

УДК 551.501

Решение задачи спектральной калибровки в дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии методом Нелдера-Мида

Малхасян А.М.¹, Белов М.Л.^{1,*}

[*belov@bmstu.ru](mailto:belov@bmstu.ru)

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Для перспективного бортового спектрометра Maya2000 проведено численное моделирование спектральной калибровки с использованием метода оптимизации Нелдера-Мида. Результаты математического моделирования показывают, что для спектрального диапазона калибровки в ультрафиолетовом диапазоне 310 – 350 нм среднее квадратическое отклонение опорного (солнечного) и приборного спектров составляет 6,01 %, а для спектрального диапазона калибровки в видимом диапазоне 410 – 500 нм среднее квадратическое отклонение опорного и приборного спектров составляет 8,10 %. Таким образом, спектральная калибровка бортового спектрометра Maya2000 про с использованием алгоритма оптимизации Нелдера-Мида дает удовлетворительное совпадение приборного и солнечного спектров.

Ключевые слова: абсорбционная спектроскопия, метод оптимизации Нелдера-Мида

Введение

Основой спектроскопических измерений и многих современных методов количественного анализа концентрации газов в атмосфере и в лабораторных условиях является закон Бугера-Ламберта [1], описывающий ослабление излучения из-за селективного поглощения газовыми составляющими среды распространения. Однако, интенсивность излучения также уменьшается из-за поглощения крыльями линий других газовых составляющих, из-за рассеяния молекулами воздуха и аэрозольными частицами, из-за ослабления оптическими элементами (линзами, зеркалами и дифракционными решетками). Турбулентность атмосферы может приводить к расширению светового пучка (и к ослаблению регистрируемого излучения). Закон Бугера-Ламберта можно обобщить, добавив в него вышеперечисленные факторы, влияющие на изменение интенсивности излучения:

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp[-L(\sum_j \sigma_j(\lambda) c_j + \varepsilon_R(\lambda) + \varepsilon_M(\lambda))] A(\lambda), \quad (1)$$

где c_j - концентрация j -й компоненты, см^{-3} ; σ_j - сечение поглощения j -й компоненты, см^2 ; $\varepsilon_R(\lambda)$ - коэффициент ослабления для рассеяния Рэля, см^{-1} ; $\varepsilon_M(\lambda)$ - коэффициент ослабления для рассеяния Ми, см^{-1} ; $A(\lambda)$ - коэффициент влияния оптических элементов и турбулентности.

Для определения концентрации конкретного газового компонента в составе среды необходимо знать влияние всех остальных компонент. В лабораторных условиях это возможно сделать. Однако при работе в атмосфере данная задача является нетривиальной.

Дифференциальная оптическая абсорбционная спектроскопия (ДОАС) решает эту проблему, используя тот факт, что аэрозольное рассеяние, эффект турбулентности и многие малые газовые составляющие атмосферы имеют плавно изменяющиеся спектральные характеристики [2-9]. Однако некоторые малые газовые составляющие обладают "тонкой" спектральной структурой поглощения, и их можно выделить на фоне компонент с "плавным спектром". Таким образом, в основе ДОАС лежит разделение "широкополосных" и "узкополосных" структур в спектре поглощения.

На рис. 1 показан принцип разделения "широкополосных" и "узкополосных" структур в спектре поглощения: выделение дифференциальной составляющей по интенсивности (а), выделение дифференциального сечения поглощения (б).

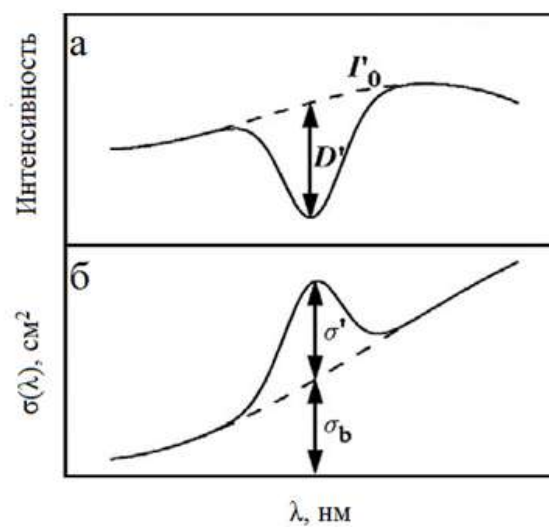


Рис.1. Принцип разделения структур: выделение дифференциальной составляющей по интенсивности (а), выделение дифференциального сечения поглощения (б)

Основной принцип ДОАС заключается в следующем: интенсивность I_0 и сечение поглощения σ разделены с помощью определенного алгоритма фильтрации на "узкие" (D' и σ') и "широкие" полосы (I_0' и σ_b). Итак, для сечения поглощения $\sigma_j(\lambda)$ можно записать:

$$\sigma_j(\lambda) = \sigma_{j0}(\lambda) + \sigma'_j(\lambda), \quad (2)$$

где $\sigma_{j0}(\lambda)$ - "широкополосная" часть сечения поглощения; $\sigma'_j(\lambda)$ - дифференциальное сечение поглощения.

