

УДК 535.34, 535.36, 539.194

*О.К. ВОЙЦЕХОВСКАЯ\*, Д.Е. КАШИРСКИЙ\*\*, О.В. ЕГОРОВ\*\*\****ИНТЕРНЕТ-РЕСУРС «INTRA VA» ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ ГАЗОВО-АЭРОЗОЛЬНЫХ СРЕД<sup>1</sup>**

Представлено описание Интернет-ресурса «INTRA VA», ориентированного на исследования в области прямых и обратных задач оптики и спектроскопии газовой-аэрозольных сред. Создаваемая информационно-вычислительная система основывается на разработанных авторами физико-математических моделях и алгоритмах для расчета в диапазоне температур 300–2500 К параметров спектральных линий колебательно-вращательных переходов молекулярных газов и спектральных характеристик газовой-аэрозольных сред.

*Ключевые слова:* Интернет-ресурс, газовой-аэрозольная среда, база данных, спектральная характеристика.

В настоящее время существует много различных спектроскопических баз данных (БД) [1]: HITRAN, HITEMP, GEISA, JPL, NIST, CDMS, VALD и др. Регулярные обновления и дополнения новыми данными приводят к возрастанию объемов БД, что усложняет процессы обработки, анализа и верификации. Для проведения расчетов спектральных характеристик и моделирования переноса радиации в газовой-аэрозольных средах на основе параметров спектральных линий (ПСЛ) газов, содержащихся в БД, создано большое количество программного обеспечения (ПО). Некоторые варианты разработанных ПО доступны также в виде Интернет-ресурсов.

Авторами данной работы разработан ряд физико-математических моделей и алгоритмов для расчета в диапазоне температур 300–2500 К ПСЛ колебательно-вращательных (КВ) переходов молекулярных газов и спектральных характеристик газовой-аэрозольных сред, необходимых для решения прямых и обратных задач оптики и спектроскопии газовой-аэрозольных сред. Особое внимание уделено ПСЛ высокотемпературных газов, непредставленных в литературе, но необходимых для разработки методик дистанционного контроля работы реактивных двигателей по анализу спектров факелов. Расчеты проводятся с использованием наборов эмпирических параметров эффективного вращательного гамильтониана и операторов взаимодействия, полученных в последних экспериментальных работах. При вычислении центров и интенсивностей линий в рассмотрение включены переходы между КВ-уровнями с суммарным изменением колебательных квантовых чисел, не превышающим двум. Последнее стало возможным в результате определения наборов параметров функции дипольного момента до второго порядка включительно на основе экспериментальных колебательных моментов переходов. Осуществляется учет внутримолекулярных эффектов в значении интенсивностей КВ-линий. Для расчета коэффициентов уширения спектральных линий воздухом, а также коэффициентов самоуширения применяются как представленные в литературе, так и полученные авторами данной работы аппроксимационные выражения. В настоящее время на основе существующего ПО создается информационно-вычислительная система «Оптика и спектроскопия газовой-аэрозольных сред» (ИВС «INTRA VA»), доступная по сети Интернет.

Реализация выполняемого на веб-сервере программного обеспечения осуществляется на языке PHP, а исполняемых клиентом скриптов – на языке JavaScript с использованием библиотеки jQuery, упрощающей разработку приложений. Взаимодействие клиента с веб-сервером происходит с помощью AJAX-запросов. Для осуществления вычислений используется написанное на языке C клиент-серверное приложение. Серверное приложение производит разбиение входящих с веб-сервера вычислительных задач на подзадачи, которые рассылаются клиентам, и последующую компиляцию результатов расчетов. Клиентское приложение проводит необходимые вычисления, используя реализованное на языке C++ программное обеспечение, включающее в себя модифицированные вычислительные алгоритмы ПО «TRA VA» [2, 3].

Интернет-ресурс в первую очередь обеспечивает доступ к созданным в нашем коллективе БД ПСЛ молекул, таких как H<sub>2</sub>O, SO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, NO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> [4, 5, 6]. Планируется постепенное расширение представляемых данных добавлением БД ПСЛ, созданных другими научными коллективами. Одними из основных входных параметров, необходимых для получения параметров спектральных линий поглощения молекулы, являются спектральный интервал, температура и давление. Резуль-

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 15-01-03176 и № 13-07-98027.

таты моделирования могут быть представлены в табличном и графическом виде, отсортированы и отфильтрованы по значениям параметров спектральных линий поглощения молекул.

Веб-интерфейс вычислительной части Интернет-ресурса, обеспечивает ввод значений входных параметров, необходимых для проведения расчетов спектральных характеристик, и представление их в формате, используемом вычислительным программным обеспечением. К входным параметрам относятся спектральный интервал, спектральное разрешение, температура и давление среды, концентрации газов, форма контура отдельной спектральной линии, микрофизические и оптические параметры аэрозолей, длина оптического пути и т.п.

