ПРИБОРОСТРОЕНИЕ INSTRUMENTATION ENGINEERING

https://doi.org/10.21122/2227-1031-2023-22-5-387-396

УДК 53.084

Спектрометр для оценки содержания SO₂ в вулканических выбросах

Канд. физ.-мат. наук И. И. Бручковский^{1, 2}, Г. С. Литвинович¹⁾

¹⁾Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ (Минск, Республика Беларусь),

²⁾Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы БГУ

(Минск, Республика Беларусь)

© Белорусский национальный технический университет, 2023 Belarusian National Technical University, 2023

Реферат. Автономный портативный спектрометр DEVI (Doas Expedition Volcanic Instrument) предназначен для полевых измерений наклонных содержаний SO2 в вулканических выбросах дистанционным оптическим методом DOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy) в диапазоне 290-365 нм с разрешением не хуже 1 нм. Для его разработки были решены такие задачи, как: практическая реализация спектрометра, включающая в себя разработку оптической схемы; создание корпуса спектрометра, обеспечивающего функции уменьшения рассеянного излучения и удобство юстировки; использование набора дополнительных датчиков для регистрации условий измерений; проведение серии лабораторных измерений для определения характеристик спектрометра; проведение серии натурных измерений и предварительная обработка полученных данных с целью восстановления наклонных толщ диоксида серы в вулканическом выбросе. На этапе разработки спектрометра использовались методы численного моделирования оптических систем в программной среде Zemax, на этапе обработки экспериментальных данных для восстановления наклонных содержаний диоксида серы – метод DOAS. Представлены результаты лабораторных измерений характеристик спектрометра: спектральное разрешение 0,58 ± 0,5 нм, угловое поле зрения 1 × 0,25°. Экспериментально определенные параметры шума детектора DEVI применялись для построения математического фильтра с целью увеличения отношения сигнал – шум, что позволило оценить содержание диоксида серы в вулканических выбросах. DEVI успешно опробован в ходе экспедиций на Курильские острова в периоды 31.07-13.08.2021 и 27.07-29.08.2022, в результате чего восстановлена величина наклонного содержания (7,5 ± 1,2) 10¹⁷ молекул/см² в выбросе вулкана Чиринкотан. Полученная оценка наклонного содержания диоксида серы согласуется с результатами, полученными различными научными группами с использованием аналогичного метода для других вулканов.

Ключевые слова: DOAS, УФ-спектрометр для полевых измерений, вулканические выбросы, диоксид серы

Для цитирования: Бручковский, И. И. Спектрометр для оценки содержания SO₂ в вулканических выбросах / И. И. Бручковский, Г. С. Литвинович // *Наука и техника*. 2023. Т. 22, № 5. С. 387–396. https://doi.org/10.21122/2227-1031-2023-22-5-387-396

Spectrometer for Estimating SO₂ Content in Volcanic Plumes

I. I. Bruchkouski^{1, 2}, H. S. Litvinovich¹⁾

¹⁾A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of Belarusian State University (Minsk, Republic of Belarus), ²⁾National Research Center for Ozonosphere Monitoring of Belarusian State University (Minsk, Republic of Belarus)

Abstract. This work presents the development and implementation of an autonomous portable spectrometer DEVI (Doas Expedition Volcanic Instrument), designed to measure SO₂ slant columns in volcanic plumes by remote optical method DOAS (Differential

Адрес для переписки Литвинович Глеб Святославович Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ ул. Академика Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Республика Беларусь Тел.: 375 29 391-07-10 litvinovichgs@yandex.by

Address for correspondence Litvinovich Hleb S. A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of Belarusian State University 7, Academician Kurchatov str., 220045, Minsk, Republic of Belarus Tel.: 375 29 391-07-10 litvinovichgs@yandex.by

387

Optical Absorption Spectroscopy) in the range of 290–365 nm with a resolution of at least 1 nm. To achieve this goal, the following tasks have been solved: practical implementation of the spectrometer, including design of optical scheme; design of a spectrometer housing for reducing scattered radiation and facilitate adjustments; applying of additional sensors to record measurement conditions; laboratory measurements to determine the spectrometer's characteristics; field measurements and preliminary data processing to retrieve SO₂ slant columns in volcanic plumes. During the spectrometer design phase, numerical simulation methods in the Zemax software have been used, while DOAS was applied for processing experimental data for retrieving SO₂ slant columns. Our laboratory measurements showed that the DEVI spectrometer has a spectral resolution of 0.58 ± 0.5 nm and an angular field of view of $1 \times 0.25^{\circ}$. To improve the signal-to-noise ratio, mathematical filter based on the experimentally determined noise parameters of the DEVI detector has been introduced, which allowed us to estimate the SO₂ slant columns in volcanic plumes. DEVI was successfully tested during expeditions to the Kuril Islands in the periods of July – August, 2021 and 2022 (31.07–13.08.2021 and 27.07–29.08.2022). Our field measurements and data processing showed the SO₂ slant column value of (7.5 ± 1.2)·10¹⁷ molecules/cm² for the volcano Chirinkotan. Obtained estimation is consistent with known results obtained for other volcanoes.