В формуле (2) переменная $\sigma_{j0}(\lambda)$ изменяется в зависимости от длины волны плавно, а $\sigma'_j(\lambda)$ изменяется относительно резко, что вызвано наличием в спектральном диапазоне линий поглощения определенного вещества. Какие изменения функции сечения поглощения понимать как плавные, а какие как резкие, конечно, вопрос того, какой спектральный диапазон мы рассматриваем и какая ширина линии поглощения того или иного вещества. Подставим (2) в (1) и получим:

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp[-L \sum_j \sigma'_j(\lambda) c_j] \exp[-L(\sum_j \sigma_{j0}(\lambda) c_j + \varepsilon_R(\lambda) + \varepsilon_M(\lambda))] A(\lambda) \quad (3)$$

где первая экспоненциальная часть отвечает за дифференциальную составляющую газовых примесей, в то время как вторая часть описывает плавное изменение интенсивности, коэффициент $A(\lambda)$ – также плавно изменяющаяся функция от длины волны.

Величину $I'_0(\lambda)$ можно определить как интенсивность в отсутствие дифференциального поглощения:

$$I'_0(\lambda) = I_0(\lambda) \exp[-L(\sum_j \sigma_{j0}(\lambda) c_j + \varepsilon_R(\lambda) + \varepsilon_M(\lambda))] A(\lambda). \quad (4)$$

Разделение влияния на поглощение различных компонент, входящих в сумму в первой экспоненте (3), возможно благодаря тому, что спектральная структура каждой компоненты уникальна.

В настоящее время для определения малых газовых компонент атмосферы (МГК) используются три пассивных спутниковых метода [10]:

- метод прозрачности, в котором информация о содержании МГК извлекается из спектров поглощения солнечного излучения при восходе и заходе Солнца за горизонт планеты;
- метод теплового излучения, использующий измерения спектральной и (или) угловой зависимости собственного излучения планеты;
- метод отраженного и рассеянного солнечного излучения, в котором информация о содержании МГК извлекается из измерений восходящего излучения в ультрафиолетовой, видимой и ближней инфракрасной областях спектра.

Физической основой использования метода ДООС при дистанционном мониторинге МГК является наличие спектрально локализованных полос поглощения в атмосфере, соответствующих различным малым газовым компонентам.

Работа посвящена спектральной калибровке спектрометра в задаче дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии.

1. Измерение малых газовых компонент в составе атмосферы с помощью метода ДОАС

Разделение "широких" и "узких" спектральных структур, делает спектроскопию поглощения пригодной для использования в атмосфере. ДОАС ограничивается измерением малых газовых составляющих, которые имеют узкополосные структуры поглощения с шириной меньше ~ 10 нм. Теоретически можно измерить все газы, которые имеют узкие полосы поглощения в УФ, видимом или ближнем ИК диапазонах спектра. Однако концентрации этих компонент в атмосфере и пределы обнаружения современных приборов ДОАС ограничивают количество газовых примесей, которые могут быть обнаружены.

На рис. 2 показана спектральная зависимость дифференциальной оптической толщины озона (O_3), полученная путем моделирования в программе MODTRAN для стандартной атмосферы при надирных наблюдениях из космоса.

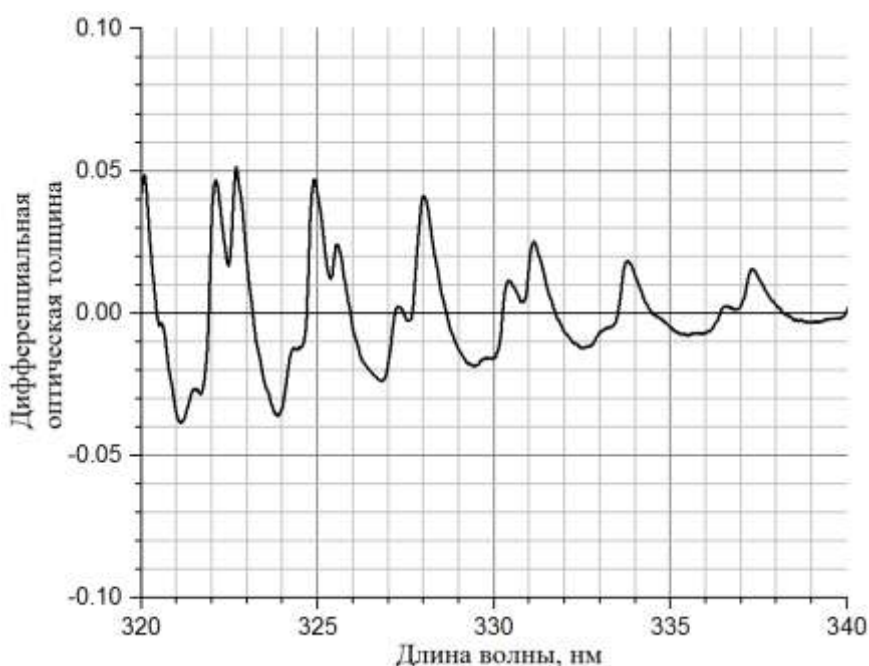


Рис. 2. Дифференциальная оптическая толщина озона

Для определения среднего содержания озона необходимо подобрать методом наименьших квадратов такое среднее значение c_{cp} , чтобы минимизировать следующее выражение:

$$[\tau_{\text{дифф}O_3}(\lambda) - \sigma_{\text{дифф}O_3}(\lambda)c_{cp}] \rightarrow \min$$

где $\tau_{\text{дифф}O_3}(\lambda)$ - дифференциальная оптическая толщина озона; $\sigma_{\text{дифф}O_3}(\lambda)$ - дифференциальное сечение поглощения озона, см^2 ; c_{cp} - среднее содержание озона, см^{-2} .

