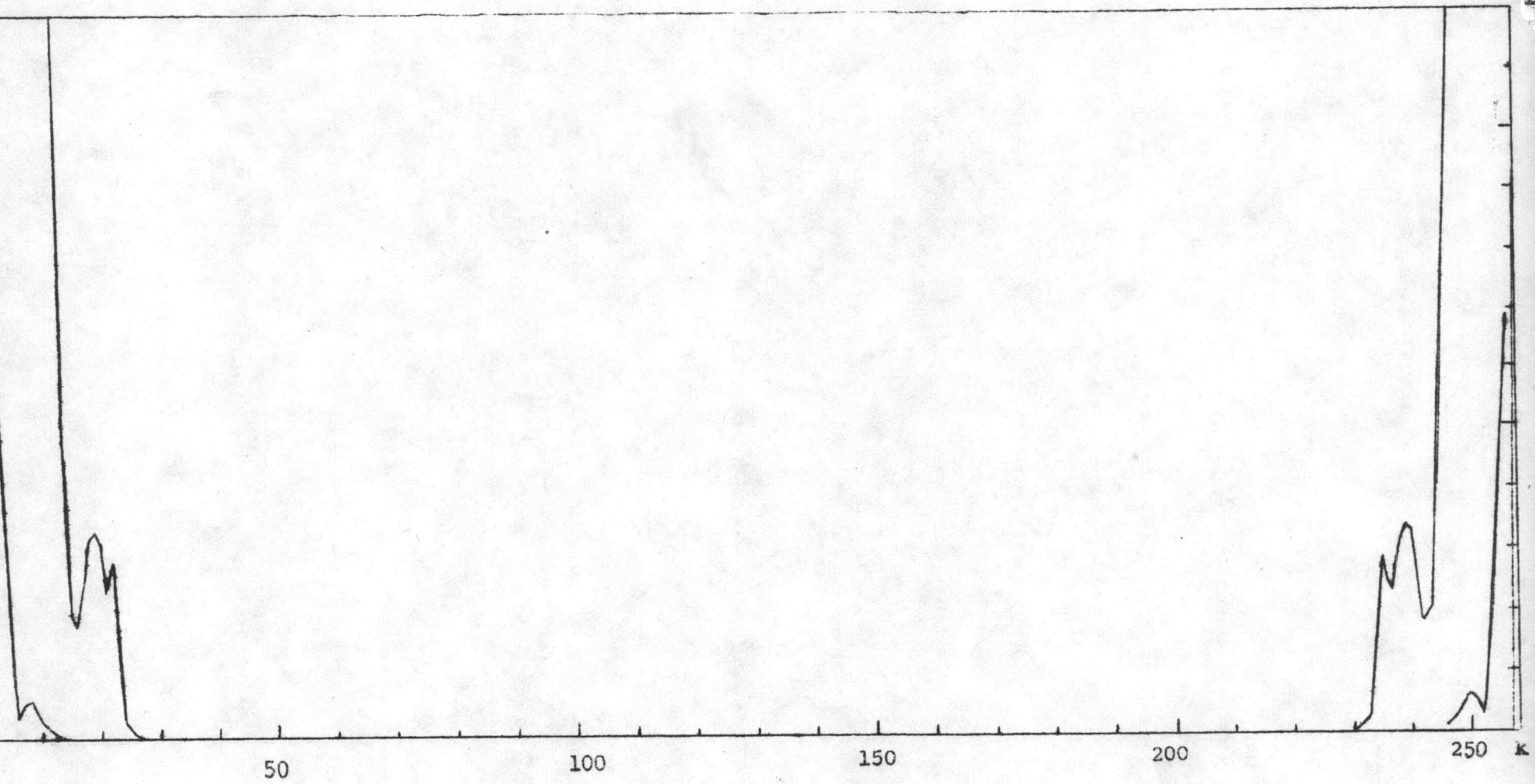
ดังแสดงในรูปที่ 3.7 ซึ่งนำไปคำนวณหา $f''(\sigma)$ ได้รูปที่ 3.8 ก และ ข เมื่อแปลงฟูเรียร์กลับ จึงได้ $F(\lambda)$ ที่ปรับความเข้มสูงสุดเป็น 1 ตามรูปที่ 3.9 ก และ ข ตามลำดับ



