

В.Ф. Головки, А.А. Поздняков, Вл.Г. Тютерев, А.А. Чурсин

## ГРАФИЧЕСКОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ КОМПЬЮТЕРНОЙ СИСТЕМЫ

Рекламируются некоторые функциональные возможности созданной нами компьютерной системы управления крупномасштабными базами данных, направленные на моделирование процесса газоанализа и оптимизацию поиска информативных участков в инфракрасных спектрах поглощения для целей зондирования атмосферных газов и примесей. Одна из компьютерных реализаций получила название GRASSP (*GRAphics Systeem of SPectra*) Основным ее предназначением является оперативная графическая визуализация спектроскопической информации, касающейся распространения лазерного излучения при различных условиях в атмосфере или в модельных смесях газов. Рекомендации, составленные на основе полученных системой графиков, могут использоваться для экспертной оценки эффективности применения спектрального прибора в различных атмосферных или технологических ситуациях.

Спектроскопические методы газоанализа являются самыми перспективными для определения концентрации малых газовых компонент в атмосфере в связи с их селективностью, высокой чувствительностью и возможностью дистанционного контроля [1], что делает их наиболее удобными для решения задач экологического мониторинга воздушного бассейна.

В последние годы в экологии особое место занимают вопросы изменения газового состава атмосферы, в частности, такие как «озоновая проблема» [2, 3], увеличение содержания  $\text{CO}_2$  («парниковый эффект»), окиси углерода  $\text{CO}$  (воспламенение нефтяных скважин) и другие. Например, исследованию механизмов формирования озона в атмосфере, а также химических процессов, приводящих к его деструкции, посвящен один из разделов международной научной программы EUROTRAC [3], называющийся TOR (Tropospheric Ozone Researches). Ряд научных работ [4–6] показывает, что для зондирования многих атмосферных газов наиболее информативным является инфракрасный (ИК) диапазон.

Но для успешного применения спектроскопических методов наряду с совершенной экспериментальной аппаратурой необходимо надежное обеспечение информацией по спектрам высокого разрешения. К настоящему времени уже созданы спектроскопические базы данных по ИК спектрам такие, как GEISA [7], HITRAN [8], ATLAS [9], которые наряду с собственно базами данных имеют пакеты прикладных компьютерных программ для управления и наиболее оптимального использования этих баз. Разработан также пакет программ LARA-1 [10], использующий банки данных HITRAN-86 и GEISA-84 и предназначенный для моделирования прохождения лазерного излучения через атмосферу. Более подробный список работ содержится в монографии [9].

Тенденция к разработке автоматизированных информационных спектроскопических систем проявляется все сильнее [11], что вызвано огромным объемом информации, например, GEISA-9I содержит сведения более чем о 700 тыс. молекулярных переходов. Авторы [12] разработали комплекс программ, обеспечивающих графическую визуализацию спектроскопической информации баз данных по спектрам поглощения атмосферных газов. Первоначально вышеупомянутые пакеты программ предназначались для использования на больших вычислительных комплексах (например, [10]), однако в последнее время наблюдается тенденция к их адаптации для персональных компьютеров [12, 13].

Главной нашей целью, которая, как нам известно, никем до сих пор не была реализована, является создание оригинальной программы, основанной на хорошо известных простейших методиках, предназначенной для использования на персональных компьютерах класса IBM PC AT/XT или совместимых с ними, и характеризующейся высоким сервисом, а также оперативным доступом к спектроскопической информации. Вместе с тем представленная здесь информационная компьютерная система [13] по своим функциональным возможностям, перечисленным ниже, также отличается от известных в литературе систем [10, 12], имеющих аналогичную направленность на рассмотрение атмосферных газов. Также отметим ее принципиальное отличие от экспертных систем типа TDS [14], направленных на глубокое изучение молекул определенного класса.

Отметим кратко главные оригинальные особенности данной версии. Во-первых, специфика мини-компьютера потребовала решения следующих задач.

