

## Программно-алгоритмическая система для численного моделирования широкополосного лазерного газоанализа атмосферы

С. А. Садовников<sup>а</sup>, аспирант, младший научный сотрудник, [orcid.org/0000-0002-3082-3521](https://orcid.org/0000-0002-3082-3521), [sadsa@iao.ru](mailto:sadsa@iao.ru)  
<sup>а</sup>Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН, пл. Академика Зуева, 1, Томск, 634055, РФ

**Введение:** актуальной исследовательской задачей является разработка гибких программно-алгоритмических комплексов с возможностью эволюционного развития расчетного функционала для успешного решения проблем оперативного и качественного контроля параметров окружающей среды. **Цель:** разработка модульной системы численного моделирования лазерного газоанализа атмосферы. **Результаты:** на основе математического аппарата метода дифференциального поглощения разработана программно-алгоритмическая система, обеспечивающая расчет сечений молекулярного поглощения, коэффициентов молекулярного поглощения, спектров пропускания атмосферы и лидарных сигналов. Расчет контуров линий поглощения производится с использованием контура Фойгта. В качестве источников априорной информации используются базы спектроскопических данных HITRAN и статистические модели распределения температуры, давления и газовых компонент атмосферы. Вместе с тем для моделирования лидарных сигналов разработаны программные блоки расчета и учета коэффициента молекулярного рассеяния и коэффициентов аэрозольного поглощения и рассеяния. Для проверки применимости различных лазерных источников в задачах экологического мониторинга атмосферы разработан блок расчета ошибок восстановления концентраций исследуемых газовых компонент атмосферы при неучете поглощения лазерного излучения сторонними газами. В целях проверки корректности функционирования программного комплекса разработан программный блок сравнения результатов моделирования спектров поглощения и пропускания атмосферы с применением общепринятой информационной системы SPECTRA. Величина несовпадения результатов расчета спектров пропускания атмосферы, полученных с использованием программно-алгоритмической системы, при сравнении с результатами SPECTRA составляет менее 1 %. Таким образом, набор представленных программных блоков позволяет осуществлять комплексное моделирование дистанционного газоанализа атмосферы. **Практическая значимость:** программно-алгоритмический комплекс позволяет производить экспресс-оценку возможностей применения широкого круга источников лазерного излучения в задачах дистанционного газоанализа атмосферы.

**Ключевые слова** – атмосфера, лидарное зондирование, метод дифференциального поглощения, газовые составляющие атмосферы.

**Цитирование:** Садовников С. А. Программно-алгоритмическая система для численного моделирования широкополосного лазерного газоанализа атмосферы. *Информационно-управляющие системы*, 2018, № 6, с. 66–73. doi:10.31799/1684-8853-2018-6-66-73  
**Citation:** Sadovnikov S. A. Software system for numerical simulation of broadband laser gas analysis of the atmosphere. *Informatsionno-upravliaiushchie sistemy* [Information and Control Systems], 2018, no. 6, pp. 66–73 (In Russian). doi:10.31799/1684-8853-2018-6-66-73

### Введение

В то время как прямое управление процессами глобальных масштабов на сегодня неподвластно человечеству, антропогенные факторы, побуждающие те или иные пагубные тренды, подвержены прямому контролю и минимизации при обнаружении непосредственной связи с динамикой неблагоприятных изменений.

Очевидно, что обнаружение подобных связей возможно лишь в случае применения передовых решений в области контроля параметров окружающей среды, отвечающих жестким требованиям качества, оперативности получения-обработки и информативности результатов.

Так, с развитием техники и технологий, наряду с такими устоявшимися подходами в газоанализе атмосферы, как метод дифференциального поглощения (МДП) [1] и дифференциальная оптическая абсорбционная спектроскопия (ДОАС)

[2], все чаще возникают идеи конвергенции нескольких концепций. В результате предлагаются взаимодополняющие методики (например, МДП–ДОАС [3]), решающие традиционные сложности исходных подходов.

С точки зрения дистанционного газоанализа атмосферы особенное внимание сегодня уделяется ближнему и среднему ИК-диапазонам спектра ввиду расположения в них большого числа колебательных и колебательно-вращательных линий поглощения ароматических веществ [4], вредных выбросов промышленных производств [5], парниковых газов [6], а также наркотических веществ [7].

Большой интерес к указанному диапазону спектра подкрепляется как значимыми успехами в синтезе новых нелинейных кристаллов [8] и построении лазерных систем на их основе с возможностью плавной перестройки длины волны выходного излучения [9], так и существенным прогрессом в развитии фотоприемных устройств [10].

Вместе с тем бурное развитие языков программирования, рост возможностей современной вычислительной техники и плоды развития концепции свободного программного обеспечения [11] предоставляют новые инструменты для повышения производительности систем научного моделирования.

Целью работы являются разработка и апробация в численном эксперименте программно-алгоритмической системы для численного моделирования лазерного газоанализа атмосферы в ближнем и среднем ИК-диапазонах спектра.

### Математический аппарат и алгоритм моделирования спектров поглощения и пропускания атмосферы

Расчет спектров поглощения и пропускания атмосферы, а также сопутствующих функций проводится с использованием общепринятого подхода «линия-за-линией», который состоит в пошаговом расчете и учете вклада каждой линии поглощения газовых составляющих атмосферы в итоговый спектр. Эмпирической и теоретико-эмпирической опорой процесса моделирования спектров является база спектроскопических данных HITRAN [12], содержащая информацию о параметрах линий поглощения различных газов. В процессе моделирования спектров поглощения и пропускания атмосферы необходимо учитывать влияние внешних факторов различного рода.