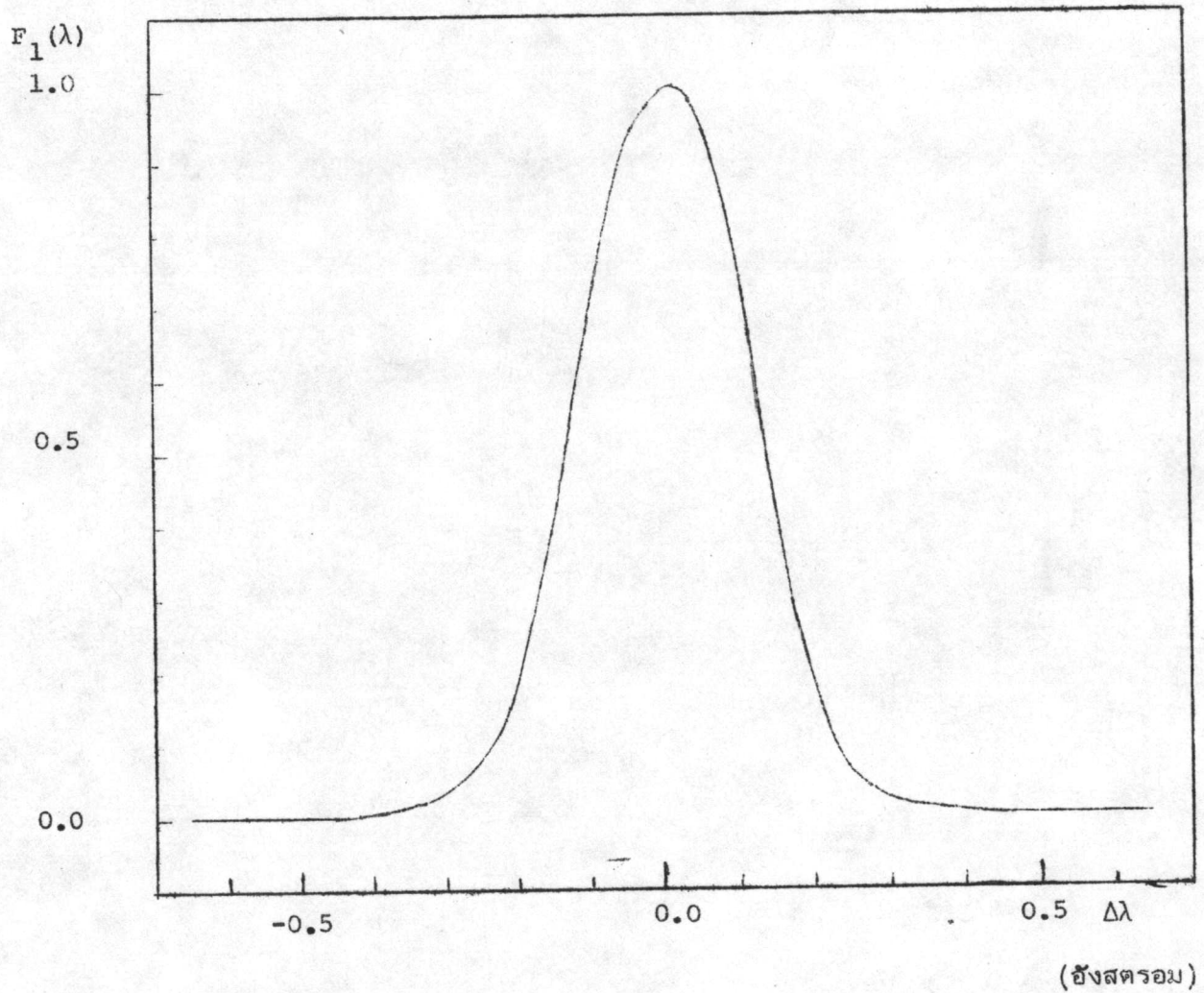
รูปที่ 3.7 กราฟของตัวกรองที่ใช้ฟิลต์สัญญาณรบกวน



