

Сведения о ходе выполнения проекта в 2022 году

«Спектроскопия атмосферных соединений с использованием терагерцовой спектроскопии высокого разрешения и искусственного интеллекта (SACHA: Spectroscopy of Atmospheric Compounds combining High-resolution terahertz & Artificial intelligence)»

Руководитель проекта: Кистенев Юрий Владимирович, д-р физ.-мат. наук, профессор

Научные (научно-технические) результаты, полученные по направлению научного исследования за первый отчетный период

Получателем гранта: Подготовлен аналитический обзор научных и информационных источников, включающий, в том числе оценку текущего технологического уровня в тематической области исследований в рамках проекта и тенденций развития соответствующей области. Подготовлен отчет о патентных исследованиях в соответствии с ГОСТ Р 15.011-96. Сформулирован согласованный с Иностраным партнером оптимальный вариант направления исследований и способов решения поставленных задач. Разработана эскизная конструкторская документация на экспериментальный образец ТГц спектрометра высокого разрешения. Разработана программа и методика исследовательских испытаний образца ТГц спектрометра высокого разрешения. Создан перестраиваемый источник узкополосного терагерцового излучения на основе цепного умножения частоты. Разработана методика расчета и компьютерной симуляции спектров высокого разрешения смесей атмосферных газов в ТГц диапазоне на основе параметров квантовых переходов. Разработаны рекомендации по возможности детектирования молекулярных компонент исходя из предельной чувствительности разрабатываемого ТГц спектрометра. Разработано прикладное программное обеспечение. Разработана программа экспериментальных исследований компонентного состава многокомпонентных газовых сред с использованием ТГц спектроскопии высокого разрешения и машинного обучения. Подготовлен промежуточный отчет об исследованиях и другая отчетная документация.

Иностраным партнером: Реализован выбор и обоснование оптимальной схемы экспериментального образца ТГц спектрометра высокого разрешения. Реализован выбор методов и алгоритмов, адаптированных для моделирования вращательных спектров высокого разрешения. Проведено взаимное сравнение параметров перестраиваемого источника узкополосного терагерцового излучения на основе цепного умножения частоты на базе Томского государственного университета с источниками, используемыми в Дюнкерке на базе лаборатории LPCA. Разработана и инсталлирована теоретическая платформа на сервере CALCULO лаборатории LPCA. Выявлены перспективы коммерциализации и оптимальные варианты вывода на рынок разрабатываемого аппаратно-программного комплекса, а также произведен поиск возможных инвесторов.

Основные научные результаты по проекту и перспективы их использования

Разработана совместно с Иностранным партнером схема компактного спектрометра высокого разрешения ТГц диапазона. Из опыта Иностранного партнера следует, что величина частоты модуляции не должна существенно превышать ширину исследуемой линии поглощения. Результаты численного моделирования паразитного эффекта Фабри-Перро показали, что за счет правильного выбора материала окон, подбора их толщины и длины кюветы можно минимизировать влияние данного эффекта. Для декомпозиции газовых проб на основе анализа их спектров поглощения перспективен метод, основанный на уменьшении сложности спектра при удалении спектрального компонента из спектра смеси, а также использование либо искусственных нейронных, либо глубоких нейронных сетей, в зависимости от размерности задачи. На основе численного моделирования показано, что искусственная нейронная сеть может восстанавливать зашумленные спектры с высокой точностью.

Разработана совместно с Иностранным партнером методика расчета и компьютерной симуляции спектров высокого разрешения смесей атмосферных газов в ТГц диапазоне на основе параметров квантовых переходов. Созданное ПО по компонентному анализу ТГц спектров высокого разрешения с использованием машинного обучения и спектральной таксономии» позволяет находить концентрацию отдельных молекулярных компонент в атмосферном воздухе.

Разработанная эскизная конструкторская документация на ТГц спектрометр определяет основные требования к элементам газовой и оптической схемам спектрометра. Проведены исследования амплитудно-частотных характеристик комплекса «синтезатор частот-умножители частоты показали, что данные параметры близки к источнику Иностранного партнера.

Разработанные итерационные алгоритмы позволяют определять с приемлемой точностью основные молекулярные константы линейных молекул на основе их вращательных полос поглощения.