«Оптика атмосферы и океана», **18,** № 9 (2005)

УДК 539.194

С.Н. Михайленко, Ю.Л. Бабиков, В.Ф. Головко

Информационно-вычислительная система «Спектроскопия атмосферных газов». Структура и основные функции

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 30.06.2005 г.

Дается описание структуры и основных функциональных возможностей информационно-вычислительной системы «Спектроскопия атмосферных газов». Система является удобным инструментом доступа через Интернет к результатам исследований в области спектроскопии атмосферных газов и решения ряда спектроскопических задач в интерактивном режиме. Она может быть использована как при проведении научно-исследовательских работ, так и в процессе преподавания курсов оптики и молекулярной спектроскопии в высшей школе.

Введение

Спектроскопическая информация, доступная в сети Интернет, как правило, представлена либо в форме архивов, организованных в виде наборов файлов, либо в виде ресурсов, содержащих средства для выполнения запроса на поиск интересующих пользователя данных, извлечения их из баз данных и отображения на сайте. Примером архивов являются сайты банков HITRAN [1], JPL [2], CDMS [3] и др. В числе Интернет-ресурсов второго типа можно назвать сайты баз данных физической лаборатории Национального института стандартов и технологий США [4], например базу по высокоточным измерениям частот переходов для молекулярных линий [5]. Главным отличием информационно-вычислительной системы «Спектроскопия атмосферных газов», http://spectra.iao.ru (ИВС SPECTRA), развиваемой в Институте оптики атмосферы СО РАН с 1999 г., от всех известных нам Интернет-ресурсов в области молекулярной спектроскопии является возможность решения прикладных спектроскопических задач в интерактивном режиме.

Основными целями ИВС SPECTRA является предоставление доступа через Интернет к информации о спектрах поглощения атмосферных газов и решение ряда задач молекулярной спектроскопии в интерактивном режиме. Среди решаемых системой задач можно назвать следующие: 1) поиск, выборка и визуализация данных по параметрам спектральных линий (ПСЛ); 2) создание пользователем собственных смесей газов; 3) моделирование лабораторных спектров высокого и низкого разрешения; 4) решение прямой спектроскопической задачи на основе метода эффективных операторов; 5) загрузка на компьютер пользователя результатов запроса для дальнейшей обработки либо сохранение их в системе для продолжения работы во время последующих сеансов. Регистрация в системе свободна и необязательна. Работа в системе возможна как для зарегистрированных, так и для не зарегистрированных пользователей. Регистрация позволяет получить доступ к более широкому набору функциональных возможностей.

Частично принципы построения, структура и технологические аспекты реализации первой версии системы (http://spectra1.iao.ru) описаны ранее в работе [6]. В статье [7] подробно рассматривался один из разделов системы – «Прямая спектроскопическая задача», позволяющий пользователю самостоятельно проводить расчеты колебательно-вращательных (КВ) спектров молекул воды и озона по заданным параметрам эффективных операторов Гамильтона и дипольного момента перехода. В данной статье этот раздел детально не рассматривается.

Основу базы ПСЛ системы составляют банки данных HITRAN-2004 [8], включая обновления 2005 г., и GEISA-97 [9]. Кроме того, база ПСЛ содержит данные, не представленные в других банках спектроскопической информации для молекул воды, углекислого газа [10] и сероводорода [11]. Данные по шести изотопическим модификациям молекулы воды получены на основе результатов работ [12, 13]. Информация по высокотемпературным спектрам представлена банками HITEMP [14], CDSD-1000 [15] и расчетами на основе [12, 13]. Оригинальные данные, включенные в систему, получены в ИОА СО РАН в кооперации с ведущими специалистами в области молекулярной спектроскопии из Франции, США и Китая.

Система основывается на ранее разработанных в лаборатории теоретической спектроскопии ИОА локальных информационных системах для персональных компьютеров AIRSENTRY [16], TDS [17] и GEISA-PC [18], которые имеют часто более широкие функциональные возможности. Необходимо отметить одно весьма важное обстоятельство. Средства ИВС SPECTRA *не позволяют моделировать спектры* поглощения/излучения *оптически*

неоднородных сред. Поэтому название ИВС SPECTRA – «*Спектроскопия атмосферных газов*», не связано с *атмосферной спектроскопией*. Подобного рода расчеты, например прохождение излучения через атмосферу, могут быть реализованы системой AIRSENTRY.

В заключение упомянем об информационном ресурсе по молекулярной спектроскопии (Атмосферная спектроскопия, http://saga.atmos.iao.ru), в рамках портала http://atmos.iao.ru, также развиваемого в ИОА СО РАН. Направленность этого ресурса имеет несколько иной характер, по сравнению с системой, представленной в данной статье. Основное внимание авторов указанного ресурса сосредоточено на создании информационной модели предметной области, в качестве которой выбрана молекулярная спектроскопия, и структурированной модели данных этой предметной области, на разработке операций с такими данными, на рассмотрении онтологий и т.д.

Структура системы

ИВС SPECTRA представляет собой программный комплекс для поиска информации в базах данных, ее обработки и отображения результатов в текстовом или графическом формате. Особенностью этого комплекса является то, что интерфейс пользователя реализован на основе Интернет-технологий. Архитектура комплекса традиционна для программных систем такого рода и состоит из основной программы, осуществляющей обработку запросов пользователей и отображение информации и построенной по модульному принципу, библиотеки классов и подпрограмм, базы данных.

База данных (БД) является важной составной частью системы и состоит из трех частей: предметной БД, справочной БД и БД административной информации и метаданных. Содержание всех трех частей БД описано в [6]. База данных функционирует под управлением СУБД *MySQL* [19]. Часть данных, для которых не требуется поиска по различным критериям, хранится в файловой системе. К метаданным относится описание меню, а также справочная информация о данных, хранимых в БД.

Библиотека классов подпрограмм состоит из трех частей: библиотеки вычислительных модулей, библиотеки классов *PHP* [20] и сервисной библиотеки. Вычислительные модули реализованы на языках *C* или *Fortran*. Основными вычислительными модулями системы являются программы расчета различных спектральных функций (реализованы на языке *C*) и программа GIP [7, 21] решения прямой спектроскопической задачи (реализована на языке *Fortran*). Библиотека классов *PHP* представляет собой набор классов, которые являются абстракциями сущностей как предметной области (молекулы и их изотопические производные, спектральные полосы, смеси газов и изотопомеров, спектры и пр.), так и используемых для организации функционирования системы (пользователи и группы, сеансы работы пользователя, меню, графика). Сервисная библиотека написана на языке *PHP* [22] и включает в себя набор вспомогательных функций, используемых как в классах, так и в основной программе.

Основная программа написана на языке *PHP* и выполняет следующие функции:

– авторизацию пользователей;

– организацию сеанса взаимодействия пользователя системой;

– разбор запроса пользователя (URL) к системе, генерируемого модулем *меню*;

– выполнение запроса путем генерации обращений к БД и выполнение вычислений;

– генерацию HTML-страницы на основе имеющегося шаблона, отображающей результаты запроса.

Для создания шаблонов страниц использован обработчик шаблонов *SMARTY* [22]. Нами в него добавлен новый объект – фрейм, представляющий собой включаемый шаблон. Фрейм, как правило, состоит из двух частей – PHP-кода, выполняющего обращение к соответствующим функциям библиотеки классов для получения данных, и собственно шаблона для генерации HTML-кода. Такой подход, на наш взгляд, придает стройность и законченность архитектурному решению системы.

Основные возможности системы

Цель системы – дать пользователю доступ к спектроскопическим данным и решать на основе этой информации некоторый круг прикладных задач. На рис. 1 показана титульная страница системы, какой ее видит зарегистрированный пользователь.

Как видно из рис. 1, пользователь имеет доступ, помимо титульной страницы, к шести разделам системы: *Молекулы*; *Спектры газовых смесей*; *Сечения поглощения*; *Прямая задача*; *Вспомогательные данные*; *Работа со спектрами*.