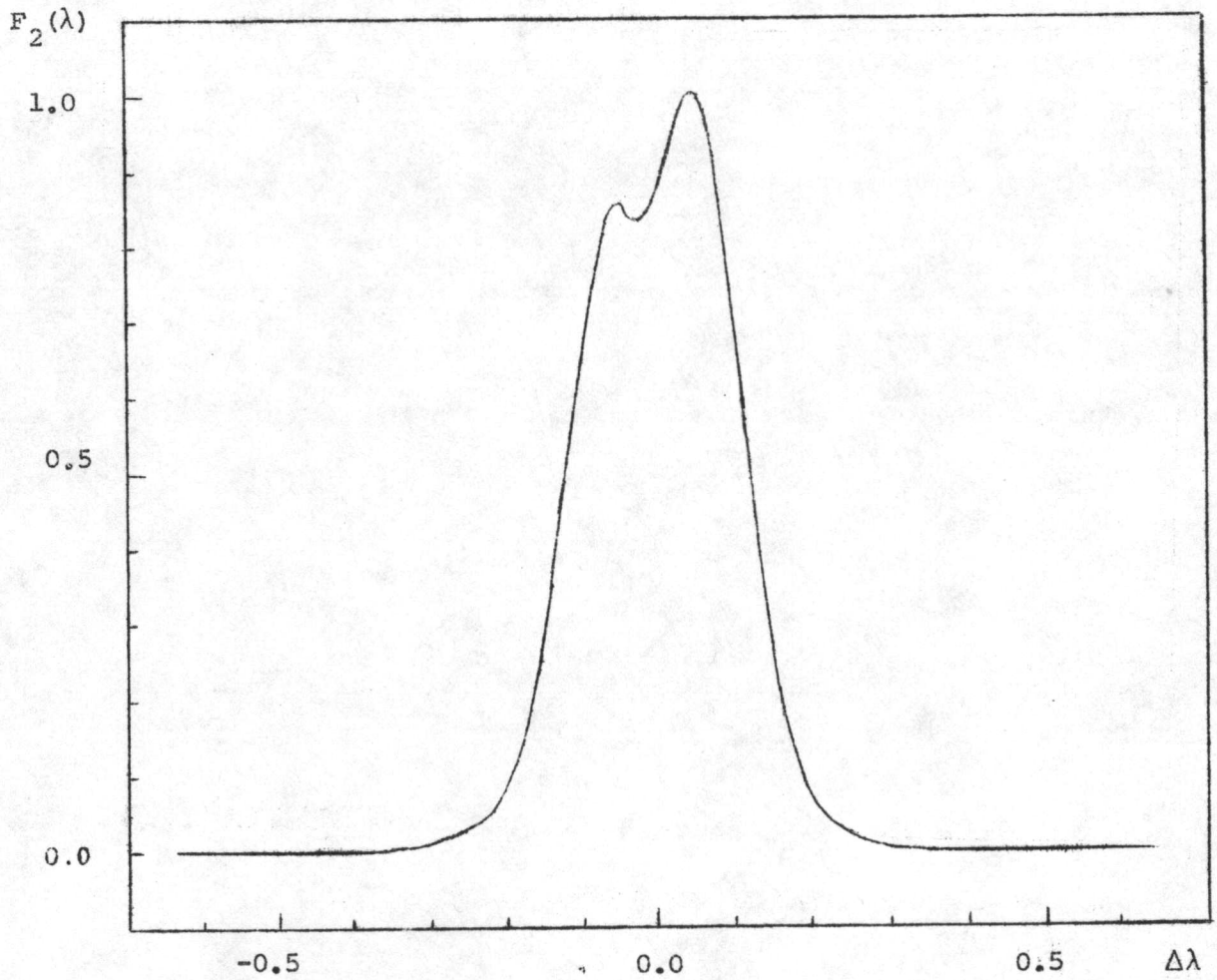
รูปที่ 3.8 ก. รูปทรงเส้นที่ความต่างศักย์ประมาณ 2500 โวลต์ ซึ่งหักรูปลักษณะของอุปกรณ์และผ่านตัวกรองแล้วในโดเมนของความถี่ รูปที่ $k < 9$ และ $k > 249$ ใช้มาตราส่วนทางซ้าย นอกนั้นใช้มาตราส่วนทางขวา



ที่ 3.8 ข. รูปทรงเส้นที่ความต่างศักย์ประมาณ 700 โวลต์ ซึ่งหักรูปลักษณะของอุปกรณ์ และผ่านตัวกรองแล้วในโดเมนของความถี่ รูปที่ $k < 12$ และ $k > 246$ ใช้มาตราส่วนทางซ้าย นอกนั้นใช้มาตราส่วนทางขวา



รูปที่ 3.9 ก. รูปทรงเส้นจากการวัดที่ความต่างศักย์ประมาณ 2500 โวลต์ หลังจากหัก
รูปลักษณะของอุปกรณ์และปรับความเข้มสูงสุดเป็น 1 แล้ว



(อังกฤษ)

รูปที่ 3.9 ข. รูปทรงเส้นจากการวัดที่ความต่างศักย์ประมาณ 700 โวลต์ หลังจากหัก
รูปลักษณะของอุปกรณ์และปรับความเข้มสูงสุดเป็น 1 แล้ว