1. Представление базы данных во внутреннем формате в сжатом виде.
2. Фрагментация системы с целью экономии пространства на твердом диске и повышения транспортабельности системы с одного компьютера на другой.
3. В связи с пунктом 1 визуализация характеристик всех линий в любом спектральном интервале.

Во-вторых, выбор специфических прикладных задач газоанализа и зондирования атмосферы предусмотрел следующие оригинальные возможности.

1. Графическое представление микроокон прозрачности интерферирующих составляющих атмосферы для контроля содержания заданных газовых компонент.

2. Построение спектров с любым наперед заданным разрешением, более низким, чем это следует из теории контуров линий.
3. Создание интерфейса между базами молекулярных и лазерных линий.

### Описание системы управления базами данных

Принципиальная блок-схема системы приведена на рис. 1. Она использует базы данных (как спектроскопическую, так и линий генерации  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ -лазеров) и состоит из программного блока, который, в свою очередь, включает в себя сервисные программы и графический пакет. Спектроскопическая база данных записана на жесткий диск во внутреннем формате, как типизированный файл, что делает возможным уменьшить объем банка (например, GEISA-84 занимает в текстовом виде около 25 Мб, а в упакованном только 18 Мб) и позволяет организовать его как файл прямого доступа к любой спектральной линии. В нашем варианте ключевыми параметрами доступа являются волновые числа переходов. Отметим важную возможность фрагментации базы данных на отдельные рабочие файлы с помощью специальных сервисных программ, что повышает мобильность при переносе системы с одного компьютера на другой.

Рабочим файлом может служить любой массив данных, записанный в стандартном международном формате, а переформатирование выполняется специальной сервисной программой. Общее управление системой осуществляется в диалоговом режиме, и она может работать с несколькими рабочими файлами, выбираемыми в режиме главного меню, которое управляет блоком сервисных процедур и инициализирует графический пакет. Ниже мы приводим краткое описание основных опций — режимов работы меню.

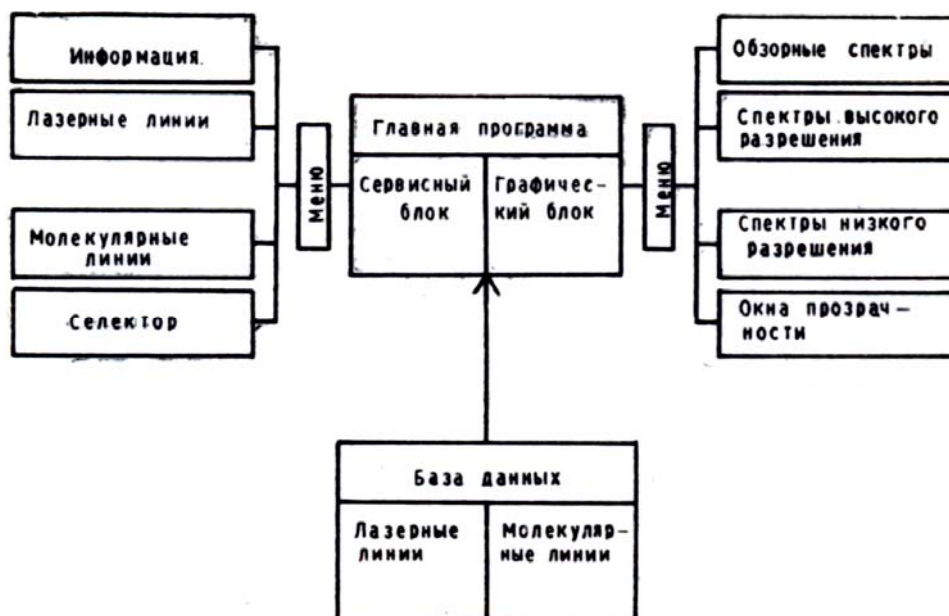


Рис. 1. Блок-схема компьютерной программы для оптимизации поиска информативных участков инфракрасных спектров поглощения и визуализации спектральной информации

Опция HELP с многочисленными своими подопциями позволяет получить информацию о физических моделях атмосферы, заложенных в систему, о естественном распространении изотопов в природе, о линиях генерации лазера и т. д. Кроме того, она содержит инструкции по эксплуатации системы.