Keywords: DOAS, UV-spectrometer for field measurements, volcanic plumes, sulfur dioxide

For citation: Bruchkouski I. I., Litvinovich H. S. (2023) Spectrometer for Estimating SO₂ Content in Volcanic Plumes. *Science and Technique*. 22 (5), 387–396. https://doi.org/10.21122/2227-1031-2023-22-5-387-396 (in Russian)

Введение

Один из способов предсказания извержений вулканов – анализ измерений газового состава вулканических выбросов [1–3]. В зависимости от геологических особенностей породы и близости магмы к поверхности Земли соотношение концентраций вулканических газов в выбросах (SO₂, BrO и др.) может изменяться. Например, увеличение содержания SO₂ в выбросах свидетельствует о близости магмы к поверхности.

Основной проблемой проведения измерений газового состава вулканических выбросов является относительно высокий риск здоровью исследователя, обусловленный в том числе высоким содержанием загрязнений воздуха вблизи объекта исследований. В этой связи актуальность представляют инструменты, позволяющие проведение измерений газового состава вулканических выбросов дистанционным методом.

В мировой практике для изучения газового состава вулканических выбросов дистанционными оптическими методами, наряду с методами Фурье-спектроскопии и корреляционной спектроскопии, применяют метод DOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy) [4] в диапазоне 305-365 нм, где находятся линии поглощения SO₂, BrO и ClO. Наблюдения по методу DOAS производятся с помощью как стационарных пунктов долговременного наблюдения, которые позволяют получать длительные временные ряды наклонных содержаний вулканических газов [5], так и переносных

малогабаритных приборов [6], построенных на базе миниатюрных спектрометров, производимых в промышленном масштабе различными фирмами, или мелкими сериями как проекты отдельных университетов. В последнем случае приходится находить компромисс между весом прибора, его автономностью и качеством получаемых данных. В этой связи актуальность представляет оптимизация конструкции прибора, в том числе оптической схемы спектрометра, таким образом, чтобы одновременно обеспечить приемлемое качество регистрируемых данных в УФ-диапазоне и высокую автономность в условиях экспедиции.

Цель настоящей работы – разработка и реализация автономного портативного спектрометра DEVI (Doas Expedition Volcanic Instrument), оптимизированного для регистрации спектров рассеянного солнечного излучения небесной сферы в диапазоне 290–365 нм со спектральным разрешением не хуже 1 нм, позволяющего проведение дистанционных измерений содержания диоксида серы в вулканических выбросах и его опробование в условиях экспедиции. Содержание диоксида серы в вулканическом выбросе определялось методом дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии (DOAS).

Отличия DEVI от аналогов заключаются в оптической схеме собственной разработки, содержащей минимальное число компонентов, что в некоторой степени минимизирует уровень рассеянного света, и наличии комплекта дополнительных датчиков, предназначенных для регистрации условий измерений с целью последующего облегчения интерпретации и обработки первичных данных. Разработанный спектрометр был опробован в экспедициях на Курильские острова в 2021 и 2022 гг., по результатам которых в настоящей работе оценивается успешность предлагаемой конструкции.

Описание спектрометра DEVI

DEVI представляет собой цельный неделимый блок, в составе которого находятся все необходимые для работы модули, включая источник питания. Главный оптический модуль DEVI – это спектрометр собственной разработки, спроектированный для вогнутой отражающей дифракционной решетки (радиус кривизны R = 60 мм, диаметр 20 мм, плотность штрихов 2581 штр./мм) и неохлаждаемой ПЗС-линейки Toshiba TCD1304DG [7], имеющей 3648 рабочих и 13 конструктивно изолированных от света пикселей. Оптическая схема спектрометра представлена на рис. 1.



Рис. 1. Оптическая схема спектрометра DEVI: 1 – входная щель; 2 – плоское зеркало; 3 – вогнутая дифракционная решетка; 4 – детектор с указанием соответствующих длин волн падающего излучения

Fig. 1. Optical layout of DEVI spectrometer:
1 – entrance slit; 2 – flat mirror; 3 – concave
diffraction grating; 4 – detector with corresponding wavelengths of the incident radiation

Спектрометр имеет систему освещения входной щели (объектив), которая обеспечивает поле зрения около 1×0,25° (вдоль и поперек входной щели спектрометра; на рис. 1 не показана). Оптическая схема спектрометра рассчитывалась в программной среде Zemax [8] в непоследовательном режиме, оптимизация параметров оптической схемы производилась по максимуму плотности излучения на модели детектора для следующих длин волн: 280, 300, 320 и 340 нм для входной щели размером 3000×50 мкм. Входная щель спектрометра собиралась вручную из двух заточенных металлических пластин, параллельность которых контролировалась визуально под микроскопом. Расчетная величина ширины аппаратной функции на полувысоте для диапазона 290–365 нм составила 0,61–0,65 нм.