Доступ к разделам системы осуществляется путем нажатия соответствующей клавиши в меню системы. Для нажатия выбранной клавиши необходимо «щелкнуть» на нее курсором «мыши».

Раздел «*Молекулы*», предназначен для получения информации о параметрах спектральных линий и моделирования спектров в разрезе «*Молекула/Изотопомер/Полоса*». При нажатии на клавишу этого раздела пользователь попадает на страницу «*Молекулы/Обзор*». Вид этой страницы представлен на рис. 2.

Раздел содержит список 45 молекул, для которых в системе имеется информация о ПСЛ (таблица в левой части окна). На рис. 2 показан фрагмент этой таблицы. Выбор интересующей нас молекулы осуществляется щелканьем курсора «мыши» на ее формулу во втором столбце списка. В правой части окна появляется общая информация о выбранной молекуле: номер, код, формула, масса, естественное содержание, статистическая сумма для каждого изотопомера молекулы, а также диапазон температур, для которых возможен расчет спектра. Ниже этой информации расположен список источников, в которых имеются данные о ПСЛ выбранной

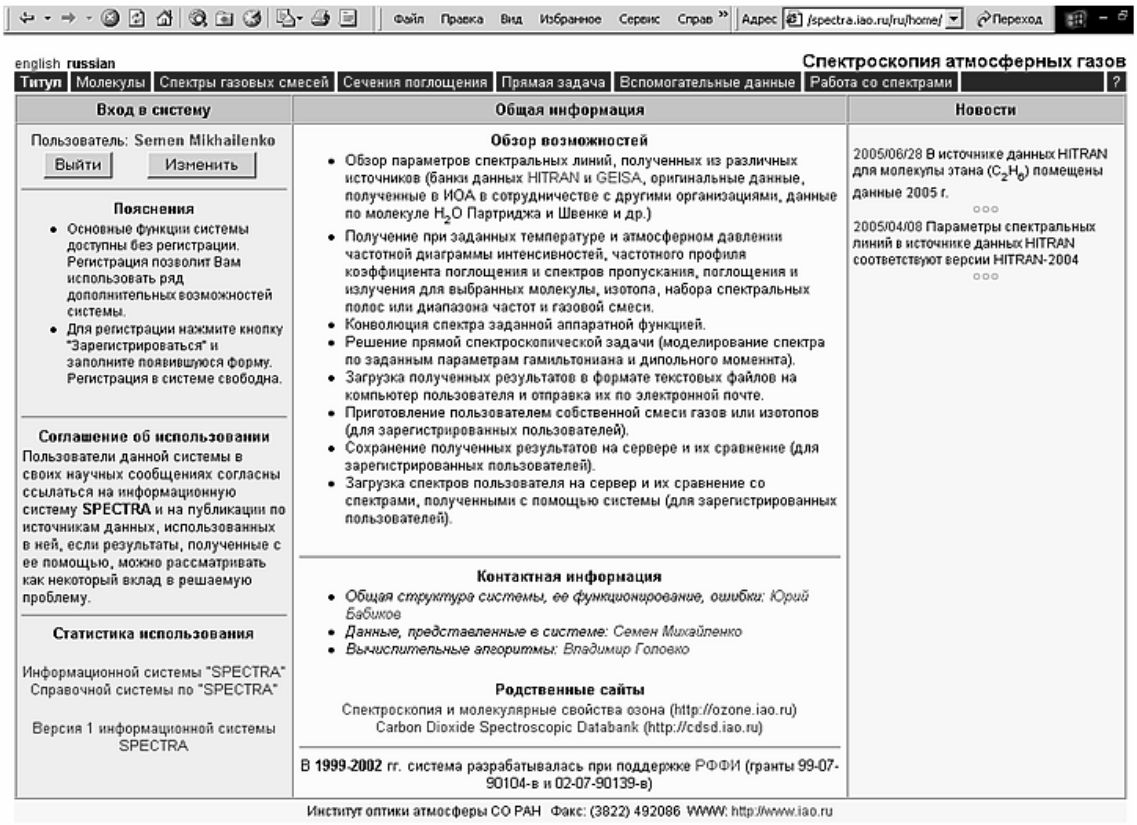

Рис. 1. Титульная страница системы SPECTRA

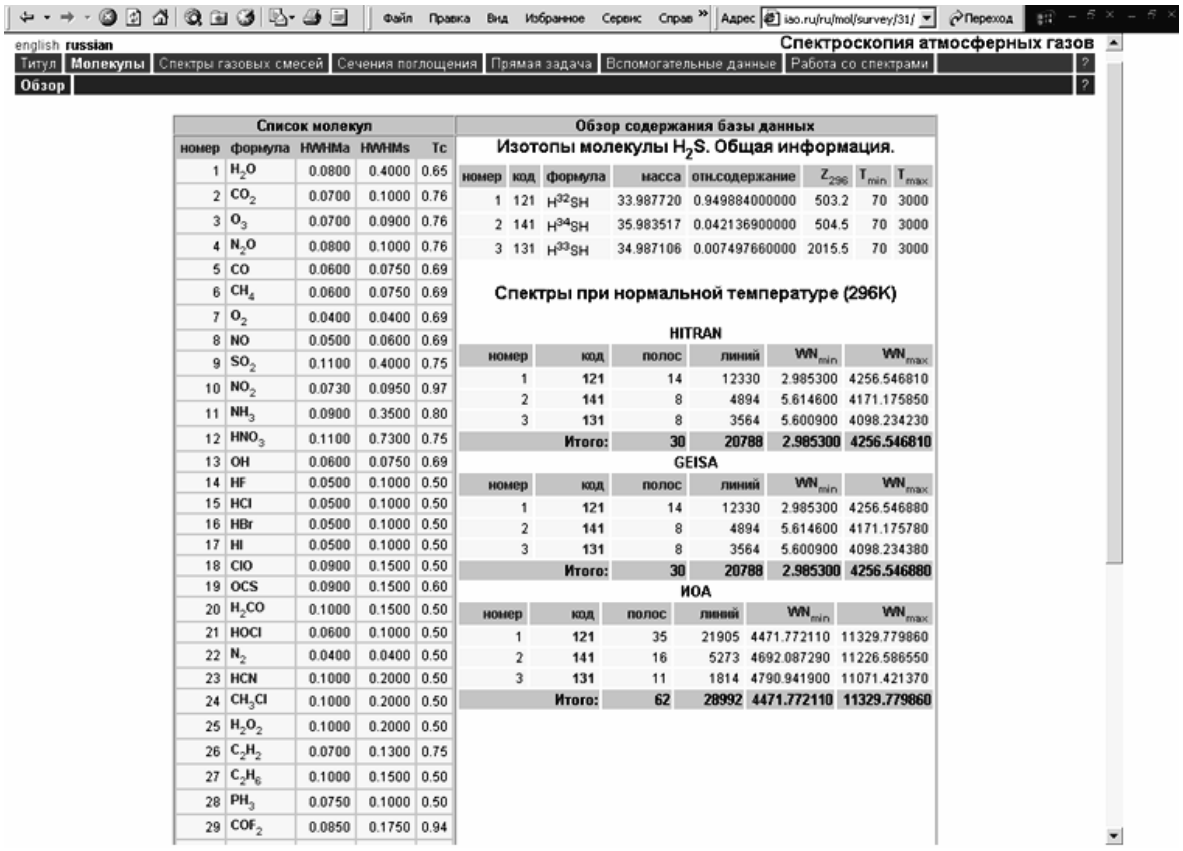

Рис. 2. Список молекул, представленных в системе, общая информация и список источников данных по ПСЛ для выбранной молекулы на примере молекулы сероводорода

4*.

молекулы. Для получения информации о колебательно-вращательных полосах молекулы необходимо выбрать один изотопомер в интересующем пользователя источнике данных. Выбор изотопомера производится путем нажатия клавиши «*код*» для выбранного источника данных. На рис. 3 показан результат такого выбора для молекулы $H_2{}^{33}S$ из базы ИОА (страница «*Молекулы/Спектральные полосы*»).