Опция SELECTOR предназначена для выбора рабочих файлов, для отсечки нижнего и верхнего пределов интенсивности линий и содержит меню для выбора различных молекул или отдельных изотопических модификаций из общего числа 81.

Остальные опции LASER LINES, MOLECULAR LINES и PLOT предназначены для визуализации спектроскопической информации. Например, при обращении к первым двум в специальном экранном окне можно, начиная с некоторого заданного волнового числа, шаг за шагом, двигаясь вперед или назад, просмотреть информацию из банков данных по лазерным линиям или спектральным переходам (центр линии, интенсивность, полуширина, энергия нижнего уровня и т. д.). Дополнительные данные, такие как показатель температурной зависимости полуширины, ближайшая лазерная линия, ссылки на литературные источники и некоторые другие, высвечиваются на экране нажатием специальных клавиш. Кроме того, опция MOLECULAR LINES служит для фрагментации базы данных, о которой упоминалось выше. С помощью опции PLOT загружается графический пакет системы, который подробно рассматривается в следующем разделе.

## Графическая система

Управление графическим пакетом осуществляется с помощью специального меню. Перечислим некоторые основные режимы работы, из которых построение микроокон прозрачности, насколько нам известно, не встречалось ни в отечественных, ни в зарубежных системах подобного рода.

1) Графическое представление коэффициента поглощения любых доступных газов или их смесей в кислородно-азотной земной атмосфере, либо самой атмосферы со спектральным разрешением, задаваемым пользователем.

2) Построение функции спектрального поглощения на 1 км трассы.

3) Изображение микроокон прозрачности атмосферы для зондирования ее компонентов или газовых примесей.

4) Построение обзорных спектров в виде набора вертикальных отрезков с длиной, пропорциональной интенсивности линий в логарифмическом масштабе, без вычерчивания контура. Этот режим применяется для оперативного получения информации о полосах поглощения исследуемого вещества.

Ряд дополнительных входных параметров задается с помощью специального меню или вводится в диалоговом режиме в экранных окнах. Сюда относятся следующие величины: тип контура поглощения (Лорентца, Гаусса), температура, давление смеси и некоторые другие параметры. Для расчета коэффициента поглощения смесью газов мы использовали метод прямого суммирования. Например, в случае лорентцевского контура коэффициент поглощения  $k(\omega)$  смеси из  $l$  газов вычисляется по хорошо известной формуле:

$$k(\omega) = \frac{B}{\pi} \sum_{i=1}^l \frac{n_i}{(\omega_i - \omega_{0i})^2 + \gamma_i^2} S_i \gamma_i, \quad (1)$$

где  $S_i$  — интенсивность линии поглощения  $i$ -й компонентой смеси (см/молек) при нормальных условиях;  $\gamma_i$  — полуширина линии (см<sup>-1</sup>/атм) при нормальных условиях (уширение воздухом);  $\omega_{0i}$  — центр линии (см<sup>-1</sup>);  $n_i$  — объемная относительная концентрация. Величина  $B$  показывает концентрацию молекул при давлении 1 атм и температуре 296 К. Значения  $n_i$  вычисляются как произведение относительной концентрации компоненты в атмосфере на естественное распространение изотопической модификации в природе, либо задаются пользователем. Для основных компонент атмосферы рассчитаны статистические суммы для интервала температур 200–350 К с шагом 1 К. Поэтому, используя показатель температурной зависимости полуширины от температуры и простую формулу уширения линии давлением, можно рассчитать коэффициенты поглощения для различных внешних условий, что позволяет моделировать распространение излучения на разных высотах.