Так, ввиду теплового движения молекул газовых компонент атмосферы возникает эффект уширения спектральных линий — эффект Доплера, при этом расчет полуширины контура производится следующим образом [13]:

$$\begin{aligned} \gamma_D(T) &= \frac{v_0}{c} \sqrt{\frac{2RT \ln 2}{M}}, \\ v_0 &= v_{\text{line}} + \delta(p_{\text{ref}})p, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $v_{\text{line}}$  — центр линии поглощения газовой компоненты, а  $\delta(p_{\text{ref}})p$  — величина сдвига центра линии поглощения, обусловленная давлением окружающей среды [12].

В свою очередь эффекты столкновения также приводят к уширению линий поглощения и описываются функцией Лоренца, при этом лоренцевская полуширина, с учетом влияния температуры и давления, представляется в следующем виде [14]:

$$\begin{aligned} \gamma_L(p_{\text{GAS}}, T) &= \left(\frac{T_{\text{ref}}}{T}\right)^{n_{\text{air}}} \times \\ &\times \left( \gamma_{\text{air(ref)}} \frac{(p - p_{\text{GAS}})}{p_{\text{ref}}} + \gamma_{\text{self(ref)}} \frac{p_{\text{GAS}}}{p_{\text{ref}}} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $p_{\text{GAS}}$  — парциальное давление газа;  $p_{\text{ref}} = 1$  атм;  $T_{\text{ref}} = 296$  К;  $n_{\text{air}}$  — коэффициент температурной зависимости уширения полуширины воздухом;  $\gamma_{\text{air(ref)}}$  — уширение полуширины воздухом при  $p = p_{\text{ref}}$  и  $T = T_{\text{ref}}$ ;  $\gamma_{\text{self(ref)}}$  — самоуширение полуширины при  $p = p_{\text{ref}}$  и  $T = T_{\text{ref}}$  [14, 15].

Вместе с тем необходимо производить температурную коррекцию интенсивностей линий поглощения [15]:

$$\begin{aligned} S(T) &= S(T_{\text{ref}}) \frac{Q(T_{\text{ref}}) \exp(-c_2 E_L / T)}{Q(T) \exp(-c_2 E_L / T_{\text{ref}})} \times \\ &\times \frac{[1 - \exp(-c_2 v / T)]}{[1 - \exp(-c_2 v / T_{\text{ref}})]}, \\ c_2 &= hc/k_B, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $S(T_{\text{ref}})$  — интенсивность линии при 296 К;  $Q(T)$  — общая внутренняя частичная функция;  $c_2$  — вторая радиационная постоянная;  $E_L$  — энергия нижнего состояния [14, 15].

Опираясь на приведенные параметры спектральных линий, возможно провести численное моделирование спектров поглощения и пропускания атмосферы. Так, профиль объемного коэффициента ослабления лазерного излучения за счет молекулярного поглощения можно представить в следующем виде [16, 17]:

$$\alpha_{\text{ma}}(v, R) = n(R)K_{\text{Voigt}}(v, R), \quad (4)$$

где  $n(R)$  — концентрация газовой компоненты;  $K_{\text{Voigt}}(v, R)$  — профиль коэффициента поглощения зондирующего лазерного излучения молекулами исследуемого газа [17, 18]:

$$\begin{aligned} K_{\text{Voigt}}(v, R) &= \frac{S(T)}{\gamma_D(T)} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \varphi(x, y), \\ \varphi(x, y) &= \Re\{w(z)\}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\varphi(x, y)$  — функция Фойгта, обеспечивающая учет эффекта уширения спектральных линий Доплера и столкновений одновременно.

Функцию Фойгта возможно получить путем выделения вещественной части комплексной функции [18]:

$$\begin{aligned} w(z) &= \exp(-z^2) \left( 1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(t^2) dt \right), \\ z &= x + iy, \\ x &= \frac{|v - v_0|}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}, \\ y &= \frac{\gamma_L}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Вместе с тем спектр пропускания атмосферы возможно получить следующим образом [17]:

$$T(\nu, R) = \exp\left(-2 \int_0^R \alpha(\nu, R) dR\right),$$

$$\alpha(\nu, R) = \alpha_{ma}(\nu, R) + \alpha_{ms}(\nu, R) + \alpha_{aa}(\nu, R) + \alpha_{as}(\nu, R), \quad (7)$$

где  $\alpha_{ms}(\nu, R)$  — профиль объемного коэффициента ослабления лазерного излучения за счет молекулярного рассеяния;  $\alpha_{aa}(\nu, R)$  и  $\alpha_{as}(\nu, R)$  — профили коэффициентов ослабления, обусловленных поглощением и рассеянием атмосферными аэрозолями.

На основе представленного математического аппарата разработаны алгоритм функционирования и программно-алгоритмическая система для численного моделирования широкополосного лазерного газоанализа атмосферы.

### Функциональные возможности программно-алгоритмической системы

Процесс функционирования программы можно разделить на три основных этапа, представленных в виде столбцов на рис. 1: 1) выбор и подготовка входных параметров; 2) численное моделирование; 3) представление и сохранение результатов расчета.