Раздел «*Спектры газовых смесей*» предназначен для получения информации о параметрах спектральных линий и для моделирования спектров в разрезе «*Газовая смесь / Диапазон*». При нажатии на клавишу этого раздела пользователь попадает на страницу «*Спектры газовых смесей / Параметры спектра*» (рис. 4).

Задавая параметры в панели запроса параметров спектра путем выбора смеси газов и типа спектральной функции, определения спектрального диапазона, давления, температуры, пути и т.д., пользователь имеет возможность рассчитать спектр интересующей его газовой смеси при определенных условиях в некотором спектральном интервале.

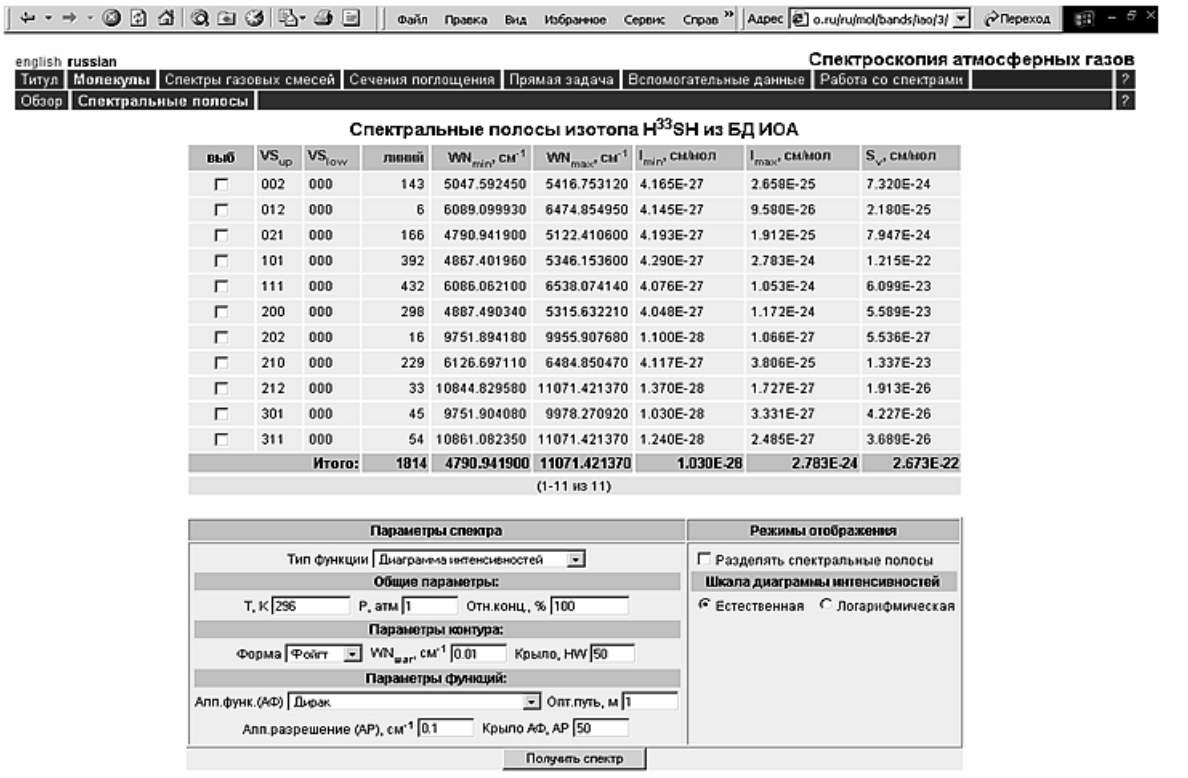

Рис. 3. Список КВ-полос на примере молекулы $H_2{}^{33}S$ в банке ИОА

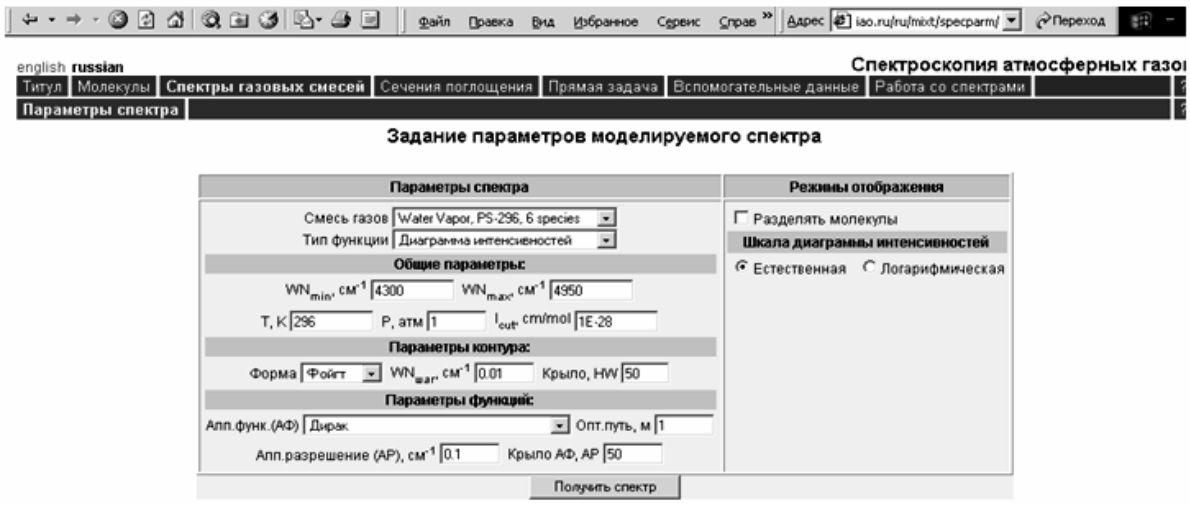

Рис. 4. Панель задания параметров для расчета спектра выбранной газовой смеси в заданном частотном диапазоне

Раздел «*Сечения поглощения*» предоставляет пользователю возможность просмотра экспериментальной информации о сечениях поглощения семи молекул: N_2O, SO_2, NO_2, SF_6, $ClONO_2$, HNO_4 и N_2O_5. В системе содержится информация о сечениях поглощения указанных молекул, соответствующая источнику данных HITRAN. Заметим, что в то время как информация о параметрах спектральных линий этого источника соответствует версии банка HITRAN-2004 (включая обновления 2005 г.), информация о сечениях поглощения соответствует версии HITRAN-2000. На рис. 5 показана страница «*Сечения поглощения/Обзор*».

В левой части рис. 5 размещен список молекул, для которых имеются данные о сечениях поглощения. В правой части отображен список экспериментальных спектров выбранной молекулы.

Раздел «*Прямая задача*» позволяет пользователю самостоятельно рассчитывать колебательно-вращательные спектры молекул воды и озона по заданным параметрам гамильтониана и дипольного момента перехода. Описание этого раздела и расчета спектров пользователем дано в [7]. Заметим, что работа с этим разделам предполагает знакомство пользователя с основами теории эффективных операторов и их приложениями к задачам молекулярных спектров.

Раздел «*Вспомогательные данные*» состоит из двух подразделов: 1) «*Вспомогательные данные/Смеси газов*» и 2) «*Вспомогательные данные/Смеси изотопов*». Раздел предназначен для создания пользователем собственных смесей газов, содержащих различные молекулярные компоненты (подразд. 1), и смесей изотопических модификаций выбранной молекулы (подразд. 2). Подразд. 1 содержит список общедоступных смесей системы и личные смеси пользователя. Подразд. 2 (рис. 6) содержит список молекул, для которых возможно создание смесей изотопических модификаций (левая часть страницы).