## Моделирование результатов измерений спектральными приборами

Хотя данная система предназначена прежде всего для графической визуализации теоретических спектров, тем не менее она открывает ряд возможностей по моделированию спектров, снимаемых реальными приборами с известной аппаратной функцией, и по решению некоторых прикладных задач лазерного зондирования атмосферы. Для построения теоретического коэффициента поглощения использовалось выражение (1). Вычисления производились с шагом  $h = \Delta\omega_{\min}/M$ , где  $\Delta\omega_{\min}$  — наименьшая из полуширин спектральных линий в рассматриваемом спектральном интервале, а целое число  $M$  задается пользователем (по умолчанию  $M = 10$ ). Однако теоретический спектр не совпадает с экспериментальным, наблюдаемым с помощью реального прибора. Последний, как правило, с более низким разрешением  $I'(\omega)$ , связан с теоретическим  $I(\omega)$  соотношением [15]

$$I'(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\omega - \omega') I(\omega') d\omega', \quad (2)$$

где  $I(\omega)$  — зависимость принятой плотности мощности излучения от волнового числа;  $A(\omega - \omega')$  — аппаратная функция спектрального прибора. Различные аппаратные функции рассмотрены в обзоре [15]. Легко показать, что коэффициенты поглощения, полученные из измеренного и теоретического спектров, связаны между собой соотношением, аналогичным (2). В данной статье для расчетов коэффициентов поглощения спектров низкого разрешения  $k_i(\omega)$  использовалась итерационная формула

$$k_i(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\omega - \omega') k_{i-1}(\omega') d\omega',$$

где  $i$  — число итераций. Величина  $k_0(\omega)$  отвечает коэффициенту поглощения в спектрах «высокого» разрешения.

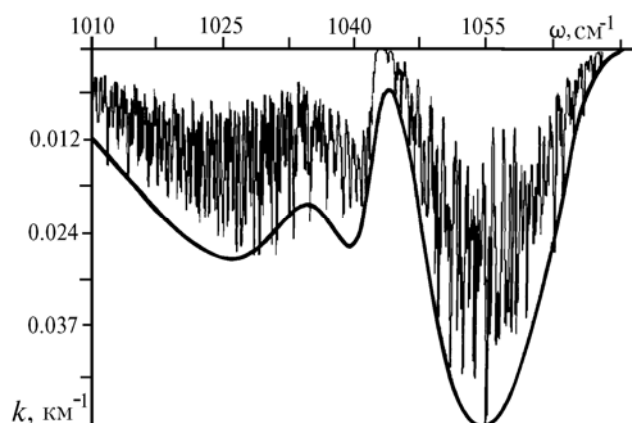


Рис. 2. Спектр низкого разрешения озона ( $\sim 2 \text{ см}^{-1}$ ) на фоне спектра высокого разрешения при концентрации, равной  $5 \cdot 10^{-8}$ , в интервале  $1010\text{--}1070 \text{ см}^{-1}$ . Нижний предел интенсивности равен  $0,5 \cdot 10^{-20} \text{ см}$  на молекулу.  $T = 296 \text{ К}$

Итерационный процесс вводится для сглаживания функций, а число итераций, которое определяется эмпирическим путем, зависит от величины разрешения спектров. Одна из опций программы соответствует простейшей аппаратной функции в виде прямоугольной щели шириной  $r_0$ :

$$A(\omega) = \begin{cases} 1/r_0, & |\omega| \leq r_0/2, \\ 0, & |\omega| > r_0/2. \end{cases}$$

На рис. 2 представлен рассчитанный таким образом спектр озона с разрешением  $2 \text{ см}^{-1}$  на фоне спектра высокого разрешения. Описанная методика позволяет прогнозировать результаты измерений в реальной атмосфере спектральными приборами, имеющими различные разрешения.

### Микроокна прозрачности

Графическая система особенно наглядно осуществляет поиск микроокон прозрачности атмосферы для зондирования ее компонент определенным типом лазера. Для этого отдельно строится контур линии поглощения интересующей нас составляющей на фоне поглощения всей остальной атмосферы с учетом заданных концентраций и внешних условий. На экране высвечиваются также линии генерации  $\text{CO}_2$ - либо  $\text{CO}$ -лазеров. Эта методика особенно полезна для зондирования газов методом дифференциального поглощения. На рис. 3 изображено микроокно прозрачности для зондирования озона в стандартной атмосфере.