3.3 การเปรียบเทียบผลการวัดกับการคำนวณทางทฤษฎี

การคำนวณหารูปทรงเส้นทางทฤษฎีเพื่อนำไปเปรียบเทียบกับรูปทรงเส้นที่เป็นผลจากการวัด จะต้องทราบว่ากลไกอะไรบ้างที่ทำให้เกิดรูปทรงเส้นขึ้น เนื่องจากรูปทรงเส้นที่เราวัดได้ เป็นสเปกตรัมที่มาจากหลอดแกสไฮโดรเจนความดันต่ำและความต่างศักย์ที่ให้กับหลอดก็มีค่าไม่มากนัก จึงคิดเส้นสเปกตรัมย่อยที่เกิดจากโครงสร้างละเอียดและการเลื่อนของแลมบ์ และคิดการขยายกว้าง เนื่องจากผลดอปเปลอร์และการขยายกว้างตามธรรมชาติ โดยตัดผลของอนุภาคแวดล้อมทิ้งไป ดังนั้นฟังก์ชันรูปทรงเส้นของเราจะเขียนได้เป็น

$$\phi_\nu = \sum_{i=1}^7 f_i \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{H(a_i, \nu_i)}{\Delta\nu_D} \quad (3.51)$$

จากการวัด เราวัดขนาดของรูปทรงเส้นที่ความยาวคลื่นต่าง ๆ ในหน่วยอังสตรอม ในการคำนวณ เราจะใช้ ϕ_ν ซึ่ง $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_\nu d\nu = 1$ โดยเขียนให้อยู่ในรูปของความยาวคลื่นหน่วยเป็น อังสตรอม $\phi_\nu(\Delta\lambda)$ ดังนั้น

$$\phi_\nu(\Delta\lambda) = \sum_{i=1}^7 f_i \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\lambda_i^2}{c} \times 10^{-8} \frac{H(a_i, \nu_i)}{\Delta\lambda_D} \quad (3.52)$$

เมื่อ $\Delta\lambda_D =$ ความกว้างดอปเปลอร์หน่วยเป็นอังสตรอม $= \frac{\lambda_i}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}}$

$m =$ มวลของอะตอมไฮโดรเจน $= 1.6735 \times 10^{-24}$ กรัม

$$a_i = \frac{\Gamma_i}{4\pi\Delta\lambda_D} \frac{\lambda_i^2}{c} \times 10^{-8}$$

$$\nu_i = \frac{\lambda - \lambda_i}{\Delta\lambda_D}$$

เราสามารถเขียนฟังก์ชันไวเกท $H(a_i, \nu_i) = \frac{a_i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-y^2) dy}{(\nu_i - y)^2 + a_i^2}$ เป็นผลบวกอนุกรม

ยกกำลังของ a_i ได้ (Mihalas, 1970)

$$H(a_i, v_i) = \sum_{n=0}^{\infty} a_i^n H_n(v_i) \quad (3.53)$$

$$\text{เมื่อ } H_n(v_i) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi} n!} \int_0^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{x}{2}\right)^2\right] x^n \cos v_i x \, dx$$

ซึ่งพบว่า $H_n(v_i)$ มีค่าน้อยที่ n ค่าสูง ๆ และนอกจากนี้เมื่อ a_i มีค่าน้อยกว่า 1 คือ ผลตอบเปลี่ยนมีอิทธิพลเหนือการขยายกว้างตามธรรมชาติ เราสามารถตัดเทอมกำลังสูง ๆ ของ a_i ทิ้งได้

การคำนวณฟังก์ชันโวกท์ในงานวิจัยซึ่ง a_i มีค่าน้อยกว่า 1 เสมอ จะคิดเพียง

5 เทอมแรกเมื่อ v_i มีค่าน้อย คือ

$$H(a_i, v_i) = \sum_{n=0}^4 a_i^n H_n(v_i) \quad (3.54)$$

$$\text{เมื่อ } H_0(v_i) = e^{-v_i^2}$$

$$H_1(v_i) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[1 - 2v_i F(v_i) \right]; \quad F(v_i) = e^{-v_i^2} \int_0^{v_i} e^{t^2} dt$$

$$H_2(v_i) = (1 - 2v_i^2) e^{-v_i^2}$$

$$H_3(v_i) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{2}{3}(1 - v_i^2) - 2v_i \left(1 - \frac{2}{3}v_i^2\right) F(v_i) \right]$$

$$\text{และ } H_4(v_i) = \left(\frac{1}{2} - 2v_i^2 + \frac{2}{3}v_i^4\right) e^{-v_i^2}$$