Этот список совпадает со списком молекул раздела «*Молекулы/Обзор*». В правой части страницы отображен список изотопомеров выбранной молекулы. Смеси изотопических модификаций молекул, так же как и смеси газов подразд. 1, могут быть трех типов:

1) стандартные смеси системы (смеси № 1 и 9, рис. 6);

2) смеси пользователя, доступные другим пользователям (смеси № 4, 6, 13, 15, 22, 27 и 28, рис. 6);

3) персональные смеси пользователя, недоступные другим пользователям (смеси № 5, 7, 10, 16, 18, 23 и 24, рис. 6).

При создании смеси пользователь может сделать ее общедоступной или персональной. Пользователь имеет право модифицировать и удалять смеси второго и третьего типов. Создание смесей доступно зарегистрированным в системе пользователям. Незарегистрированный пользователь имеет возможность лишь просмотреть общедоступные смеси.

Замечание. В списке газовых смесей имеются стандартные смеси, соответствующие 10 моделям атмосферного воздуха (смеси № 1–10 раздела «*Вспомогательные данные/Смеси газов*»). Еще раз обращаем внимание пользователя на то, что это не означает возможности моделирования атмосферных спектров. Используя эти смеси, пользователь может моделировать лабораторные спектры смесей, соответствующих газовому составу атмосферы.

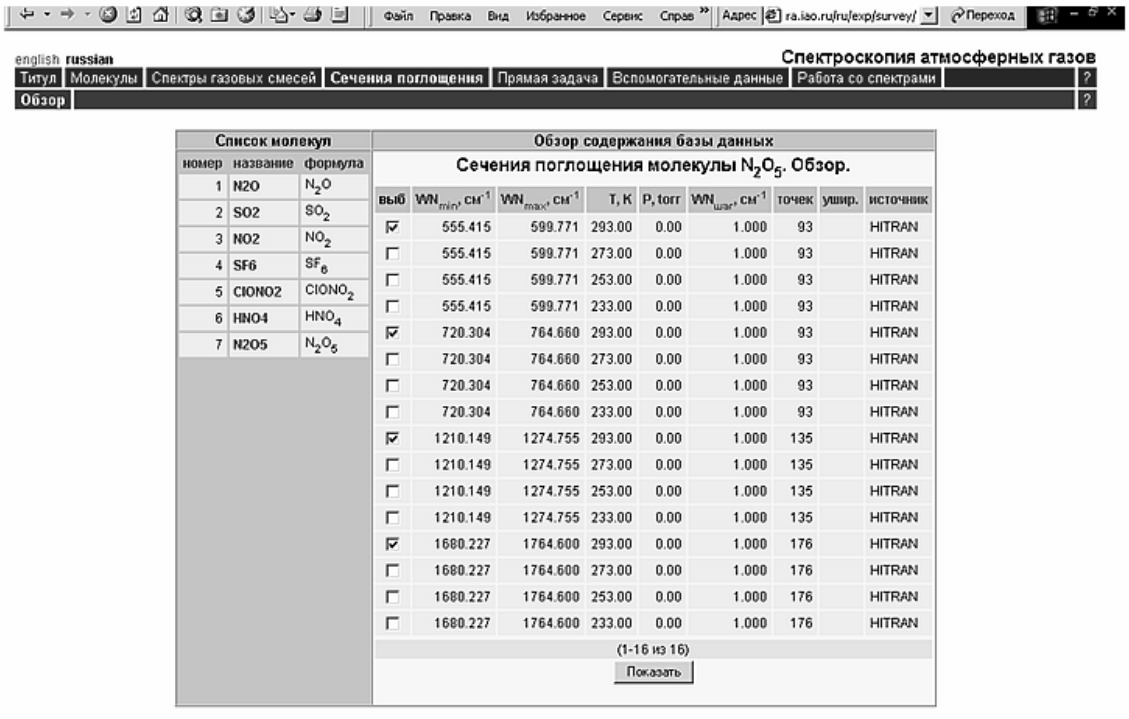

Рис. 5. Обзор содержания экспериментальных спектров сечений поглощения выбранной молекулы