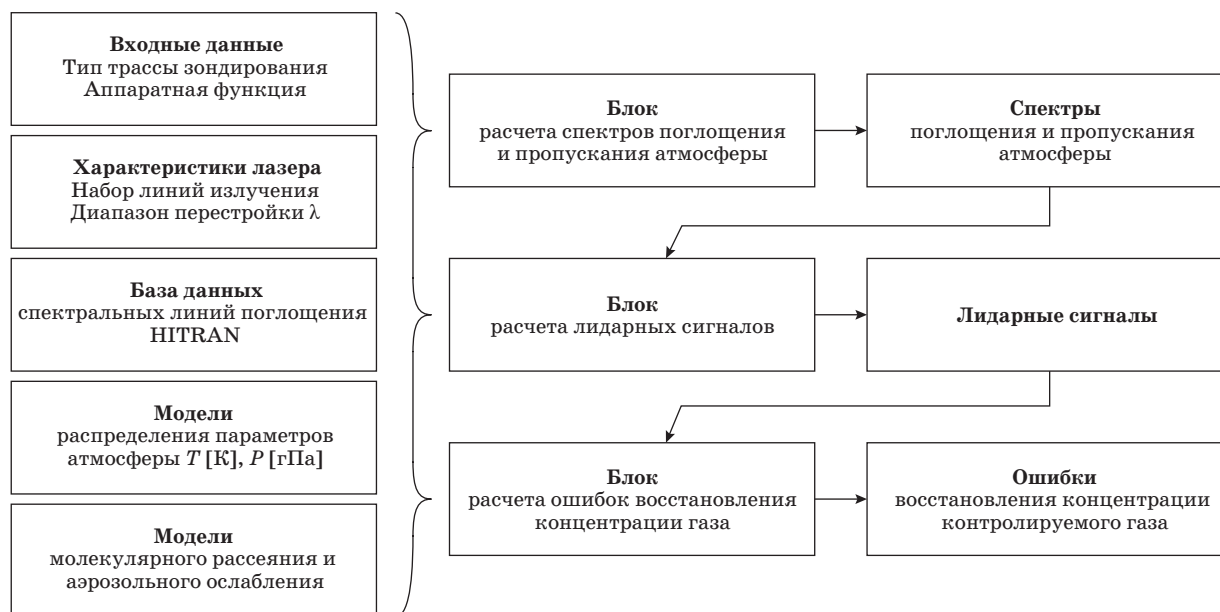
В качестве входных данных выступают параметры трассы зондирования, тип трассы (горизонтальная, вертикальная), характеристики источ-

ника излучения (набор линий излучения, диапазон перестройки, ширина линии излучения, мощность) и приемной части прибора.

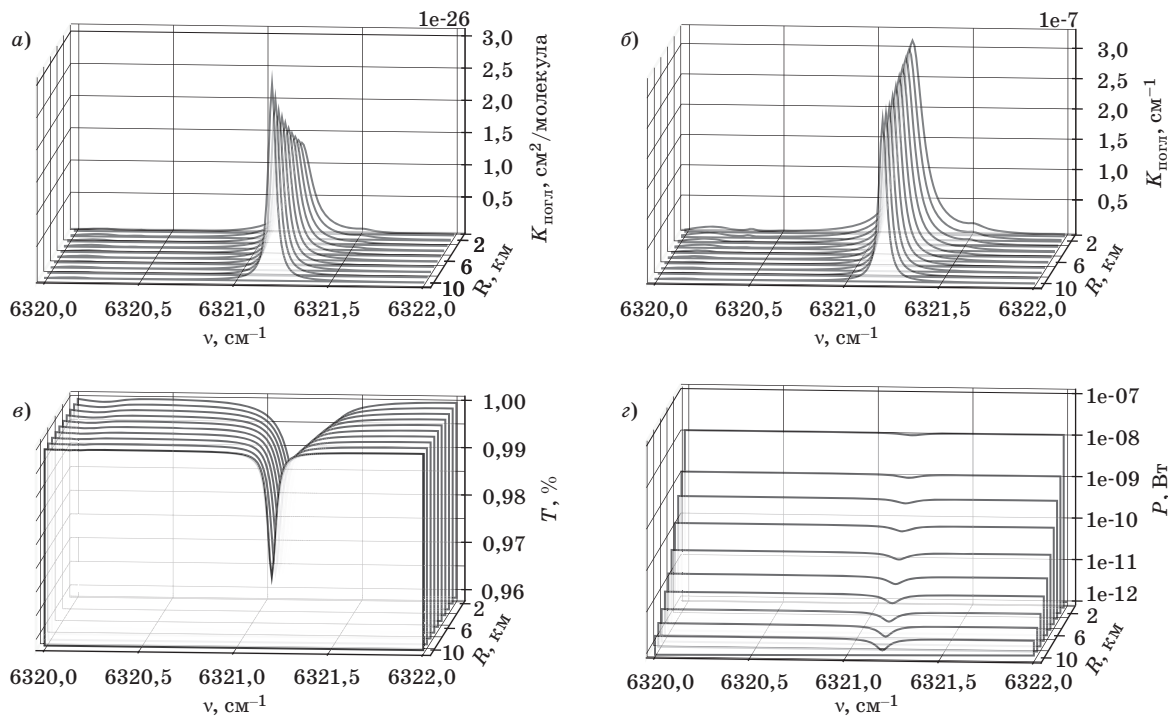
В список основных функциональных возможностей программно-алгоритмической системы входит расчет сечения молекулярного поглощения, коэффициента молекулярного поглощения (рис. 2, а и б), спектров пропускания атмосферы (рис. 2, в) на основе базы данных HITRAN [12] и статистических моделей распределения атмосферных характеристик [19]. Вместе с тем автором разработан программный блок моделирования лидарных сигналов (рис. 2, г), в процессе функционирования которого производятся расчет и учет коэффициента молекулярного рассеяния (рис. 3, а) [20] и коэффициентов аэрозольного поглощения (рис. 3, б) и рассеяния [21] соответственно.

Необходимо отметить, что при расчете указанных спектров предусмотрена возможность выбора различных аппаратных функций: прямоугольника, треугольника, Гаусса, Лоренца и др. [22]. При этом, как отмечалось ранее, расчет контуров линий поглощения производится с использованием контура Фойгта [18].

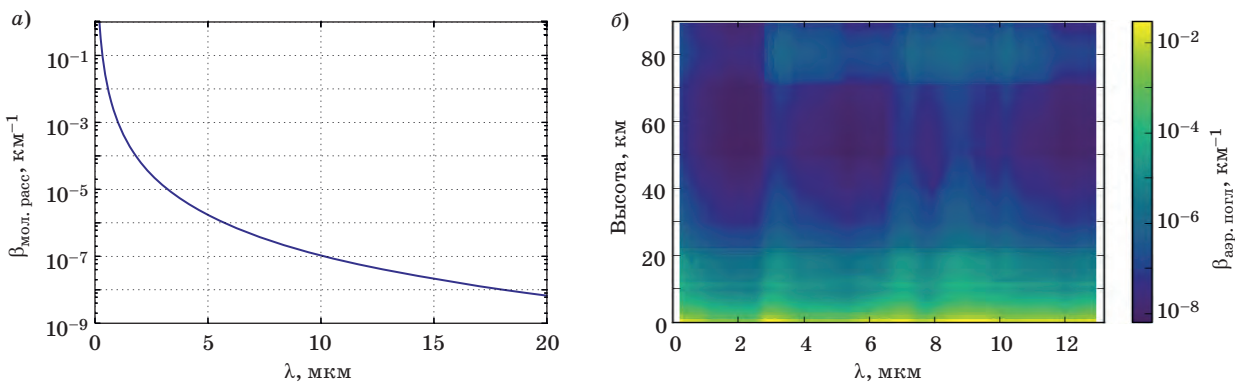
Для целей проверки применимости различных лазерных источников в задачах экологического мониторинга атмосферы разработан блок расчета ошибок восстановления концентраций исследуемых газовых компонент атмосферы при неучете поглощения лазерного излучения сторонними газами. В результате набор представленных программных блоков позволяет производить комплексное моделирование дистанционного газоанализа атмосферы.



■ Рис. 1. Общая схема функционирования программно-алгоритмической системы  
 ■ Fig. 1. General scheme of the program-algorithmic system functioning



■ **Рис. 2.** Спектры поглощения атмосферы (а, б), спектр пропускания атмосферы (в) и лидарные сигналы (г)  
 ■ **Fig. 2.** Atmospheric absorption spectra (а, б), atmospheric transmission spectrum (в) and lidar signals (г)



■ **Рис. 3.** Зависимости коэффициентов молекулярного рассеяния (а) и аэрозольного поглощения (б) от длины волны  
 ■ **Fig. 3.** Molecular scattering (а) and aerosol absorption coefficients (б) versus wavelength

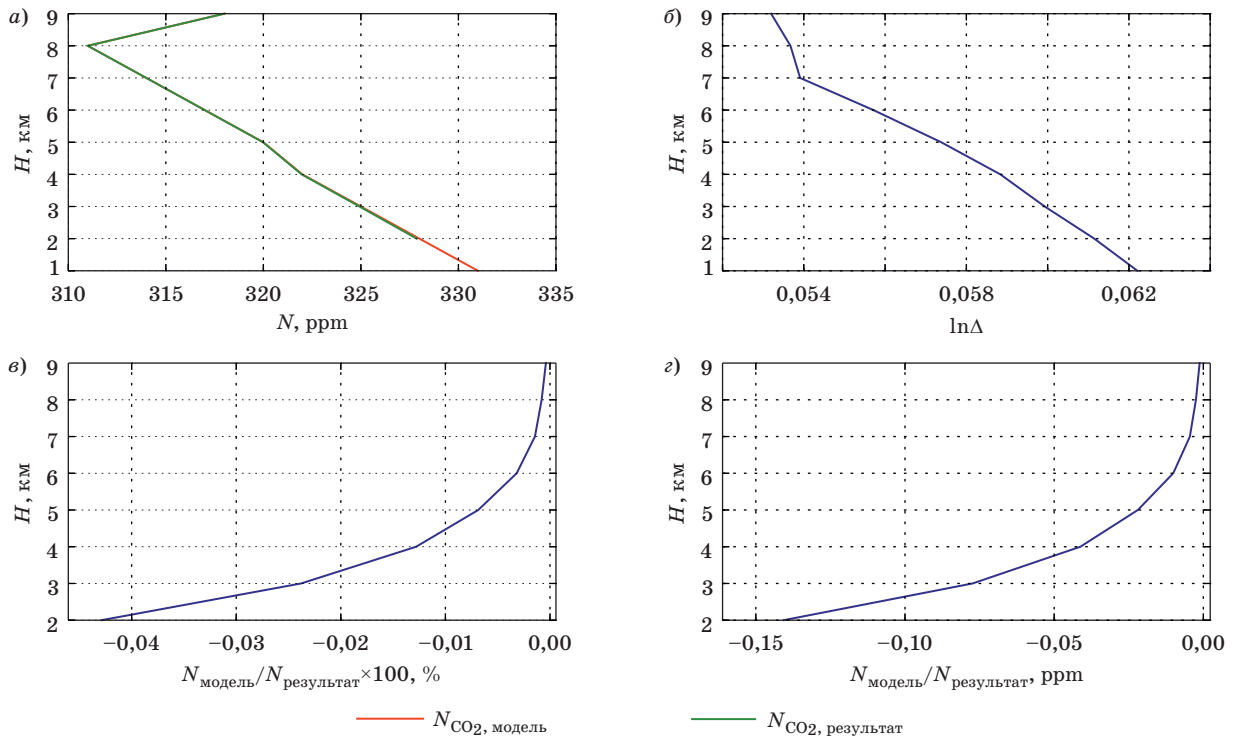
Результаты численного эксперимента по восстановлению концентрации углекислого газа на вертикальной трассе лета средних широт [19] приведены на рис. 4, где показан пример восстановления концентрации исследуемой газовой компоненты ( $\text{CO}_2$ ) и результат расчета ошибки, возникающей ввиду неучета влияния слабой линии поглощения водяного пара (рис. 2, б —  $6321,55 \text{ см}^{-1}$ ), расположенной неподалеку от анализируемой линии поглощения углекислого газа (рис. 2, б —  $6321,25 \text{ см}^{-1}$ ).

Концентрация водяного пара снижается с увеличением высоты, ввиду этого представленная на рис. 4 ошибка влияния мешающего поглощения

уменьшается с высотой. Очевидно, при учете влияния всех факторов, вызывающих ошибки восстановления концентраций газов, будет наблюдаться рост величины ошибки с высотой.

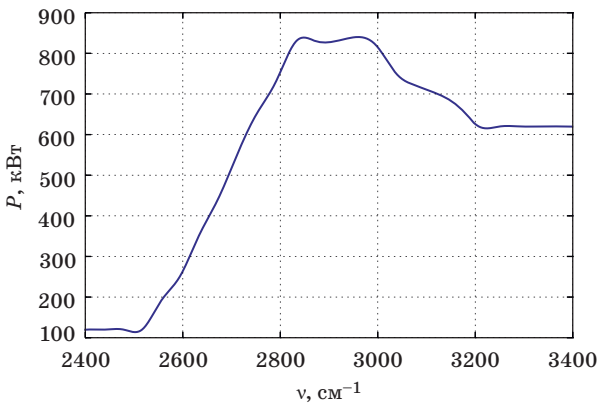
Для случая применения расчетов в приложении к дискретно и плавно перестраиваемым по частоте источникам лазерного излучения предусмотрена возможность использования линейно и кубически интерполируемых зависимостей мощности лазерных импульсов от длины волны или волнового числа (рис. 5).

Вместе с тем представленная на всех рисунках графика является интерактивной, что суще-



■ **Рис. 4.** Результаты численного эксперимента по восстановлению концентрации углекислого газа: *a* — модельная и восстановленная зависимости концентраций  $\text{CO}_2$  вдоль трассы зондирования; *b* — разность логарифмов величин лидарных сигналов [16]; *v, z* — ошибка восстановления концентрации  $\text{CO}_2$  в процентах и в ppm соответственно

■ **Fig. 4.** The results of a numerical experiment to reconstructing the concentration of carbon dioxide: *a* — model and reconstructed dependences of  $\text{CO}_2$  concentrations along the sounding path; *b* — the difference between the logarithms of the lidar signals [16]; *v, z* — error of  $\text{CO}_2$  concentration reconstructing in percent and ppm, respectively



■ **Рис. 5.** Кубически интерполированная перестроенная кривая лазера с параметрической генерацией света в среднем ИК-диапазоне спектра

■ **Fig. 5.** A cubic interpolated tuning curve of a laser with parametric light generation in the middle IR range of the spectrum

ственно упрощает процесс анализа результатов моделирования и способствует увеличению производительности работы оператора.

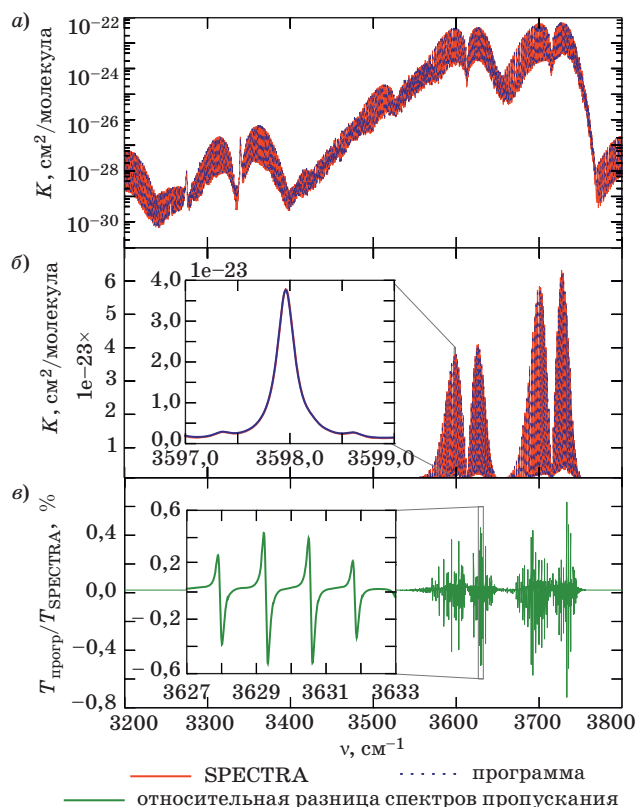
Наряду с представленными возможностями, интуитивная архитектура и модульная органи-

зация программного комплекса предоставляют возможность расширять существующий расчетный функционал для решения смежных задач.

### Результаты моделирования

Проверка корректности функционирования программного комплекса проводилась путем сравнения результатов моделирования спектров с применением информационной системы SPECTRA [23]. Сравнивались результаты моделирования спектров поглощения и пропускания атмосферы в условиях лета средних широт. Рис. 6, *a* показывает качественное совпадение хода коэффициента поглощения в области как слабых, так и сильных линий поглощения. На рис. 6, *b* для наглядности приведена увеличенная часть спектра, а именно одна из линий поглощения  $\text{CO}_2$ . При рассмотрении данной линии видно, что величина коэффициентов поглощения совпадает, однако положения центров линий имеют небольшое расхождение. Из анализа кривой относительной разницы между спектрами пропускания  $\text{CO}_2$  на рис. 6, *v* можно сделать вывод о том, что итоговая величина несовпадения результатов расчета составляет менее 1 %.





■ **Рис. 6.** Результаты расчета спектров поглощения (а, б) и спектров пропускания (в)  $\text{CO}_2$   
 ■ **Fig. 6.** Calculation results for absorption spectra (a, б) and transmission spectra (в) of  $\text{CO}_2$

### Литература

1. Schotland R. M. Some observations of the vertical profile of water vapor by a laser optical radar. *Proc. Fourth Symposium on Remote Sensing of the Environment*, Ann Arbor, Michigan, 1966, pp. 273–283.
2. Lampel J., Zielcke J., Schmitt S., Pöhler D., Frieß U., Platt U., Wagner T. Detection of  $\text{O}_4$  absorption around 328 and 419 nm in measured atmospheric absorption spectra. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018, vol. 18, iss. 3, pp. 1671–1683. doi:10.5194/acp-18-1671-2018
3. Романовский О. А., Суханов А. Я., Харченко О. В., Яковлев С. В., Садовников С. А. Моделирование дистанционного газоанализа атмосферы лазерной системой на основе параметрического генератора света. *Информационно-управляющие системы*, 2017, № 5, с. 71–79. doi:10.15217/issn1684-8853.2017.5.71
4. Sandford S. A., Bernstein M. P., Materese C. K. The infrared spectra of polycyclic aromatic hydrocarbons with excess peripheral H atoms (Hn-PAHs) and their relation to the 3.4 and 6.9  $\mu\text{m}$  PAH emission features. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 2013, vol. 205, no. 1, pp. 1–30. doi:10.1088/0067-0049/205/1/8

В целом реализованный на данный момент функционал программно-алгоритмического комплекса позволяет производить экспресс-оценку возможностей применения широкого круга источников лазерного излучения в задачах дистанционного газоанализа атмосферы.

### Заключение

Разработана автоматизированная программно-алгоритмическая система, обеспечивающая расчет коэффициентов поглощения, спектров пропускания атмосферы, лидарных сигналов, а также ошибок восстановления концентраций газовых компонент атмосферы. Анализ результатов сравнения спектров, полученных в программе, с данными расчета общеизвестной информационной системы SPECTRA показал возможность использования разработанного программного комплекса в задачах моделирования дистанционного газоанализа атмосферы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-45-700722 в части разработки блока расчета спектров пропускания атмосферы) и гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых (грант № МК-1367.2017.5 в части разработки блока моделирования лидарных сигналов).

5. Lambert-Girard S., Allard M., Piché M., Babin F. Differential optical absorption spectroscopy lidar for mid-infrared gaseous measurements. *Applied Optics*, 2015, vol. 54, no. 7, pp. 1647–1656. doi:10.1364/AO.54.001647
6. Griffith D. W. T., Pohler D., Schmitt S., Hammer S., Vardag S. N., Platt U. Long open-path measurements of greenhouse gases in air using near-infrared fourier transform spectroscopy. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, vol. 11, iss. 3, pp. 1549–1563. doi:10.5194/amt-11-1549-2018
7. Айрапетян В. С., Маганкова Т. В. Расчет концентрации наркотических веществ методом дифференциального поглощения и рассеяния. *СибОптика-2015: сб. материалов Междунар. науч. конф.*, Новосибирск, 13–25 апреля 2015 г., Новосибирск, 2015, т. 1, с. 141–147.
8. Guo J., Xie J.-J., Li D.-J., Yang G.-L., Chen F., Wang C.-R., Zhang L.-M., Andreev Y. M., Kokh K. A., Lanski G. V., Svetlichnyi V. A. Doped GaSe crystals for laser frequency conversion. *Light: Science & Applications*, 2015, vol. 4, iss. 12, pp. 1–12. doi:10.1038/lssa.2015.135
9. Колкер Д. Б., Шерстов И. В., Костюкова Н. Ю., Бойко А. А., Зенов К. Г., Пустовалова Р. В. Комбинированный параметрический генератор света

- с непрерывной перестройкой длины волны излучения в спектральном диапазоне 2.5–10.8 мкм. *Квантовая электроника*, 2017, т. 47, № 1, с. 14–19.
10. Демьяненко М. А., Козлов А. И., Овсяк В. Н. Аналитическое сравнение характеристик фотоприемников инфракрасного диапазона на основе фотодиодов HgCdTe и фотодетекторов GaAs/AlGaAs с квантовыми ямами. *Оптический журнал*, 2016, т. 83, № 9, с. 64–71.
  11. Bressert E. *Scipy and Numpy: an Overview for Developers*. O'Reilly Media, 2012. 67 p.
  12. Gordon I. E., Rothman L. S., Hill C., Kochanov R. V., Tan Y., Bernath P. F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K. V., Drouin B. J., Flaud J.-M., Gamache R. R., Hodges J. T., Jacquemart D., Perevalov V. I., Perrin A., Shine K. P., Smith M.-A. H., Tennyson J., Toon G. C., Tran H., Tyuterev V. G., Barbe A., Császár A. G., Devi V. M., Furtenbacher T., Harrison J. J., Hartmann J.-M., Jolly A., Johnson T. J., Karman T., Kleiner I., Kyuberis A. A., Loos J., Lyulin O. M., Massie S. T., Mikhailenko S. N., Moazzen-Ahmadi N., Müller H. S. P., Naumenko O. V., Nikitin A. V., Polyansky O. L., Rey M., Rotger M., Sharpe S. W., Sung K., Starikova E., Tashkun S. A., Vander Auwera J., Wagner G., Wilzewski J., Wcislo P., Yu S., Zak E. J. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2017, vol. 203, pp. 3–69. doi:10.1016/j.jqsrt.2017.06.038
  13. Зуев В. Е., Макушкин Ю. С., Пономарев Ю. Н. *Спектроскопия атмосферы*. Л.: Гидрометеиздат, 1987. 248 с.
  14. Edwards D. P. *GENLN2: A general line-by-line atmospheric transmittance and radiance model*. NCAR Technical Note, 1992. 147 p. doi:10.5065/D6W37T86
  15. Бобровников С. М., Матвиенко Г. Г., Романовский О. А., Сериков И. Б., Суханов А. Я. *Лидарный спектроскопический газоанализ атмосферы*. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2014. 508 с.
  16. Hinkley E. D. *Laser Monitoring of the Atmosphere*. Springer-Verlag, 1976. 396 p.
  17. Романовский О. А., Харченко О. В., Яковлев С. В. Методические аспекты лидарного зондирования малых газовых составляющих атмосферы по методу дифференциального поглощения. *Журнал прикладной спектроскопии*, 2012, т. 79, № 5, с. 799–805.
  18. Terlouw J. P., Vogelaar M. G. R., Breddels M. A. *Kapteyn documentation*. <https://media.readthedocs.org/pdf/kapteyn/latest/kapteyn.pdf> (дата обращения: 27.09.2018).
  19. Зуев В. Е., Комаров В. С. Статистические модели температуры и газовых компонент атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1986. 264 с.
  20. Penndorf R. Tables of the refractive index for standard air and the rayleigh scattering coefficient for the spectral region between 0.2 and 20.0  $\mu$  and their application to atmospheric optics. *Journal of the Optical Society of America*, 1957, vol. 47, iss. 2, pp. 176–182. doi:10.1364/JOSA.47.000176
  21. Креков Г. М., Рахимов Р. Ф. *Оптико-локационная модель континентального аэрозоля*. Новосибирск: Наука, 1982. 199 с.
  22. Kochanov R. V., Gordon I. E., Rothman L. S., Wcislo P., Hill C., Wilzewski J. S. HITRAN Application Programming Interface (HAPI): A comprehensive approach to working with spectroscopic data. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2016, vol. 177, pp. 15–30. doi:10.1016/j.jqsrt.2016.03.005
  23. Михайленко С. Н., Бабинов Ю. Л., Головкин В. Ф. Информационно-вычислительная система «Спектроскопия атмосферных газов». Структура и основные функции. *Оптика атмосферы и океана*, 2005, т. 18, № 09, с. 765–776.

UDC 004.422.81; 551.510.412

doi:10.31799/1684-8853-2018-6-66-73

#### Software system for numerical simulation of broadband laser gas analysis of the atmosphere

S. A. Sadovnikov<sup>a</sup>, Post-Graduate Student, Junior Researcher, orcid.org/0000-0002-3082-3521, sadsa@iao.ru

<sup>a</sup>V. E. Zuev Institute of Atmospheric Optics SB RAS, 1, Academician Zuev Sq., 634021, Tomsk, Russian Federation

**Introduction:** Successful monitoring of environmental parameters requires the development of flexible software complexes with evolvable calculation functionality. **Purpose:** Developing a modular system for numerical simulation of atmospheric laser gas analysis. **Results:** Based on differential absorption method, a software system has been developed which provides the calculation of molecular absorption cross-sections, molecular absorption coefficients, atmospheric transmission spectra, and lidar signals. Absorption line contours are calculated using the Voigt profile. The prior information sources are HITRAN spectroscopic databases and statistical models of the distribution of temperature, pressure and gas components in the atmosphere. For modeling lidar signals, software blocks of calculating the molecular scattering coefficient and aerosol absorption/scattering coefficients were developed. For testing the applicability of various laser sources in the problems of environmental monitoring of the atmosphere, a concentration reconstruction error calculation block was developed for the atmospheric gas components, ignoring the interfering absorption of laser radiation by foreign gases. To verify the correct functioning of the software, a program block was developed for comparing the results of the modeling of atmospheric absorption and transmission spectra by using the standard SPECTRA information system. The discrepancy between the calculation of the atmospheric transmission spectra obtained using the developed system as compared to the SPECTRA results is less than 1%. Thus, a set of the presented program blocks allows you to carry out complex modeling of remote atmospheric gas analysis. **Practical relevance:** The software complex allows you to rapidly assess the possibilities of using a wide range of laser radiation sources for the problems of remote gas analysis.

**Keywords** — atmosphere, lidar sounding, differential absorption lidar technique, atmospheric trace gas.

**Citation:** Sadvnikov S. A. Software system for numerical simulation of broadband laser gas analysis of the atmosphere. *Informatsionno-upravliaiushchie sistemy* [Information and Control Systems], 2018, no. 6, pp. 66–73 (In Russian). doi:10.31799/1684-8853-2018-6-66-73

**References**

1. Schotland R. M. Some observations of the vertical profile of water vapor by a laser optical radar. *Proc. Fourth Symposium on Remote Sensing of the Environment*, Ann Arbor, Michigan, 1966, pp. 273–283.
2. Lampel J., Zielcke J., Schmitt S., Pöhler D., Frieß U., Platt U., Wagner T. Detection of O<sub>4</sub> absorption around 328 and 419 nm in measured atmospheric absorption spectra. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018, vol. 18, iss. 3, pp. 1671–1683. doi:10.5194/acp-18-1671-2018
3. Romanovskii O. A., Sukhanov A. Y., Kharchenko O. V., Yakovlev S. V., Sadvnikov S. A. Simulation of remote atmospheric sensing by a laser system based on optical parametric oscillator. *Informatsionno-upravliaiushchie sistemy* [Information and Control Systems], 2017, no. 5, pp. 71–79 (In Russian). doi:10.15217/issn1684-8853.2017.5.71
4. Sandford S. A., Bernstein M. P., Materese C. K. The infrared spectra of polycyclic aromatic hydrocarbons with excess peripheral H atoms (Hn-PAHs) and their relation to the 3.4 and 6.9 μm PAH emission features. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 2013, vol. 205, no. 1, pp. 1–30. doi:10.1088/0067-0049/205/1/8
5. Lambert-Girard S., Allard M., Piché M., Babin F. Differential optical absorption spectroscopy lidar for mid-infrared gaseous measurements. *Applied Optics*, 2015, vol. 54, no. 7, pp. 1647–1656. doi:10.1364/AO.54.001647
6. Griffith D. W. T., Pöhler D., Schmitt S., Hammer S., Vardag S. N., Platt U. Long open-path measurements of greenhouse gases in air using near-infrared fourier transform spectroscopy. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, vol. 11, iss. 3, pp. 1549–1563. doi:10.5194/amt-11-1549-2018
7. Ayrapetyan V. S., Maganakova T. V. Calculate the concentration drags method of differential absorption and scattering. *Sbornik materialov Mezhdunarodnoi nauchnoi konferentsii "SibOptika-2015"* [Proc. Int. Conf. "SibOptika-2015"], Novosibirsk, 2015, vol. 1, pp. 141–147 (In Russian).
8. Guo J., Xie J.-J., Li D.-J., Yang G.-L., Chen F., Wang C.-R., Zhang L.-M., Andreev Y. M., Kokh K. A., Lanski G. V., Svetlichnyi V. A. Doped GaSe crystals for laser frequency conversion. *Light: Science & Applications*, 2015, vol. 4, iss. 12, pp. 1–12. doi:10.1038/lsa.2015.135
9. Kolker D. B., Sherstov I. V., Kostyukova N. Yu., Boyko A. A., Zenov K. G., Pustovalova R. V. Combined optical parametric oscillator with continuous tuning of radiation wavelength in the spectral range 2.5–10.8 μm. *Quantum Electronics*, 2017, vol. 47, no. 1, pp. 14–19. doi:10.1070/QEL16238
10. Demyanko M. A., Kozlov A. I., Ovsiuk V. N. Comparative analysis of specifications for HgCdTe photodiode-based infrared photodetectors and for GaAs/AlGaAs quantum-well photodetectors. *Journal of Optical Technology*, 2016, vol. 83, no. 9, pp. 559–564. doi:10.1364/JOT.83.000559
11. Bressert E. *Scipy and numpy: an overview for developers*. O'Reilly Media, 2012. 67 p.
12. Gordon I. E., Rothman L. S., Hill C., Kochanov R. V., Tan Y., Bernath P. F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K. V., Drouin B. J., Flaud J.-M., Gamache R. R., Hodges J. T., Jacquemart D., Perevalov V. I., Perrin A., Shine K. P., Smith M.-A. H., Tennyson J., Toon G. C., Tran H., Tyuterev V. G., Barbe A., Császár A. G., Devi V. M., Furtenbacher T., Harrison J. J., Hartmann J.-M., Jolly A., Johnson T. J., Karman T., Kleiner I., Kyuberis A. A., Loos J., Lyulin O. M., Massie S. T., Mikhailenko S. N., Moazzen-Ahmadi N., Müller H. S. P., Naumenko O. V., Nikitin A. V., Polyansky O. L., Rey M., Rotger M., Sharpe S. W., Sung K., Starikova E., Tashkun S. A., Vander Auwera J., Wagner G., Wilzewski J., Wcislo P., Yu S., Zak E. J. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2017, vol. 203, pp. 3–69. doi:10.1016/j.jqsrt.2017.06.038
13. Zuev V. E., Makushkin Yu. S., Ponomarev Yu. N. *Spektroskopiia atmosfery* [Spectroscopy of the atmosphere]. Leningrad, Gidrometeoizdat Publ., 1987. 248 p. (In Russian).
14. Edwards D. P. *GENLN2: a general line-by-line atmospheric transmittance and radiance model*. NCAR Technical Note, 1992. 147 p. doi:10.5065/D6W37T86
15. Bobrovnikov S. M., Matvienko G. G., Romanovskii O. A., Serikov I. B., Sukhanov A. Ya. *Lidarnyi spektroskopicheskii gazoanaliz atmosfery* [Lidar spectroscopic gas analysis of the atmosphere]. Tomsk, IOA SO RAN Publ., 2014. 508 c. (In Russian).
16. Hinkley E. D. *Laser monitoring of the atmosphere*. Springer-Verlag, 1976. 396 p.
17. Romanovskii O. A., Kharchenko O. V., Yakovlev S. V. Methodological aspects of lidar ranging of trace gases in the atmosphere by differential absorption. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2012, vol. 79, iss. 5, pp. 793–800. doi:10.1007/s10812-012-9673-4
18. Terlouw J. P., Vogelaar M. G. R., Breddels M. A. *Kapteyn documentation*. Available at: <https://media.readthedocs.org/pdf/kapteyn/latest/kapteyn.pdf> (accessed 27 September 2018).
19. Zuev V. E., Komarov V. S. *Statisticheskie modeli temperatury i gazovykh komponentov atmosfery* [Statistic models of temperature and gas components of the atmosphere]. Leningrad, Gidrometeoizdat Publ., 1986. 264 p. (In Russian).
20. Penndorf R. Tables of the refractive index for standard air and the rayleigh scattering coefficient for the spectral region between 0.2 and 20.0 μ and their application to atmospheric optics. *Journal of the Optical Society of America*, 1957, vol. 47, iss. 2, pp. 176–182. doi:10.1364/JOSA.47.000176
21. Krekov G. M., Rakhimov R. F. *Optiko-lokatsionnaya model' kontinental'nogo aerizolizatsii* [Optical location model of continental aerosol]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1982. 199 p. (In Russian).
22. Kochanov R. V., Gordon I. E., Rothman L. S., Wcislo P., Hill C., Wilzewski J. S. HITRAN Application Programming Interface (HAPI): A comprehensive approach to working with spectroscopic data. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2016, vol. 177, pp. 15–30. doi:10.1016/j.jqsrt.2016.03.005
23. Mikhailenko S. N., Babikov Yu. L., Golovko V. F. Information-calculating system spectroscopy of atmospheric gases. The structure and main functions. *Atmospheric and oceanic optics*, 2005, vol. 18, no. 09, pp. 765–776 (In Russian).