Описанный метод использует известную математическую модель и подбирает ее параметры для наилучшего совпадения с экспериментальными данными. Если при этом используется метод наименьших квадратов, то целевая функция, определяется как сумма

квадратов разности между известной математической моделью и экспериментальными данными.

Если математическая модель является нелинейной относительно своих параметров, то для решения необходимо использовать сложные методы оптимизации [1, 11-14].

Для получения правильных результатов обработки методом ДООС необходимо учитывать параметры регистрирующей аппаратуры. К таким параметрам относятся: вид и ширина аппаратной функции (спектральное разрешение), особенности спектральной калибровки; шумовые характеристики приёмника излучения.

Одним из перспективных спектрометров для использования метода дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии в задаче атмосферного газоанализа является спектрометр Maya2000 pro [15]. Основные характеристики спектрометра Maya2000 Pro приведены в таблице 1.

Таблица 1. Основные технические характеристики спектрометра Maya2000 Pro.

Детектор	
Модель:	Hamamatsu S10420-1106
Архитектура:	матричная с покадровым переносом и освещением с обратной стороны
Количество пикселей:	2048 x 64 (всего 2068 x 70)
Размер пикселя:	14 x 14 мкм
Квантовая эффективность:	75% (макс.)
Оптический модуль	
Оптическая схема:	f/4, симметричная скрещенная Черни-Тернера
Фокусное расстояние:	101 мм
Входная апертура:	сменная входная щель 5, 10, 25, 50, 100 или 200 мкм или волокно (без щели)
Дифракционная решётка:	14 вариантов, от УФ до коротковолнового ближнего ИК-диапазона
Дифракционная решётка HC-1:	обеспечивает покрытие спектрального диапазона от УФ до коротковолнового ближнего ИК-диапазона (165-1100 нм). Ширина диапазона покрытия: 900 нм.
Спектроскопические характеристики	
Спектральный диапазон:	Зависит от установленной дифракционной решётки
Оптическое разрешение:	до ~ 0.05 нм FWHM (зависит от выбранной дифракционной решетки и ширины входной щели)
Время интегрирования:	6 мс - 5 с
АЦП:	16 разрядов, 500 кГц
Динамический диапазон:	15000:1
Отношение сигнал/шум:	450:1

Данные, полученные со спектрометра Maya2000 pro, установленного на борту международной космической станции, использовались в статье в качестве измеренных спектров.

В качестве опорного спектра использовался эталонный спектр солнечного излучения (результаты измерения спектральной солнечной постоянной с высоким спектральным разрешением) [16].

Измеренный спектрометром спектр ($I(\lambda)$) и спектр высокого разрешения ($I_s(\lambda)$) имеют различное спектральное разрешение. Поэтому, сначала их приводили в соответствие друг с другом. Опорный (солнечный) спектр высокого разрешения сворачивали с аппаратной функцией различной ширины (Full-Width Half-Maximum, FWHM), а также сдвигали шкалу длин волн до наилучшего совпадения с измеренным спектром.

Наиболее рациональным является предварительное разделение солнечного и приборного спектров на спектральные "окна" равной ширины. Затем солнечный спектр умножается на полином низкой степени для того, чтобы сравнить его по амплитуде со спектром, измеренным прибором. С целью минимизации целевой функции, описывающей рассогласование между опорным и приборным спектрами в каждом спектральном "окне": двигается сетка длин волн, изменяются коэффициенты полинома и изменяется ширина аппаратной функции прибора (см. выражение (5)). В результате получается таблица сдвига длин волн и ширины аппаратной функции для центральной длины волны каждого спектрального "окна" (эти значения интерполируются для всего рабочего спектрального диапазона прибора).

$$I_o(\lambda) = [I_s(\lambda - \Delta_i) \sum_{k=1}^d b_k(\lambda_i)^k] \otimes \text{SFP}_i, \quad (5)$$

где $I_o(\lambda)$ - приведенный опорный спектр; $I_s(\lambda)$ – опорный (солнечный) спектр высокого разрешения; Δ_i – сдвиг сетки длин волн в i -ом спектральном окне; SFP_i - аппаратная функция прибора; b_k – коэффициенты полинома низкой степени.

Для спектральной калибровки спектрометра Maya2000 про был использован метод оптимизации Нелдера-Мида.

2. Алгоритм оптимизации Нелдера-Мида

Для калибровки спектрометра Maya2000 про (для минимизации рассогласования между опорным (солнечным) спектром и спектром, измеренным в отсутствие среды) использовался метод оптимизации Нелдера — Мида [12,17-19].

Метод Нелдера — Мида — метод оптимизации (поиска минимума) функции от нескольких переменных. Простой и в тоже время эффективный метод, позволяющий оптимизировать функции без использования градиентов. Метод надежен и, как правило, показывает хорошие результаты, хотя и отсутствует теория сходимости. Может использоваться в функции `optimize` из модуля `scipy.optimize` популярной библиотеки для языка `python`, которая используется для математических расчетов.