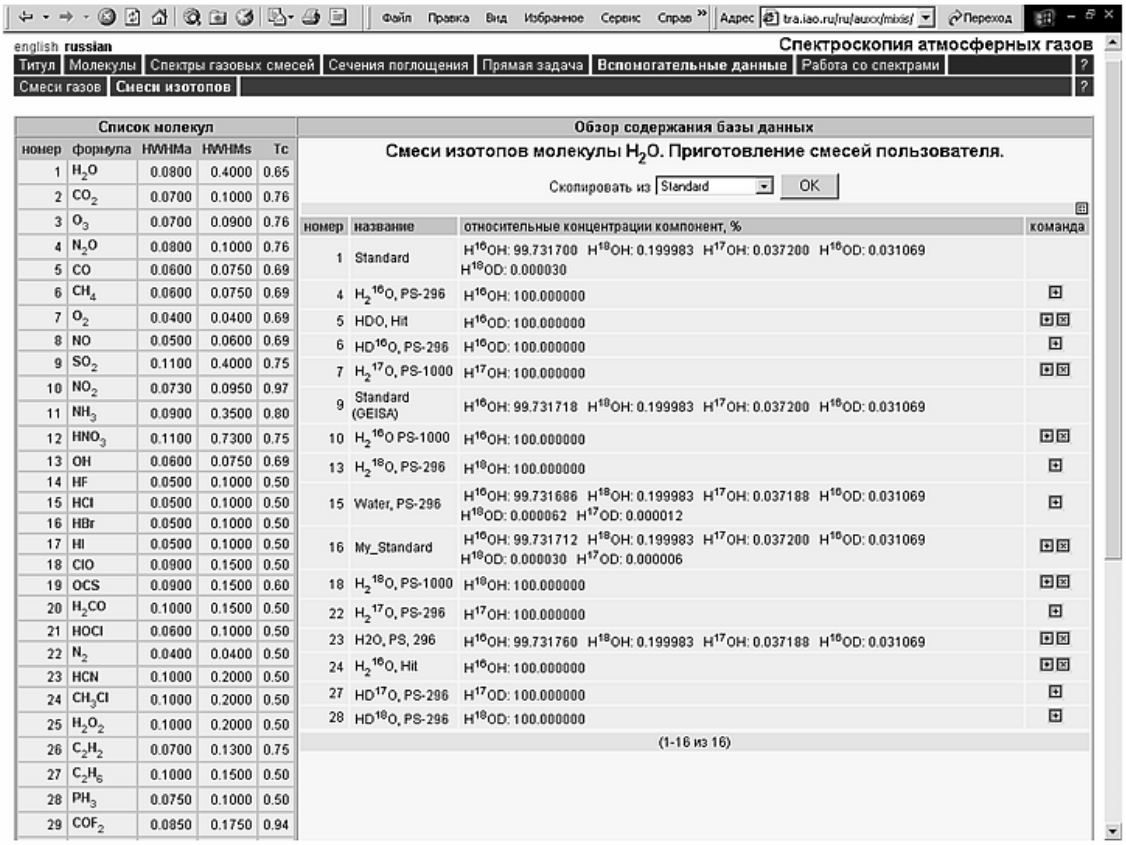

Рис. 6. Список смесей изотопических модификаций на примере молекулы воды

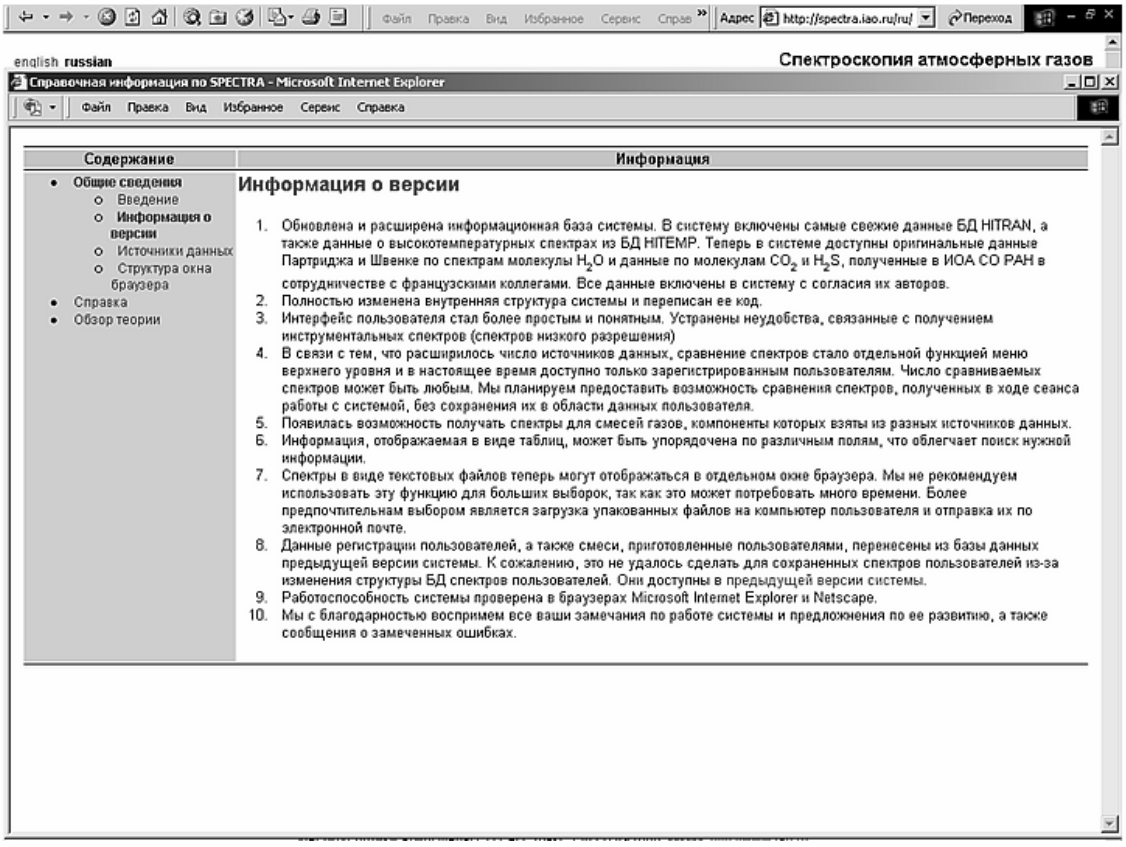

Рис. 7. Типичный вид окна со справочной информацией

Раздел «*Работа со спектрами*» доступен только зарегистрированным пользователям и предназначен для работы со спектрами пользователя. Спектры этого раздела могут быть получены средствами самой системы, а могут быть загружены пользователем в систему со своего компьютера. Раздел предназначен для загрузки и хранения спектров, их сравнения между собой и удаления ненужных спектров.

Справочная система

Кроме перечисленных разделов в ИВС имеется справочная система. Доступ к информации справочной системы осуществляется путем нажатия клавиши «*?*» в правой части меню системы. Информация отображается в отдельном окне браузера (рис. 7). Окно разделено на две части. В левой части размещено *Содержание*, в правой – собственно информация о выделенном разделе системы.

Справочная система ИВС SPECTRA состоит из трех частей (рис. 7): «*Общие сведения*»; «*Справка*»; «*Обзор теории*».

В «*Общих сведениях*» дана краткая аннотация по ИВС («*Введение*»), информация о версии системы («*Информация о версии*»), представлены шесть источников ПСЛ – HITRAN, GEISA, HITEMP, CDSD, PS и ИОА («*Источники данных*») и описана структура окна браузера («*Структура окна браузера*»).

В «*Справке*» дано подробное описание всех шести разделов системы. Названия соответствующих разделов этой части справочной системы полностью совпадают с названиями разделов ИВС.

В части «*Обзор теории*» даны определения и основные формулы для расчета спектральных функций (разделы «*Спектральные функции*» и «*Коэффициент поглощения*»), контуров спектральных линий («*Форма контура*»), зависимости рассчитываемых величин от температуры и давления («*Зависимость от температуры и давления*»), свертки спектра высокого разрешения с аппаратной функцией («*Конволюция спектров*»).

Наиболее часто задаваемые вопросы

Как отмечалось в предыдущих разделах статьи, главными целями системы являются: предоставление доступа к спектроскопической информации и решение ряда спектроскопических задач в интерактивном режиме. Освещение основных возможностей системы по реализации ее целей будет дано в форме ответов на ряд вопросов, возникающих, как правило, при обращении к системам подобного рода.

Прежде всего, в разделах «Введение» и «Структура системы» уже было сказано о том, что в настоящей версии системы возможно проведение расчетов спектров лишь для оптически однородных сред. Таким образом, моделирование в рамках системы атмосферных спектров либо спектров газовых сред с неоднородным распределением температуры, давления, концентраций и т.д. в настоящей версии не предполагается.

Для каких молекул и какая спектроскопическая информация имеется в системе?

В системе есть два сорта спектроскопической информации – параметры спектральных линий (как расчетные, так и экспериментальные) и экспериментальные спектры низкого разрешения (сечения поглощения). Список молекул, для которых в системе имеется информация по ПСЛ, представлен в разделе «*Молекулы/Обзор*» (см. рис. 2). Для каждой молекулы представлены набор изотопомеров и перечень источников данных ПСЛ. Банки HITEMP, CDSD и PS содержат исключительно расчетную информацию. Банки HITRAN, GEISA и ИОА являются компиляциями, содержащими как расчетные, так и экспериментальные данные.

Молекулы, для которых имеется информация об экспериментальных сечениях поглощения, представлены в разделе «*Сечения поглощения/Обзор*» (см. рис. 5). Данные этого раздела могут быть загружены на компьютер пользователя только в графическом виде.

Как получить информацию о параметрах спектральных линий отдельной полосы для выбранной молекулы?

Для получения ПСЛ отдельной полосы (или группы полос) выбранной молекулы необходимо воспользоваться разделом «*Молекулы*». Например, «кликнув мышкой» на формулу молекулы сероводорода (молекула № 31 списка молекул на странице «*Молекулы/Обзор*»), получаем информацию о том, что данные по ПСЛ искомой молекулы содержатся в трех банках данных: HITRAN, GEISA и ИОА (см. рис. 2). Далее, «кликнув мышкой» на код «*131*» изотопомера $H_2{}^{33}S$ из банка ИОА, получаем информацию об 11 спектральных полосах выбранной молекулы из этого банка (см. рис. 3). Выбор интересующих нас полос производится путем их отметки «мышкой» в левом столбце (поле «*выб*») списка полос. Ниже списка полос размещена панель запроса параметров спектра. Для получения информации о ПСЛ значение поля «*Тип функции*» в левой части панели («*Параметры спектра*») должно быть «*Диаграмма интенсивностей*». Если в списке полос отмечено более одной полосы, то в правой части панели («*Режимы отображения*»), для удобства отображения информации, можно поставить отметку в поле «*Разделять спектральные полосы*». После этого нужно нажать клавишу «*Получить спектр*» в нижней части панели запроса параметров спектра. Результат запроса отображается на странице «*Молекулы/Спектр*» (рис. 8).

Как видно из рис. 8, *разделение* полос заключается в отображении соответствующих линий различным цветом.