สำหรับเมื่อ v_i มีค่ามาก จะใช้ค่าประมาณของฟังก์ชันโวกท์คือ (Greenstein, 1960)

$$H(a_i, v_i) \approx \frac{a_i}{\sqrt{\pi} v_i^2} \left(1 + \frac{3}{2v_i^2}\right) \quad (3.55)$$

โดยเขียนเป็นโปรแกรมสำหรับคำนวณในเครื่องคอมพิวเตอร์ (ดูภาคผนวก ข.) และใช้ค่า $v_i = 10$ เป็นเกณฑ์แบ่งระหว่างค่ามากกับค่าน้อย

ได้ทดลองแทนค่า T เพื่อหารูปทรงเส้นที่อุณหภูมิต่าง ๆ แล้วปรับค่าความเข้มสูงสุดของ ϕ_ν เป็น 1 นำไปเปรียบเทียบกับรูปทรงเส้นที่ได้จากการวัด พบว่ารูปทรงเส้นที่เกิดจากการแทนค่า $T = 1700$ และ $T = 700$ เคลวิน ดังรูปที่ 3.10 ก และ ข มีลักษณะใกล้เคียงกับรูปทรงเส้นจากการวัดเมื่อความต่างศักย์ที่ให้หลอดมีค่าประมาณ 2500 และ 700 โวลต์ มากที่สุด ตามลำดับ ดังนั้นอุณหภูมิยังผลของแก๊สไฮโดรเจนภายในหลอดบริเวณที่เกิดเส้นไฮโดรเจนอัลฟาจึงควรมีค่าประมาณ 1700 เคลวิน หรือ 700 เคลวิน แล้วแต่กรณีดังกล่าวแล้ว ตามลำดับ

3.4 การเปรียบเทียบฟังก์ชันไวท์กับฟังก์ชันเกาส์เซียน

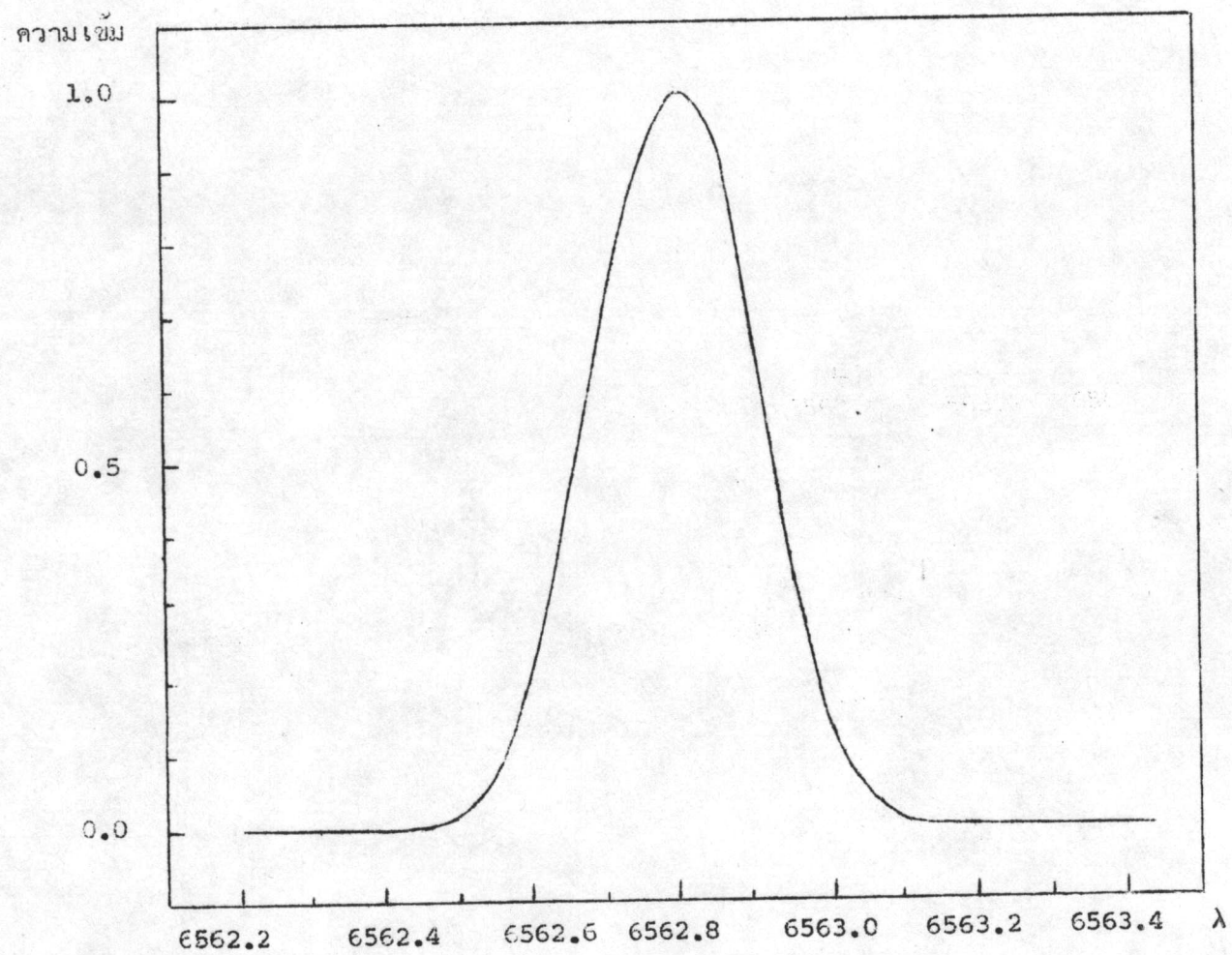
ในขณะที่ทำการวิจัยได้สังเกตเห็นว่าฟังก์ชันของรูปทรงเส้นไฮโดรเจนอัลฟาที่คำนวณโดยคิดเส้นสเปกตรัมย่อยเนื่องจากโครงสร้างละเอียดและการเลื่อนของแลมบ์ และคิดการขยายกว้างเนื่องจากผลดอปเปลอร์และการขยายกว้างตามธรรมชาติ จากสมการ (3.52) หรือที่เรียกว่าฟังก์ชันไวท์นั้นมีลักษณะคล้ายคลึงกับฟังก์ชันเกาส์เซียนโดยเฉพาะที่อุณหภูมิสูง ๆ จึงได้ทดลองหาความสัมพันธ์ระหว่างค่าอุณหภูมิ T ในฟังก์ชันไวท์ของเส้นไฮโดรเจนอัลฟาที่แทนด้วย