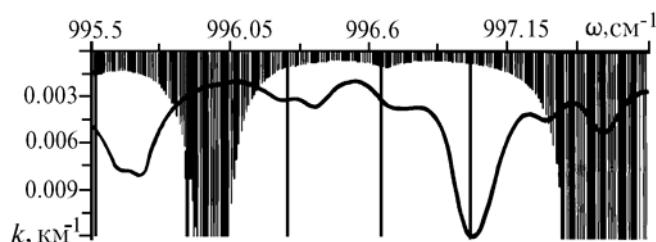


Рис. 3. Микроокно прозрачности для зондирования озона (сплошная кривая) на фоне поглощения остальной атмосферы (черный фон)  $T = 296 \text{ К}$ . Вертикальными линиями изображаются волновые числа излучения, генерируемого в среде  $\text{CO}_2$ -лазера

Для облегчения поиска микроокон прозрачности на больших спектральных интервалах в системе предусмотрена специальная опция «экспресс-окна», с помощью которой строится обзорный спектр атмосферы (в линейном масштабе), причем линии зондируемого компонента изображаются отдельным цветом на фоне остальных линий. Для дистанционного контроля важно оценить максимальную дальность зондирования, для чего нами предусмотрена специальная опция, с помощью которой можно оперативно построить функцию спектрального пропускания для частоты излучения используемого лазера и длины трассы  $L$ , что исключает из рассмотрения спектральные участки с очень сильным поглощением зондируемого вещества, даже если они формально и являются окнами прозрачности. Указанная опция позволяет правильно выбрать взаиморасположение источника излучения и приемника для различных атмосферных ситуаций.

## Программная реализация системы

Компьютерная программа написана на алгоритмическом языке Паскаль (версия Turbo—Pascal 6,0). Для создания сервисной части системы мы широко использовали расширение языка Turbo—Pascal пакет Turbo Professional 4,0, содержащий подпрограммы, обеспечивающие создание систем меню, экранных окон для ввода значений параметров, выдачи сообщений об ошибках и т. п. Кроме того, нами разработаны специальные программные средства, реализующие экранные окна и осуществляющие ввод данных в графическом режиме дисплея, что позволяет избежать замедляющих процесс работы переключений из графического режима дисплея в текстовый и обратно и в общем обеспечить более высокий уровень сервиса и экранного дизайна. По нашему мнению, использование экранных окон является наиболее удобным и перспективным в информационных и сервисных компьютерных системах.

В заключение укажем основные технические характеристики представленной компьютерной системы и детали ее работы. Для вычисления и последующего графического построения спектроскопических функций исходные данные для выбранного спектрального интервала (центры линий, интенсивности, полуширины) заносятся в специально выделенную область оперативной памяти компьютера. Максимальное число линий, которое возможно загрузить, зависит от объема свободной памяти, версии DOS'a, и, вообще говоря, от выбранной графической опции.

Для компьютеров с оперативной памятью 640 Кб при построении спектров высокого разрешения или обзорных спектров можно загрузить около 18500 линий. При построении спектров низкого разрешения, окон прозрачности это число меньше, потому что часть памяти ЭВМ используется для хранения результатов вычислений коэффициента поглощения, который затем строится на экране. Время построения какого-либо спектра зависит от ширины спектрального интервала, числа загруженных линий, типа компьютера. Например, на построение коэффициента поглощения атмосферы с высоким разрешением на участке  $920-930 \text{ см}^{-1}$  на компьютере типа IBM PC LT-286, с сопроцессором, затрачивается около 2 мин. На построение же функции спектрального поглощения требуется около 3 мин.