Расчет спектральных характеристик газов (коэффициентов поглощения, оптических толщ, функций пропускания и поглощения, энергетической яркости) осуществляется line-by-line методом, в рамках которого проводится суммирование вклада каждой спектральной линии для определения величины поглощения. Спектральные характеристики аэрозолей (коэффициенты рассеяния, поглощения и ослабления, оптические толщи, функции пропускания и поглощения) рассчитываются согласно теории Ми. Расчеты могут быть проведены для различных спектральных интервалов, шага расчета, спектрального разрешения и вида аппаратной функции.

Моделирование может длиться значительный период времени, поэтому все вычислительные задачи помещаются в очередь. У пользователя есть возможность отслеживать продвижение своих задач в очереди и состояние их выполнения на странице Интернет-ресурса или через уведомления, отправляемые на его адрес электронной почты. Результаты расчетов сохраняются на сервере и могут быть просмотрены в табличном и графическом виде, сохранены на жестком диске компьютера пользователя или отправлены на его адрес электронной почты.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dimitrijević M.S, Sahal-Bréchet S., Kovačević A., and et al. // J. Phys.: Conf. Series. – 2010. – Vol. 257. – 012032.
2. Войцеховская О.К., Войцеховский А.В., Каширский Д.Е. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – Т. 53, № 9/3. – С. 157–158.
3. Voitsekhovskaya O.K., Voitsekhovskii A.V., Egorov O.V., Kashirskii D.E. // Proc. of SPIE. – 2014. – Vol. 9292. – 929211.
4. Voitsekhovskaya O.K., Egorov O.V. // Russ. Phys. J. – 2012. – Vol. 55, Iss. 4. – P.362–368.
5. Voitsekhovskaya O.K., Egorov O.V. // Mosc. Univ. Phys. Bull. – 2013. – Vol. 68, Iss. 2. – P. 132–138.
6. Voitsekhovskaya O.K., Kashirskii D.E., Egorov O.V. // Russ. Phys. J. – 2013. – Vol. 56, Iss. 4. – P. 473–482.

\*Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

\*\*Сибирский физико-технический институт ТГУ, г. Томск, Россия

E-mail: kde@mail.tsu.ru

Войцеховская Ольга Кузьминична, д.ф.-м.н., профессор;  
Каширский Данила Евгеньевич, к.ф.-м.н., млад. науч. сотр.;  
Егоров Олег Викторович, аспирант.

*O.K. VOITSEKHOVSKAYA\*, D.E. KASHIRSKII\*\*, O.V. EGOROV\*\*\**

#### INTERNET RESOURCE «INTRAVA» FOR SOLVING THE PROBLEMS OF OPTICS AND SPECTROSCOPY OF GAS-AEROSOL MEDIA

A description of an Internet resource «INTRAVA» focused on research in the field of direct and inverse problems of optics and spectroscopy of gas-aerosol media is represented. Created software is based on the physical and mathematical models and algorithms for calculating the parameters of the spectral lines of the vibrational-rotational transitions of molecular gases and the spectral characteristics of gas-aerosol media in the temperature range 300–2500 K.

**Keywords:** *Internet resource, gas-aerosol medium, database, spectral dependence.*

#### REFERENCES

1. Dimitrijević M.S, Sahal-Bréchet S., Kovačević A., and et al., European Virtual Atomic Data Centre – VAMDC, *J. Phys.: Conf. Series*, 2010, vol. 257, paper 012032.

2. Voitsekhovskaya O.K., Voitsekhovskii A.V., Kashirskii D.E., Programmnoe obespechenie modelirovaniya distancionnogo monitoringa termodinamicheski neodnorodnykh gazovo-aerosolnykh sred, *Izv. vuzov. Fizika*, 2010, vol. 53, no. 9/3, pp. 157–158.
3. Voitsekhovskaya O.K., Voitsekhovskii A.V., Egorov O.V., Kashirskii D.E., Optical-physical methods of remote diagnostics of high-temperature gas media, *Proc. of SPIE*, 2014, vol. 9292, paper 929211.
4. Voitsekhovskaya O.K., Egorov O.V., Calculation of the intensities of vibrational hydrogen sulfide transitions for remote sounding high-temperature media, *Russ. Phys. J.*, 2012, vol. 55, iss. 4, pp.362–368.
5. Voitsekhovskaya O.K., Egorov O.V., The absorption of sulfur dioxide in the terahertz range at temperatures of 300-1200 K, *Mosc. Univ. Phys. Bull.*, 2013, vol. 68, iss. 2, pp. 132–138.
6. Voitsekhovskaya O.K., Kashirskii D.E., Egorov O.V., Spectroscopic support of laser remote sensing of the sulfur dioxide gas in the jet of the engine exhaust gases, *Russ. Phys. J.*, 2013, vol. 56, iss. 4, pp. 473–482.

\*National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia,

\*\*Siberian Physical-Technical R&D Institute of TSU, Tomsk, Russia,

E-mail: kde@mail.tsu.ru

---

Voitsekhovskaya Olga Kuzminichna, Prof., Dr. Sc.;

Kashirskii Danila Evgenyevich, Researcher, PhD;

Egorov Oleg Viktorovich, Postgraduate student.