Алгоритм заключается в формировании симплекса (`simplex`) и последующего его деформирования в направлении минимума, посредством трех операций:

- 1) Отражение (`reflection`);

- 2) Растяжение (expansion);
- 3) Сжатие (contract).

Симплекс представляет из себя геометрическую фигуру, являющуюся n — мерным обобщением треугольника. Для одномерного пространства — это отрезок, для двумерного — треугольник. Таким образом n — мерный симплекс имеет $n + 1$ вершину.

Алгоритм заканчивается, когда:

- 1) Было выполнено необходимое количество итераций.
- 2) Площадь симплекса достигла определенной величины.
- 3) Текущее лучшее решение достигло необходимой точности.

Симплекс-метод широко используется для оптимизации параметров модели. Это связано с тем, что данный метод оптимизирует целевую функцию довольно быстро и эффективно.

3. Анализ результатов калибровки спектрометра Maya2000 рго методом Нелдера-Мида

Для анализа работы метода оптимизации Нелдера-Мида в задаче спектральной калибровки спектрометра Maya2000 рго рассчитывалось значение среднего квадратического отклонения σ (СКО) между приборным (измеренным спектрометром) спектром ($I(\lambda)$) и опорным (солнечным) спектром ($I_0(\lambda)$):

$$\sigma = \sqrt{\frac{(I(\lambda) - I_0(\lambda))^2}{n}} \quad (6)$$

где n – число длин волн приборной сетки для выбранного спектрального диапазона (были выбраны два спектральных диапазона – один в ультрафиолетовой, а другой в видимой спектральной области).

Математическое моделирование работы оптимизационного алгоритма Нелдера-Мида для задачи спектральной калибровки спектрометра Maya2000 рго было проведено с использованием пакета прикладных программ MATLAB.

Ниже в таблицах 2,3 и на рисунке 3,4 приведены результаты спектральной калибровки для следующих двух спектральных диапазонов: от 310 до 350 нм и от 415 до 500 нм.

Таблица 2. Результаты спектральной калибровки спектрометра в спектральном диапазоне диапазон 310 - 350 нм

Номер окна	FWHM, нм	Сдвиг, нм
1	2,608	0,027
2	3,057	0,060
3	1,814	-0,744
4	2,861	0,020
5	2,695	-0,070
6	2,622	0

Таблица 3. Результаты спектральной калибровки спектрометра в спектральном диапазоне 415 - 500 нм

Номер окна	FWHM, нм	Сдвиг, нм
1	2,351	-0,650
2	4,534	0,040
3	7,482	0,239
4	2,040	-0,595
5	2,276	-1,170
6	1,521	0,228
7	1,622	-1,021
8	3,746	-0,130
9	1,832	-0,926
10	1,714	-0,504