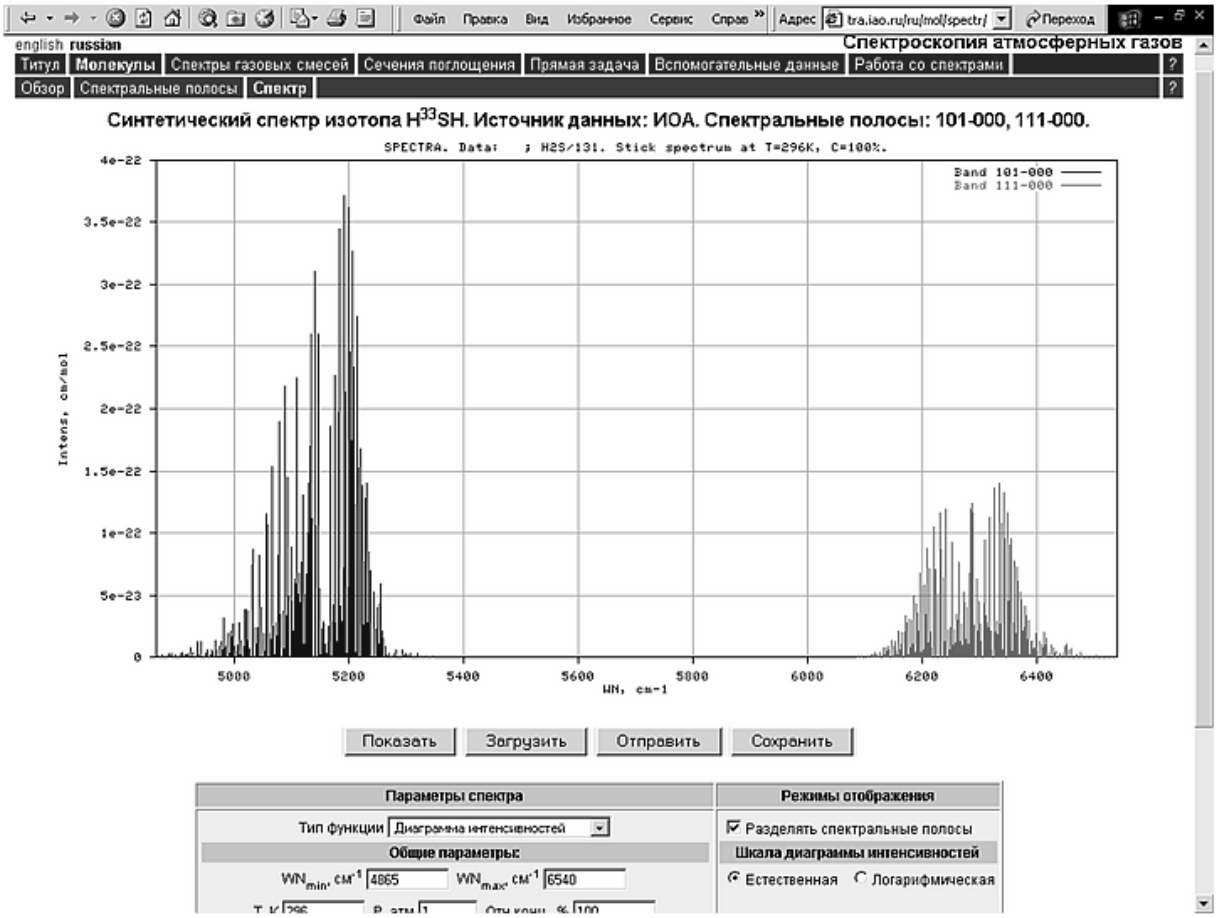

Рис. 8. Результат расчета спектра (диаграмма интенсивностей) выбранных спектральных полос молекулы $H_2{}^{33}S$

Как получить информацию о параметрах спектральных линий для смеси газов в некотором частотном интервале?

Для получения ПСЛ для смеси газов в некотором спектральном диапазоне необходимо воспользоваться разделом «*Спектры газовых смесей*» и сформировать задание, используя панель запроса параметров моделируемого спектра (см. рис. 4). Для того чтобы сформировать задание для системы, необходимо указать интересующую пользователя смесь газов. Смесь выбирается из выпадающего списка смесей (параметр панели «*Смесь газов*»). На рис. 4 показан пример задания для получения информации о шести изотопических модификациях молекулы воды (смесь «*Water Vapor, PS-296, 6 species*») из банка данных PS в диапазоне частот 4300–4950 $см^{-1}$. Результат выполнения запроса отображается на странице «*Спектры газовых смесей/Спектр*». Вид этой страницы аналогичен странице «*Молекулы/Спектр*» на рис. 8. Если в смеси газов присутствуют различные молекулярные компоненты, то их линии могут быть отображены различными цветами, подобно линиям различных полос рис. 8.

Как получить информацию о параметрах спектральных линий в текстовом формате?

В текстовом формате информация о ПСЛ может быть получена со страниц «*Молекулы/Спектр*» (рис. 8) или «*Спектры газовых смесей/Спектр*» путем нажатия кнопки «*Показать*», расположенной между графическим изображением спектра и панелью запроса параметров спектра. Текстовый файл загружается в отдельное окно браузера. Если файл достаточно велик, то его загрузка может потребовать длительного времени. Текстовый файл, упакованный в формате *zip*, можно также загрузить на компьютер пользователя. Для этого используется кнопка «*Загрузить*». Третья возможность получения запрашиваемой информации – отправить файл, упакованный в формате *zip*, по электронной почте, используя кнопку «*Отправить*».

Как рассчитать спектр пропускания (поглощения, излучения) или коэффициент поглощения?

Все четыре спектральные функции можем рассчитать, используя панель запроса параметров для

расчета спектра либо в разделе «*Молекулы*» (см. рис. 3 и 8), либо в разделе «*Спектры газовых смесей*» (см. рис. 4).

Для расчета спектра в некотором частотном диапазоне в панели задания необходимо выбрать газовую смесь в поле «*Смесь газов*», задать тип моделируемой функции, выбирая ее из выпадающего списка в поле «*Тип функции*», и частотный диапазон (параметры $WN_{\min}$, и $WN_{\max}$, $см^{-1}$). Температура, давление, длина пути и отсечка по интенсивности для линий, которые берутся в расчет для моделирования спектра, размещены в соответствующих полях панели задания. При расчете коэффициента поглощения, поглощения, пропускания и излучения нужно обратить внимание на «*Параметры контура*» – форму контура, величину крыла линии (в полуширинах) и шаг, с которым необходимо моделировать спектр. Если задан достаточно большой спектральный диапазон и в него попадает большое число линий газовой смеси, то при очень малом шаге моделирование спектра может занять много времени. Возможности системы позволяют учесть влияние аппаратной функции. Тип функции выбирается из выпадающего списка поля «*Ann. функ. (АФ)*». В этом случае нужно указывать аппаратное разрешение в поле «*Ann. разрешение (AP), $см^{-1}$*». На рис. 9 показан результат расчета спектра пропускания смеси «*Water Vapor, PS-296, 6 species*» в диапазоне 4600–4650 $см^{-1}$. Расчет произведен для нормальной температуры (296 К), давления 0,2 атм и длины пути 100 м. В расчете использовался контур Фойгта с величиной крыла в 50 полуширин и учитывались все линии с интенсивностью выше 1×10^{-28} см/молек, шаг по частоте равнялся 0,001 $см^{-1}$. Влияние аппаратной функции не учитывалось (аппаратная функция *Дирак*) Время расчета при этом составляет 3–4 с. Результат расчета отображен на рис. 9. Между рисунком спектра и панелью задания помещен уменьшенный по высоте график диаграммы интенсивностей.

Аналогичным образом рассчитываются спектральные функции в разделе «*Молекулы*» для группы выбранных полос. Панели запроса параметров для моделирования спектра в этих разделах совпадают, как это видно из рис. 3 и 4.

Как сохранить полученную информацию на сервере?