Юстировка спектрометра включала в себя два этапа. Сперва производилась минимизация полуширины аппаратной функции спектрометра при помощи незначительного изменения положения решетки, зеркала и детектора при регистрации монохроматических линий ртутной газоразрядной лампы низкого давления, помещенной в фотометрическую сферу. Далее следовал этап уменьшения сферических аберраций, комы и астигматизма при помощи специально разработанных бленд, положение и форма которых определялись экспериментально за несколько итераций.

На рис. 2 представлены внешний вид корпуса спектрометра на различных этапах его разработки, начиная от трехмерной модели и заканчивая готовым изделием. Корпус спектрометра спроектирован таким образом, чтобы тонкую подстройку положения зеркала и решетки (рис. 2а) можно было осуществлять, не открывая защитной крышки, поскольку доступ ко всем юстировочным элементам (винтам) имеется извне, что, в свою очередь, позволяет проводить настройку спектрометра в режиме реального времени при закрытом корпусе. Расположение световых ловушек (рис. 2а) выбрано таким образом, чтобы минимизировать рассеянный свет от нулевого порядка дифракции, а их острая форма исключает появление бликов. Объектив содержит двояковыпуклую линзу (рис. 2b) с фокусным расстоянием 90 мм из стекла марки КУ-1, а также синий фильтр, отсекающий видимый и ИК диапазоны для уменьшения уровней рассеянного света внутри спектрометра.

На рис. За представлен внешний вид DEVI со снятой крышкой, где обозначены видимые элементы. В управляющей программе реализованы два режима работы (ручной и автоматический для работы на штативе), для которых предусмотрены различные режимы выбора

Приборостроение

времени экспозиции (ручной и автоматический). Переключение режимов производится при помощи кнопок 4 (рисунок 3b) на лицевой панели для возможности выбора различных режимов съемки (одиночный спектр, непрерывная съемка, темновой и опорный спектры)



и кнопкой перезагрузки управляющего микроконтроллера 5. Для возможности ручного выбора времени экспозиции сбоку корпуса предусмотрен инкрементный энкодер 7, позволяющий вручную выбирать время экспозиции с шагом в 0,1 мс.



Puc. 2. Корпус спектрометра и схематичный ход лучей: а – 3D модель без объектива, юстировочных винтов и светового замка (1 – узел входной щели; 2 – световые ловушки; 3 – детектор; 4 – плоское зеркало;
 5 – дифракционная решетка); b – готовый спектрометр и ход световых лучей в нем (1 – объектив; 2 – плоские зеркала; 3 – дифракционная решетка; 4 – разъем сигнала с детектора; 5 – детектор)

Fig. 2. Spectrometer unit and ray layout: a – 3D model without lens, adjusting screws and light lock (1 – entrance slit assembly;
 2 – light traps; 3 – detector; 4 – flat mirror; 5 – diffraction grating); b – assembled spectrometer and path of light in it (1 – lens; 2 – flat mirror; 3 – diffraction grating; 4 – signal connector from detector; 5 – detector)



Рис. 3. Внешний вид DEVI: а – до первой экспедиции, со снятой крышкой (1 – крышка отсека элемента питания; 2 – плата АЦП детектора спектрометра; 3 – плата контроллера; 4 – экран; 5 – датчик BME280; 6 – GPS датчик;
7 – плата видеорегистратора; 8 – карта памяти; 9 – видеокамера; 10 – объектив спектрометра; 11 – DC-DC преобразователь;
12 – кнопка запуска регистрации); b – во время второй экспедиции, на штативе (1 – фотокамера; 2 – объектив спектрометра;
3 – радиатор; 4 – кнопки выбора режимов работы; 5 – кнопка перезагрузки; 6 – разъем для подключения внешнего питания;
7 – энкодер; 8 – дополнительный отсек с батареей; 9 – кнопка включения)

Fig. 3. Outer design of DEVI: a – before the first expedition, without cover (1 – cover of battery compartment;
2 – ADC board of detector; 3 – controller board; 4 – screen; 5 – BME280 sensor; 6 – GPS sensor; 7 – video recorder board;
8 – memory card; 9 – video camera; 10 – spectrometer lens; 11 – DC-DC converter; 12 – button for launching registration);
b – during the second expedition, in operating mode (1 – camera; 2 – spectrometer lens; 3 – radiator;
4 – buttons for selecting operating modes; 5 – reset button; 6 – connector for external power supply;
7 – encoder; 8 – additional compartment with battery; 9 – power button)



В DEVI интегрирован видеорегистратор для записи исследуемого объекта во время измерений. Одновременно с видеорегистрацией фотопривязка объекта к спектру осуществляется дополнительной фотокамерой 1 (рис. 3b, модель OV7670, 640×480 пикселей со встроенным буфером памяти). Фиксирование фотокамеры выполнено при помощи крепления «ласточкин хвост» к корпусу спектрометра, что обеспечивает одинаковую многократную установку и, в свою очередь, жесткую привязку полей зрения спектрометра и видеокамеры. Кадр с фотокамеры передается на микроконтроллер для последующего отображения на экране DEVI и сохранения на карту памяти. Данные, получаемые при помощи видеорегистратора, сохраняются независимо.