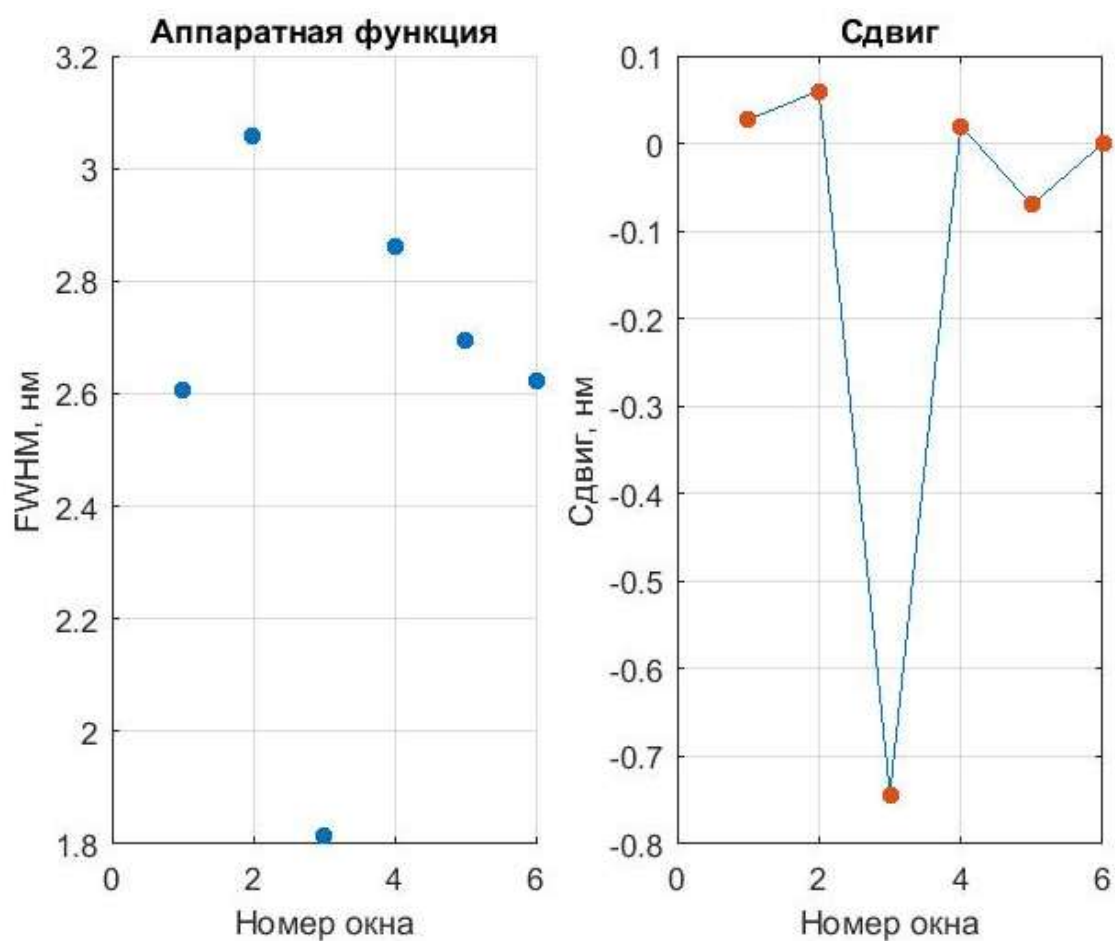


Рисунок 3. Значения FWHM и спектрального сдвига для диапазона 310 - 350 нм.

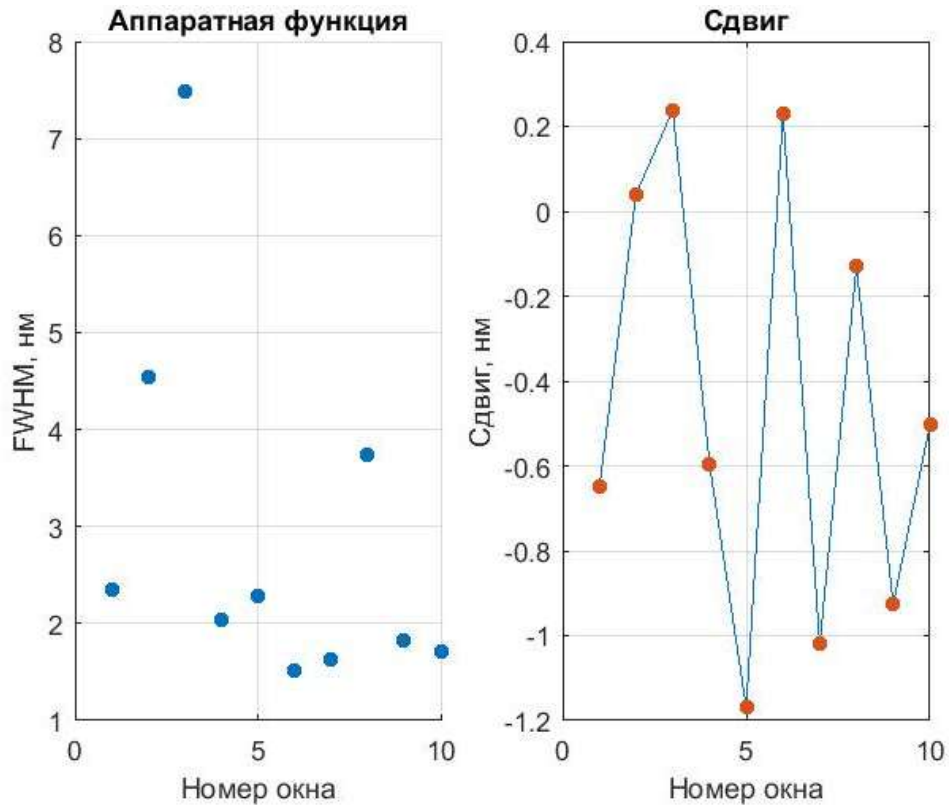


Рисунок 4. Значения FWHM и спектрального сдвига для диапазона 415 - 500 нм.

На рисунков 5,6 для наглядности представлены опорный солнечный спектр (красная линия) и результат спектральной калибровки с использованием алгоритма Нелдера-Мида.