Как отмечалось выше, эта возможность доступна только зарегистрированным пользователям – одним из атрибутов сохраняемой информации является имя пользователя. Сохранить полученную информацию на сервере можно со страниц «*Молекулы/Спектр*» (см. рис. 8) и «*Спектры газовых смесей/Спектр*» (см. рис. 9) путем нажатия кнопки

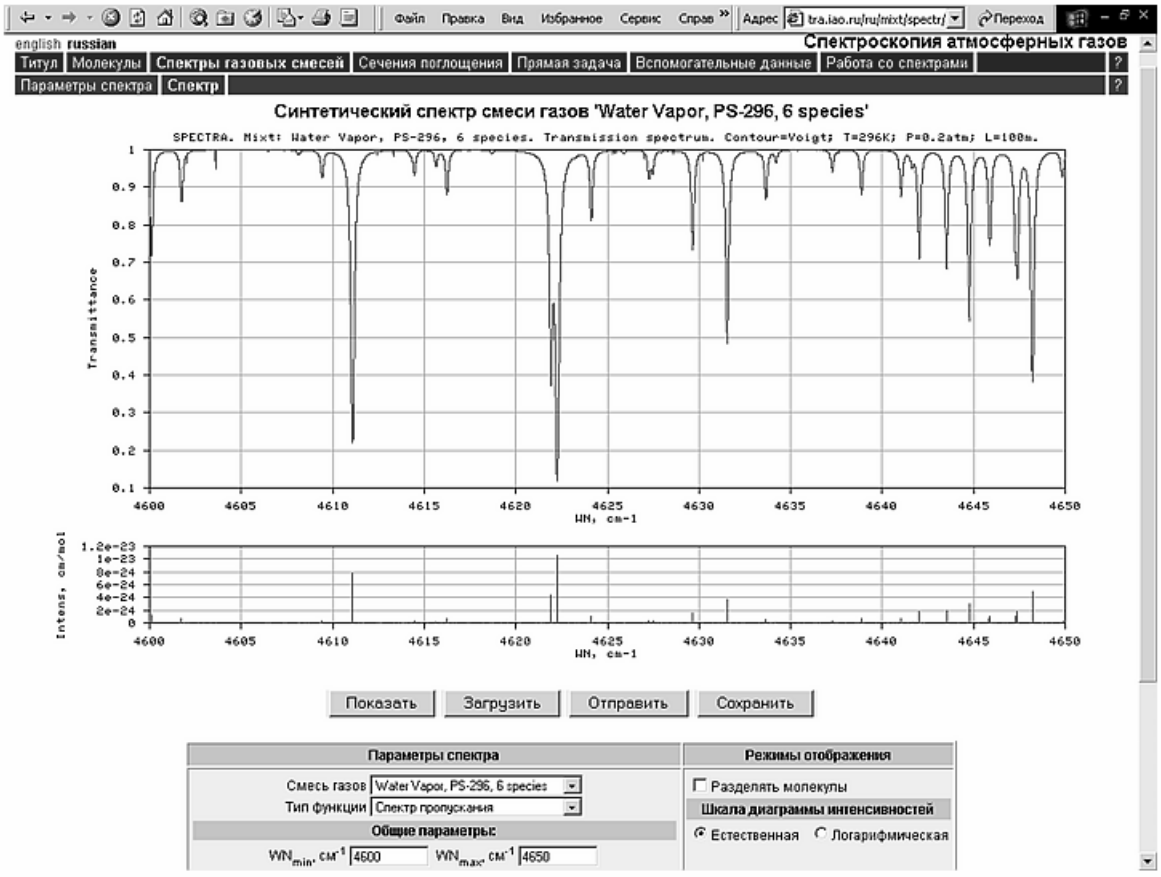

Рис. 9. Результат расчета спектра пропускания выбранной газовой смеси в заданном частотном диапазоне

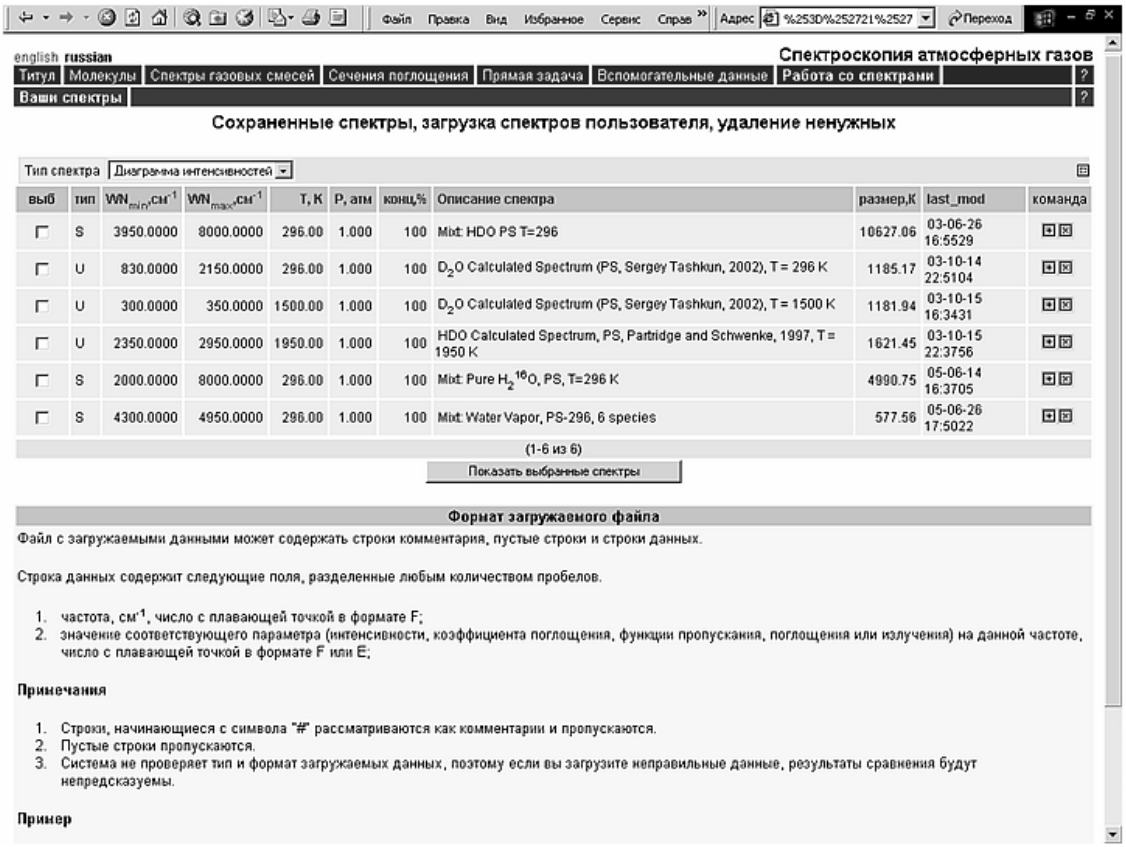

Рис. 10. Пример списка сохраненных спектров пользователя (диаграммы интенсивностей)

«*Сохранить*», расположенной между графическим изображением спектра и панелью запроса параметров спектра. Доступ к сохраненной информации осуществляется через раздел «*Работа со спектрами*», показанный на рис. 10. Сохраняемые спектры классифицируются по шести типам (поле «*Тип спектра*» на рис. 10) и соответствуют шести типам спектральных функций панели запроса параметров (см. рис. 3 и 4). Так, например, спектр рис. 8 сохранен в указанном разделе как «*Диаграмма интенсивностей*» — последняя запись списка на рис. 10. Спектр, отображенный на рис. 9, может быть сохранен как «*Спектр пропускания*» в разделе «*Работа со спектрами*». Символом «*S*» на рис. 10 отмечены спектры, полученные средствами системы. Символом «*U*» отмечены спектры, загруженные в систему пользователем со своего компьютера.

Как приготовить смесь изотопомеров выбранной молекулы?

Этот сервис доступен зарегистрированным пользователям. Для приготовления смеси изотопомеров пользователь должен перейти в раздел «*Вспомогательные данные/Смеси изотопов*», показанный на рис. 6. Выбор интересующей пользователя молекулы производится путем нажатия клавиши, соответствующей формуле этой молекулы, в списке молекул. Приготовление новой смеси производится либо копированием уже существующей смеси (выбирается из выпадающего списка в поле «*Скопировать из*»), либо созданием новой, с использованием клавиши «*Добавить*». Клавиша расположена в верхнем правом углу списка смесей. При нажатии клавиши «*Добавить*» на экране появляется форма «*Добавление новой смеси пользователя*». В форме перечислены все изотопомеры выбранной молекулы и соответствующие им источники ПСЛ. Пользователь должен заполнить поле «*название*», ввести значения относительных концентраций интересующих его изотопических модификаций молекулы и указать источники данных ПСЛ.