Для регистрации условий проведения измерений используются следующие периферийные устройства: GPS-приемник HT1818Z3G5L, компас и инклинометр MPU9250, а также датчик метеопараметров BME280.

В качестве управляющего контроллера использовалась плата Arduino Due, для управления и считывания сигнала с детектора применялась плата собственной разработки на основе микроконтроллера STM32F103. Для оцифровки предварительно масштабированного операционным усилителем AD8021 сигнала с детектора применялся встроенный в микроконтроллер 12-битный АЦП. Тактовая частота микроконтроллера (72 МГц) позволила реализовать диапазон времен накопления сигнала от 10 мкс до 30 мин. Частота оцифровки пикселей детектора составила 250 кГц. Имеющийся ТFT экран на базе ILI9486 предназначен для отображения регистрируемого спектра и вывода информации, получаемой с датчиков: времени, координаты, значений температуры, относительной влажности и атмосферного давления, угла наклона прибора, азимута, индикатора заряда батареи, времени экспозиции, а также фотоизображения с камеры OV7670.

На рис. 4 представлена блок-схема DEVI. Программа управления микроконтроллером STM32F103 детектора написана на языке С с максимальным использованием аппаратных средств микроконтроллера (таймеры, ШИМ, DMA, интерфейс SPI), оставляя вычислительные возможности контроллера свободными для дополнительных задач. Управление детектором TCD1304DG полностью реализовано (в соответствии с документацией [7]) за счет встроенных в микроконтроллер таймеров: один отвечает за тактирование детектора, второй – за время накопления сигнала, третий – за считывание. Все таймеры синхронизированы между собой для исключения задержек и сбоев в работе детектора.

Программа управления Arduino Due написана на языке C с использованием стандартных библиотек Arduino IDE. Ее функции сводятся к поочередному опросу датчиков (каждого со своей частотой) и камеры 1 (рис. 3b), обновлению информации на экране. Кроме того, программа обрабатывает события нажатий на кнопки (рис. 3a), считывает сигнал с детектора и сохраняет его на встроенную карту памяти вместе с метаданными, осуществляет смену режимов работы прибора и изменение времени накопления сигнала детектора.



Puc. 4. Схематическое описание архитектуры DEVI: синий – интерфейсы передачи данных, зеленый – путь передачи оцифрованного сигнала детектора *Fig. 4.* Schematic description of DEVI architecture:

blue – data transfer interfaces, green – route of digital signal from detector

Наука				
итехника. Т. 22, №	5	(2	023))
Science and Technique	V	22	No 5	(202)

Литиевая батарея размещается в рукояти корпуса и обеспечивает непрерывную работу прибора около трех часов. Форма и конструкция защитного корпуса DEVI разрабатывались таким образом, чтобы регистрацию спектров яркости небесной сферы можно было производить одной рукой. Корпус DEVI имеет кронштейн для крепления к штативу, что также позволяет проводить серию измерений при неизменном направлении визирования в автоматическом режиме.

Лабораторные исследования параметров DEVI

Угловые поля зрения спектрометра, видеорегистратора и видеокамеры, а также их относительное расположение в пространстве определялись при помощи специально разработанной гониометрической установки для угловых калибровок. Установка представляет собой две поворотные платформы, вращающиеся во взаимно перпендикулярных плоскостях (горизонтальной и азимутальной), и позволяет проведение привязки полей зрения оптических систем в двух плоскостях за одну установку с точностью порядка 70 угловых секунд.

Эффективный рабочий диапазон спектрометра (область спектра, в которой выполняется DOAS-анализ) находится в диапазоне 304–364 нм, для которого экспериментально определенное спектральное разрешение (ширина монохроматической линии в нанометрах на половине высоты) составило $0,58 \pm 0,5$ нм, время регистрации спектра интенсивностью 2/3 от уровня насыщения детектора составило 3 с (условия регистрации: дневное время, участок безоблачного неба).

На рис. 5а представлен вид аппаратной функции спектрометра при регистрации ртутной линии от протяженного источника, что

подтверждает правильность выполнения всех юстировок и эффективность выбора бленд, так как спектральное разрешение на длине волны 334,14 нм составило 0,61 нм.