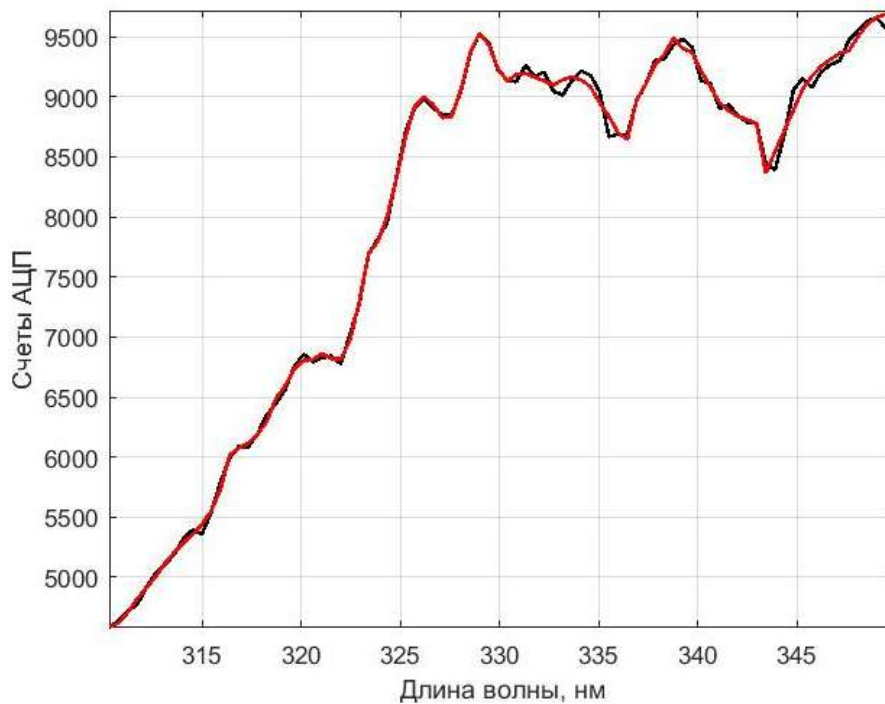


Рисунок 5. Результат калибровки для диапазона длин волн 310 - 350 нм

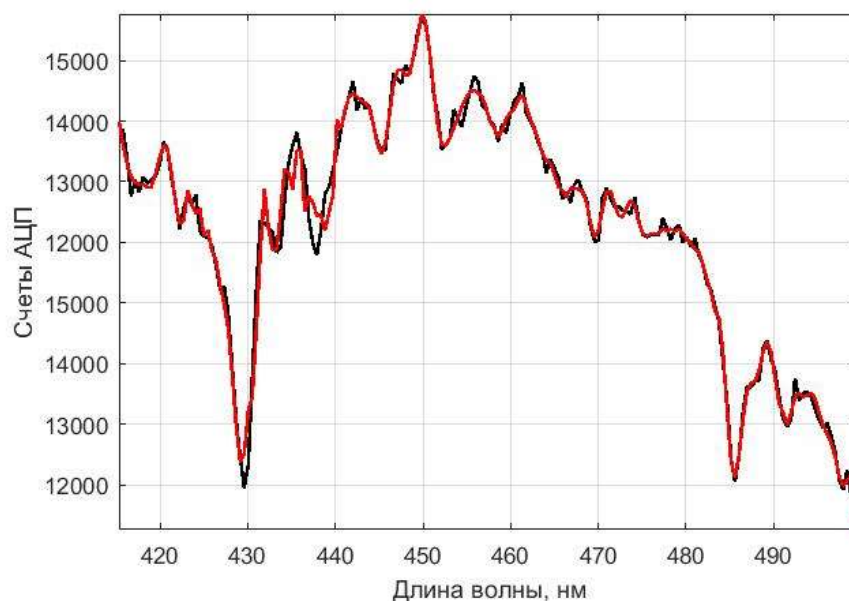


Рисунок 6. Результат калибровки для диапазона длин волн 415 - 500 нм

Оценка среднего квадратического отклонения σ между приборным (измеренным спектрометром) спектром ($I(\lambda)$) и опорным (солнечным) спектром ($I_0(\lambda)$) приведена ниже в таблице 4.

Таблица 4. Оценка результатов спектральной калибровки спектрометра Maya2000 pro.

Алгоритм	СКО, %	
	310 - 350 нм	415 - 500 нм
Нелдера-Мида	6,01	8,10

Рисунки 5,6 и таблица 4 показывают, что спектральная калибровка с использованием алгоритма оптимизации Нелдера-Мида дает удовлетворительное совпадение приборного и солнечного спектров.

Заключение

Рассмотрено решение задачи спектральной калибровки в дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии газового состава земной атмосферы при дистанционном мониторинге малых газовых компонент в ультрафиолетовом и видимом спектральных диапазонах с искусственного спутника Земли. Для перспективного бортового спектрометра Maya2000 pro проведено численное моделирование спектральной калибровки с использованием метода оптимизации Нелдера-Мида. Результаты математического моделирования показывают, что для спектрального диапазона калибровки в ультрафиолетовом диапазоне 310 – 350 нм среднее квадратическое отклонение опорного (солнечного) и приборного спектров составляет 6,01 %, а для спектрального диапазона калибровки в видимом диапазоне 410 – 500 нм среднее квадратическое отклонение опорного и приборного

спектров составляет 8,10 %. Таким образом, спектральная калибровка бортового спектрометра Maya2000 про с использованием алгоритма оптимизации Нелдера-Мида дает удовлетворительное совпадение приборного и солнечного спектров.