После заполнения формы и нажатия клавиши «*ОК*» в списке смесей появится новая запись. Напротив названия личной смеси пользователя имеются кнопки изменения и удаления этой смеси (в поле «*команда*»). При нажатии кнопки «*Изменить*» появляется форма «*Изменение смеси пользователя*», идентичная форме «*Добавление новой смеси пользователя*». Внесенные в форму изменения сохраняются нажатием клавиши «*ОК*».

Приготовив изотопические смеси всех необходимых молекул, пользователь может переходить к составлению газовой смеси.

Как приготовить газовую смесь?

Этот сервис доступен зарегистрированным пользователям. Для приготовления газовой смеси поль-

зователь должен перейти в раздел «*Вспомогательные данные/Смеси газов*». На этой странице отображается список всех газовых смесей, доступных пользователю. Процедура создания новой смеси газов аналогична вышеописанной процедуре приготовления изотопических смесей молекул. При нажатии клавиши «*Добавить*» на экране появляется форма «*Добавление новой смеси пользователя*». В форме перечислены все 45 молекулярных компонент, перечисленных в списках молекул (см. рис. 2 и 6).

Заполнение и сохранение формы производятся аналогично тому, как это делалось при составлении смеси изотопомеров отдельной молекулы. Смесь изотопомеров для каждой молекулы выбирается из выпадающего списка «*смесь изотопов*», расположенного напротив формулы каждой из молекул. После заполнения формы и нажатия клавиши «*ОК*» в списке газовых смесей появится новая запись. Новая запись появится также и в выпадающем списке поля «*Смесь газов*» в форме запроса параметров для моделирования спектра (см. рис. 4 и 9).

Заключение

Информационно-вычислительная система SPECTRA предоставляет доступ через Интернет не только к данным известных спектроскопических банков [8, 9, 14], но и к данным, не представленным в других банках [10, 11, 15]. Существенной особенностью данной системы является возможность интерактивного решения ряда спектроскопических задач по моделированию спектров высокого и низкого разрешения для широкого круга молекул атмосферных газов.

Решение прямой спектроскопической задачи в рамках системы позволяет пользователю рассчитывать спектры молекул для тех спектральных диапазонов и условий, которые не представлены в базе данных системы по ПСЛ.

Использование системы может быть полезным для специалистов в области молекулярной спектроскопии, атмосферной оптики и иных направлений, связанных с использованием данных о спектральных свойствах газовых сред.

Кроме того, система может использоваться в качестве инструмента обучения при чтении курсов лекций и проведении практических занятий по оптике и молекулярной спектроскопии в высших учебных заведениях (факультетах, кафедрах) физического и химического профилей.

Авторы статьи выражают благодарность своим коллегам — С.А. Ташкуну, В.И. Перевалову и Вл.Г. Тютереву за сотрудничество и вклад в развитие системы, а также Ю.А. Поплавскому и В.А. Капитанову за полезные замечания и обсуждения, способствовавшие исправлению ряда ошибок моделирования спектров.

Работа выполняется при частичной поддержке из программы РАН 2.10 «Оптическая спектроскопия и стандарты частоты».

1. http://www.hitran.com
2. http://spec.jpl.nasa.gov
3. http://www.cdms.de
4. http://physics.nist.gov
5. http://physics.nist.gov/PhysRefData/wavenum/html/spect.html
6. *Бабиков Ю.Л., Барб А., Головко В.Ф., Михайленко С.Н., Тютерев Вл.Г.* Интернет-коллекции по молекулярной спектроскопии // Сб. трудов Третьей Всерос. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» RCDL-2001. Сентябрь 2001. Петрозаводск: Изд-во Карел. науч. центра РАН, 2001. С. 183–187.
7. *Михайленко С.Н., Ташкун С.А., Бабиков Ю.Л., Головко В.Ф., Тютерев Вл.Г.* Прямая спектроскопическая задача в рамках ИВС «Спектроскопия атмосферных газов» // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17. № 11. С. 927–938.
8. *Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Benner D.C., Birk M., Brown L.R. Carleer M.R., Chackerian C., Jr., Chance K., Dana V., Malathy Devi V., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Vander Auwera J., Varanasi P., Wagner G.* The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. *in press.*
9. *Jacquinet-Husson N., Arie E., Ballard J., Barbe A., Bjoraker G., Bonnet B., Brown L.R., Camy-Peyret C., Champion J.-P., Chedin A., Chursin A., Clerbaux C., Duxbury G., Flaud J.-M., Fourrie N., Fayt A., Graner G., Gamache R.R., Goldman A., Golovko V., Guelachvili G., Hartmann J.-M., Hilico J.-C., Hillman J., Lefevre G., Lellouch E., Mikhailenko S.N., Naumenko O.V., Nemtchinov V., Newnham D.A., Nikitin A., Orphal J., Perrin A., Reuter D.C., Rinsland C.P., Rosenmann L., Rothman L.S., Scott N.A., Selby J., Sinitsa L.N., Sirota J.M., Smith M.A.H., Smith K.M., Tyuterev Vl.G., Tipping R.H., Urban S., Varanasi P., Weber M.* The 1997 spectroscopic GEISA databank // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1999. V. 62. N 2. P. 205–254.
10. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L.* CDSD-296, the carbon dioxide spectroscopic databank: Version for atmospheric applications // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. *in preparation.*
11. *Науменко О.В., Половцева Е.Р.* База данных по поглощению сероводорода в области 4 400–11 400 $см^{-1}$ // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 11. С. 985–991.
12. *Partridge H., Schwenke D.W.* The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. N 11. P. 4618–4639.
13. *Schwenke D.W., Partridge H.* Convergence testing of the analytic representation of an *ab initio* dipole moment function for water: Improved fitting yields improved intensities // J. Chem. Phys. 2000. V. 113. N 16. P. 6592–6597.
14. *Rothman L.S., Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goorvitch D., Goldman A., Hawkins R.L. Schroeder J., Selby J.E.A., Watson E.B.* HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. *in preparation.*
15. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N.* CDSD-1000, the high-temperature

carbon dioxide spectroscopic databank // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2003. V. 82. N 1–4. P. 165–197.
16. *Golovko V.F., Nikitin A.V., Chursin A.A., Tyuterev Vl.G.* Information system AIRSENTRY for modeling atmospheric infra-red spectra and radiation transmission in the atmosphere // Proc. of the 2nd Intern. Workshop ADBIS95. Moscow: Phasis Publishing House, 1995. V. 2. P. 12–14.
17. *Tyuterev Vl.G., Babikov Yu.L., Tashkun S.A., Perevalov V.I., Nikitin A.V., Champion J.-P., Wenger Ch., Pierre C., Pierre G., Hilico J.-C., Loete M.* T.D.S. spectroscopic databank for spherical tops: DOS version // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1994. V. 52. N 3/4. P. 459–479.
18. *Husson N., BonnetB., Chedin A., Scott N.A., Chursin A.A., Golovko V.F., Tyuterev Vl.G.* The GEISA data bank in 1993: A PC/AT compatible computers new version // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1994. V. 52. N 3/4. P. 425–438.
19. http://www.mysql.org
20. http://www.php.net
21. *Tashkun S.A., Tyuterev Vl.G.* GIP: a program for experimental data reduction in molecular spectroscopy // Proc. SPIE. 1994. V. 2205. P. 188–191.
22. http://smarty.php.net

S.N. Mikhailenko, Yu.L. Babikov, V.F. Golovko. **Information-computation system «Spectroscopy of Atmospheric Gases». Structure and main functions.**

This paper describes the structure and main functional capabilities of the information-computation system «Spectroscopy of Atmospheric Gases». The system is a convenient tool for the Internet access to the results of investigation in spectroscopy of atmospheric gases and for the interactive solution of some spectroscopic problems. The system can be used both for research purposes and for teaching the courses of optics and molecular spectroscopy in the higher school.