Таким образом, применение корректирующих бленд позволило немного уменьшить аберрации в схеме, за счет чего спектральное разрешение для отдельных длин волн удалось улучшить на 13 % в сравнении с минимальным теоретически рассчитанным значением, при этом интенсивность линий уменьшилась не более чем на 10 % от исходной величины. Вместе с тем из данных рис. 5а можно заметить некоторую несимметричность линии в ее правой части, которая обусловлена оставшимися аберрациями.

Для определения оптимальных режимов работы прибора проводился специальный эксперимент в соответствии с методикой, изложенной в [9], а именно, регистрировался сигнал с детектора при отсутствии излучения на различных временах накопления сигнала. Полученный массив данных позволил экспериментально определить среднеквадратические отклонения (СКО) структурного шума и шума считывания используемого детектора в зависимости от времени накопления, которые представлены на рис. 5b. Из рисунка можно заметить, что явной зависимости СКО компонент шума от времени накопления не наблюдается, полезный сигнал для любого времени накопления имеет амплитуду шума в пределах 2-3 ед. АЦП, а шум считывания в дватри раза превосходит структурный шум для любого времени накопления.

Другими словами, лабораторные исследования параметров компонент шума детектора показали, что влиянием времени накопления на параметры фильтра в предварительной математической обработке отдельного спектра можно пренебречь.



Рис. 5. Аппаратная функция спектрометра DEVI (а) и зависимость компонент шума детектора для различных времен накопления (b)



Наука итехника. Т. 22, № 5 (2023) Science and Technique, V. 22, No 5 (2023) Наличие повторяющейся структуры в различных компонентах шума может быть связано с некоторой дополнительной компонентой, не выделенной в ходе исследования и вызванной, например, особенностями аппаратной реализации электронной обвязки детектора.

Методика измерений и обработки спектральных данных

Методика измерений подразумевала получение данных различного типа:

опорные спектры – регистрировались в зенитном направлении или направлении, не содержащем вулканических шлейфов. Регистрация спектров производилась с рук несколькими сериями по 20 спектров в каждой, с минимальной задержкой перед регистрацией полезных спектров. Таким образом, опорные спектры априорно не содержат в себе информацию о газовом составе вулканического выброса, однако содержат информацию об атмосферных малых газовых составляющих, рассеянии Рэлея и Ми, а также о фраунгоферовских линиях;

2) полезные спектры – регистрировались в направлении на шлейф вулканического выброса, в различных местах шлейфа. Поле зрения спектрометра ориентировалось при помощи видеокамеры, после чего производилась регистрация нескольких спектров в различных местах шлейфа. Полезные спектры содержат в себе всю ту информацию, что и опорные спектры, а также информацию о неупругом поглощении рассеянного солнечного излучения газами вулканического выброса;

3) темновые спектры – регистрировались при отсутствии оптического сигнала при закрытой крышке объектива спектрометра для тех времен экспозиции, на которых регистрировались опорные и темновые спектры.

Таким образом, совокупность перечисленных выше данных образует серию измерений и позволяет применить метод DOAS для анализа полезных спектров.

В основе метода DOAS лежит уравнение Бугера – Ламберта – Бэра, записанное для распространения излучения в атмосфере в следующем виде:

$$I_{0}(\lambda, L) = I_{0}(\lambda) \exp \times \left[-\int_{0}^{L} \left(\sum_{j} \sigma_{j0}(\lambda) c_{j}(l) + \varepsilon_{R}(\lambda, l) + \varepsilon_{M}(\lambda, l) \right) dl \right],$$
⁽¹⁾

где $I_0(\lambda, L)$ – спектр после прохождения излучением пути длиной L; $I_0(\lambda)$ – то же в отсутствие

Наука	а	
итехника.	T. 22, № 5 (2023)	
Science and	Technique V 22 No 5 (202

поглотителей; $\sigma_{j0}(\lambda)$ – сечения поглощения; c_j – концентрация *j*-й микропримеси; $\varepsilon_R(\lambda, L)$, $\varepsilon_M(\lambda, L)$ – коэффициенты поглощения для рассеяния Рэлея и Ми соответственно.

Измеряемая величина в таком случае — наклонное содержание SCD_j — является интегральной концентрацией *j*-й газовой микропримеси вдоль неизвестного пути света *L*

$$SCD_{j}(L) = \int_{0}^{L} c_{j}(l) dl$$
 [молекул/см²]. (2)

Кроме описанных в формуле (1) трех основных процессов ослабления излучения в атмосфере, есть еще один процесс второго порядка малости, пренебрежение которым накладывает ограничение на точность метода, а именно ринг-эффект. Ринг-эффект учитывают введением в процедуру DOAS-анализа фиктивного сечения поглощения $\sigma_{\text{Ring}}(\lambda)$, который рассчитывается методами квантовой механики.

Процедура DOAS-анализа представляет собой минимизацию целевой функции χ^2 масштабированных сечений поглощения одновременно нескольких малых газовых составляющих, коэффициентов полинома, сечения ринг-эффекта и измеренного спектра поглощения, который получается путем удаления фраунгоферовых линий. Для минимизации функции χ^2 обычно применяется нелинейный метод Левенберга – Маркварда в подходящем диапазоне длин волн

$$\chi^{2} = \int_{\lambda_{1}}^{\lambda_{2}} \left[\left[\ln I(\lambda, L) - \ln I_{0}(\lambda) \right] + \sum_{j} \sigma_{j}(\lambda) DSCD_{j}(L) + \sum_{m} p_{m} \lambda^{m} \right] d\lambda \rightarrow \min.$$
(3)

Последнее слагаемое (3) учитывает медленно меняющуюся часть для рассеяний Рэлея и Ми, а также для других атмосферных примесей с широкой полосой поглощения, p_m – коэффициенты полинома степени *m*. Диапазон длин волн выбирается так, чтобы в нем содержались спектральные особенности сечений поглощений целевых малых газовых составляющих.

Для минимизации влияния колебаний температуры на стабильность оптических параметров спектрометра и постоянство шумовых характеристик детектора период проведения серии измерений сокращался до 2–5 мин.

Обработка натурных спектров производилась методом DOAS при помощи программного обеспечения QDOAS v.2.111 [10], в процедуре анализа учитывались сечения поглощения, представленные в табл. 1. Восстановление наклонных содержаний SO_2 проводилось с использованием полинома порядка 2 для интервала 307,5–316 нм. Кроме того, для коррекции уровня рассеянного света применялась настройка *offset* второго порядка.

Таблица 1

Сечения поглощения и настройки, использованные для восстановления SO₂ Absorption cross sections and settings

used for SO ₂ retrieval				
Сечение поглощения Примечание		Интервал анализа, нм		
SO ₂	SO ₂ _vandaele_293			
O ₃	O ₃ _243K_Bogumil (I ₀ -коррекция 1·10 ²⁰ мол/см ²)	307,5-316		
BrO	BrO_Wilmouth_298K			
Ring	Ping NDSC2002			
Ring λ^4	Killg_NDSC2005			

Для коррекции собственного шума детектора использовался фильтр [11], так как такой подход позволяет рассчитать параметры последнего на основании экспериментально измеренных статистических параметров шума конкретного детектора с учетом схемотехнических особенностей сопряженного с ним модуля считывания. Значение интенсивности b'_i *i*-го оцифрованного пикселя в спектре пересчитывалось по формуле

$$b_{i}' = \mu_{i-4,i+4} + \frac{\sigma_{i-4,i+4}^{2} - \nu^{2}}{\sigma_{i-4,i+4}^{2}} \times \left(b_{i} - \mu_{i-4,i+4}\right) = \frac{1}{9} \sum_{k=-4}^{4} b_{i-k} + \frac{\left(\frac{1}{9} \sum_{k=-4}^{4} \left[b_{i-k}^{2} - \frac{1}{9} \sum_{k=-4}^{4} b_{i-k}\right]\right)^{2} - \nu^{2}}{\left(\frac{1}{9} \sum_{k=-4}^{4} \left[b_{i-k}^{2} - \frac{1}{9} \sum_{k=-4}^{4} b_{i-k}\right]\right)^{2}} \times \left(b_{i} - \frac{1}{9} \sum_{k=-4}^{4} b_{i-k}\right), \qquad (4)$$

где b_i – значение интенсивности *i*-го пикселя зашумленного спектра; μ – математическое среднее значений b_i в окне из девяти пикселей, которого достаточно для оценки локальных параметров спектра, но не оказывает влияния на уширение спектральных линий; σ – СКО значений b_i в окне; v - CKO значений шума в спектре.

В качестве набора темновых сигналов для определения параметров компонент шума V детектора использовали массив темновых спектров, зарегистрированный при тех же температурах и временах экспозиции, при которых регистрировались серии измерений во время экспедиции.

Первые результаты

Впервые прибор был опробован в ходе экспедиций на Курильские острова в период 31.07–13.08.2021 (вулканы Чиринкотан, Синарка, Берга, Кунтаминар) и 27.07–29.08.2022 (вулканы Чикурачки, Эбеко). Результат наложения всех областей регистрации DEVI представлен на рис. ба. На рис. 6b показаны примеры спектров, зарегистрированных в направлении вулканического выброса (полезные спектры) и в зенитном направлении (опорный спектр).

В ходе первой экспедиции для исследования динамики газовых выбросов в конкретной точке вулканического шлейфа регистрация полезных спектров производилась с использованием штатива в автоматическом режиме (влк. Чиринкотан). В ходе второй экспедиции с целью отслеживания происходящих вдоль направления распространения шлейфа химических реакций в процессе распространения и остывания вулканического выброса, производилась регистрация полезных спектров под различными углами линии наблюдения с использованием штатива (влк. Чикурачки).

На рис. 7 представлен вид вулканического выброса вулкана на о. Чиринкотан за два дня до его извержения, направление визирования спектрометра и пример восстановления наклонного содержания (SCD) SO₂ в спектральном интервале 307,5–316 нм.

Стоит отметить, что представленный на рис. 7b пример DOAS-анализа для SO₂ демонстрирует полученную величину наклонного содержания $(7,5 \pm 1,2) \cdot 10^{17}$ молекул/см², которая хорошо согласуется с известными данными [4, 12].

Кроме того, из рис. 7b можно заметить, что измеренные значения сечения поглощения SO₂ показывают наличие значимых искажений, остаточный спектр имеет довольно большую амплитуду и отличается присутствием заметной структуры. Эти особенности в совокупности указывают на потенциал для улучшения системы регистрации полезного сигнала спектрометра.



Рис. 6. Видеопривязка объекта и поля зрения спектрометра и пример получаемого спектра: а – области регистрации DEVI (1 – кадр видеорегистратора; 2 – кадр фотокамеры; 3 – поле зрения спектрометра); b – пример регистрируемых спектров

Fig. 6. Registration area of object and field of view of spectrometer and an example of recorded spectrum: a – DEVI registration areas (1 – video recorder frame; 2 – camera frame; 3 – spectrometer's field of view); b – example of recorded spectra



Puc. 7. Вулканический шлейф выброса на о. Чиринкотан за два дня до извержения (a) и пример восстановления наклонных содержаний SO₂ (b)
 Fig. 7. Volcanic plume emissions on Chirinkotan Island two days before eruption (a) and example of retrieval of SO₂ slant columns (b)

выводы

1. Разработан одномодульный автономный портативный спектрометр DEVI (масса 1,4 кг), содержащий миниатюрный спектрометр собственного дизайна на диапазон 290–365 нм с разрешением $0,58 \pm 0,5$ нм, позволяющий регистрацию сигнала за время экспозиции не более 3 с.

2. Примененная методика юстировки спектрометра с использованием итерационно регулируемых бленд позволила практически реализовать спектральное разрешение $0,58 \pm 0,5$ нм, в то время как теоретически рассчитанное разрешение составило 0,61-0,65 нм. Таким образом, на отдельных длинах волн удалось получить спектральное разрешение на 13 % лучше, чем рассчитанное теоретически. При этом стоит отметить, что в модели была выбрана мини-

мальная величина входной щели спектрометра, так что дальнейшее ее сужение приводило лишь к уменьшению интенсивности линий.

3. Разработанный спектрометр снабжен различными периферийными устройствами (видеокамера, видеорегистратор, GPS-приемник, датчик температуры, давления и относительной влажности, инклинометр), которые значительно упрощают интерпретацию полученных данных. Проведенный предварительно комплекс лабораторных угловых калибровок вместе с использованием встроенного ТFT-экрана позволил в условиях экспедиции в режиме реального времени ориентировать поле зрения спектрометра в различные области вулканического выброса, что, в свою очередь, позволило исключить измерения спектров яркости из оптически плотных участков шлейфа, корректировать направление визирования в зависимости от направления ветра, а также проводить измерения в различных точках шлейфа. Характеристики чувствительности детектора и шумовые характеристики разработанной электронной обвязки в совокупности показали практическую возможность успешного применения метода DOAS к зарегистрированным спектрам с целью восстановления содержания диоксида серы.