Список литературы

1. Platt U., Stutz J. Differential Optical Absorption Spectroscopy – Principles and Applications. Springer-Verlag Berlin, 2008. 597 p.
2. Clemer K., van Roozendaal M., Fayt C., Hendrick F., Hermans C., Pinardi G., Spurr R., Wang P., De Maziere M. Multiple wavelength retrieval of tropospheric aerosol optical properties from MAX-DOAS measurements in Beijing // Atmospheric Measurement Techn. 2010. V.3. P. 863–878.
3. Stutz J., Hurlock S., Colosimo S. et al. A novel dual-LED based long-path DOAS instrument for the measurement of aromatic hydrocarbons // Atmospheric Environment. 2016. V.147. N. 1. P. 121–132.
4. Stutz J., Hurlock S., Colosimo S., Tsai C., Cheung R., Festa J., Pikel'naya O., Alvarez S., Flynn J., Erickson M., Olaguer E. A novel dual-LED based long-path DOAS instrument for the measurement of aromatic hydrocarbons // Atmospheric Environ. 2016. V.147. N.1. P. 121–132. Doi: [10.1016/j.atmosenv.2016.09.054](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.09.054)
5. Geiko P.P., Smirnov S.S., Samokhvalov I.V. Detection of concentration small gas components of atmosphere by DOAS method // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). 2015. V.24. N.2. P. 152–158.
6. Kern C., Trick S., Rippel B., Platt U. Applicability of light-emitting diodes as light sources for active differential optical absorption spectroscopy measurements // Applied Opt. 2006. V. 45. N.9. P. 2077–2068. Doi: [10.1364/AO.45.002077](https://doi.org/10.1364/AO.45.002077)
7. Vita F., Kern C., Inguaggiato S. Development of a portable active long-path differential optical absorption spectroscopy system for volcanic gas measurements // J. Sens. Syst. 2014. V.3. N. 1. P. 355–367. Doi: [10.5194/jsss-3-355-2014](https://doi.org/10.5194/jsss-3-355-2014)
8. Vlemmix T., Pijters A. J. M., Berkhout A. J. C., Gast L. F. L., Wang P., Levelt P. F. Ability of the MAX-DOAS method to derive profile information for NO₂: can the boundary layer and free troposphere be separated? // Atmospheric Measurement Techn. 2011. V.4. P. 2659–2684.
9. Coburn S., Dix B., Sinreich R., Volkamer R. The CU ground MAX-DOAS instrument: characterization of RMS noise limitations and first measurements near Pensacola, FL of BrO, IO, and CHOCHO // Atmospheric Measurement. Techn. 2011. V.4. P. 2421–2439.
10. Козинцев В.И., Орлов В.М., Белов М.Л., Городничев В.А., Стрелков Б.В. Оптико-электронные системы экологического мониторинга природной среды. М.: Изд-во МГТУ, 2002. 528 с.
11. Медынский М. М., Дьячук А.К. Численные методы оптимизации с использованием Maple 11. М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2009. 287 с

12. Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization. // *Computer Journal*. 1965. N1. 308-313.
13. A.O. Umar, I.M. Sulaiman, M. Mamat, M.Y. Waziri, N. Zamri. On damping parameters of Levenberg-Marquardt algorithm for nonlinear least square problems. // *Phys.: Conf. Ser.* 2021. 1734 012018.
14. Zhenxiang Wu, Tong Zhou, Lei Li, Liang Chen, Yanfang Ma, A New Modified Efficient Levenberg–Marquardt Method for Solving Systems of Nonlinear Equations // *Mathematical Problems in Engineering*. 2021. V.2021. Article ID 5608195. 11 p. Available at: <https://doi.org/10.1155/2021/5608195>.
15. Maya2000 Pro Deep UV Spectrometer. Available at: www.oceanoptics.com, accessed 02.12.2021.
16. Kurucz R.L. The solar spectrum: atlases and line identifications. In: Sauval, A. J., Blomme, R., Grevesse, N. (ed) *Laboratory and astronomical high resolution spectra*, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 1995. V.81. P. 17-31.
17. Nam Pham, Bogdan M. Wilamowski. Improved Nelder Mead’s Simplex Method and Applications. // *Journal of computing*. 2011. V.3. N.3. Available at: <https://sites.google.com/site/journalofcomputing/www.journalofcomputing.org>, accessed 02.12.2021.
18. Fuchang Gao, Lixing Han. Implementing the Nelder-Mead simplex algorithm with adaptive parameters. // *Comput Optim Appl*. 2010. DOI: [10.1007/s10589-010-9329-3](https://doi.org/10.1007/s10589-010-9329-3)
19. Метод оптимизации Нелдера — Мида. Available at: <https://habr.com/ru/post/332092/>, accessed 02.12.2021.

Solution of the Spectral Calibration Problem in Differential Optical Absorption Spectroscopy by the Nelder-Mead Method

A.M. Malkhasyan¹, M.L. Belov^{1,*}

[*belov@bmstu.ru](mailto:belov@bmstu.ru)

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Keywords: absorption spectroscopy, Nelder - Mead optimization method

Differential optical absorption spectroscopy (DOAS) is a well-established method for analyzing the chemical composition of gases, which plays an important role in studying the physical and chemical properties of the Earth's atmosphere.

The physical basis for using the DOAS method for remote monitoring of small gas components of the atmosphere is the presence of spectrally localized absorption bands in the atmosphere corresponding to various gas components.

The article considers the solution of the problem of spectral calibration in differential optical absorption spectroscopy of the gas composition of the Earth's atmosphere with remote monitoring of small gas components in the ultraviolet and visible spectral ranges from an artificial Earth satellite.

Numerical modeling of spectral calibration using the Nelder-Mead optimization method was carried out for the promising on-board spectrometer Maya2000 pro.

To analyze the operation of the Nelder-Mead optimization method in the spectral calibration problem of the Maya2000 pro spectrometer, the value of the mean square deviation between the instrument (measured by the spectrometer) spectrum and the reference (solar) spectrum was calculated.

The spectrum measured by the spectrometer and the reference (solar) spectrum of high resolution have different spectral resolutions. Therefore, they were previously brought into line with each other. The wavelength scale was shifted to the best match with the measured spectrum and a high-resolution reference (solar) spectrum was convoluted with a hardware function of different widths.

Mathematical modeling of the operation of the Nelder-Mead optimization algorithm for the spectral calibration of the Maya2000 pro spectrometer was carried out using the MATLAB application software package.