Несколько слов о требованиях к компьютеру. Система может использоваться на ПЭВМ типа IBM PC AT/XT или совместимых с ними, оснащенных видеоадаптерами типа VGA, EGA, CGA или HERCULES. Для надежной работы требуется не менее 280–300 Кб свободной оперативной памяти.

На наш взгляд, подобные системы обладают практически неограниченными возможностями для развития. В частности, в следующие версии включаются новые опции: наряду с молекулярным поглощением предполагается рассмотреть ослабление излучения аэрозолем для различных моделей. Особый интерес может вызвать возможность определения концентраций компонентов атмосферы из обработки экспериментального спектра поглощения. Включение других режимов можно уточнить по желанию пользователя системы.

1. Лазерный контроль атмосферы, Под ред. Хинкли Э.Д. М.: Мир, 1979. 419 с.
2. Steinfeld J.I., Adler-Golden S.M., Galanger J.W. // J. Phys. Chem. Data. 1987. V. 16. P. 911–951.
3. EUROTRAC Annual Report, TOR 1989, EUROTRAC International Scientific Secretariat. Garmisch-Partenkirchen: June 1990. P. 179.
4. Zander R., Gunson M.R., Farmer C.B., Norton R.H., Rinsland C.P. // Atmospheric Spectroscopy Applications, Workshop. Proceedings, 6–8 June 1990. Moscow. — Tomsk: Institute of Atmospheric Optics. 1990. P. 256–263.
5. Toon G.C., Farmer C.B., Norton R.H. // Nature. 1986. № 319. P. 570–571.
6. Zander R., Rinsland C.P., Farmer C.B., Brown L.R., Norton R.H. // Geophys. Res. Lett. 1986. V. 13. P. 757–760.
7. Chedin A., Husson N., Scott N.A., Cohen-Halaleh I., Berroir A. The «GPISA» data bank 1984 Version, Laboratoire de Meteorologie Dvnantique du CNRS, 1986.
8. Rothman L.S., Gamache R.R., Goldman A. et al. // Appl. Opt. 1987. V. 26. №19. P. 4058–4097.
9. Войцеховская О.К., Розина А.В., Трифонова Н.Н. Информационная система по спектроскопии высокого разрешения. Новосибирск: Наука, 1988. 150 с.
10. Мицель А.А., Руденко В.П. Пакет прикладных программ для расчета энергетических потерь оптического излучения в атмосфере LARA-1 (версия 1988) Томск, 1988. 56 с. (Препринт/Институт оптики атмосферы СО АН СССР, № 57).
11. Войцеховская О.К., Зуев В.Е., Тютерев В.Г. // Оптика атмосферы. 1988. Т. 1. № 3. С. 3–15.
12. Atmospheric Transmission and Radiance Software. PCTran 7, PCSenTRAN, PCModTRAN. PCLnTRAN. Brookline: ONTAR Corporation, 1991. 12 p.
13. Chursin A.A., Golovko V.F., Pozdnyakov A.A., Tyuterev V.I.G. // 12-th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy Abstracts. Dijon 9–13 September. 1991. P. F30.
14. Babikov Yu.L., Tashkun S.A., Tyuterev V.I.G., Champion J.P., Jouvard J.M., Pierre G. and Wenger C. // 12-th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Abstracts Dijon: 9–13 September, 1991. P. M26.
15. Раутиан С.Г. // УФИ. 1958. Т. 66. В. 3. С. 475.

V.F. Golovko, A.A. Pozdnyakov, V.I.G. Tyuterev, A.A. Chursin. **Gravities Software Supporting the Informational Computer System.**

Some functional capabilities of a computer system for monitoring big databases aimed at modeling the gas analysis procedures and at optimizing the search for informative regions in the IR for atmospheric gas analysis are advertised. One of the computer versions of the system is called GRASSP (GRAphics System of SPectra). The main purpose of this version is the graphical visualization of spectroscopic information concerning the laser radiation propagation under different conditions in the atmosphere or in model gas mixtures. Recommendations that could be formulated based on the graphical information obtained using this system can be used for an expert assessments of a spectroscopic device in different atmospheric and technological applications.