ЛИТЕРАТУРА

- Sparks, R. S. J. Forecasting Volcanic Eruptions / R. S. J. Sparks // Earth and Planetary Science Letters. 2003. Vol. 210, No 1. P. 1–15. https://doi.org/10.1016/ s0012-821x(03)00124-9.
- Forecasting, Detecting, and Tracking Volcanic Eruptions from Space / M. P. Poland [et al.] // Remote Sensing in Earth Systems Sciences. 2020. Vol. 3, iss. 1. P. 55–94. https://doi. org/10.1007/s41976-020-00034-x.
- Forecasting Etna Eruptions by Real-Time Observation of Volcanic Gas Composition / A. Aiuppa [et al.] // Geology. 2007. Vol. 35, No 12. P. 1115–1118. https://doi.org/10. 1130/g24149a.1.
- 4. Platt, U. Differential Optical Absorption Spectroscopy: Principles and Applications / U. Platt, J. Stutz. Berlin: Springer-Verlag, Heidelberg, 2008. 597 p.
- Variation of the BrO/SO₂ Molar Ratio in the Plume of Tungurahua Volcano Between 2007 and 2017 and Its Relationship to Volcanic Activity / S. Warnach [et al.] // Frontiers in Earth Science. 2019. Vol. 7. P. 1–14. https:// doi.org/10.3389/feart.2019.00132
- Detection of Bromine Monoxide in a Volcanic Plume / N. Bobrowski [et al.] // Nature. 2003. Vol. 423, iss. 6937. P. 273–276. https://doi.org/10.1038/nature01625.
- Toshiba TCD1304DG [Electronic Resource]. Mode of access: https://toshiba.semicon-storage.com/ap-en/semiconductor/ product/linear-image-sensors/detail.TCD1304DG.html – Date of access: 23.07.2020.
- Zemax Official Website [Electronic Resource]. Mode of access: https://www.zemax.com/. Date of access: 21.08.2022.
- A Technique for Evaluation of CCD Video-Camera Noise / K. Irie [et al.] // IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology. 2008. Vol. 18, Iss. 2. P. 280–284. https://doi.org/10.1109/tcsvt.2007.913972.
- QDOAS software [Electronic Resource]. Mode of access: https://uv-vis.aeronomie.be/software/QDOAS/. Date of access: 04.04.2023.
- Литвинович, Г. С. Алгоритм предварительной обработки данных линейки приборов с зарядовой связью на основе адаптивного фильтра Винера / Г. С. Литвинович, И. И. Бручковский // Информатика. 2021. Т. 18, No 1. C. 72–83. https://doi.org/10.37661/1816-0301-2021-18-1-72-83.
- BrO/SO₂ Molar Ratios From Scanning DOAS Measurements in the NOVAC Network / P. Lübcke [et al.] // Solid

Earth. 2014. Vol. 5, iss. 1. P. 409-424. https://doi.org/ 10.5194/se-5-409-2014.

Поступила 18.04.2023 Подписана в печать 20.06.2023 Опубликована онлайн 29.09.2023

REFERENCES

- 1. Sparks R. S. J. (2003) Forecasting Volcanic Eruptions. *Earth and Planetary Science Letters*, 210 (1), 1–15. https://doi.org/10.1016/s0012-821x(03)00124-9.
- Poland M. P., Lopez T., Wright R., Pavolonis M. J. (2020) Forecasting, Detecting, and Tracking Volcanic Eruptions from Space. *Remote Sensing in Earth Systems Sciences*, 3 (1), 55–94. https://doi.org/10.1007/s41976-020-00034-x.
- Aiuppa A., Moretti R., Federico C., Giudice G., Gurrieri S., Liuzzo M., Papale P., Shinohara H., Valenza M. (2007) Forecasting Etna Eruptions by Real-Time Observation of Volcanic Gas Composition. *Geology*, 35 (12), 1115–1118. https://doi.org/10.1130/g24149a.1.
- Platt U., Stutz J. (2008) *Differential Optical Absorption* Spectroscopy: Principles and Applications. Berlin, Springer-Verlag, Heidelberg, 2008. 597.
- Warnach S., Bobrowski N., Hidalgo S., Arellano S., Sihler H., Dinger F., Lübcke P., Battaglia J., Steele A., Galle B., Platt U., Wagner T. (2019) Variation of the BrO/SO₂ Molar Ratio in the Plume of Tungurahua Volcano Between 2007 and 2017 and Its Relationship to Volcanic Activity. *Frontiers in Earth Science*, 7, 1–14. https://doi.org/10. 3389/feart.2019.00132.
- Bobrowski N., Hönninger G., Galle B., Platt U. (2003) Detection of Bromine Monoxide in a Volcanic Plume. *Nature*, 423 (6937), 273–276. https://doi.org/10.1038/natu re01625.
- Toshiba TCD1304DG. Available at: https://toshiba.semiconstorage.com/ap-en/semiconductor/product/linear-image-sen sors/detail.TCD1304DG.html (accessed 23 July 2020).
- 8. Zemax Official Website. Available at: https://www.zemax. com (accessed 21 August 2022).
- Irie K., McKinnon A. E., Unsworth K., Woodhead I. M. (2008) A Technique for Evaluation of CCD Video-Camera Noise. *IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology*, 18 (2), 280–284. https://doi.org/10.1109/ tcsvt.2007.913972.
- 10. *QDOAS Software*. Available at: https://uv-vis.aeronomie. be/ software/QDOAS/ (accessed 04 April 2023).
- Litvinovich H. S., Bruchkouski I. I. (2021) Algorithm for Preliminary Processing of Charge Coupled Devices Array Data Based on the Adaptive Wiener filter. *Informatika = Informatics*, 18 (1), 72–83. https://doi.org/10.37661/1816-0301-2021-18-1-72-83 (in Russian).
- Lübcke P., Bobrowski N., Arellano S., Galle B., Garzón G., Vogel L., Platt U. (2014) BrO/SO₂ Molar Ratios From Scanning DOAS Measurements in the NOVAC Network. *Solid Earth*, 5 (1), 409–424. https://doi.org/10. 5194/se-5-409-2014.

Received: 18.04.2023 Accepted: 20.06.2023 Published online: 29.09.2023

