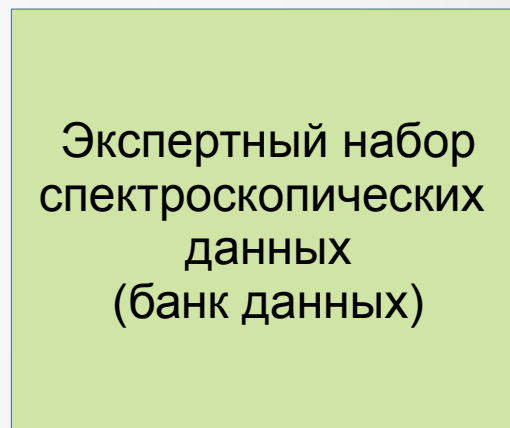
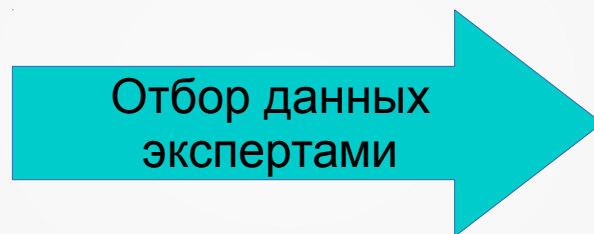


Универсальный модуль «унарные операции» в ИВС «молекулярная спектроскопия»

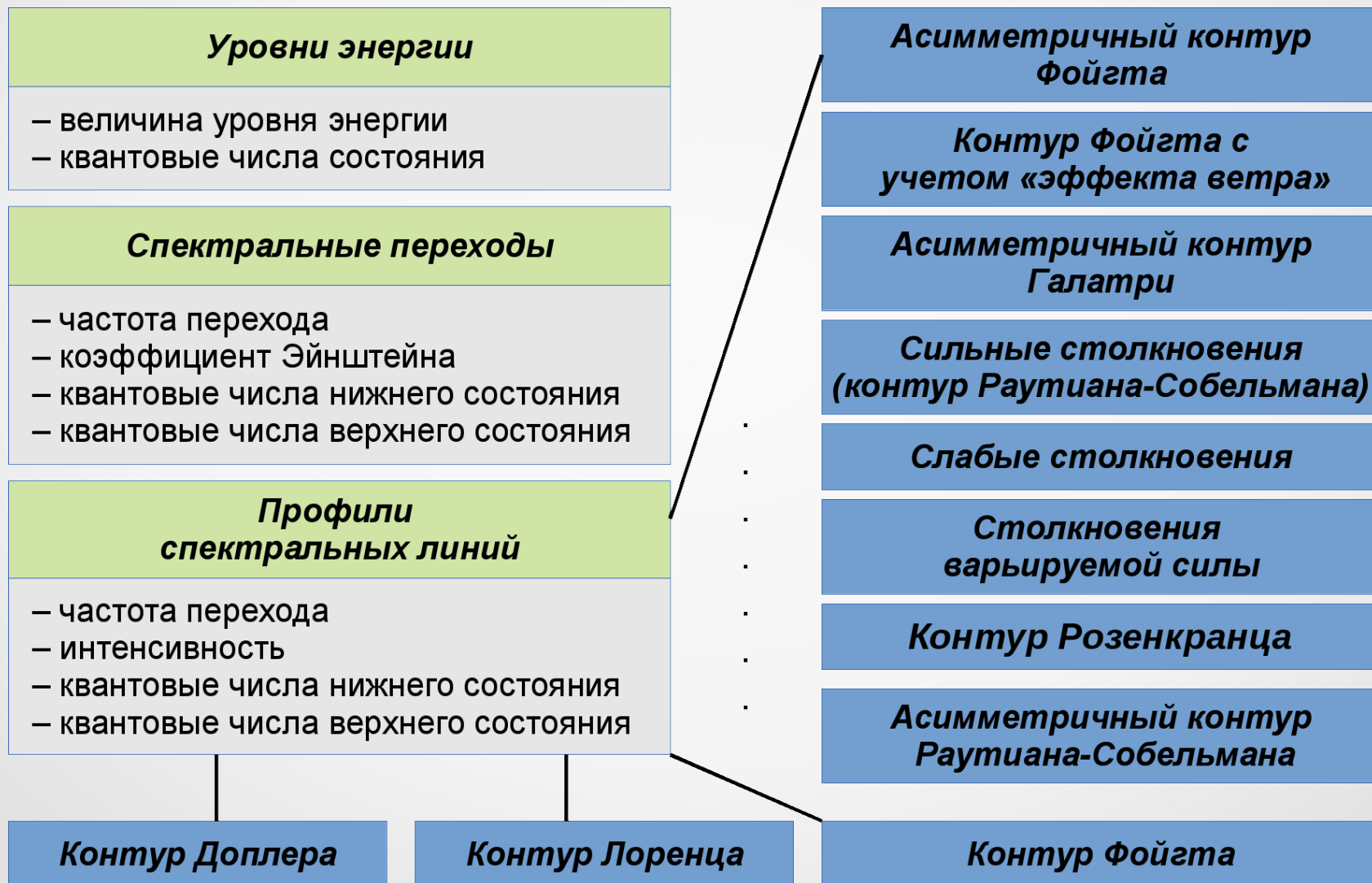
Козодоев А.В., Козодоева Е.М.
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Томск, Россия
kav@iao.ru, klen@iao.ru

Путь данных от публикации до экспертного набора данных.

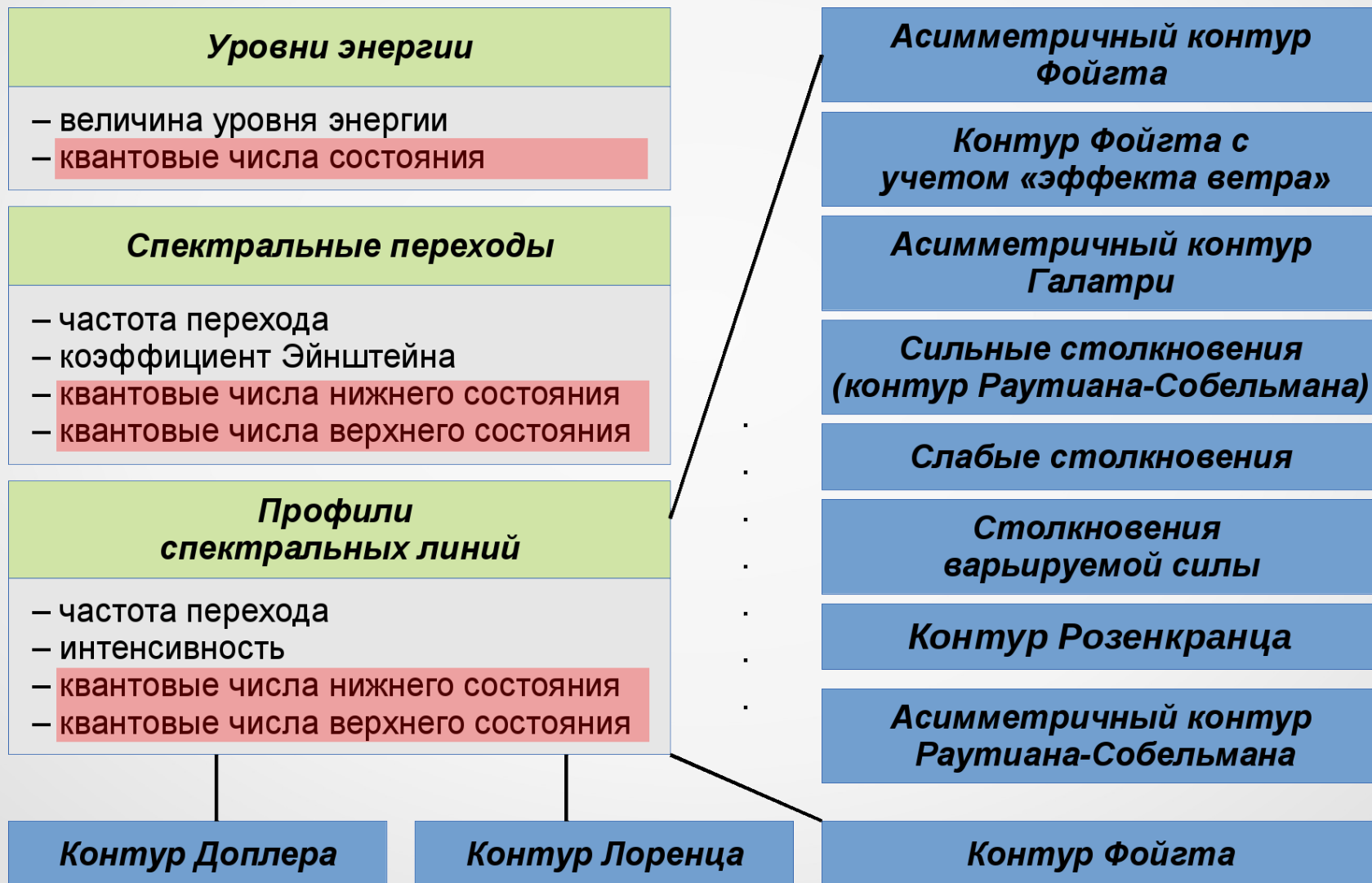


Расчёты, измерения.

Структура спектральных данных.



Структура спектральных данных.

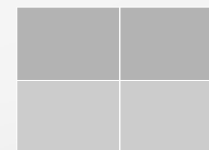
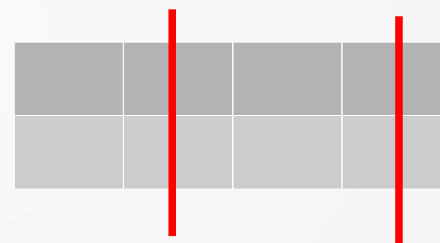
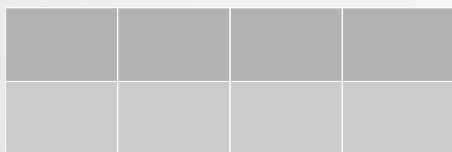
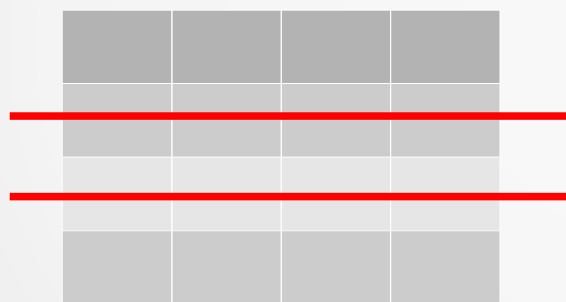


Структура спектральных данных. Изменчивая часть.

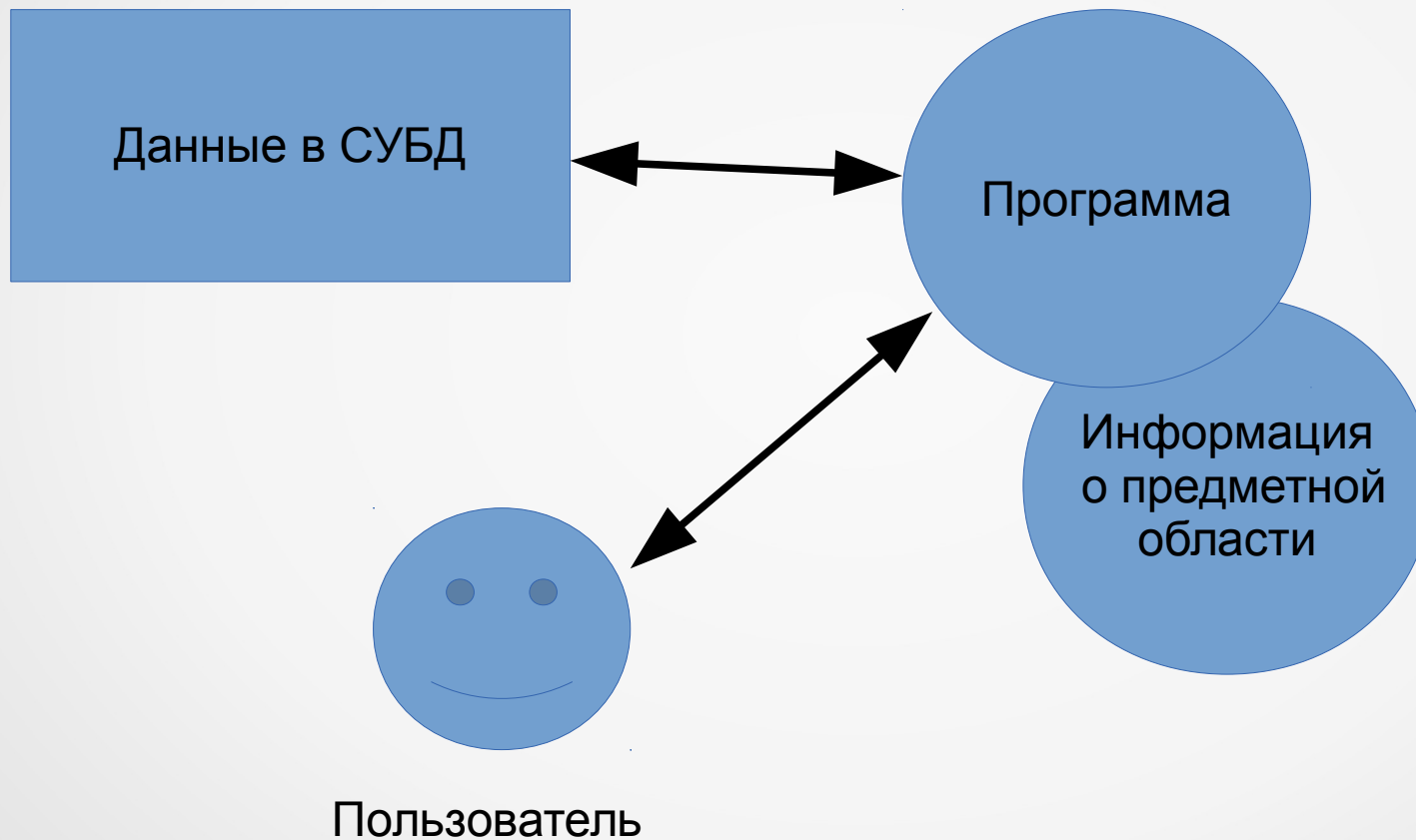
- Мы используем квантовые числа предложенные в проекте VAMDC для процессов поглощения молекул в основном электронном состоянии (квантовые числа в нормальных модах)
- В зависимости от вещества (изотополога) количество квантовых чисел определяющих состояние молекулы может меняться от единиц, до десятка и более. Например, банк данных HITRAN-2012 содержит данные по 47 веществам (120 изотопологов).
- Меняется не только количество квантовых чисел, но и их тип, и допустимые значения. Например, для C_2H_2 полный угловой момент (J) это целое положительное число, симметрия имеет два значения «+» и «-», а квантовое число ϵ имеет значения «e» и «f».

Унарные операции

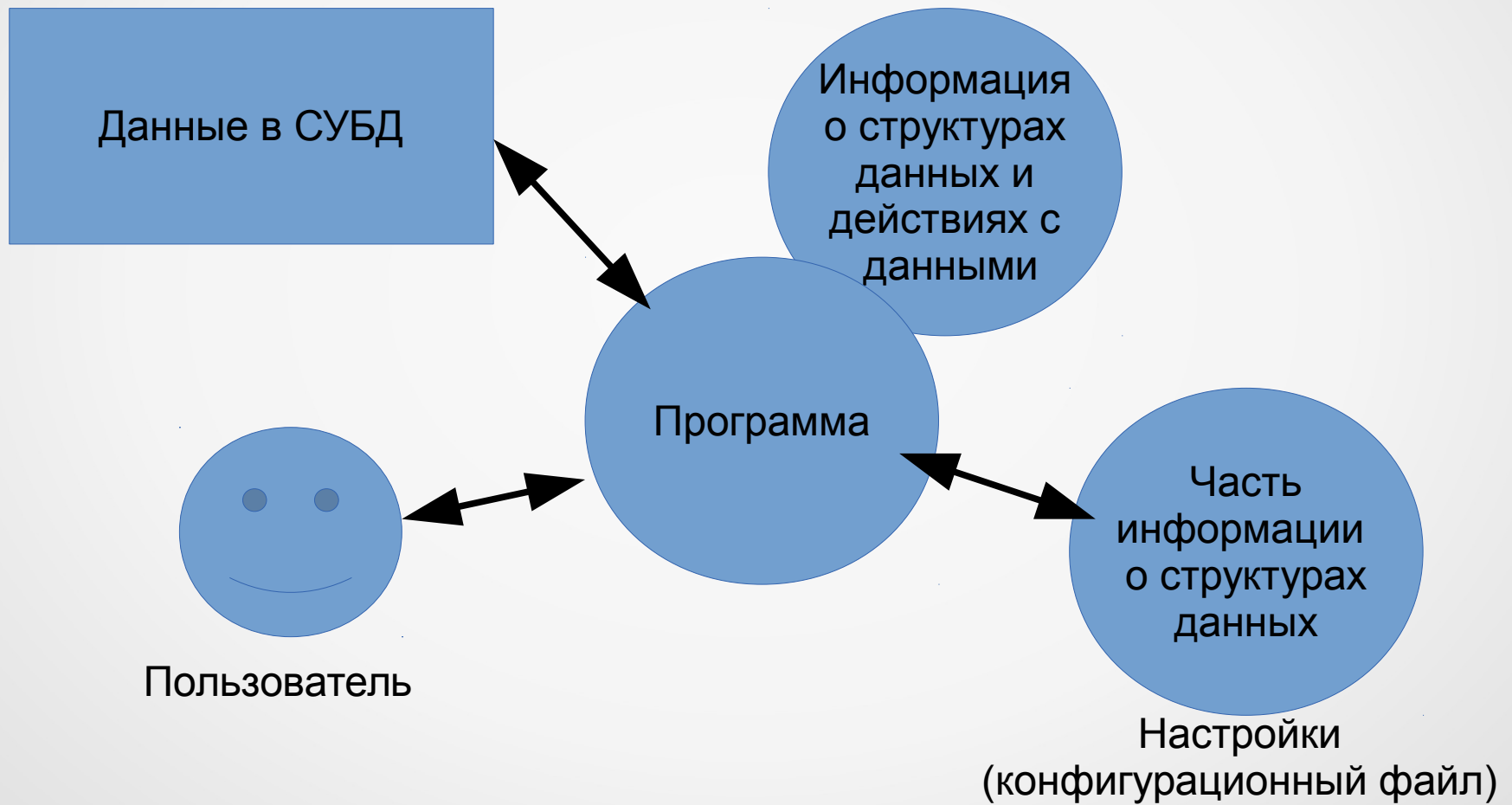
- выборка: выбор или удаление строк
- проекция: редукция числа величин (столбцов)



Обычный способ разработки программ



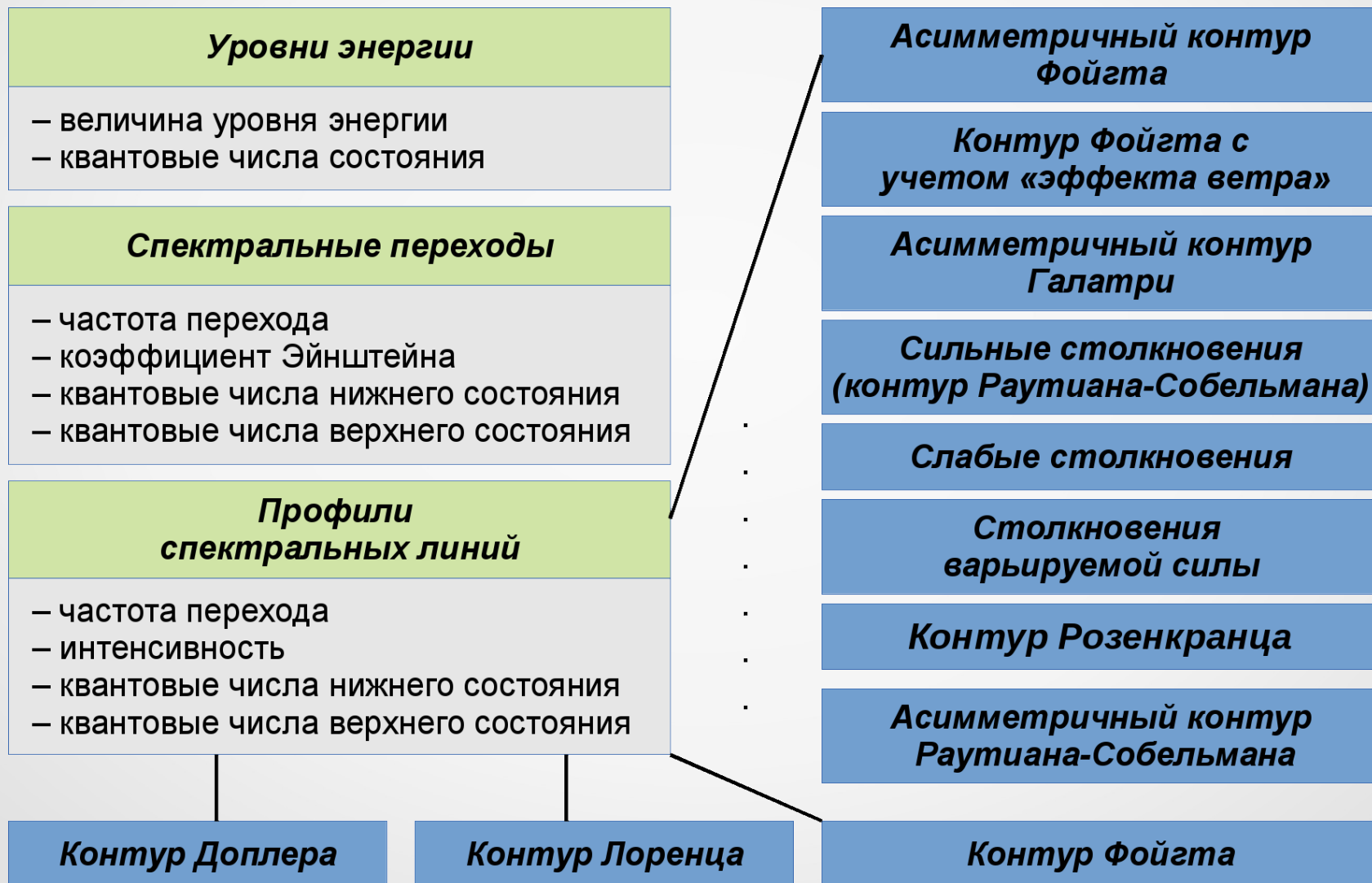
Применённый способ разработки программы




Некоторые свойства элементов данных в конфигурационном файле

- Место хранения, имя поля в таблице БД
- «Ключ» для словаря терминов отображаемых пользователю
- Допустимость использования элемента в условиях при выборке данных
- Тип условия (ограничение по диапазону или выбор значения из списка)
- Обязательный элемент или нет (можно ли исключать колонку с данными)
- Условие выборки формально правильных данных

Структура спектральных данных.



Веб-интерфейс. Выбор исходного набора данных.

 Унарные операции с наборами данных

Поиск источников информации

Выбор задачи: Уровни энергии Профили линий Переходы

Вещество:

Диапазон вакуумных частот (см⁻¹):

Слова для поиска источников данных по контексту, содержащемуся в аннотации или ссылке на публикацию. (Фамилии авторов публикаций, журнал, год публикации, слова из названий статьи)

40

Всего строк 171

| Выбор | Название <small>Вычисления/Эксперимент</small> | Число записей | Аннотация |
|-----------------------|---|---------------|---|
| <input type="radio"/> | 1962_BIPiBe_H2O | 2 | L. R. Blaine, E. K. Plyler, and W. S. Benedict, Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology, 1962, Volume 66A, Pages 223. |
| <input type="radio"/> | 1962_RaBrSiWi_H2O | 117 | K. NARAHARI RAO, W. W. BRIM, V. L. SINNETT, and RALPH H. WILSON, Wavelength Calibrations in the Infrared. IV. Use of a 1000-Lines-per-Inch Bausch and Lomb Plane Replica Grating, Journal of Optical Society of America, 1962, Volume 52, Issue 8, Pages 862-865, DOI: 10.1364/JOSA.52.000862, http://www.opticsinfobase.org/josa/abstract.cfm?URI=josa-52-8-862 . <input type="button" value="Annotation"/> |
| <input type="radio"/> | 1964_GaCaHaBe_H2O | 2 | D. M. Gates, R. F. Calfee, D. W. Hansen, and W. S. Benedict, Monograph 71, U.S., Natl. Bur. Std., 1964. |
| <input type="radio"/> | 1966_LiDeGa_H2O | 5 | M. Lichtenstein, V.E. Derr, J.J. Gallagher, Millimeter wave rotational transitions and the Stark effect of the water molecule, Journal of Molecular Spectroscopy, 1966, Volume 20, Issue 4, Pages 391-401, DOI: 10.1016/0022-2852(66)90010-5. <input type="button" value="Annotation"/> |

Веб-интерфейс. Формирование условия выборки.

Условия для унарных операций

2012_YuPeDrMa_H2O

Shanshan Yu, John C. Pearson, Brian J. Drouin, Marie-Aline Martin-Drumel, Olivier Pirali, Michel Vervloet, Laurent H. Coudert, Holger S.P. Muller, Sandra Brunken,
 Measurement and analysis of new terahertz and far-infrared spectra of high temperature water,
 Journal of Molecular Spectroscopy, 2012, Volume 279, Pages 16–25,
 DOI: 10.1016/j.jms.2012.07.011, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jms.2012.07.011>.

Annotation

Выбор ограничений

| Физические величины | Ограничения |
|---|---|
| Колебательная полоса | 0 2 0 - 0 2 0 ▾ |
| Полный угловой момент нижнего состояния $J_{\min} < J < J_{\max}$ | 1 <input type="text"/> 20 <input type="text"/> (1 - 26) |
| Вакуумные волновые числа $\omega_{\min} < \omega < \omega_{\max}$ | 400 <input type="text"/> <input type="text"/> (9.85717 - 687.61435) |
| Неопределенность вакуумных волновых чисел $\Delta\omega_{\min} < \Delta\omega < \Delta\omega_{\max}$ | <input type="text"/> <input type="text"/> (0.0008 - 0.02) |

Сохранить ограничение

Таблица ограничений

| Имя ограничения | Колебательная полоса | Полный угловой момент нижнего состояния (J) | Вакуумные волновые числа (ω) | Неопределенность вакуумных волновых чисел ($\Delta\omega$) |
|-----------------|----------------------|---|---------------------------------------|--|
| C0 | 0 0 0 0 1 0 | | | |
| C1 | 0 2 0 0 2 0 | 1 - 20 | 400 - | |

Очистить таблицу ограничений

Формирование условий и выполнение унарных операций

Условие: C0 OR C1

NOT OR AND BACK

Данные удовлетворяющие сформированному условию:

Выбрать Исклчить

C0
C1

Веб-интерфейс. Построчная выборка. Проекция. Сохранение.

| Показать 10 строк от 0 | | