

*А. А. Ковалёв, к.т.н., доцент, доц. каф. (ORCID 0000-0002-4974-5201)
Национальный университет гражданской защиты Украины, Харьков, Украина*

ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДА ОПЕРАТИВНОГО КОНТРОЛЯ АТМОСФЕРЫ В УСЛОВИЯХ ЧРЕЗВЫЧАЙНЫХ СИТУАЦИЙ

Проведено теоретическое обоснование и выбран метод оперативного дистанционного безпробоотборного газоанализа атмосферы в условиях чрезвычайных ситуаций. В результате анализа методов безпробоотборного определения веществ в открытой атмосфере, установлено, что наиболее целесообразно применение оптических спектральных методов контроля состава атмосферы, подразумевающих регистрацию и анализ электромагнитного излучения объекта наблюдения. Для определения наиболее эффективного метода дистанционного мониторинга, была составлена аналитическая классификация всех возможных оптических спектральных методов дистанционного мониторинга: лидарные методы, акустооптические фильтры, корреляционные спектрометры, перестраиваемые интерференционные светофильтры, применение интерферометра Фабри-Перо или Фурье-спектрометрии. Определено, что для решения задачи безпробоотборного анализа веществ в открытой атмосфере, наиболее целесообразно применение инфракрасного фурье-спектрорадиометра среднего спектрального разрешения, работающего в пассивном режиме в окне прозрачности атмосферы 7-14 мкм и позволяющем получать экспериментальную информацию в режиме реального времени. Проведены аналитические и теоретические исследования конструкции и алгоритмов работы двухлучевого интерферометра, а также математических методов обработки и интерпретации экспериментальной информации. Установлено, что для решения задачи обнаружения, идентификации и определения концентраций веществ в открытой атмосфере, применим спектральный анализ на основе моделей расчета переноса излучения в атмосфере, для чего необходимо разработать алгоритмы решения задачи распознавания веществ, основанные на линеаризации задачи в исходной постановке с последующим применением методов корреляционного анализа и методов поиска квазирешений. Для этого предложена постановка обратной задачи атмосферной оптики и выведено кинетическое уравнение изменения интенсивности излучения в открытой атмосфере.

Ключевые слова: Дистанционный анализ, идентификация веществ, Фурье-спектроскопия, восстановление концентраций, перенос излучения

1. Введение

Ликвидация последствий чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера является важной государственной функцией, а ее актуальность обусловлена как природными, так и техногенными факторами. Постоянно растущий технологический уровень современного мира, и растущий уровень техногенных производств, обуславливают увеличение нештатных ситуаций, ведущих к техногенным авариям и катастрофам, которые во многих случаях сопровождаются выбросами вредных веществ, загрязняющих атмосферу. Это представляет значительную угрозу для населения, территорий и окружающей среды, которые являются основными элементами системы гражданской защиты.

Риск возникновения катастрофы с выбросом загрязняющих веществ связан с функционированием любых предприятий, технологический процесс функционирования которых связан с высокими температурами, давлениями, различными видами взрывоопасных химических веществ, производством, хранением, транспортировкой и использованием различных горюче-смазочных материалов, теплоэнергетикой и еще очень большим количеством различных факторов.

Масштаб, характер и состав выбросов загрязняющих веществ в атмосферу могут быть разными, как незначительными, локального характера, так и глобаль-

ними, с катастрофическими последствиями, например, при аварии на Чернобыльской атомной электростанции. Способность различных слоев атмосферного воздуха двигаться с большой скоростью в разных направлениях приводит к риску загрязнения огромных площадей вредными и токсичными веществами, требует проведения оперативного тропосферного контроля, для определения условий проведения ликвидации чрезвычайной ситуации (ЧС) и необходимости эвакуации населения из зараженной местности.

Многофакторность параметров, влияющих на состояние атмосферы, не позволяет в полной мере, с использованием существующих на сегодня методов и способов математического моделирования, решить задачу прогнозирования распространения выбросов загрязняющих веществ в атмосфере. Исходя из этих позиций, разработка методов оперативного контроля состояния атмосферы в условиях чрезвычайных ситуаций, является актуальной проблемой в области гражданской защиты.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

В Украине проводится регулярный планово-стационарный (повседневный) контроль состояния атмосферы. При возникновении ЧС сопровождающейся выбросами вредных веществ, загрязняющих атмосферу, проводится оперативный контроль состояния атмосферы (в полевых условиях). Согласно постановлению кабинета министров Украины (КМУ) № 827 от 14 августа 2019 «Некоторые вопросы осуществления государственного мониторинга в области охраны атмосферного воздуха», министерства и ведомства осуществляют организацию наблюдений за уровнями следующих загрязняющих веществ: диоксид серы, диоксид азота и оксиды азота, Бензол, оксид углерода, Свинец, Твердые частицы (ТЧ₁₀)⁻¹, Твердые частицы (ТЧ_{2,5})⁻², Арсен, кадмий, ртуть, никель, Бенз (а) пирен, Озон.

Общую организацию и координацию субъектов мониторинга атмосферного воздуха осуществляет Минприроды, также, согласно постановлению КМУ, устанавливают пункты наблюдений и ведут наблюдение за уровнями загрязняющих веществ Министерство здравоохранения, Государственная служба по чрезвычайным ситуациям (ГСЧС) и Государственное агентство Украины по управлению зоной отчуждения. При этом, фактически основной сетью наблюдения за атмосферным воздухом является сеть гидрометеорологической службы (Гидромет), входящая в структуру ГСЧС.

Гидромет осуществляет мониторинг за загрязнением атмосферного воздуха в 53 городах и на 163 стационарных постах базовой сети, 33 метеостанции наблюдают за загрязнением атмосферных осадков, 54 станции – за загрязнением снежного покрова.

Для оперативного контроля состояния атмосферы подразделения МО, МВД и ГСЧС располагают различными типами стационарных и полевых измерительных приборов, причем обеспеченность практических подразделений современной техническими средствами измерений чрезвычайно низкая. Наиболее распространенным техническим средством измерения загрязнений воздуха остается войсковой прибор химической разведки, не соответствует современным требованиям и вызовам, стоящим перед ГСЧС.

Общим существенным недостатком имеющихся в Украине приборов измерения загрязнения атмосферы является необходимость непосредственного отбора проб и относительно большое время получения результатов. На сегодня в Укра-

ине нет технических средств (и технологий их создания) способных проводить дистанционный безпробоотборный газоанализа, в том числе в особых условиях повышенных температур и давлений и в быстро меняющихся условиях атмосферы. По этим причинам необходима разработка метода и аппаратуры дистанционного контроля состава атмосферы, позволяющие работать в режиме реального времени в сочетании с высокой мобильностью.

Проведенный анализ методов безпробоотборного определения веществ в открытой атмосфере установил, что на сегодняшний день, среди всех систем дистанционного контроля лидирующее положение занимают системы, основанные на оптических методиках контроля состава атмосферы. Данные системы подразумевают регистрацию и последующий анализ электромагнитного излучения самого объекта [1].

Для определения наиболее эффективного метода дистанционного мониторинга, была составлена аналитическая классификация известных оптических методов дистанционного мониторинга веществ:

1. Методы получения спектральных характеристик:

а) активные методы – в этом случае используется искусственный высокостабильный источник излучения, который просвечивает газовую смесь, спектр которой в последующем анализируется;

б) пассивные методы – в этом случае регистрируется и анализируется прошедшее (или рассеянное) солнечное, лунное излучение или собственное тепловое излучение всех составляющих трассы наблюдения, включая собственное излучение прибора.

2. Методы формирования изображения:

а) кадровые (регистрирующие единицу измерения – кадр, состоящий из пикселей);

б) сканирующие (регистрирующие изображение последовательно).

Спектральные методы анализа основаны на регистрации характерных спектров веществ и их дальнейшей обработке, где ключевую роль играет распознавание веществ по линиям или полосам в спектрах. В [2] рассматриваются основы молекулярной оптики, которые дают представление о физических основах спектрального анализа [3], что позволяет теоретически рассчитать линии и полосы поглощения (излучения) для одно- и многоатомных молекул.

Основные оптические спектральные методы безпробоотборного анализа веществ:

1. Лидары (LIDAR - Light Detection And Ranging) являются оптическими системами локации и спектрального анализа и основаны на эффектах неупругого рассеяния и поглощения. С конструктивной точки зрения лидары, в зависимости от конкретности поставленной задачи, подразделяются по типу применяемого лазера. Так, в работе [4] приведены основные типы применяемых лазеров, их технические характеристики, а в источнике [5] описаны основные типы лидарных систем, среди которых следует отметить:

- топографические лидары;
- лидары обратного рассеяния;
- флюорисцентные лидары;
- лидары дифференциального поглощения.

В [6] приведен краткий обзор лидарных систем, принципов их работы и областей применения. В [7] проводится сравнительный анализ основных методов ла-

зерной спектроскопии (абсорбционные, излучательные, калориметрические), описываются возникающие при этом эффекты и области применения. Лидарные комплексы позволяют измерять дальность и угловые координаты движущихся объектов [8]; измерять параметры поверхности [9]; исследовать атмосферные аэрозоли; определять концентрации [10], координаты и динамику газовых компонентов [11].

Недостатками лидарных методов дистанционного мониторинга веществ в открытой атмосфере является: Необходимость использование мощных лазеров, что приводит к увеличению габаритов и веса измерительного комплекса, требует большого энергопотребления, что в свою очередь сильно увеличивает стоимость лидарных комплексов; Недостаточная мобильность и сложность организации работы в полевых условиях.

2. Спектральные акустооптические газоанализаторы (акустооптические фильтры) основаны на принципе дифракции света на ультразвуковых волнах, что позволяет из широкого спектра оптического излучения выделять узкий интервал длин волн, удовлетворяющий условию Вульфа-Брэгга. Изменяя частоту звуковых волн, можно перемещать выделяемый участок длин волн по спектру в достаточно широком диапазоне. На сегодняшний день акустооптические фильтры коллинеарного взаимодействия могут составить конкуренцию классическим спектрометрам и уже нашли применение в приборах дистанционного контроля состава атмосферы активного типа [12] (например, «САГА» производство РФ www.sigma-optic.ru). Принцип действия газоанализаторов на базе акустооптических фильтров основан на измерении спектрального коэффициента поглощения звука специфической для каждого загрязнителя длины волны, для чего используется мощный внешний источник подсветки (УФ и видимого диапазона спектра), устанавливаемый соосно с газоанализатором. На оптимальном расстоянии (до 100 м) и нужной высоте располагают оптический ретроотражатель, от которого зондирующий пучок света отражается и возвращается обратно [13]. Для данного типа газоанализаторов диапазон длин волн 250-470 нм, максимальное число спектральных каналов – 2500, минимальное время измерений – 30 с, энергопотребление – 500 Вт, время выхода в рабочий режим – 15 мин.

Благодаря разработке новых материалов и высокоточных технологий, применение акустооптических фильтров в приборах дистанционного газоанализа имеет значительный потенциал. Ведущие мировые космические агентства (Роскосмос, NASA, ЕКА, JAXA) ведут постоянные научные и проектно-конструкторские работы в данном направлении, создавая приборы для дистанционного исследования состава планетных атмосфер [14].

Недостатками акустооптических газоанализаторов является необходимость использовать выносной оптический ретроотражатель, который заранее устанавливается на местности, на оптимальном расстоянии и нужной высоте относительно подвижной станции или стационарного поста и от которого отражается зондирующий пучок, возвращающийся в газоанализатор, что крайне трудно реализовать в условиях ЧС. При этом, использование акустооптических фильтров в надирном режиме для оценки состояния атмосферы в условиях чрезвычайных ситуаций, не целесообразно ввиду небольшого числа обнаруживаемых компонентов при работе в данном режиме.

3. Корреляционные спектрометры в простейшем случае работают по дифференциальной схеме, т.е., используя два фильтра (или две спектральные линии излучения лазера или светодиода), регистрируют две спектральные линии, одна из

которых настроена на максимум полосы поглощения, а другая на максимум полосы пропускания вещества [15]. По изменению разности и отношения сигналов судят о наличии вещества и его концентрации. Такой способ фильтрации обладает наименьшей избирательностью к мешающим компонентам, и его наиболее разумно применять при анализе газов, имеющих спектры с широкими полосами поглощения [16]. В настоящее время вместо одиночных оптических фильтров применяют оптические маски, позволяющие значительно повысить разностный сигнал за счет формирования спектра пропускания прибора, коррелирующего со структурой колебательно-вращательных или электронных полос поглощения исследуемого компонента газовой смеси [17].

Недостатками применения корреляционных спектрометров для дистанционного мониторинга веществ в открытой атмосфере является: конструктивная сложность оперативного использования: для наблюдения временных корреляций рассеянного излучения необходимо использовать лазерное излучение, которое является когерентным и монохроматичным, что приводит к увеличению габаритов и веса измерительного комплекса, требует большого энергопотребления, что в свою очередь сильно увеличивает стоимость. При этом, размер исследуемых объектов должен быть сопоставим с длиной световой волны, для более мелких частиц падающий свет рассеивается равномерно по всем направлениям, что затрудняет их определение. В лабораторных условиях возможно использование рентгеновских источников излучения, длина волны которых очень мала, что позволяет изучать структуры молекулярного масштаба.

В настоящее время, методом фотонной корреляционной спектроскопии исследуют поведение различных коллоидных систем, а также полимерных растворов и гелей. Распространения данный метод получил для анализа физиологических жидкостей в медицинской диагностике.

4. Перестраиваемые интерференционные светофильтры (ПИФ) применяются в качестве монохроматизирующего элемента, что позволяет повысить светосилу, упростить конструкцию и увеличить скорость сканирования по сравнению с классическими монохроматорами. При использовании ПИФ возможно управление светосилой и спектральным разрешением [18]. На основе ПИФ был построен пробоотборный ИК-анализатор [19], предназначенный для оперативного контроля опасных примесей токсичных газов более 100 видов, таких как аммиак, бензол, фосген и пр.

5. Интерферометр Фабри-Перо (ИФП) — многолучевой спектральный прибор с двумерной дисперсией и высокой разрешающей способностью. Светосила ИФП в 10-100 раз выше, чем у классических спектрографов. В работе [20] рассмотрены конструкционная схема ИФП, принципы работы, физические и технические показатели и области применения. В настоящее время ИФП считается одним из перспективных направлений создания спектрорадиометров изображений (imaging spectrometer), позволяющих идентифицировать облако загрязняющих веществ и восстановить распределение интегральных концентраций в пространстве [21].

Существенным недостатком как интерферометра Фабри-Перо, так и перестраиваемых интерференционных светофильтров для дистанционного мониторинга веществ в открытой атмосфере является необходимость внешней подсветки, что крайне трудно реализовать в условиях ЧС.

6. Фурье-спектрометры – модуляционные спектральные приборы, в которых для получения спектра необходимо произвести обратное преобразование Фурье

експериментально регистрируемого сигнала [22]. Широкое распространение этого метода определилось развитием вычислительной техники. Фурье-спектрометры обеспечили резкое повышение спектрального разрешения, информативности и скорости получения информации по сравнению с другими оптическими спектрометрами. Фурье-спектроскопические комплексы получили особое распространение как сигнальные системы пассивного типа быстрого дистанционного обнаружения веществ, в этом случае подобные комплексы называют фурье-спектрорадиометры (ФСР) [23]. Наиболее эффективна работа ФСР в ИК области спектра, на которую приходится максимум спектральной яркости энергетической светимости объектов наблюдения. ФСР комплексы способны измерять только интегральную концентрацию и как следствие, координаты облака загрязняющих веществ ограничиваются лишь значениями углов возвышения и места. Максимальная дальность у современных ФСР составляет 5–6 км при минимально обнаружимой интегральной концентрации – до единиц ppm (Particle Per Million – концентрация молекул, выраженная в числе молекул данного вещества на миллион молекул смеси) на квадратный метр. Характерными чертами ФСР комплексов являются: простота конструкции, высокая степень автоматизации измерений, малый вес, низкое энергопотребление (десятки ватт), а также низкая стоимость [24].

Существенным недостатком ФСР систем, является необходимость заранее иметь спектр чистой трассы наблюдения (без наличия загрязняющих веществ), для последующего оперативного сравнения и обнаружения загрязняющих и (или) отравляющих веществ в атмосфере, что не всегда возможно выполнить, особенно в условиях ЧС.

Проведённое исследование оптических спектральных методов беспроце- борного анализа показало, что наиболее эффективными методиками контроля состава атмосферы в режиме реального времени являются лидарные комплексы и ФСР системы, которые получили особое распространение в качестве систем пассивного типа. Лидары, используя мощный источник подсветки, позволяют получать большее, нежели методики пассивного типа, соотношение сигнал/шум и соответственно большую дальность действия, возможность обнаруживать очень малые концентрации веществ, а также исследовать форму и геометрические размеры облака веществ. Однако необходимость постоянного применения источника излучения накладывает технические, экономические и другие ограничения на применимость данных систем. ФСР комплексы как системы мониторинга веществ пассивного типа регистрируют собственное тепловое излучение и, как следствие, работают в ИК диапазоне 7–14 мкм, на который приходится максимум естественного теплового излучения. Колебательно-вращательный спектр является “отпечатком пальцев” (fingerprint) или индивидуальным паспортом данного соединения, позволяющим идентифицировать его по спектроскопической информации. В настоящее время создан ряд атласов, картотек и баз спектральных данных индивидуальных веществ, среди которых существуют банки спектров индивидуальных веществ в ИК диапазоне спектра (более 1000 соединений).

Далее рассмотрим схемные решения фурье-спектрометров. Для решения задач дистанционного зондирования атмосферы целый ряд производителей разработали мобильные фурье-спектрометры [22]. В работе [25] описаны конструкции фурье-спектроскопических систем. Большинство из них оборудовано одноэлементным фотоприемником и ручной системой наведения на объект исследования. Среди таких моделей следует отметить изделия фирм “Midac” (www.midac.com) и [civil security. DOI: 10.5281/zenodo.3901973](https://doi.org/10.5281/zenodo.3901973)

EDO corporation (www.nycedo.com), спектральное разрешение которых достигает $0,15 \text{ см}^{-1}$ в рабочем диапазоне 7-40 мкм, минимально обнаружимые концентрации при наличии внешнего ИК-источника подсветки 0,1-15 ppb. Ко второму поколению мобильных фурье-спектрометров относят близкие по своим параметрам изделия MR100 и MR200 фирмы "Bomem" (www.bomem.com) и K300 фирмы "Kayser" (www.kayser.it). Модели серии MR обеспечивают спектральное разрешение $0,2-32 \text{ см}^{-1}$, скорость сканирования 2-100 спектров/с в спектральном диапазоне 2-15 мкм. Рекомендуются длины трасс измерения для активных методик 5-500 м. В настоящее время появились и более технически совершенные модели фурье-спектрометров, изначально ориентированных на работу в пассивном режиме. Это разработки фирм "Bomem" (модель CATSI), "Bruker" (модель OPAG22), "Blocking Engineering" (модели Model 100, Model 500 и Block I- Spec). Модели MCAD и PORTHOS являются полностью автоматизированными комплексами и предназначены для работы в диапазоне 7-14 мкм с целью идентификации отравляющих веществ и промышленных экотоксикантов в атмосфере при дальности действия 0,1-5 км.

В Российской Федерации фурье-спектрометры разрабатываются специально для систем пассивного обнаружения веществ в открытой атмосфере в автоматическом режиме [26]. В МГТУ им. Н.Э. Баумана в кооперации с рядом институтов разработан и создан типоряд мобильных фурье-спектрометров обладающих спектральным разрешением $4-8 \text{ см}^{-1}$ в рабочем диапазоне 8-12 мкм, временем сканирования интерферограммы 0,3 с, дальностью обнаружения до 6 км и вероятностью обнаружения веществ более 0,9. ИК фурье-спектрометры типа ИКФС-2 разработаны в ВНИЦ «ГОИ им. С.И. Вавилова», ФГУП «Исследовательский центр им. М.В. Келдыша» и Институте космических исследований РАН для решения задач мониторинга атмосферы Земли с орбитальных спутников. Данные спектрометры имеют спектральное разрешение $0,5 \text{ см}^{-1}$, рабочий диапазон 6-20 мкм, погрешность измерения излучения $0,5 \text{ К}$, вертикальное пространственное разрешение 1-2 км, горизонтальное разрешение от 110 км. Следует отметить панорамные и визуализирующие (imaging) [27] фурье-спектрометры, которые позволяют получить пространственную информацию об облаке газа или аэрозоли, построить диаграмму и визуализировать распространения вещества в пространстве.

Таким образом, можно сформулировать основные области применения Фурье-спектрометров:

1. Идентификация веществ с удаленной позиции, что необходимо для целей обнаружения токсичных и ядовитых соединений [28], экологического мониторинга работы промышленных предприятий, соблюдения условий охраны труда [63], и др. В этих случаях регистрируются спектры среднего разрешения (как правило, единицы см^{-1}) и подразумевается проведение экспресс-анализа веществ [64] за предельно короткое время, где основной задачей является идентификация при недостатке информации об окружающей метеобстановке. Данные процедуры анализа являются практически полностью автоматизированными.

2. Идентификация веществ в условиях повышенных температур и давлений, а также в быстро меняющихся условиях, где принципиально невозможно проводить анализ путем отбора проб [29]. Например, в рамках проектов AEROTEST и AEROJET ФСП системы применяются для анализа парниковых, токсичных и озон-разрушающих веществ в выхлопах газотурбин самолетов. Подобная информация применяется для последующей доработки двигателей на предмет полного

сгорания топлива и для выработки экологических нормативов.

3. Визуализация облака газа или аэрозоля в атмосфере [30]. Подобные системы работают как системы быстрого реагирования на предмет выброса веществ и аэрозолей в атмосферу и позволяют как предупредить о выбросе вещества, так и локализовать облако. В данном случае целесообразно применять панорамные ФСР [31].

4. Определение температуры газовой смеси с удаленной позиции [32]. Например, в [33] рассмотрены области спектра, где априори известно, что вещество находится в состоянии насыщения для данных условий, например, R-ветвь в спектре излучения CO_2 в диапазоне 2390 см^{-1} . Аппроксимация спектра функцией Планка позволяет восстановить температуру смеси. В [69] приведен алгоритм восстановления температуры атмосферы со спектрорадиометра, расположенного на спутнике, с погрешностью 1° в километровом слое даже при значительном закрытии поверхности Земли облаками.

5. Проведение подробного химического анализа состава атмосферы и наблюдения за изменениями составляющих атмосферы, например озона или парниковыми газами. Для этого применяются спектры высокого разрешения и алгоритмы точного численного расчета (line-by-line) с привлечением метеорологической информации, например, с зондов [34]. В некоторых случаях эта процедура является предварительной для расчета фонового спектра и выделения спектра анализируемого вещества. В любом случае, подобные процедуры требуют сбора большого количества исходной информации, высокой квалификации исследователя и значительных временных и вычислительных затрат [35].

6. Восстановление характеристик атмосферы, мирового океана и подстилающей поверхности из космоса (температурные профили, профили влажности, содержание озона, температура подстилающей поверхности, доля покрытия облачностью и др.) для моделирования динамики поведения Земли как системы, выделения и оценки основных факторов, определяющих ее современное поведение, а также прогнозирование характеристик системы на различные сроки в разных регионах. Так, в 1999г. по программе (EOS) NASA на орбиту был запущен спутник Terra несущий на борту пять спектрорадиометров. Исследуемые объекты и измеряемые характеристики описаны в источнике [36]. Алгоритмы восстановления характеристик приведены в [37]. В Российской Федерации, для решения задач спутникового мониторинга атмосферы Земли и мирового океана используется фурье- спектрометр ИКФС-2 (рис. 1), размещенный на спутнике «Метеор-М» Полная масса ИКФС-2 составляет 50 кг.

Анализ известных типов ФСР систем, показал, что данные системы нашли применение как в качестве методик как активного типа, так и пассивного типа [38]. Наибольшее распространение ФСР системы получили в качестве систем пассивного типа, предназначенных для космического дистанционного зондирования земли и астрономических тел [39], при этом зарубежные публикации по данному направлению освещают преимущественно теоретические аспекты данного вопроса, и итоговые результаты измерений и испытаний. Конфиденциальность отдельных данных и практической реализации измерительных приборов обусловлена государственной и коммерческой тайной по использованию данных приборов для дистанционного зондирования земли с использованием искусственных спутников, летательных аппаратов или стационарных постов.



Рис. 1. Фурье-спектрометр ИКФС-2

Проблема создания модели Фурье-спектрометра для целей наземного контроля состава атмосферы, требует обоснования и разработки его аппаратного, математического и программно-алгоритмических подсистем.

Таким образом, не решенной частью проблемы является создание математической подсистемы Фурье-спектрометра включающей специализированные математические методы интерпретации экспериментальной информации (спектрограмм), получаемой на Фурье-спектрометрах с открытых атмосферных трасс.

3. Цель и задачи исследования

Цель работы – обоснование выбора и развитие метода оперативного дистанционного анализа атмосферы, путём интерпретации (расшифровки) спектрограмм Фурье-спектрометра, снятых в условиях ЧС на открытых атмосферных трассах.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- составить математическое описание работы двухлучевого интерферометра Майкельсона;
- провести исследование математических методов обработки и интерпретации экспериментальных данных, получаемых на Фурье-спектрометрах;
- поставить уравнение переноса излучения для решения обратной задачи атмосферной оптики.

4. Составление математического описания работы интерферометра Майкельсона

С целью создания модели дистанционного газоанализатора атмосферы, использующего Фурье-спектроскопический принцип работы, составим математическое описание работы классического двухлучевого интерферометра Майкельсона (рис.2), состоящего из двух зеркал (одно или оба из которых подвижны) и светоделителя [22].

Фотоприемным устройством при движении зеркала регистрируется интерферограмма, являющаяся автокорреляционной функцией регистрируемого спектра. Пусть амплитуда на входе интерферометра равна $E(t)$. Полупрозрачный слой покрытия разделяет входящий пучок на две части. На приемнике они встречаются и смешиваются, имея при этом относительную временную задержку τ . Фотоприемник регистрирует интенсивность, усредненную за время Q .

Обозначив ρ – пропускание прибора, и u – светосилу Фурье-спектрометра, основное уравнение фурье-спектроскопии запишется в виде [28]:

$$I(t) = \frac{\rho u}{2} \langle [E(t) + E(t+\tau)]^2 \rangle, \quad (1)$$

далее, уравнение (1) преобразуется [32] к виду:

$$I(t) = \rho u [I_0 + I(\tau)].$$

Согласно теореме Винера-Хинчина [38], обратное преобразование Фурье [49] от автокорреляционной функции стационарного случайного процесса $I(\tau)$ дает его спектральную плотность (спектр):

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) e^{-2\pi\nu x} dx, \quad (2)$$

где x – оптическая разность хода лучей в плечах интерферометра. Уравнение (2) можно записать в интегральном виде:

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} D(x) I(x) \cos(2\pi\nu x) dx, \quad (3)$$

где $D(x)$ – функция аподизации, обусловленная физическими и конструктивными ограничениями на ход подвижного зеркала интерферометра.

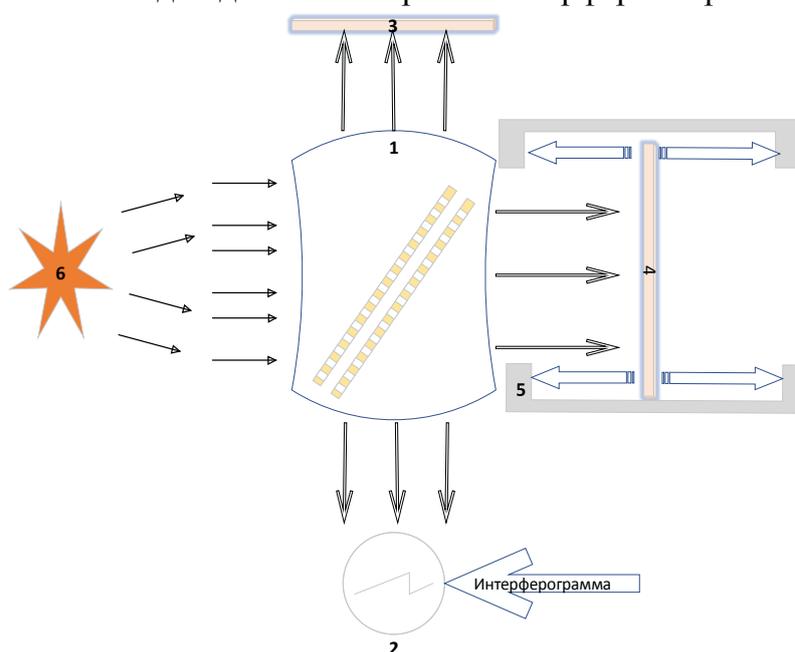


Рис. 2 Принципиальная оптическая схема интерферометра Майкельсона с подвижным зеркалом: 1 – Светоделительная система; 2 – Фотоприёмник; 3 – Зеркало 1 $R = 100\%$; 4 – Зеркало 2 $R = 100\%$; 5 – система перемещения зеркала 2; 6 – Источник излучения

Ряд факторов, таких как случайный шум, неточное совпадение точки выборки с положением нулевой разности оптического хода, неполная компенсация разности оптического хода лучей в плечах интерферометра для разных длин волн и др., вносят фазовые ошибки в интерферограмму. С учетом фазовых ошибок, уравнение (3) сведется к виду:

$$B_c(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} D(x) I(x-\delta) \cos(2\pi\nu x) dx,$$

где δ – ошибка регистрации (сдвиг) интерферограммы. Для двухсторонних интерферограмм, снятых в интервале $-L \leq x \leq L$, истинный спектр $B(\nu)$ определяется действительной $P_c(\nu)$ и мнимой $Q_c(\nu)$ частями спектра $B_c(\nu)$, причем результат не зависит от величины ошибки δ при сохранении ширины аппаратной функции:

$$|B_c(\nu)| = \left| \sqrt{|P_c^2(\nu)| + |Q_c^2(\nu)|} \right| = |B(\nu)|.$$

Для заданного и всегда конструктивно ограниченного хода подвижного зеркала спектральное разрешение спектра двухсторонней интерферограммы вдвое меньше принципиально возможного [1], поэтому, зачастую переходят к регистрации несимметричной односторонней интерферограммы $-l \leq x \leq L$, $l \ll L$. В этом случае необходимо учесть возможные фазовые ошибки интерферограммы $\phi(\nu)$, которые могут быть обусловлены неточным совпадением точки выборки с положением нулевой разницы оптического хода, неполной компенсации разности оптического хода лучей в плечах интерферометра для разных длин волн, а также случайными шумами. Также необходимо отметить, что поскольку ФСР регистрирует тепловое излучение всех объектов линии наблюдения, то при получении энергетического спектра нужно учитывать собственное тепловое излучение ФСР $F(\nu)$, а также спектральный коэффициент оптического тракта ФСР $R_o(\nu)$. В итоге, связь зарегистрированной интерферограммы и спектра запишется в виде:

$$I(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} R_o(\nu) [B(\nu) - F(\nu)] \exp[i(2\pi\nu x - \phi(\nu))] d\nu.$$

Для учета фазовых ошибок применяют универсальные методы фазовой коррекции, среди которых можно выделить мультипликативный метод Мерца [40] и итерационный метод Формана [41]. Процедуры учета собственного теплового излучения ФСР описаны в [22].

Таким образом, при использовании данного способа определения выбросов загрязняющих веществ в условиях чрезвычайных ситуаций от дистанционного измерителя потребуется кроме функции аппаратных измерений, также наличия соответствующего программного обеспечения и вычислительных мощностей, для получения и расшифровки спектра ФСР.

При этом, учитывая требования и задачи ГСЧС, фурье-спектроскопия обладает рядом преимуществ перед аналогичными спектральными методами:

- постоянство спектрального разрешения на всем рабочем диапазоне;
- высокая скорость регистрации спектров;
- большая светосила;
- отсутствие ограничений на спектральное разрешение за счет размеров оптических элементов;
- возможность высокой автоматизации измерений.

Преимущества фурье-спектроскопии перед другими спектроскопическими методами определяются прежде всего энергетическими выигрышами, получив-

шими название выигрыша Жакино и Фелжета [42].

Диаметр входной апертуры связан в разрешающей силе спектрометра и выигрыш в светосиле интерферометра перед классическим спектрометром составляет $\frac{2\pi}{\beta} \approx 120...300$ раз (т.н. выигрыш Жакино), где β – угловая высота щели спектрометра. Выигрыш Фелжета (мультиплекс-фактор) связан с тем, что в фурье-спектрометре одновременно регистрируются все частоты, и в результате выигрыш сигнал/шум по отношению к классическому спектрометру достигает \sqrt{M} , где:

$$M = \frac{V_{\max} - V_{\min}}{\delta_v},$$

где δ – ошибка регистрации (сдвиг) интерферограммы.

Выигрыш Кона – это использование лазера (как правило, гелий-неонового) в качестве внутреннего стандарта длин волн для управления отсчетами интерферограммы в процессе перемещения подвижного зеркала.

Существенным преимуществом фурье-спектроскопии является отсутствие ограничений в спектральном разрешении за счет размеров оптических элементов [47]. Трудно ожидать, что размеры дифракционных решеток или призм будут более 50 см. Таким образом, естественным пределом разрешения приборов, использующих пространственную дисперсию, будет величина $0,02 \text{ см}^{-1}$. В то же время, уже сейчас налажен промышленный выпуск фурье-спектрометров с разрешением $0,002 \text{ см}^{-1}$.

Среди других преимуществ фурье-спектроскопии следует отметить малое время измерения [43], т.е. время, необходимое для передвижения подвижного зеркала и пропорциональное требуемому разрешению. Это преимущество оказывается важным при исследовании динамических процессов.

5. Исследования математических методов обработки данных, получаемых на Фурье-спектрометрах

5.1. Выбор метода анализа интерферограмм

Основной задачей проведения спектрального анализа является получение качественной и количественной информации о составе исследуемой газовой смеси или аэрозоля по экспериментальным радиационным данным. В случае фурье-спектроскопии исходной экспериментальной информацией является интерферограмма.

Существуют методики по распознаванию состава газовых смесей путем прямого анализа интерферограмм [44]. Этот метод имеет преимущество перед анализом спектров в том, что не требует проведения обратного преобразования Фурье. В работе [45] предлагается вычислять фоновый спектр (без исследуемого вещества) низкого разрешения путем Фурье преобразования от части интерферограммы. Такой метод хорошо работает для спектров с узкими линиями вещества на фоне сплошного фонового спектра и применяется как вспомогательный этап перед выделением спектра исследуемого вещества.

Учитывая специфику применения, разрабатываемого Фурье-спектрометра пожарно-спасательными службами, для решения задачи спектрального анализа наибо-

лее применимы методы анализа спектров. Для чего преобразованием Фурье зарегистрированную интерферограмму преобразуют в энергетический спектр излучения.

Анализ локальных областей спектра подразумевает спектральный анализ на основе выборочных колебательно-вращательных линий. В этом случае можно проводить избирательный анализ конкретных веществ по их селективным линиям, а также восстанавливать температуру газовой составляющей по ее радиационным данным. Такой подход обладает большей точностью по отношению к широкополосным методам, но гораздо меньшей универсальностью. В работе [46] приведена таблица рекомендуемых областей анализа для основных составляющих атмосферы и парниковых газов (H_2O 1990-2010, 1965-1985, 2655-2675 cm^{-1} ; CO_2 2045-2065 2390-2400 cm^{-1} и др.). Анализ включает моделирование спектра анализируемого вещества на основе спектральной базы данных с последующим вписыванием методом наименьших квадратов в данной области спектра. Все метрологические и расчетные процедуры описаны в [46]. В [47] дается описание специализированного алгоритма SFIT по восстановлению концентраций трассовых газов по их спектрам поглощения. Более точную информацию можно получить, выделяя отдельные колебательно-вращательные полосы интересующего вещества, для чего необходимо использование спектрометра высокого разрешения. В [47] для анализа использовались характерные линии для продуктов горения: для CO вращательная линия P19 на 2064,30 cm^{-1} ; для CH_4 вращательная линия P19 на 3148,78 cm^{-1} , для CO_2 вращательная линия R72 на 2389,28 cm^{-1} . Концентрации восстанавливались непосредственно из интенсивности полученных линий. При рассмотрении только этих линий нивелировалось влияние атмосферного поглощения. Также в [47] приведен метод восстановления температуры газа по его спектру. Рассматривается R- ветвь в спектре излучения CO_2 в диапазоне 2390 cm^{-1} и т.к. интегральная концентрация углекислого газа велика, то спектр находится в состоянии насыщения в диапазоне около 2390 cm^{-1} . Преобразованием спектра АЧТ в температуру было получено значение температуры газа.

5.2. Проведение спектрального анализа на основе моделей расчета переноса излучения в атмосфере

Для решения задачи обнаружения, идентификации и определения концентраций необходимо от измеряемых спектральных данных перейти к искомым физическим величинам – концентрациям искомого вещества. В общем случае для восстановления искомого величин необходимо решить уравнение переноса излучения в атмосфере. Решение подобных задач, как правило, проводят методом последовательных приближений. При поиске модельного спектра и алгоритма приближений необходимо выбрать модель переноса излучения в среде, исходя из требований точности и быстроты решения поставленной задачи.

Модели переноса излучения можно разделить на:

1. Модели полинейного счета (line-by-line codes) [48]

– LinePark (<http://www.spectralcalc.com>), модель разработки GATS, позволяющая рассчитывать спектры поглощения-излучения;

– LBLRTM, полнофункциональная модель полинейного счета переноса излучения;

– FASCODE (Fast Atmospheric Signature Code), самая распространенная модель полинейного счета, обеспечивающая наибольшую точность расчета из всех представленных на сегодняшний день моделей, согласно [49].

– FLISS – модель переноса излучения, разработанная в ИКИ РАН РФ аналог FASCODE.

2. Модели низкого разрешения:

– MODTRAN – наиболее распространенная модель расчета спектров пропускания и излучения. Разработана на основе LOWTRAN для обеспечения большего спектрального разрешения и точности, но при этом высокой скорости расчетов. В модель включены возможности расчета излучения в присутствии облаков и аэрозольного рассеяния;

– 6S – модель переноса излучения, разработанная для атмосферной коррекции [47], применяемая при регистрации восходящего излучения от Земли с самолетов и спутников. Имеет возможность моделирования излучения от большого класса подстилающих поверхностей и в условиях облачности.

Существуют модели переноса излучения для условий, когда большое значение имеет аэрозольное рассеяние – это, так называемые, много рассеивающие модели (multiple scattering codes, среди которых SBDART, DISORT, SCIATRAN и т.д.) и трехмерные рассеивающие модели (SHDOM, I3RC).

Для корректного использования любой из перечисленных моделей переноса излучения в атмосфере необходима метеорологическая информация (градиент температуры, давления, профили влажности и т.п.), что является серьезным ограничением использования подобных моделей. Как правило, подобная информация поступает с радиозондов либо наземных метеостанций, откуда данные собираются в центры и предоставляются в консолидированном виде исследовательским центрам и группам. Вторым серьезным ограничением использования подобных алгоритмов является время обработки, которое составляет, как правило, несколько минут на один профиль, что значительно превышает время одного скана ФСР.

В основе моделей полинейного счета, как моделей переноса излучения, лежит уравнение переноса излучения. Так, восходящее излучение в условиях локального термодинамического равновесия запишется в виде [49]:

$$I_+(\tau_v, \mu) = \int_0^\infty \left[B_v(T_g) \exp\left(-\frac{\tau_v^g}{\mu}\right) + \int_0^{\tau_v^g} B_v\left(T(\tau_v') \exp\left(-\frac{\tau_v'}{\mu}\right) \frac{d\tau_v'}{\mu}\right) \right] \Phi_v dv, \quad (4)$$

где I_+ – интенсивность восходящего излучения, регистрируемого спутником в космосе; B_v – функция Планка; T_g – температура вблизи поверхности земли; τ_v^g – оптическая толщина атмосферы близ поверхности земли; $\mu = \cos(\theta)$, θ – зенитный угол, Φ_v – спектральная функция пропускания z -го канала спектрометра. Для уравнения (4) рассчитывается усредненная оптическая толщина атмосферного слоя при заданном числе спектральных интервалов в виде суммы оптических толщин отдельных интервалов:

$$\tau_{v_1}(p_1, p_{N_1}) = \sum_{m=1}^{N_1} \mu_m^* \int_{p_m}^{\rho_{m+1}} \left(\sum_{i=1}^N k_{v_1}^{i,m} \omega^{i,m} \right) dp, \quad (5)$$

где N_1 – число атмосферных слоев; p – давление; $\mu^* = \frac{1}{\mu}$, $\theta < 60^\circ$; v – волновое

число; k – спектральный коэффициент экстинкции, N – количество атмосферных компонентов, $\omega(p)$ – профиль массового соотношения компонентов.

Вычисление монохроматического спектрального коэффициента экстинкции является ключевым этапом модели полинейного счета:

$$k_v^i(\rho, T) = \sum_{j=1}^{N_B^i} \sum_{k=1}^{N_j^i} S_k^{i,j}(T) f_k^{i,j}(v, \rho, T) + C^i(v, \rho, T),$$

где N_B^i – число колебательных линий; N_j^i – общее число линий поглощения, принадлежащих j -ой полосе i -ой молекулы; $S_k^{i,j}$ – интенсивность k -ой линии; $f_k^{i,j}$ – нормированная форма контура; C^i – континуальное поглощение, обуславливающее вклад соседних спектральных интервалов. Интенсивность спектральных линий и континуального поглощения содержится в спектральных банках данных и пересчитывается для нужных температур и давления с использованием колебательно-вращательных парциальных функций.

Исследованию формы контура посвящен целый ряд работ, [46–48], основным содержанием которых является обоснование выбора формы контура для определенных условий (частота столкновений, влияние эффекта Доплера и т.п.), а также адаптация алгоритмов для повышения скорости расчета. Базовыми формами контура являются Доплеровский, Лоренцевский и Фойгтовский.

Модели низкого разрешения (MODTRAN, LOWTRAN) являются адаптациями моделей полинейного счета, которые должны значительно увеличить скорость расчетов с некоторой потерей точности и гибкости модели. В моделях низкого разрешения спектральные функции (коэффициент молекулярного поглощения, континуальное поглощение и т.п.) табулируются для заданного спектрального разрешения (для MODTRAN это значение составляет 2 см^{-1} , для LOWTRAN – 5 см^{-1}) в разрезе по нескольким температурам (как правило, это 200, 225, 250, 275, 300 К) для заданного набора молекул. Для температур, отличных от указанных, пересчет спектральных функций производится линейной интерполяцией. Как и в случае полинейного счета, для расчета переноса и излучения необходима метеорологическая информация со сторонних источников.

5.3. Проведение спектрального анализа на основе референтных спектров

Для множества спектральных задач, связанных с определением концентрации веществ при помощи экспериментально зарегистрированных спектров, уравнение переноса излучения сводится к системе линейных алгебраических уравнений вида [50]:

$$\sum_{j=1}^n K_{i,j} \varphi_j = f_i, (j=1 \dots m), \quad (6)$$

где φ – искомая функция, f – экспериментальные данные, K – ядро системы. Подобного рода задачи можно решать традиционными методами (метод Гаусса и т.п.), но ввиду некорректности поставленной задачи [51] применяют более адаптивные методы (регуляризацию, метод невязки, метод поиска квазирешений и т.п.).

Для линеаризации обратной задачи модель переноса излучения сводят к сло-

ею задаче. В простейшем случае выделяют подстилающую поверхность [48–51], облако идентифицируемого вещества (смеси веществ) и атмосферную трассу. При таком подходе задача идентификации веществ и определения их концентраций сводится к выделению из общего зарегистрированного спектра либо спектра данного вещества, либо спектра всей газовой составляющей. Далее качественный и количественный анализ представляет собой сравнение полученного спектра с базой данных референтных спектров и получение на его основе информации о концентрациях идентифицированных веществ.

Группа авторов выделяет коэффициент пропускания искомого вещества [45–47], который можно записать в виде:

$$\tau_{зв}(\nu) = \exp(-D_{зв}(\nu)) = \frac{B(\nu) - P(\nu, T)}{B_0(\nu) - P(\nu, T)}, \tau \in [0, 1], \quad (7)$$

где $\tau_{зв}(\nu)$ – коэффициент пропускания искомого вещества; $B(\nu)$ – спектральная яркость энергетической светимости трассы наблюдения; $B_0(\nu)$ – спектральная яркость энергетической светимости трассы наблюдения без наличия примесей в атмосфере; $P(\nu)$ – функция Планка.

В работе [45] подробно описываются алгоритмы обработки результатов полевых измерений, выполненных на ФСР. Подобная методика не требует априорной метеорологической информации, однако для возможности анализа необходимо заранее в месте наблюдения заснять спектр трассы без примеси, что накладывает определенные ограничения. Другим серьезным ограничением является тот факт, что можно восстановить только интегральные концентрации веществ. Однако скорость работы, универсальность и простота делают подобный подход особенно актуальным в системах быстрого реагирования на появления загрязняющих веществ в области обзора.

Другим методом линеаризации является пересчет спектра излучения в яркостную температуру [52]:

$$T_{br}(\nu) = \frac{h\nu}{\ln\left(\frac{2hc^2\nu^3}{B(\nu)} + 1\right)k},$$

где $T_{br}(\nu)$ – яркостная температура; h – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана; $B(\nu)$ – экспериментальный спектр излучения.

Использование яркостных температур позволяет линеаризовать задачу, предварительно создав базу данных референтных спектров основных атмосферных поглотителей, а также возможных примесей. Анализ проводят корреляционными и регрессионными методами. В работе [53] приведен адаптированный алгоритм быстрой фоновой подстройки и идентификации (FBCI). В основе этого алгоритма лежит метод наименьших квадратов, где на базе матрицы регрессии вычисляются оценочные значения восстанавливаемых концентраций. Основным преимуществом FBCI является фиксированное число итераций. Идентификация происходит в два этапа. На первом этапе из экспериментального спектра вычитанием спектра атмосферы и базовой линии выделяется спектр примесей. На вто-

ром этапе происходит отбраковка веществ из базы данных по коэффициенту корреляции и значению соотношения сигнал-шум (signal to noise ratio – SNR).

5.4. Исследования численных методов решения задачи распознавания веществ

Корреляционный анализ – метод обработки экспериментальных данных, заключающийся в изучении коэффициентов корреляции между переменными. При этом для установления статистических взаимосвязей сравниваются коэффициенты корреляции между одной парой или множеством пар признаков. Корреляционный анализ применяется при решении задач, когда заранее нельзя быть уверенными в том, что между изучаемыми переменными есть определенная функциональная связь [54]. В этом случае основной задачей является определение линейной связи между исследуемыми величинами x и y , критерием которой является коэффициент корреляции, рассчитываемый как:

$$r_{xy} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x - \bar{x})^2 \sum (y - \bar{y})^2}}.$$

В ряде работ [41, 46–52] применяется корреляционный анализ для определения линейных связей между экспериментальными и референтными спектрами. В случае, когда коэффициент корреляции превышает априори установленное значение, то говорят об идентификации вещества. Еще в середине XX века корреляционный анализ применялся для идентификации примесей в стали и контроля качества стали, и является на данный момент хорошо зарекомендовавшим себя методом экспресс-анализа веществ по их селективным линиям в спектрах.

Регрессионный анализ при решении задачи распознавания веществ.

При решении задач идентификации веществ и нахождения концентраций линейный регрессионный анализ применяется для случая спектрального анализа на основе референтных спектров. На первоначальном этапе идентифицируются вещества, возможно находящиеся в газовой смеси. Затем на основе регрессионного анализа определяются концентрации веществ. Если вычисленные концентрации превышают предельные значения, то факт обнаружения вещества с помощью корреляционного анализа считается ложным.

Линейный регрессионный анализ [54] – статистический метод исследования зависимости между зависимой переменной Y и одной или несколькими независимыми переменными X_1, X_2, \dots, X_p . На практике линия регрессии чаще всего ищется в виде линейной функции искомую наилучшим образом приближающей кривую Y :

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_N X_N. \quad (8)$$

Если сформулировать задачу построения линии регрессии как поиска максимального значения функции правдоподобия, то нетрудно показать, что максимум функции достигается в точке:

$$r(\bar{b}) = \sum_{k=1}^M (Y_k - \hat{Y}_k)^2 \rightarrow \min, \quad (9)$$

где ρ – невязка, M – объем выборки.

Это так называемый метод наименьших квадратов (МНК), с помощью которого большая часть задач определения концентраций веществ. Решением уравнения (9) является набор параметров b_i , позволяющий построить регрессию (8). Уравнение (9) можно решать прямым дифференцированием функции (9) по b , а полученную систему уравнений, например, методом Гаусса. В общем случае уравнение (9) можно сформулировать в виде уравнения обобщенной невязки.

Метод регуляризации при решении задачи распознавания веществ.

Задачи распознавания веществ могут быть сведены к линейным обратным задачам вида:

$$Az = u. \quad (10)$$

Рассмотрим случай, когда класс возможных решений уравнения является компактом. В уравнении (10) A – оператор, z – искомые переменные (концентрации веществ), u – известные экспериментальные данные. В общем случае, с учетом экспериментальных погрешностей, уравнение (10) примет вид:

$$Az = u_\delta. \quad (11)$$

В практических задачах вместо точного значения u_T в уравнении (11) присутствует приближенное значение u_δ , где для известного значения погрешности δ отклонение от точного значения имеет вид $\rho_u(u_\delta, u_T) \leq \delta$. Задача состоит в том, чтобы по известным исходным данным (u_δ, A, δ) найти приближенное значение решения z_T , устойчивого к малым изменениям u_δ . Применение обратного преобразования A^{-1} для решения уравнения (11) не всегда является корректным, поскольку решение $z_\delta = A^{-1}u_\delta$ существует не для всякого $u \in U$. Если матрица системы A невырожденная, то асимптотически устойчиво приближенное решение $\lim_{\delta \rightarrow 0} z_\delta = z_T$. Однако важно отметить, что если матрица системы плохо обусловлена, то, несмотря на формальную устойчивость решения, небольшие искажения входной информации δ могут привести к большим разбросам в приближенном решении. В этом случае для поиска приближенного решения применяют метод регуляризации [55].

$$z_\alpha = R(u_\delta, \alpha), \quad (12)$$

где z_α – регуляризованное решение уравнения (11); α – параметр регуляризации, R – регуляризирующий оператор.

Регуляризованное решение можно построить следующим образом:

$$z_\delta^\alpha = (A + \alpha E)^{-1} u_\delta,$$

где E – единичная матрица.

Параметр регуляризации необходимо выбрать таким образом, чтобы ощутимо повысить обусловленность системы, но при этом не сильно увеличить ошибку в решении.

В методе регуляризации Тихонова в качестве устойчивого приближенного решения z_a берется функция, минимизирующая функционал:

$$M_\alpha(z) = \|Az - u_\delta\|^2 + \alpha\Omega(z),$$

где $\Omega(z)$ – неотрицательный стабилизирующий функционал.

Регуляризованное решение является асимптотически устойчивым:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} z_\delta^\alpha = \bar{z}, \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha = 0,$$

Неправильный выбор параметра регуляризации α может привести к существенным расхождениям между исходным и построенным регуляризованным решением.

Таким образом, при поиске приближенного решения методом регуляризации необходимо решить две задачи:

- 1 – выбрать регуляризирующий оператор R ;
- 2 – определить параметр регуляризации.

Как правило, нахождение параметра регуляризации α для конкретного уровня погрешности осуществляется методом минимизации функционала невязки. В практических задачах регуляризация сводится к использованию дополнительных априорных условий, позволяющих отфильтровать заведомо ложные решения, такие как: отрицательные значения давлений (концентраций), превышение найденных значений над значениями давлений (концентраций) насыщенных паров при данной температуре и т.п.

Для применения регуляризирующих методов необходимо задание априорной информации об уровне погрешности правой части, однако данная информация не всегда доступна при обработке реальных данных. В [56] показано, что использование неверных оценок приводит к неудовлетворительным результатам.

Применение метода обобщенной невязки функционала рассогласования для нахождения значений концентраций веществ.

Решение любой количественной задачи сводится к нахождению искомого параметра z по заданным исходным данным u (10). Однако в случае экспериментального получения исходных данных u , априори вносится ошибка измерения (11). Широко распространенным методом решения уравнения (11) служит метод подбора решения (последовательных приближений). Он состоит в том, что для элементов Z некоторого заранее заданного подкласса возможных решений M вычисляется оператор Az , т.е. решается прямая задача. В качестве приближенного решения уравнения (11) берут $\tilde{z} \in M$, на котором невязка (функция рассогласования) $\rho_u(A_{\tilde{z}}, u_\delta)$ достигает минимума:

$$\rho_u(A_{\tilde{z}}, u_\delta) = \inf_{z \in M} r_u(A_z, u), \quad (13)$$

где $\rho_u(A_z, u)$ – расстояние между элементами Az и u в пространстве M , метрика которого определяется постановкой задачи.

Частным случаем (но очень распространенным) метода обобщенной невязки является метод наименьших квадратов (9). Решение, полученное на компактном множестве путем минимизации невязки вида (13), называют квазирешением, а

данный метод – методом квазирешений, предложенный В.К. Ивановым [17, 20]. Квазирешением уравнения (11) называют элемент $z_K \in M$, минимизирующий невязку $\rho_u(A_z, u_\delta)$ на компактном множестве M . При предположении непрерывности оператора A , невязка является непрерывным функционалом, который достигает своей нижней грани на компакте M . Таким образом, существует не единственное для любого $u \in U$. Множество квазирешений уравнения (11) на компакте M , соответствующих u_δ , обозначим через Z_K^δ . В [92] показано, что:

$$\sup_{z \in Z_K^\delta} \|z - \bar{z}\| \rightarrow 0 \text{ при } \|u_\delta - \bar{u}\| \rightarrow 0,$$

где \bar{z} – точное решение для точной правой части \bar{u} .

Таким образом, задача определения квазирешения на компактном множестве является корректной.

Поиск квазирешений, как правило, проводят методами подбора, среди которых стоит выделить [57]: методы полного перебора; метод Монте-Карло; методы целенаправленного поиска (покоординатный спуск, градиентный поиск, метод Ньютона); генетические алгоритмы.

Среди всех перечисленных методов следует отметить генетические алгоритмы, поскольку они обладают целым рядом преимуществ:

- оперируют сразу с набором параметров;
- на каждом шаге формируется сразу несколько решений задачи оптимизации;
- устойчивы к виду оптимизируемой функции. В процессе поиска вычисляются только значения целевой функции без производных;
- позволяют найти решение, близкое к глобальному минимуму;
- функционала.

5.5. Исследования спектроскопических баз данных и комплексов спектроскопических программ

Существующие компиляции спектроскопических баз данных содержат наиболее полные спектры и идентификации колебательно-вращательных переходов молекул, составляющих основу стандартной атмосферы. Самыми информативными являются две базы данных, разрабатываемые практически параллельно в США и Франции:

1. HITRAN (<http://www.cfa.harvard.edu / HITRAN / Updated>) [58] является компиляционной базой данных спектроскопических параметров, предназначенной для использования в различных компьютерных программах по моделированию поглощения и излучения радиации в атмосфере. Данная база данных является продолжающимся проектом, начатым в конце 1960-х годов в Исследовательской Лаборатории ВВС США в ответ на необходимость детального изучения инфракрасных свойств атмосферы.

2. GEISA (<http://ara.lmd.polytechnique.fr>) [59] (Исследование и управление атмосферной спектроскопической информацией) представляет собой долговременный проект, разрабатываемый в Политехнической школе, начиная с 1976г. Первоначально банк данных GEISA содержал спектроскопическую информацию о молекулах, представляющих интерес, главным образом, с точки зрения исследования атмосферы Земли и других планет. В настоящее время он содержит па-

раметры спектральных линий 96 изотопмеров, относящихся к 42 молекулам.

Создано несколько базы данных специального назначения [60]:

1. CSDS (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank) – спектроскопический банк данных по двуокиси углерода, является высокоточным расчетным банком спектроскопических данных по молекуле CO_2 .

2. Швенке-Партридж (PS) - расчетный список линий молекулы воды, содержащий частоты переходов, интенсивности, нижние энергии и квантовую идентификацию колебательно-вращательных переходов молекулы воды [98]. Расчет выполнил С.А. Ташкун в Институте оптики атмосферы СО РАН (Томск) с использованием программного комплекса VTET Давида Швенке (NASA, США).

3. Российская спектральная база данных ИОА (Институт оптики атмосферы СО РАН <http://spectra.iao.ru>). В источник включены данные (как расчетные, так и экспериментальные), полученные в отделении спектроскопии Института оптики атмосферы СО РАН (Томск).

Комплексы программ математического моделирования спектров и интерпретации спектральной информации реализуют математические модели прохождения излучения в атмосфере и позволяют после определения необходимого набора входных параметров газовой смеси и параметров трассы рассчитать спектральную функцию (спектр излучения/пропускания, спектральный коэффициент поглощения и др.). Ряд программных комплексов позволяют по входным радиационным данным восстанавливать параметры газовой смеси.

Комплексы программ (КП) решают следующие задачи:

1. Математическое моделирование спектров газовых смесей на основе моделей полинейного счета. В этом случае необходимо задать целый ряд параметров газовой смеси (химический и изотопный состав, профили температур, давления и влажности, длину трассы и др.), а также параметров спектра (спектральное разрешение, форма контура, форма крыла обрезающей функции, аппаратная функция и др.). Использование подобного рода КП позволяет получить наиболее достоверную спектральную информацию, обеспечивающую высокое спектральное разрешение (до $0,001 \text{ см}^{-1}$) в широком спектральном диапазоне (от 0 до $5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$) и минимальное расхождение с измеренными радиационными данными (точность расчетов порядка или меньше абсолютной погрешности измерения спектров [61]). Примерами подобного класса КП является КП HAWKS [12], поставляемая разработчиками БД HITRAN, а также PeLnWin, 6S [62], система SPECTRA (<http://spectra.iao.ru>) и многие другие. Время восстановления характеристик газовой смеси определяется параметрами спектра и детальностью модели и может составлять от нескольких минут до многих часов, но в любом случае много превышает время одного скана и не может использоваться для задач оперативного обнаружения веществ.

2. Математическое моделирование прохождения излучения в среде на основе моделей низкого спектрального разрешения. Данный класс КП обладает тем же функционалом, что и описанный в предыдущем пункте, с тем отличием, что спектральные характеристики изначально пересчитываются и табулируются для низкого спектрального разрешения (2, 4, 5, 10, 20 см^{-1}) и нескольких значений температур (200, 225, 250, 275, 300 К). Данный подход значительно сокращает время расчетов, но по-прежнему требует подробной априорной метеорологической информации. Среди подобного класса КП можно отметить MODTRAN, LOWTRAN.

3. Проведение экспресс-анализа веществ в открытой атмосфере [61, 62]. Данный класс КП позволяет на основе спектров среднего разрешения (2-10 см^{-1}) корре-

ляционными методами проводить идентификацию веществ путем сравнения с референтными спектрами. Для идентифицированных веществ вычисляются оценочные интегральные концентрации регрессионными методами или методами обобщенной невязки. Данные КП позволяют выполнять обнаружение веществ в открытой атмосфере для пользователя, практически не обладающего специальными знаниями, позволяет работать в режиме реального времени и является основой систем быстрого обнаружения и оповещения о появлении вредных веществ или газовых утечек. Недостатками подобных КП является возможность определения только интегральных концентраций в оценочном режиме (невозможно точно с метрологической точки зрения определить значения концентраций, поскольку почти все параметры трассы численно оцениваются внутри алгоритма, что вносит большие ошибки в восстановленные концентрации). Вторым недостатком является необходимость перед проведением процедур экспресс-анализа получить спектр трассы без примеси, что накладывает определенные ограничения на области применения КП.

6. Постановка обратной задачи атмосферной оптики

Под обратной задачей атмосферной оптики следует понимать задачу определения характеристик веществ (не являющихся непосредственно наблюдаемыми величинами) по свойствам их спектров (которые наблюдаются непосредственно и напрямую зависят как от определяемых характеристик, так и от внешних факторов). Как правило, нас будут интересовать следующие параметры: концентрации искоемых веществ, их распределение в пространстве, динамика поведения облака веществ во времени и т.п.

Для решения обратной задачи атмосферной оптики запишем уравнение переноса излучения для среды с поглощением, рассеянием и собственным излучением. Перенос излучения и лучистый теплообмен влияют как на состояние вещества и на его движение, а также на распределение температуры в стационарном состоянии. Это влияние связано с тем, что, испуская или поглощая излучение, вещество теряет или приобретает энергию, охлаждается или нагревается. В общем случае состояние вещества описывается уравнениями гидродинамики, которые при наличии лучистого теплообмена следует обобщить, учитывая взаимодействие излучения с веществом. Однако во многих случаях, например, при достаточно низких («приземных») температурах, влияние излучения на состояние вещества невелико, и в этом случае задачи нахождения поля излучения и описание состояние вещества разделяются [63].

Рассмотрим излучение частоты « ν » в единичном интервале частот, распространяющееся внутри единичного телесного угла в определенном направлении « Ω », при этом баланс излучения в элементарном цилиндре с площадью основания « ds » и высотой « dx », расположенном таким образом, что направление « Ω » совпадает с образующей цилиндра и перпендикулярно к его основаниям (рис. 3).

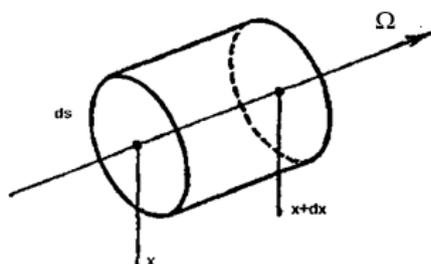


Рис. 3. К выводу уравнения переноса излучения

За время «dt» в левое основание втекает количество излучения $I_V(\Omega, r, t) ds dt$. Из правого основания за тот же промежуток времени «dt» вытекает $(I_V + dI_V) ds dt$.

Интенсивность есть функция координат и времени, следовательно, изменение интенсивности выходного излучения составит:

$$dI_V = \frac{I_V}{t} dt + \frac{I_V}{x} dx, \quad (14)$$

где I_V – количество входящего излучения; t – продолжительность входящего излучения; dx – расстояние пройденное излучением (высота элементарного цилиндра).

При этом, учитывая скорость распространения излучения, примем следующие допущения, с целью упрощения записи уравнения переноса излучения:

- Излучение объектов стационарно по времени;
- Среда распространения излучения изотропна;
- Влияние рефракции и поляризации не учитываются, т.к. пренебрежимо малы.

Приведенные ограничения не означают, что рассматриваемая среда является термодинамически равновесной. Изменение интенсивности пучка происходит вследствие поглощения и испускания излучения с рассматриваемыми характеристиками, а также за счет рассеяния излучения.

Уменьшение интенсивности излучения за счет поглощения средой можно записать в следующем виде:

$$dI_V = -\sigma(v) n(x) I(x) dx, \quad (15)$$

где $\sigma(x)$ – сечение поглощения среды, $n(x)$ – концентрация поглощающих частиц в точке x .

Увеличение интенсивности за счет собственного равновесного излучения элементарного объема среды запишется следующим образом:

$$dI_V = \sigma(x) n(x) \frac{P(v, T)}{2\pi} dx, \quad (16)$$

где $P(v, T)$ – функция Планка собственного равновесного излучения абсолютно черного тела; T – температура среды в точке x ; 2π – коэффициент, введен поскольку рассматривается односторонний (т.е. в полупространстве) спектральный поток.

Применение функции Планка для формализации излучения среды позволяет учесть как самопроизвольное, так и вынужденное излучение среды [4].

Влияние рассеяния на интенсивность запишется следующим образом:

$$dI_V = \frac{\beta(x)}{4\pi} \int_{\Omega} I_V(x, \Omega) \gamma(x, \Omega) d\Omega dx - \beta(x) I_V(x) dx, \quad (17)$$

где $\frac{\beta(x)}{4\pi} \int_{\Omega} I_V(x, \Omega) \gamma(x, \Omega) d\Omega dx$ – первое слагаемое отвечает за увеличение интенсивности из-за рассеяния в направлении Ω фотонов других направлений распро-

странения (под углом θ к направлению Ω), но проходящих через заданный элементарный объем, таким образом, учитывается вклад со всех направлений телесного угла; Ω ; $\gamma(x, \Omega)$ – индикатриса рассеяния, $d\Omega$ – элемент телесного угла; $\beta(x)I_v(x)dx$ – второе слагаемое учитывает уменьшение интенсивности излучения за счет рассеяния; $\beta(x)$ – показатель рассеяния среды в точке x .

С учетом перечисленных физических процессов, уравнение переноса излучения (14) (кинетическое уравнение для интенсивности излучения) запишется в виде:

$$\frac{dI(x)}{dx} = \sigma(x)n(x)\frac{P(v, T)}{2\pi} - (\sigma(x)n(x) + \beta(x)) \cdot I(x) + \frac{\beta(x)}{4\pi} \int_{\Omega} I(x, \Omega)\gamma(x, \Omega)d\Omega, \quad (18)$$

где $\frac{dI(x)}{dx}$ – изменение интенсивности излучения; $P(v, T)$ – функция Планка собственного равновесного излучения абсолютно черного тела; $\beta(x)$ – показатель рассеяния среды в точке x ; $\sigma(x)$ – сечение поглощения среды, $n(x)$ – концентрация поглощающих частиц в точке x ; $I(x, \Omega)\gamma(x, \Omega)d\Omega$ – интенсивность рассеяния излучения в направлении Ω .

Уравнение (18) представляет собой интегро-дифференциальное уравнение, для решения которого необходимо доопределить ряд параметров (распределение температуры, коэффициенты поглощения, рассеяния, индикатриса рассеяния и др.).

Для решения задачи беспроботборного анализ веществ в открытой атмосфере, целесообразно и эффективно применение инфракрасного фурье-спектрометра среднего спектрального разрешения, работающего в пассивном режиме в окне прозрачности атмосферы 7-14 мкм и позволяющем получать экспериментальную информацию в режиме реального времени.

Для интерпретации полученной экспериментальной информации, без необходимости предварительной регистрации фонового спектра, необходимо разработать алгоритмы решения задачи распознавания веществ, основанные на линеаризации задачи в исходной постановке с последующим применением методов корреляционного анализа и методов поиска квазирешений, как наиболее разработанных в настоящее время методов решения обратных задач прикладного характера.

7. Обсуждение результатов исследования дистанционного газоанализа атмосферы с использованием Фурье-спектрометра

В настоящее время в мире не существует ни одного реализованного метода и способа беспроботборного анализа веществ в открытой атмосфере для нужд пожарно-спасательных подразделений, при этом беспроботборные методы спектрального анализа веществ в открытой атмосфере, крайне востребованы и имеют значительный потенциал для применения пожарно-спасательными службами как в Украине, так и в мире.

Применение мобильного панорамного Фурье-спектрометрического комплекса, работающего в пассивном режиме, регистрирующего и обрабатывающего собственное тепловое излучение трассы наблюдения, имеет следующие преимущества:

– мобильность и простота использования – портативный прибор может быть эффективно применен оперативным расчетом ГПСЧ;

- проведение идентификации веществ в атмосфере с удаленной позиции;
- определение температуры газовой смеси с удаленной позиции;
- высокую точность качественного экспресс-анализа загрязняющих и (или) отравляющих веществ в открытой атмосфере в режиме реального времени;
- получение пространственной информации о облаке газа или аэрозоли, с построением диаграммы и визуализацией распространения вещества в пространстве;
- возможность интеграции с другими техническими и транспортными средствами (БПЛА, ПА, САСМ, Автомобили РХБЗ).

При условии разработки соответствующих математических методов обработки и интерпретации экспериментальной информации, получаемой на Фурье-спектрометрах, использование современных мини ЭВМ позволит получать результаты в режиме реального времени. При этом, благодаря росту вычислительных мощностей и миниатюризации современных ЭВМ стало возможно проведение беспробоотборного анализа веществ в открытой атмосфере в полевых условиях.

Для решения полученного кинетического уравнения интенсивности излучения можно применять ряд приближенных методов решения: метод последовательных приближений, метод двухпоточкового приближения, метод сферических гармоник, метод Соболева и некоторые другие [69]. Однако приведенные методы приближенного решения интегро-дифференциального кинетического уравнения являются вычислительно трудоемкими процедурами и не подходят для решения обратных задач в режиме реального времени. Поэтому в дальнейших исследованиях целесообразно предложить ряд упрощающих предположений, позволяющих линеаризовать уравнение интенсивности излучения, а затем разработать методику решения, не требующую доопределения параметров среды и применимую для работы в режиме реального времени.

8. Выводы

1. Создание модели Фурье-спектрометра для целей наземного контроля состава атмосферы целесообразно основывать на использовании двухлучевого интерферометра Майкельсона. Эффективность работы Фурье-спектрорадиометрического комплекса определяется возможностью работы в пассивном режиме, регистрируя и обрабатывая собственное тепловое излучение трассы наблюдения, для этого спектры регистрируются в диапазоне прозрачности атмосферы 7-14 мкм, на который также приходится максимум собственной светимости тел. Работа в пассивном режиме позволяет не применять мощный высокостабильный источник подсветки (например, лазер), что существенно уменьшает энергопотребление, размеры, вес и стоимость подобного комплекса. Поскольку Фурье-спектрометр регистрирует тепловое излучение всех объектов линии наблюдения, то при получении энергетического спектра нужно учитывать собственное тепловое излучение ФСП $F(\nu)$, а также спектральный коэффициент оптического тракта ФСП $R_0(\nu)$.

2. Для решения задачи наземного спектрального анализа, не требующего предварительного измерения спектра трассы наблюдения, наиболее применимы методы анализа спектров, для чего преобразованием Фурье зарегистрированную интерферограмму преобразуют в энергетический спектр излучения. Необходимые, для этого, математические методы обработки данных, целесообразно получить путём доработки существующих комплексов программ, на основе моделей переноса излучения в атмосфере (line-by-line модели). Открытые ресурсы спектральных бан-

ков данных HITRAN и GEISA имеют неполные данные о спектральных линиях изотопомеров химически опасных веществ, при этом Фурье-спектрометру, для задач пожарно-спасательных подразделений достаточно определять конечный набор соединений: NH_3 (3600 — 2800), CO_2 (2045-2065, 2390-2400 cm^{-1})

3. Получено уравнение переноса излучения для решения обратной задачи атмосферной оптики. Для достоверного решения полученного уравнения, его необходимо линеаризовать и разработать методику решения, не требующую определения параметров среды, при этом целесообразно линейное приближение обратной задачи атмосферной оптики с учетом допущений о физических свойствах среды (среда рассматривается в виде плоского слоя, пренебрегаем рассеянием).

Литература

1. Aurelio Oriana, Julien Réhault, Fabrizio Preda, Dario Polli, Giulio Cerullo Scanning Fourier transform spectrometer in the visible range based on birefringent wedges // *Journal of the Optical Society of America*. 2016. V. 33. Issue 7. P. 1415–1420.

2. Плазменные и газовые лазеры. Бойченко А. М., Панченко А. Н., Тарасенко В. Ф., Ткачѳв А. Н., Яковленко С. И., Панченко Н. А. Томск: SST, 2017. С. 316.

3. Dennis K., Killinger I, Robert T. Menzies Editorial for the Special Issue “Optical and Laser Remote Sensing of the Atmosphere” // *Remote Sens*. 2019. 11(7). P. 742. <https://doi.org/10.3390/rs11070742>

4. Матвиенко Г. Г., Бабушкин П. А., Бобровников С. М., Боровой А. Г., Бочковский Д. А., Галилейский В. П., Гришин А. И., Долгий С. И., Елизаров А. И. Лазерное и оптическое зондирование атмосферы // *Оптика атмосферы и океана* 32. 2019. № 9. С. 305–324. DOI: 10.15372/AOO20190905

5. *Optical Waves and Laser Beams in the Irregular Atmosphere*. Nathan Blaunstein, Natan Kopeika CRC Press London 2017. P. 334

6. Christopher S. Goldensteina, R. Mitchell Spearrinb, Jay. B. Jeffriesc, Ronald K. Hansonc Infrared laser-absorption sensing for combustion gases // *Progress in Energy and Combustion Science* Volume 60. May 2017. P. 132–176

7. Zheng Weijian, Yu Chunchao, Yang Zhixiong, Zhang Weifeng, Wang Hongwei, Lei Zhenggang, Yuan Xiaochun, Zhang Peizong, Yan Min, Zheng Zhimin Remote sense for environment pollution gases in wide infrared spectral range // *Infrared and Laser Engineering*. 2019. №48 (11): 110400 P. 34–58 [doi:10.3788/IRLA201948.1104002](https://doi.org/10.3788/IRLA201948.1104002)

8. Мингалев И. В., Федотова Е. А., Орлов К. Г. Построение параметризаций молекулярного поглощения в нижней и средней атмосфере земли в ИК диапазоне // *Physics of Auroral Phenomena: Proc. XLI Annual Seminar, Apatity*. 2018. P. 191–197.

9. Анисимов С. И., Жаховский В. В., Иногамов Н. А., Мигдал К. П., Петров Ю. В., Хохлов В. А. Физика высоких плотностей энергии и лазерные технологии // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2019 Т. 156. Вып. 4(10). С. 806–836.

10. Шубин А. А., Лагунов А. Н., Богданов А. А., Гапоненко М. В. Методы газовой хроматографии и ИК-спектроскопии как инструменты пожарно-технической экспертизы // *Сибирский пожарно-спасательный вестник: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Сибирская пожарно-спасательная академия"*. 2017. № 3 (6). С. 22–27.

11. Канев Ф. Ю., Макенова Н. А., Веретехин И. Д., Лукин В. П. Тепловые
civil security. DOI: 10.5281/zenodo.3901973

искажения многоканального лазерного излучения // Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы: Тезисы докладов 23 Международного симпозиума. Томск ИОА РАН, 2017. С. 181

12. Пожар В. Э., Боритко С. В., Мазур М. М., Шорин В. Н., Кутуза И. Б., Фадеев А. В., Шерышев А. Е., Карандин А. В., Штельман Л. В. Интеграция акустооптических спектрометров со спектральными базами данных // Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации: Материалы 11-й Международной научно-технической конференции. Российское НТОРЭС им. А.С. Попова. Суздаль, 07-10 октября 2018. С. 151–189.

13. Котов В. М. Акустооптика. Брэгговская дифракция многоцветного излучения. Москва: Янус-К, 2016. С. 280.

14. Петрова М. С., Долгополов И. С., Антонычева Е. А., Сюй А. В. Применение акустооптического эффекта // Дальневосточный государственный университет путей сообщения (Хабаровск) Бюллетень научных сообщений. 2019. № 24. С. 25-32.

15. Mahesh P., Biswadip G., Rao P.V. N., Dadhwal V. K., Sreenivas G., Kanchana A. L. A new ground-based FTIR spectrometer reference site at Shadnagar (India) and preliminary columnar retrievals of CH₄ and N₂O // International Journal of Remote Sensing. 2017. V. 38. Issue 14. P. 122–185.

16. Lucile Rutkowski, Alexandra C. Johansson, Gang Zhao, Thomas Hausmaninger, Amir Khodabakhsh, Ove Axner, and Aleksandra Foltynowicz Sensitive and broadband measurement of dispersion in a cavity using a Fourier transform spectrometer with kHz resolution // Optics Express. 2017. V. 25. Issue 18. P. 21711–21718. <https://doi.org/10.1364/OE.25.021711>

17. Kaley A. Walker, Patrick E. Sheese, Chris D. Boone, David E. Flittner, Robert Damadeo Comparisons of Nitrogen Dioxide Profiles from the Atmospheric Chemistry Experiment Fourier Transform Spectrometer (ACE-FTS) and Stratospheric Aerosol and Gas Experiment (SAGE) III // Optical Sensors and Sensing Congress (ES, FTS, HISE, Sensors) OSA Technical Digest (Optical Society of America 2019), paper FTu2B.5 <https://doi.org/10.1364/FTS.2019.FTu2B.5>

18. Каллистратова М. А., Петенко И. В., Кузнецов Р. Д., Куличков С. Н., Чхетиани О. Г., Чунчусов И. П., Люлюкин В. С., Зайцева Д. В., Вазаева Н. В., Кузнецов Д. Д., Перепелкин В. Г., Буш Г. А. Содарное зондирование пограничного слоя атмосферы: обзор исследований Института физики атмосферы им. Обухова РАН // Известия, Физика атмосферы и океана. 2018. С. 242–256.

19. Лабусов В. А., Гаранин В. Г., Зарубин И. А. Новые спектральные комплексы на основе анализаторов МАЭС. Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2017;83(1 р. II). С. 15–20. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2018-83-1-II-15-20>

20. Пожар В. Э., Балашов А. А., Булатов М. Ф. Современные спектральные оптические приборы НТЦ УП РАН // Научное приборостроение. 2018. Т. 28. № 4. С. 49–57.

21. Xiaomin Nie, Eva Ryckeboer, Gunther Roelkens, and Roel Baets CMOS-compatible broadband co-propagative stationary Fourier transform spectrometer integrated on a silicon nitride photonics platform // Optics Express. 2017. V. 25. Issue 8. P. A409-A418. <https://doi.org/10.1364/OE.25.00A409>

22. Спектрометр с Фурье-преобразованием [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://scienceworld.wolfram.com/physics/FourierTransformSpectrometer.html>

23. Наземные радиометры с двойной поляризацией [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.radiometer-physics.de/products/microwave-remote->

sensing-instruments/radiometers/dual-polarisation-surface-radiometers

24. Mario C. M. M. Souza, Andrew Grieco, Newton C. Frateschi, Yeshaiahu Fainman Fourier transform spectrometer on silicon with thermo-optic non-linearity and dispersion correction // *Nature Communications*. 2018. V. 9. 665.

25. Jaan Laane *Frontiers and Advances in Molecular Spectroscopy* // Elsevier. 2017. P. 788.

26. Гаврик А. Л., Бондаренко М. И., Коломиец С. Ф., Копнина Т. Ф., Луканина Л. А. Миссия Венера-д: концепция радиосистемы и методы обработки данных радиопросвечивания // *Распространение радиоволн: Труды XXVI Всероссийской открытой научной конференции*. В 2-х томах. Казань, 01-06 июля 2019 г. С. 32–59.

27. Фирсов К. М., Размоллов А. А., Клиточенко И. И. Радиационная модель для спектральных каналов радиометров, установленных на спутниках Sentinel-2A и Landsat 8 // *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса: Сборник трудов V Международной конференции и молодёжная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2019)*. Москва. 2019. С. 144–145.

28. Tiemo Landes, Amr Tamimi, J. Lavoie, Michael G. Raymer, Brian J. Smith, Andrew H. Marcus Quantum Fourier Transform Spectroscopy Rochester Conference on Coherence and Quantum Optics (CQO-11) OSA Technical Digest (Optical Society of America, 2019), paper W4B.2. <https://doi.org/10.1364/CQO.2019.W4B.2>

29. Ameneh Jabbari, Khosrow Hassani, Mohammad Taghi Tavassoly Determination of the spectral line profile using a phase gradient step and stationary Fourier transform spectroscopy // *Applied Optics*. 2019. V. 58. Issue 19. P. 5353–5359 <https://doi.org/10.1364/AO.58.005353>

30. Schütze C., Sauer U. Challenges associated with the atmospheric monitoring of areal emission sources and the need for optical remote sensing techniques – an open-path Fourier transform infrared (OP-FTIR) spectroscopy experience report. // *Environmental Earth Sciences*. 2016. V. 75. Article number: 919.

31. Tijian Wang, Taichang Gao, Hongsheng Zhang, Maofa Ge, Hengchi Lei, Peichang Zhang, Peng Zhang, Chunsong Lu, Chao Liu, Hua Zhang, Qiang Zhang, Hong Liao, Haidong Kan, Zhaozhong Feng, Yijun Zhang, Xiushu Qie, Xuhui Cai, Mengmeng Li, Lei Liu & Shengrui Tong Review of Chinese atmospheric science research over the past 70 years: Atmospheric physics and atmospheric environment // *Science China Earth Sciences*. 2019. V. 62. P. 1903–1945.

32. Juan Antonio Fernández Pierna, Marena Manley, Pierre Dardenne, Gerard Downey, Vincent Baeten *Modern Techniques for Food Authentication (Second Edition)*. 2018. Pages 103-138 / Chapter 4 - Spectroscopic Technique: Fourier Transform (FT) Near-Infrared Spectroscopy (NIR) and Microscopy (NIRM) P. 309–345 <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814264-6.00004-9>

33. Zheng Weijian, Yu Chunchao, Yang Zhixiong, Zhang Weifeng, Wang Hongwei, Lei Zhenggang, Yuan Xiaochun, Zhang Peizong, Yan Min, Zheng Zhimin Remote sense for environment pollution gases in wide infrared spectral range // *Infrared and Laser Engineering*. 2019. № 48(11). 110400 P. 39–45. doi: 10.3788/IRLA201948.1104002

34. Toth Lorand, Kovacs Izabella, Călămar Engolica-Nicoleta, Găman George Artur, Ghicioi Emilian Validation and determination of accidental gas emissions by advanced gas scanning method in the infrared field // *International Multidisciplinary Scientific GeoConference 2019: SGEM; Sofia. T. 19. Изд. 1.1. P. 108–144* [Civil Security. DOI: 10.5281/zenodo.3901973](https://doi.org/10.5281/zenodo.3901973)

DOI:10.5593/sgem2019/1.1/S05.124

35. Claudia Emde, Vasileios Barlakas, Céline Cornet, Frank Evans, ZhenWang, Laurent C. Labonotte, AndreasMacke, Bernhard Mayer, Manfred Wendisch IPRT polarized radiative transfer model intercomparison project – Three-dimensional test cases (phase B) // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* April. 2018. V. 209. P. 19–44. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2018.01.024>

36. Børge Hamre, Snorre Stamnes, Knut Stamnes, Jakob Stamnes AccuRT A versatile tool for radiative transfer simulations in the coupled atmosphere-ocean system // *AIP Conference Proceedings* 1810, 120002. 2017. V. 1810. Issue 1. P. 854–903 <https://doi.org/10.1063/1.4975576>

37. Joan Miquel Galve, César Coll, Juan Manuel Sánchez, Enric Valor, Raquel Niclòs, Lluís Pérez-Planells, Carolina Doña, Vicente Caselles Single band atmospheric correction tool for thermal infrared data: application to Landsat 7 // *Proceedings Volume 10004, Image and Signal Processing for Remote Sensing XXII*; 1000405. 2016. P. 55-67. <https://doi.org/10.1117/12.2241425>

38. Cheng-Hsien Lin, Richard H. Grant, Albert J. Heber, Cliff T. Johnston Application of open-path Fourier transform infrared spectroscopy (OP-FTIR) to measure greenhouse gas concentrations from agricultural fields // *Atmos. Meas. Tech.* 2019. (12) P. 3403–3415. <https://doi.org/10.5194/amt-12-3403-2019>

39. Zhixiong Yang, Chunchao Yu, Weifeng Zhang, Weijian Zheng, Hongwei Wang, Zhenggang Lei, Peizhong Zhang Remote sense for environment pollution gases in wide infrared spectral range Applied Optics and Photonics China (AOPC2019), 2019. Beijing, China Proceedings Volume 11337, AOPC 2019: Optical Spectroscopy and Imaging; 1133717. 2019. <https://doi.org/10.1117/12.2547867>

40. Jong-Seon Kim, Hyeon Jeong Kim, Jae Hwan Lee, Young I Kang & Byeong Hwang Park Development of a radiative transfer model for the determination of toxic gases by Fourier transform–infrared spectroscopy with a support vector machine algorithm // *Journal Instrumentation Science Technology*. V. 47. 2019. Issue 3. P. 264–277.

41. Jae Hwan Lee, Jong Min Lee, Young I Kang Field identification and spatial determination of hazardous chemicals by Fourier transform infrared imaging // *Journal Instrumentation Science Technology*. V. 44. 2016. Issue 5. P. 504–520.

42. Samuel A. Meek, Arthur Hipke, Guy Guelachvili, Theodor W. Hänsch, Nathalie Picqué Doppler-free Fourier transform spectroscopy // *Optics Letters*. 2018. V. 43. Issue 1. P. 162–165. <https://doi.org/10.1364/OL.43.000162>

43. Carli B., Ade P., Cortesi U. et al. Emission Fourier transform spectroscopy for the remote sensing of the atmosphere // *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*. 2019. № 16. P. 1313–1328.

44. Mohamed M. A., Jaafar J., Ismail A. F., Othman M.H.D., Rahman M.A. Chapter 1 - Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy Membrane Characterization 2017. P. 3–29 <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63776-5.00001-2>

45. Uta Sauer, H. Borsdorf, P. Dietrich, A. Liebscher, I. Möller, S. Martens, F. Möller, S. Schlömer, C. Schütze Application of open-path Fourier transform infrared spectroscopy for atmospheric monitoring of a CO₂ back-production experiment at the Ketzin pilot site (Germany) // *Environmental Monitoring and Assessment*. 2018. V. 190, Article number: 114.

46. Zhi-xiong Yang, Shuangxi Xu, Fei Xia, Xiubin Hong, Weijian Zheng, Zhenggang Lei, Chunchao Yu The principle and state research on gas identification method for long-wave infrared hyperspectral imaging // *Applied Optics and Photonics China*

(AOPC2019), 2019, Beijing, China / Proceedings V. 11338, AOPC 2019: Optical Sensing and Imaging Technology; 113383G. 2019. <https://doi.org/10.1117/12.2548084>

47. Israel Borges, Sebastião Thomas, D.Robinson, Alina Alexeenko Atmospheric Spray Freeze-Drying: Numerical Modeling and Comparison With Experimental Measurements // Journal of Pharmaceutical Sciences Volume 106, Issue 1, January 2017. P. 183–192.

48. Jorge Vicent ; Neus Sabater ; Luis Alonso ; Jochem Verrelst ; J. Moreno Alg: a Toolbox for the Generation of Look-Up tables Based on Atmospheric Radiative Transfer Models // 2018 9th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS) 23-26 Sept. 2018. 122. p. doi: 10.1109/WHISPERS.2018.8747034

49. Леонов А. С. Локально экстраоптимальные регуляризующие алгоритмы и апостериорные оценки точности для некорректных задач с разрывными решениями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56. номер 1. С. 3–15.

50. Козак Л. Я., Федоров В. Е., Глушков Г. Е. Методы обработки экспериментальных данных для последующего построения математических моделей // Информационные технологии в моделировании и управлении: подходы, методы, решения: Сборник научных статей II Всероссийской научной конференции с международным участием. В 2 частях. Тольятти, 22-24 апреля 2019 г. С. 85–108.

51. Васина В. В. Итерационные процессы для некорректно поставленных задач с монотонным оператором // Математические труды 2018. Т. 21. № 2. С.117–135. <https://doi.org/10.17377/mattrudy.2018.21.205>

52. Jing Liu, Wen-bin Xu, Jun-Wei Li, Min Yang, Peng Xiu, Chong Zheng, Xian-Zhong Sun Study on recognition method of ethylene gas based on absorption characteristics of infrared spectrum // Applied Optics and Photonics China (AOPC2019), 2019, Beijing, China / Proceedings. V. 11338: Optical Sensing and Imaging Technology; 113380G. 2019. P. 28–59. <https://doi.org/10.1117/12.2541519>

53. Małgorzata Majder-Łopatka, Wioletta Rogula-Kozłowska, Wiktor Waśik The application of stand-off infrared detection to identify air pollutants // 10th Conference on Interdisciplinary Problems in Environmental Protection and Engineering EKO-DOK 2018. V. 44. 2018. P. 102–112.

54. Рязанов В. И., Шаповалов А. В., Шаповалов В. А., Увижева Ф. Х., Шериева М. А., Численная модель распространения примесей в атмосфере с учетом локальных метеорологических условий, Материалы международной научной конференции «Актуальные проблемы прикладной математики и физики» Кабардино-Балкария, Нальчик, 17–21 мая 2017 г. С. 54–68.

55. Martin D. H., Pullet E. Polarized interferometric spectrometry for millimetre and submillimetre spectrum // Infrared Physics. 2019. № 10. P. 105–109.

56. Одинцов С. Л., Гладких В. А., Камардин А. П., Мамышев В. П., Невзорова И. В. Оценки показателя преломления и регулярной рефракции оптических волн в пограничном слое атмосферы // Оптика атмосферы и океана. 30(10). 2017. С. 829–833.

57. Сидикова А. И. Численный подход к оценке погрешности некорректных задач // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». 2016. Т. 16. № 2. С. 150–153.

58. База данных молекулярного поглощения HITRAN [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://hitran.org>

59. База данных молекулярной спектроскопии GEISA [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://ara.lmd.polytechnique.fr>

60. Kochanov Roman V., Gordon Iouli E., Rothman Laurence S.; Shine, Keith; Sharpe, Steven W.; Johnson, Timothy J.; Harrison, Jeremy J.; Bernath, Peter F.; Wallington, Timothy; Birk, Manfred; Wagner, Georg; Hill, Christian Absorption Cross-Sections in HITRAN2016: Major Database Update for Atmospheric, Industrial, and Climate Applications // 72nd International Symposium on Molecular Spectroscopy: June 19-23, 2017 at The University of Illinois at Urbana-Champaign. Abstract id.TJ10 / June 2017. DOI: 10.15278/isms.2017.TJ10

61. Leidi Wanga, Dingling Zhangb, ChenChenc, Fei Hua, Lei Zhanga Impact analysis of surface albedo heterogeneity on shortwave radiation using a 3D radiative transfer model // Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics Volume 204, August 2020, №105287. P. 37-54 / <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2020.105287>

62. Jae Hwan Lee, Hyeon Jeong Kim, Jong-Seon Kim, Hyunwoo Nam, Young Il Kang, Byeong-Hwang Park Development of compact stand-off hazardous chemical detector based on Michelson interferometer // Optical Engineering. № 57(8). 084105. 2018. P. 108–132. <https://doi.org/10.1117/1.OE.57.8.084105>

61. Zheng S. N., Zou J., Cai H., Song J. F., Chin L. K., Liu P. Y., Z. P. Lin, D. L. Kwong A. Q. Liu Microring resonator-assisted Fourier transform spectrometer with enhanced resolution and large bandwidth in single chip solution // Nature Communications V. 10. Article number: 2349. 2019. P. 18–32.

62. Lucile Rutkowski, Alexandra C. Johansson, Gang Zhao, Thomas Hausmaninger, Amir Khodabakhsh, Ove Axner, Aleksandra Foltynowicz Sensitive and broadband measurement of dispersion in a cavity using a Fourier transform spectrometer with kHz resolution // Optics Express. 2017. V. 25. Issue 18. P. 21711–21718 <https://doi.org/10.1364/OE.25.021711>

63. Pasquale Sellitto, Henda Guermazi, Elisa Carboni, Richard Siddans, Mike Burton Unified quantitative observation of coexisting volcanic sulfur dioxide and sulfate aerosols using ground-based Fourier transform infrared spectroscopy // Atmos. Meas. Tech. 12. 2019. P. 5381–5389. <https://doi.org/10.5194/amt-12-5381-2019>

64. Svedberg U. Fourier Transform Infrared Spectroscopy in Industrial Hygiene Applications: Assessment of Emissions from and Exposures in Wood Processing Industries, Doctoral thesis. Uppsala: Uppsala University, 2018. P. 58.

65. Ph.de Donato, O.Barres, J.Sausse, N.Taquet Advances in 3-D infrared remote sensing gas monitoring. Application to an urban atmospheric environment // Remote Sensing of Environment. 2016. V. 175. P. 301–309.

66. Philippe Hébert, Clémence Pierangelo, Alain Rosak, Elodie Cansot, Frédéric Bernard, Claude Camy-Peyret Progress in static fourier transform infrared spectroscopy: assessment of sifiti preliminary performances // Proceedings Volume 10567, International Conference on Space Optics. ICSO; 1056723. 2017. P. 408–4035. <https://doi.org/10.1117/12.2308129>

67. Suskind J., Bamet C. D., Blaisdell J. M. Retrieval of atmospheric and surface parameters from AIRS/AMSU/HSB data in the presence of clouds // IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing. 2017. V. 41. № 2. P. 390–409.

68. Norbert Höfert, Klaus Schäfer, Andreas Richter, Konradin Weber, Peter Maas. Standards VDI 4211 and VDI 4212 on passive FTIR and DOAS remote sensing techniques // SPIE Remote Sensing, 2018, Berlin, Germany // Proceedings Volume 10786, Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere XXIII; 107860W. 2018. P. 275–309. <https://doi.org/10.1117/12.2325145>

О. О. Ковальов¹, к.т.н., доцент, доц. каф.

Національний університет цивільного захисту України, Харків, Україна

ОБГРУНТУВАННЯ МЕТОДУ ОПЕРАТИВНОГО КОНТРОЛЮ АТМОСФЕРИ В УМОВАХ НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЙ

Проведено теоретичне обґрунтування і обраний метод оперативного дистанційного безпробовідбірної газового аналізу атмосфери в умовах надзвичайних ситуацій. В результаті аналізу методів безпробовідбірної визначення речовин у відкритій атмосфері, встановлено, що найбільш доцільним, є застосування оптичних спектральних методів контролю складу атмосфери, що працюють за рахунок реєстрації та аналізу електромагнітного випромінювання об'єкта спостереження. Для визначення найбільш ефективного методу дистанційного моніторингу, була складена аналітична класифікація всіх можливих оптичних спектральних методів дистанційного моніторингу: лідарні методи, акустооптичні фільтри, кореляційні спектрометри, інтерференційні світлофільтри, що перестроюються, застосування інтерферометра Фабрі-Перо або Фур'є-спектрометрії. Визначено, що для вирішення завдання безпробовідбірної аналізу речовин у відкритій атмосфері, найбільш доцільним є застосування інфрачервоного Фур'є-спектрорадіометра середньої спектральної роздільної здатності, який працює в пасивному режимі у вікні прозорості атмосфери 7-14 мкм і дозволяє отримувати експериментальну інформацію в режимі реального часу. Проведені аналітичні та теоретичні дослідження конструкції і алгоритмів роботи двопроменевого інтерферометра, а також математичних методів обробки та інтерпретації експериментальної інформації. Встановлено, що для вирішення завдання виявлення, ідентифікації та визначення концентрацій речовин у відкритій атмосфері, доцільно застосовувати спектральний аналіз на основі моделей розрахунку переносу випромінювання в атмосфері, для чого необхідно розробити алгоритми розв'язання задачі розпізнавання речовин, засновані на лінеаризації задачі у вихідній постановці з подальшим застосуванням методів кореляційного аналізу і методів пошуку квазірішення.

Ключові слова: Дистанційний газоаналіз, ідентифікація речовин, Фур'є-спектроскопія, відновлення концентрацій

*O. Kovalov, PhD, Associate Professor, Associate Professor of the Department
National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*

SUBSTANTIATION OF THE METHOD OF OPERATIONAL CONTROL OF THE ATMOSPHERE IN EMERGENCY SITUATIONS

The theoretical substantiation is carried out and the method of operational remote non-sampling gas analysis of the atmosphere in emergency situations is chosen. As a result of the analysis of the methods of sample-free determination of substances in an open atmosphere, it was found that the use of optical spectral methods for controlling the composition of the atmosphere, implying the registration and analysis of electromagnetic radiation of the object under observation, is most appropriate. To determine the most effective method of remote monitoring, an analytical classification of all possible optical spectral methods of remote monitoring was compiled: lidar methods, acoustic-optic filters, correlation spectrometers, tunable interference filters, the use of a Fabry-Perot interferometer or Fourier spectrometry. It was determined that in order to solve the problem of sampling analysis of substances in an open atmosphere, it is most appropriate to use an infrared Fourier spectroradiometer of medium spectral resolution, operating in a passive mode in an atmosphere transparency window of 7-14 nm and allowing to obtain experimental information in real time. Analytical and theoretical studies of the design and operation algorithms of a two-beam interferometer, as well as mathematical methods for processing and interpreting experimental information, have been carried out. It is established that to solve the problem of detecting, identifying and determining the concentrations of substances in an open atmosphere, we apply spectral analysis based on models for calculating radiation transfer in the atmosphere, for which it is necessary to develop algorithms for solving the problem of recognition of substances based on linearization of the problem in the initial formulation with subsequent application of the methods correlation analysis and quasi-solution search methods.

Keywords: Remote gas analysis, substance identification, Fourier spectroscopy, concentration restoration

References

1. Scanning Fourier transform spectrometer in the visible range based on birefringent wedges. (2016). Aurelio Oriana, Julien Réhault, Fabrizio Preda, Dario Polli, and Giulio Cerullo. *Journal of the Optical Society of America A*, 33, 7, 1415–1420.
2. Boychenko, A. M., Panchenko, A. N., Tarasenko, V. F., Tkachev, A. N., Yakovlenko, S. I., Panchenko, N. A. (2017). *Plasma and gas lasers*. Tomsk: SST, 316.
3. Editorial for the Special Issue “Optical and Laser Remote Sensing of the Atmosphere”. Dennis K. Killinger 1, and Robert T. Menzies. *Remote Sens.* 2019, 11 (7), 742. <https://doi.org/10.3390/rs11070742>
4. Laser and optical sounding of the atmosphere. (2019). Г. Г. Matvienko, П. А. Grandmother C. M. Bobrovnikov, А. Г. Borovoy, D. A. Bochkovsky, B. П. Galilean, А. I. Grishin, S. I. Dolgiy, А. I. Elizarov et al. “Optics of the Atmosphere and Ocean”, 32, 9 DOI: 10.15372 / AOO20190905
5. *Optical Waves and Laser Beams in the Irregular Atmosphere*. Nathan Blaunstein, Natan Kopeika 2017, 334.
6. Infrared laser-absorption sensing for combustion gases. Christopher S. Goldensteina, R. Mitchell Spearrinb, Jay. B. Jeffriesc, Ronald K. Hansonc. *Progress in Energy and Combustion Science*, 60, May 2017, 132–176.
7. Remote sense for environment pollution gases in wide infrared spectral range. 2019. Zheng Weijian, Yu Chunchao, Yang Zhixiong, Zhang Weifeng, Wang Hongwei, Lei Zhenggang, Yuan Xiaochun, Zhang Peizong, Yan Min, Zheng Zhimin // *Infrared and Laser Engineering*, 48 (11): 110400 / doi: 10.3788 / IRLA201948.1104002
8. The construction of molecular absorption parametrizations in the lower and middle atmosphere of the earth in the IR range. 2018. IV. Mingalev, E.A. Fedotova, K.G. Orlov. *Physics of Auroral Phenomena: Proc. XLI Annual Seminar, Apatity*, 191–197.
9. *High Energy Density Physics and Laser Technologies*. 2019. S. I. Anisimov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, K. P. Migdal, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 156, 4 (10), 806–836.
10. Shubin, A. A., Lagunov, A. N., Bogdanov, A. A., Gaponenko, M. V. (2017). *Methods of gas chromatography and IR spectroscopy as tools for fire-technical expertise*. Siberian Fire and Rescue Bulletin: Siberian Fire and Rescue Academy, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education, 3 (6), 22–27.
11. Thermal distortion of multichannel laser radiation. (2017). F. Yu. Kanev, N. A. Makenova, I. D. Veretekhin, V. P. Lukin. *Optics of the atmosphere and ocean. Atmospheric Physics: Abstracts of the 23rd International Symposium*. Tomsk IOA RAS, 181.
12. Integration of acousto-optical spectrometers with spectral databases. (2018). Pozhar, V. E., Boritko, S. V., Mazur, M. M., Shorin, V. N., Kutuza, I. B., Fadeev, A. V., Sheryshev, A. E., Karandin, A. V., Shtelman, L. V. *Acousto-optical and radar methods for measuring and processing information: Materials of the 11th International Scientific and Technical Conference*. Russian NTORES them. A. S. Popova. Suzdal, October 7–10.
13. Kotov, V. M. *Acoustooptics. Bragg diffraction of multicolor radiation*. Janus-K Publishing House, Moscow, 2016, 280.
14. The use of acousto-optical effect. (2019). Petrova, M. S., Dolgopolov I. S., Antonycheva E. A., Xu A. V. *Far Eastern State University of Railway Engineering (Khabarovsk) Bulletin of Scientific Communications*, 24, 25–32.
15. A new ground-based FTIR spectrometer reference site at Shadnagar (India) and preliminary columnar retrievals of CH₄ and N₂O. (2017). P. Mahesh, G. Biswadip, P.V. N. Rao, V. K. Dadhwal, G. Sreenivas, A. L. Kanchana. *International Journal of Remote Sensing*, 38, 14.

16. Sensitive and broadband measurement of dispersion in a cavity using a Fourier transform spectrometer with kHz resolution. (2017). Lucile Rutkowski, Alexandra C. Johansson, Gang Zhao, Thomas Hausmaninger, Amir Khodabakhsh, Ove Axner, and Aleksandra Foltynowicz. *Optics Express*, 25, 18, 21711–21718.

17. Comparisons of Nitrogen Dioxide Profiles from the Atmospheric Chemistry Experiment Fourier Transform Spectrometer (ACE-FTS) and Stratospheric Aerosol and Gas Experiment (SAGE) III. Kaley A. Walker, Patrick E. Sheese, Chris D. Boone, David E. Flittner, and Robert Damadeo. *Optical Sensors and Sensing Congress (ES, FTS, HISE, Sensors) OSA Technical Digest (Optical Society of America, 2019)*, paper FTu2B.5.

18. Sodar sounding of the atmospheric boundary layer: a review of studies of the Institute of Atmospheric Physics named after Obukhov RAS. (2018). M. A. Kallistratova, I. V. Petenko, R. D. Kuznetsov, S. N. Kulichkov, O. G. Chkhetiani, I. P. Chunchusov, V. S. Lyulyukin, D. V. Zaitseva, N. V. Vazaeva D. D. Kuznetsov, V.G. Perepelkin, G.A. Bush / *Izvestia, Atmospheric and Ocean Physics*, 242–256.

19. Labusov, V. A., Garanin, V. G., Zarubin, I. A. (2017). New spectral complexes based on MAES analyzers. Factory laboratory. *Diagnostics of materials*. 83 (1 p.II): 15-20. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2018-83-1-II-15-20>

20. Modern spectral optical instruments of the STC UP RAS. (2018). Fire V. E., Balashov A. A., Bulatov M. F. *Scientific Instrumentation*, 28, 4, 49–57.

21. CMOS-compatible broadband co-propagative stationary Fourier transform spectrometer integrated on a silicon nitride photonics platform. (2017). Xiaomin Nie, Eva Ryckeboer, Gunther Roelkens, and Roel Baets. *Optics Express*, 25, 8.

22. Spectrometer with Fourier transform. Access Mode: <http://scienceworld.wolfram.com/physics/FourierTransformSpectrometer.html>

23. Terrestrial radiometers with double polarization. Access mode: <https://www.radiometer-physics.de/products/microwave-remote-sensing-instruments/radiometers/dual-polarisation-surface-radiometers>

24. Fourier transform spectrometer on silicon with thermo-optic non-linearity and dispersion correction. (2018). Mario C. M. Souza, Andrew Grieco, Newton C. Frateschi, Yeshaiahu Fainman. *Nature Communications*, 9, 665.

25. *Frontiers and Advances in Molecular Spectroscopy*: Jaan Laane. (2017). Elsevier, 788.

26. The mission of Venus-d: the concept of a radio system and methods for processing radio illumination data. (2019). Gavrik A. L., Bondarenko M. I., Kolomiyets S. F., Kopnina T. F., Lukanina L. A. *Propagation of radio waves: Proceedings of the XXVI All-Russian Open Scientific Conference*, 2, Kazan, July 01-06.

27. The radiation model for spectral channels. (2019). K. M. Firsov, A. A. Razmolov, I. I. Klitovenko. The radiation model for the spectral channels of radiometers installed on the Sentinel-2A and Landsat 8 satellites. *Modern Problems of Remote Sensing of the Earth from Space: Proceedings of the V International Conference and Youth School “Information Technologies and Nanotechnologies” (ITNT-2019)*, 144–145.

28. Quantum Fourier Transform Spectroscopy. Tiemo Landes, Amr Tamimi, J. Lavoie, Michael G. Raymer, Brian J. Smith, and Andrew H. Marcus. *Rochester Conference on Coherence and Quantum Optics (CQO-11) OSA Technical Digest (Optical Society of America, 2019)*, paper W4B.2.

29. Determination of the spectral line profile using a phase gradient step and stationary Fourier transform spectroscopy. (2019). Ameneh Jabbari, Khosrow Hassani,

Mohammad Taghi Tavassoly. *Applied Optics*, 58, 19, 5353–5359.

30. Challenges associated with the atmospheric monitoring of areal emission sources and the need for optical remote sensing techniques—an open-path Fourier transform infrared (OP-FTIR) spectroscopy experience report. (2016). C. Schütze, U. Sauer // *Environmental Earth Sciences*, 75, 919.

31. Review of Chinese atmospheric science research over the past 70 years: Atmospheric physics and atmospheric environment. (2019). Tijian Wang, Taichang Gao, Hongsheng Zhang, Maofa Ge, Hengchi Lei, Peichang Zhang, Peng Zhang, Chunsong Lu, Chao Liu, Hua Zhang, Qiang Zhang, Hong Liao, Haidong Kan, Zhaozhong Feng, Yijun Zhang, Xiushu Qie, Xuhui Cai, Mengmeng Li, Lei Liu & Shengrui Tong / *Science China Earth Sciences*, 62, 1903–1945.

32. *Modern Techniques for Food Authentication (Second Edition)*. (2018). Pages 103-138. Chapter 4 – Spectroscopic Technique: Fourier Transform (FT) Near-Infrared Spectroscopy (NIR) and Microscopy (NIRM) / Juan Antonio Fernández Pierna, Mariana Manley, Pierre Dardenne, Gerard Downey, Vincent Baeten.

33. Remote sense for environment pollution gases in wide infrared spectral range. (2019). Zheng Weijian, Yu Chunchao, Yang Zhixiong, Zhang Weifeng, Wang Hongwei, Lei Zhenggang, Yuan Xiaochun, Zhang Peizong, Yan Min, Zheng Zhimin // *Infrared and Laser Engineering*, 48(11): 110400. doi: 10.3788/IRLA201948.1104002

34. Validation and determination of accidental gas emissions by advanced gas scanning method in the infrared field. (2019). Toth, Lorand; Kovacs, Izabella; Călămar, Engolica-Nicoleta; Găman, George Artur; Ghicioi, Emilian. *International Multidisciplinary Scientific GeoConference: SGEM*; Sofia, 19.

35. IPRT polarized radiative transfer model intercomparison project – Three-dimensional test cases (phase B). (2018). Claudia Emde, Vasileios Barlakas, Céline Cornet, Frank Evans, Zhen Wang, Laurent C. Labonotte, Andreas Macke, Bernhard Mayer, Manfred Wendisch. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 209, April, 19–44.

36. AccuRT: A versatile tool for radiative transfer simulations in the coupled atmosphere-ocean system // Børge Hamre, Snorre Stamnes, Knut Stamnes, Jakob Stamnes // *AIP Conference Proceedings* 1810, 120002 (2017), Volume 1810, Issue 1, <https://doi.org/10.1063/1.4975576>

37. Joan Miquel Galve, 1 César Coll, 1 Juan Manuel Sánchez, 2 Enric Valor, 1 Raquel Niclòs, 1 Lluís Pérez-Planells, 1 Carolina Doña, 1 Vicente Caselles. (2016). Single band atmospheric correction tool for thermal infrared data: application to Landsat 7. *Proceedings, 10004, Image and Signal Processing for Remote Sensing XXII*; 1000405.

38. Application of open-path Fourier transform infrared spectroscopy (OP-FTIR) to measure greenhouse gas concentrations from agricultural fields. (2019). Cheng-Hsien Lin, Richard H. Grant, Albert J. Heber, Cliff T. Johnston. *Atmos. Meas. Tech.*, 12, 3403–3415.

39. Remote sense for environment pollution gases in wide infrared spectral range Zhixiong Yang, Chunchao Yu, Weifeng Zhang, Weijian Zheng, Hongwei Wang, Zhenggang Lei, Peizhong Zhang *Applied Optics and Photonics China (AOPC2019)*, 2019, Beijing, China. (2019). *Proceedings*, 11337, *AOPC 2019: Optical Spectroscopy and Imaging*; 1133717.

40. Development of a radiative transfer model for the determination of toxic gases by Fourier transform–infrared spectroscopy with a support vector machine algorithm. (2019). Jong-Seon Kim, Hyeon Jeong Kim, Jae Hwan Lee, Young Il Kang Byeong

Hwang Park / *Journal Instrumentation Science Technology*, 47, 3, 264–277.

41. Field identification and spatial determination of hazardous chemicals by Fourier transform infrared imaging. (2016). Jae Hwan Lee, Jong Min Lee Young Il Kang. *Journal Instrumentation Science Technology*, 44, 5, 504–520.

42. Membrane Characterization 2017, Pages 3-29. Chapter 1 – Fourier Transform 57. (2018). Doppler-free Fourier transform spectroscopy. Samuel A. Meek, Arthur Hipke, Guy Guelachvili, Theodor W. Hänsch, and Nathalie Picqué. *Optics Letters*, 43, 1, 162–165.

43. Carli, B., Ade, P., Cortesi, U. et al. (2019). Emission Fourier transform spectroscopy for the remote sensing of the atmosphere. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 16, 1.313–1328.

44. Infrared (FTIR) Spectroscopy. M. A. Mohamed, J. Jaafar, A. F. Ismail, M.H.D. Othman, M. A. Rahman. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63776-5.00001-2>

45. Application of open-path Fourier transform infrared spectroscopy for atmospheric monitoring of a CO₂ back-production experiment at the Ketzin pilot site (Germany). (2018). Uta Sauer, H. Borsdorf, P. Dietrich, A. Liebscher, I. Möller, S. Martens, F. Möller, S. Schlömer, C. Schütze. *Environmental Monitoring and Assessment*, 190, 114.

46. The principle and state research on gas identification method for long-wave infrared hyperspectral imaging. (2019). Zhi-xiong Yang, Shuangxi Xu, Fei Xia, Xiubin Hong, Weijian Zheng, Zhenggang Lei, Chunchao Yu. *Applied Optics and Photonics China (AOPC2019)*, 2019, Beijing, China. Proceedings, 11338, AOPC 2019: Optical Sensing and Imaging Technology; 113383G. <https://doi.org/10.1117/12.2548084>

47. Atmospheric Spray Freeze-Drying: Numerical Modeling and Comparison With Experimental Measurements. Israel Borges, Sebastião Thomas, D. Robinson, Alina Alexeenko / *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 106, Issue 1, January 2017, 183–192.

48. Alg: a Toolbox for the Generation of Look-Up tables Based on Atmospheric Radiative Transfer Models. Jorge Vicent; Neus Sabater; Luis Alonso; Jochem Verrelst; J. Moreno. (2018). 9th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS) 23–26 Sept. DOI: 10.1109/WHISPERS.2018.8747034

49. A. S. Leonov. (2016). Locally extra-optimal regularizing algorithms and posterior accuracy estimates for ill-posed problems with discontinuous solutions. *J. Comput. mate. and mat. Fiz.*, 56, 1, 3–15.

50. Methods of processing experimental data for the subsequent construction of mathematical models. (2019). Kozak L. Ya., Fedorov V. E., Glushkov G. E. *Information technology in modeling and management: approaches, methods, solutions: Collection of scientific articles of the II All-Russian scientific conference with international participation*. In 2 parts. Tolyatti, April 22–24.

51. Vasina, V. V. (2018). Iterative processes for ill-posed problems with a monotone operator. *Mat. Tr.*, 21, 2, 117–135. <https://doi.org/10.17377/mattrudy.2018.21.205>

52. Study on recognition method of ethylene gas based on absorption characteristics of infrared spectrum. (2019). Jing Liu, Wen-bin Xu, Jun-Wei Li, Min Yang, Peng Xiu, Chong Zheng, Xian-Zhong Sun. *Applied Optics and Photonics China (AOPC2019)*, 2019, Beijing, China. Proceedings, 11338: Optical Sensing and Imaging Technology; 113380G. <https://doi.org/10.1117/12.2541519>

53. The application of stand-off infrared detection to identify air pollutants. Małgorzata Majder-Łopatka, Wioletta Rogula-Kozłowska, Wiktor Wasik. (2018). 10th Civil Security. DOI: 10.5281/zenodo.3901973

Conference on Interdisciplinary Problems in Environmental Protection and Engineering EKO-DOK 2018, 44.

54. Ryazanov, V. I., Shapovalov, A. V., Shapovalov, V. A., Uvizheva, F. Kh. Sherieva, M. A. (2017). "A numerical model of the propagation of impurities in the atmosphere taking into account local meteorological conditions", Materials of the international scientific conference "Actual Problems of Applied Mathematics and Physics" Kabardino-Balkaria, Nalchik, May, 17–21.

55. Martin, D.H., Pullet, E. (2019). Polarized interferometric spectrometry for millimetre and submillimetre spectrum. *Infrared Physics*, 10, 105–109.

56. Estimates of the refractive index and regular refraction of optical waves in the atmospheric boundary layer. (2017). Odintsov, S. L., Gladkikh, V. A., Kamardin, A. P., Mamyshv, V. P., Nevzorova, I. V. *Optics of the atmosphere and ocean*, 30 (10), 829–833.

57. Sidikova, A. I. (2016). A numerical approach to estimating the error of incorrect tasks. *Bulletin of SUSU. Series "Computer technology, management, electronics"*, 16, 2, 150–153.

58. Database of molecular absorption HITRAN. Access Mode: <https://hitran.org>

59. Database of molecular spectroscopy GEISA. Access Mode: <https://ara.lmd.polytechnique.fr>

60. Absorption Cross-Sections in HITRAN2016: Major Database Update for Atmospheric, Industrial, and Climate Applications. Kochanov, Roman V.; Gordon, Iouli E.; Rothman, Laurence S.; Shine, Keith; Sharpe, Steven W.; Johnson, Timothy J.; Harrison, Jeremy J.; Bernath, Peter F.; Wallington, Timothy; Birk, Manfred; Wagner, Georg; Hill, Christian. 72nd International Symposium on Molecular Spectroscopy: June 19-23, 2017 at The University of Illinois at Urbana-Champaign. Abstract id.TJ10. June 2017/ DOI: 10.15278/isms.2017.TJ10

61. Impact analysis of surface albedo heterogeneity on shortwave radiation using a 3D radiative transfer model. Leidi Wanga, Dingling Zhangb, ChenChenc, Fei Hua, Lei Zhanga / *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 204, August 2020, 105287. <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2020.105287>

62. Development of compact stand-off hazardous chemical detector based on Michelson interferometer. (2018). Jae Hwan Lee, Hyeon Jeong Kim, Jong-Seon Kim, Hyunwoo Nam, Young Il Kang, Byeong-Hwang Park. *Optical Engineering*, 57(8), 084105. <https://doi.org/10.1117/1.OE.57.8.084105>

61. Microring resonator-assisted Fourier transform spectrometer with enhanced resolution and large bandwidth in single chip solution. (2019). S. N. Zheng, J. Zou, H. Cai, J. F. Song, L. K. Chin, P. Y. Liu, Z. P. Lin, D. L. Kwong A. Q. Liu. *Nature Communications*, 10, 2349.

62. Sensitive and broadband measurement of dispersion in a cavity using a Fourier transform spectrometer with kHz resolution. (2017). Lucile Rutkowski, Alexandra C. Johansson, Gang Zhao, Thomas Hausmaninger, Amir Khodabakhsh, Ove Axner, and Aleksandra Foltynowicz. *Optics Express*, 25, 18, 21711–21718. <https://doi.org/10.1364/OE.25.021711>

63. Unified quantitative observation of coexisting volcanic sulfur dioxide and sulfate aerosols using ground-based Fourier transform infrared spectroscopy. (2019). Pasquale Sellitto, Henda Guermazi, Elisa Carboni, Richard Siddans, Mike Burton. *Atmos. Meas. Tech.*, 12, 5381–5389. <https://doi.org/10.5194/amt-12-5381-2019>

64. Svedberg, U. (2018). *Fourier Transform Infrared Spectroscopy in Industrial Hygiene Applications: Assessment of Emissions from and Exposures in Wood Pro-*

cessing Industries, Doctoral thesis. Uppsala: Uppsala University, 58.

65. Advances in 3-D infrared remote sensing gas monitoring. Application to an urban atmospheric environment. Ph.de Donato, O.Barres, J.Sausse, N.Taquet. Remote Sensing of Environment, 175, 15 March 2016, 301–309.

66. Progress in static fourier transform infrared spectroscopy: assessment of sifti preliminary performances. (2017). Philippe Hébert, Clémence Pierangelo, Alain Rosak, Elodie Cansot, Frédéric Bernard, Claude Camy-Peyret. Proceedings, 10567, International Conference on Space Optics – ICSO 2006; 1056723. <https://doi.org/10.1117/12.2308129>

67. Suskind, J., Bamet, C. D., Blaisdell, J. M. (2017). Retrieval of atmospheric and surface parameters from AIRS/AMSU/HSB data in the presence of clouds. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 41, 2, 390–409.

68. Standards VDI 4211 and VDI 4212 on passive FTIR and DOAS remote sensing techniques. Norbert Höfert, Klaus Schäfer, Andreas Richter, Konradin Weber, Peter Maas. SPIE Remote Sensing, 2018, Berlin, Germany. Proceedings Volume 10786, Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere XXIII; 107860W. <https://doi.org/10.1117/12.2325145>

Надійшла до редколегії: 06.02.2020

Прийнята до друку: 18.02.2020