$$\phi_\nu(\Delta\lambda) \equiv \phi_\nu(\Delta\lambda, T) = \sum_{i=1}^7 f_i \frac{H(a_i, v_i)}{\Delta\lambda_D} \quad (3.56)$$

กับค่าการกระจาย β ในฟังก์ชันเกาส์เซียนที่แทนด้วย

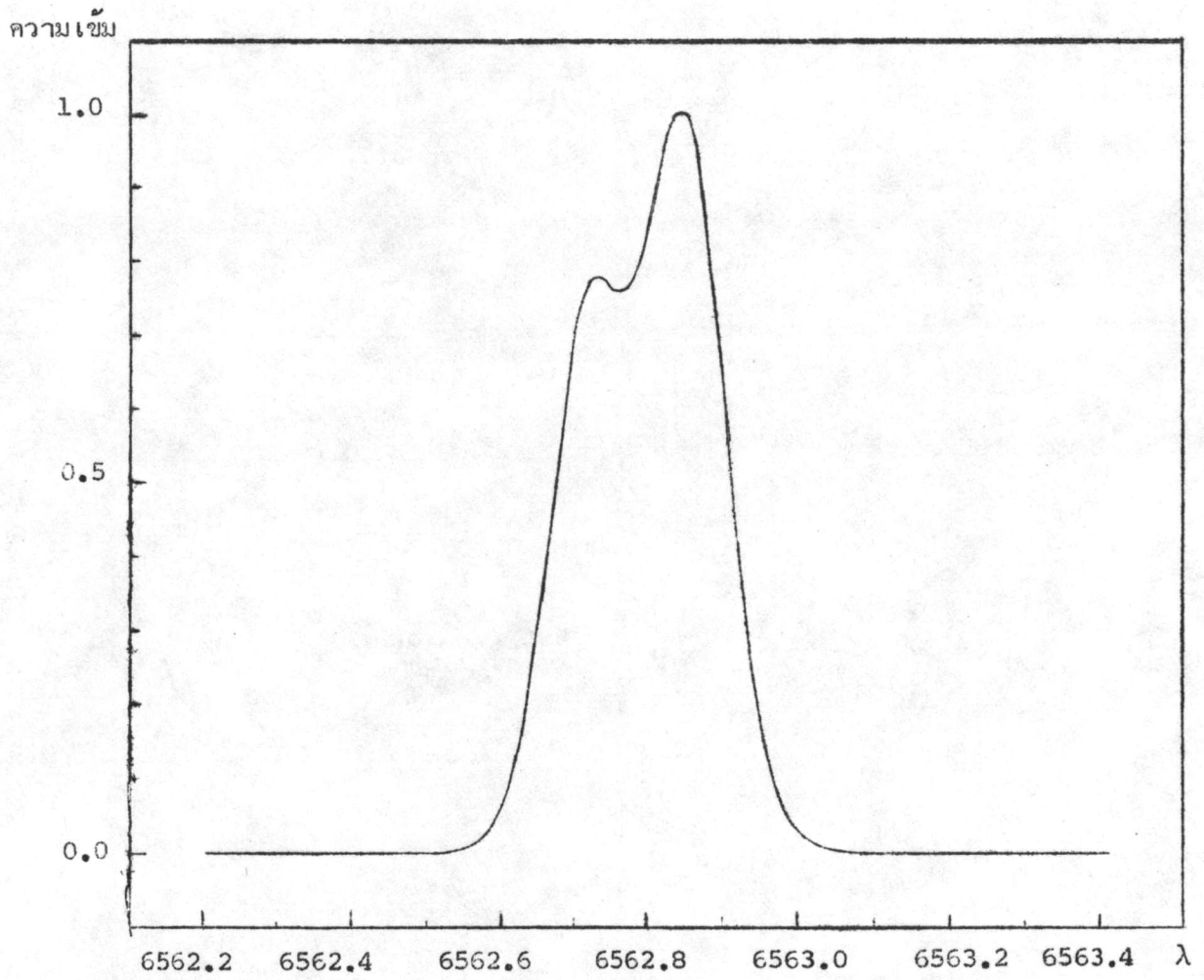
$$F(\Delta\lambda) \equiv F(\Delta\lambda, \beta) = \exp \left[-\left(\frac{\Delta\lambda - \Delta\lambda_0}{\beta} \right)^2 \right] \quad (3.57)$$

เมื่อ $\Delta\lambda_0 =$ ค่าคงที่



(ซึ่งสรอม)

รูปที่ 3.10 ก. รูปทรงเส้นจากการคำนวณที่อุณหภูมิ 1700 เคลวิน



(ฮังสตรอม)

รูปที่ 3.10 ข. รูปทรงเส้นจากการคำนวณที่อุณหภูมิ 700 เคลวิน

เราเริ่มจากการคำนวณหาฟังก์ชันไวท์ในช่วงความยาวคลื่น (6562.3 , 6563.3) อังสตรอมให้ห่างกัน 0.01 อังสตรอมเป็นจำนวน 100 ค่า ที่อุณหภูมิ 3500, 4000, ..., 8000 เคลวิน โดยปรับให้ความเข้มสูงสุดมีค่าเป็น 1 และความเข้มสูงสุดอยู่ตรงกลางรูปทรงเส้น จากนั้นจึงลองแปรค่า $\Delta\lambda_0$ ในช่วง (-0.020 , 0.020) อังสตรอมให้ห่างกัน 0.001 อังสตรอม และ β ในช่วง (0.11 , 0.31) อังสตรอมให้ห่างกัน 0.01 อังสตรอม แล้วคำนวณฟังก์ชันเกาส์เซียนที่ความยาวคลื่นตรงกันกับฟังก์ชันไวท์ เพื่อหาค่า $\Delta\lambda_0$ และ β ที่จะทำให้ผลรวมของกำลังสองของความแตกต่างของฟังก์ชันทั้งสองที่ความยาวคลื่นต่าง ๆ มีค่าน้อยที่สุดสำหรับอุณหภูมิหนึ่ง ๆ หรือ

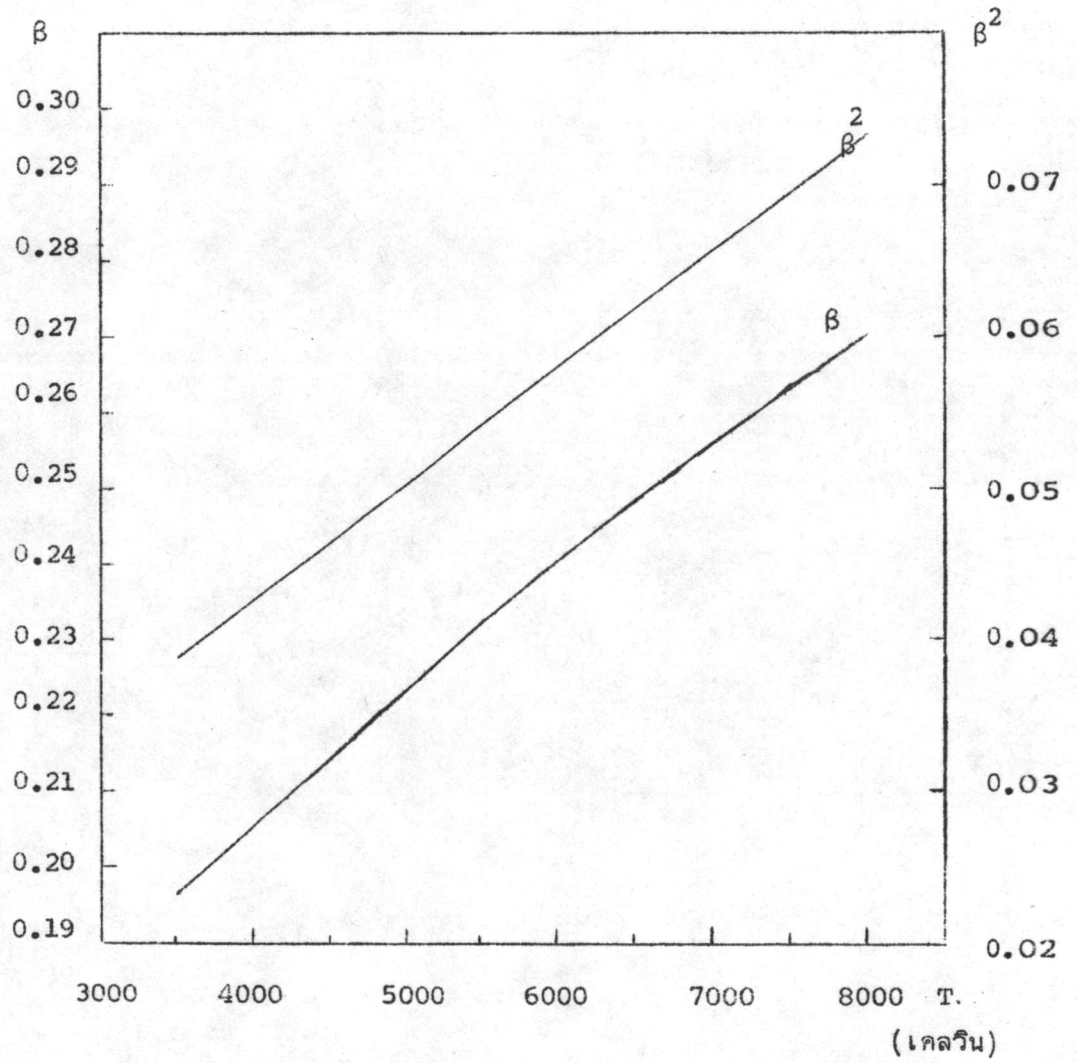
$$\sum_{k=1}^{100} (G_k)^2 = \sum_{k=1}^{100} \left[e^{-\left(\frac{\Delta\lambda_k - \Delta\lambda_0}{\beta}\right)^2} - \phi_V(\Delta\lambda_k, T) \right]^2 \quad \text{มีค่าน้อยที่สุดสำหรับ}$$

อุณหภูมิที่กำหนด

ผลการคำนวณปรากฏว่า $\Delta\lambda_0$ ต้องมีค่า 0.003 อังสตรอมจึงจะเป็นไปตามเงื่อนไขข้างบน ส่วนค่า β พบว่ามีการเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ ได้ทดลองแปรค่า β ให้ละเอียดยิ่งขึ้นที่แต่ละอุณหภูมิ ได้ค่า β ตามเงื่อนไขที่อุณหภูมิต่าง ๆ ดังในรูปที่ 3.11 ซึ่งคำนวณหาความสัมพันธ์โดยใช้โปรแกรมในเครื่องคำนวณเอชพี -97 ได้เป็น

$$\beta^2 = 0.01135 + 7.744 \times 10^{-6} T \quad (3.58)$$

ความสัมพันธ์นี้จะช่วยให้เราสามารถใส่ฟังก์ชันเกาส์เซียนแทนฟังก์ชันไวท์ของเส้นไฮโดรเจนอัลฟาในงานที่ซับซ้อนได้อย่างสะดวกและรวดเร็วขึ้นมาก



รูปที่ 3.11 กราฟระหว่างอุณหภูมิในฟังก์ชันโวกท์กับการกระจายในฟังก์ชัน เกาส์เซียน