The results of mathematical modeling show that for the spectral calibration range in the ultraviolet range of 310 - 350 nm, the mean square deviation of the reference (solar) and instru-

ment spectra is 6.01 % and for the spectral calibration range in the visible range of 410 - 500 nm, the mean square deviation of the reference and instrument spectra is 8.10%.

Thus, spectral calibration of the Maya2000 pro onboard spectrometer using the Nelder-Mead optimization algorithm gives a satisfactory coincidence of the instrument and solar spectra.

References

1. Platt U., Stutz J. Differential Optical Absorption Spectroscopy – Principles and Applications. Springer-Verlag Berlin, 2008. 597 p.
2. Clemer K., van Roozendaal M., Fayt C., Hendrick F., Hermans C., Pinardi G., Spurr R., Wang P., De Maziere M. Multiple wavelength retrieval of tropospheric aerosol optical properties from MAX-DOAS measurements in Beijing // Atmospheric Measurement Techn. 2010. V.3. P. 863–878.
3. Stutz J., Hurlock S., Colosimo S. et al. A novel dual-LED based long-path DOAS instrument for the measurement of aromatic hydrocarbons // Atmospheric Environment. 2016. V.147. N. 1. P. 121–132.
4. Stutz J., Hurlock S., Colosimo S., Tsai C., Cheung R., Festa J., Pikelnaya O., Alvarez S., Flynn J., Erickson M., Olaguer E. A novel dual-LED based long-path DOAS instrument for the measurement of aromatic hydrocarbons // Atmospheric Environment. 2016. V.147. N.1. P. 121–132. Doi: [10.1016/j.atmosenv.2016.09.054](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.09.054)
5. Geiko P.P., Smirnov S.S., Samokhvalov I.V. Detection of concentration small gas components of atmosphere by DOAS method // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). 2015. V.24. N.2. P. 152–158.
6. Kern C., Trick S., Rippel B., Platt U. Applicability of light-emitting diodes as light sources for active differential optical absorption spectroscopy measurements // Applied Opt. 2006. V. 45. N.9. P. 2077–2068. Doi: [10.1364/AO.45.002077](https://doi.org/10.1364/AO.45.002077)
7. Vita F., Kern C., Inguaggiato S. Development of a portable active long-path differential optical absorption spectroscopy system for volcanic gas measurements // J. Sens. Syst. 2014. V.3. N. 1. P. 355–367. Doi: [10.5194/jsss-3-355-2014](https://doi.org/10.5194/jsss-3-355-2014)
8. Vlemmix T., Pijters A. J. M., Berkhout A. J. C., Gast L. F. L., Wang P., Levelt P. F. Ability of the MAX-DOAS method to derive profile information for NO₂: can the boundary layer and free troposphere be separated? // Atmospheric Measurement Techn. 2011. V.4. P. 2659–2684.
9. Coburn S., Dix B., Sinreich R., Volkamer R. The CU ground MAX-DOAS instrument: characterization of RMS noise limitations and first measurements near Pensacola, FL of BrO, IO, and CHOCHO // Atmospheric Measurement. Techn. 2011. V.4. P. 2421–2439.
10. Kozintsev V.I., Orlov V.M., Belov M.L., Gorodnichev V.A., Strelkov B.V. Optiko-elektronnyye sistemy ekologicheskogo monitoringa prirodnoi sredy [Optical-electronic systems of environmental monitoring of the natural environment]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2002. 528 p. (in Russian).

11. Medinskii M.M., D'yachuk A.K. Numerical optimization methods using Mapple 11 [Chislennii metodi optimizatsii s ispolzovaniem Mapple 11]. Moscow, MAI-PRINT Publ., 2009. 287 p. (in Russian).
12. Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization. // *Computer Journal*. 1965. N1. 308-313.
13. A.O. Umar, I.M. Sulaiman, M. Mamat, M.Y. Waziri, N. Zamri. On damping parameters of Levenberg-Marquardt algorithm for nonlinear least square problems. // *Phys.: Conf. Ser.* 2021. 1734 012018.
14. Zhenxiang Wu, Tong Zhou, Lei Li, Liang Chen, Yanfang Ma, A New Modified Efficient Levenberg–Marquardt Method for Solving Systems of Nonlinear Equations // *Mathematical Problems in Engineering*. 2021. V.2021. Article ID 5608195. 11 p. Available at: <https://doi.org/10.1155/2021/5608195>
15. Maya2000 Pro Deep UV Spectrometer. Available at: www.oceanoptics.com, accessed 02.12.2021.
16. Kurucz R.L. The solar spectrum: atlases and line identifications. In: Sauval, A. J., Blomme, R., Grevesse, N. (ed). *Laboratory and astronomical high resolution spectra*, Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 1995. V.81. P. 17-31.
17. Nam Pham, Bogdan M. Wilamowski. Improved Nelder Mead's Simplex Method and Applications. // *Journal of computing*. 2011. V.3. N.3. Available at: <https://sites.google.com/site/journalofcomputing/www.journalofcomputing.org>, accessed 02.12.2021.
18. Fuchang Gao, Lixing Han. Implementing the Nelder-Mead simplex algorithm with adaptive parameters. // *Comput Optim Appl*. 2010. DOI 10.1007/s10589-010-9329-3.
19. The Nelder - Mead optimization method. Available at: <https://habr.com/ru/post/332092/>, accessed 02.12.2021.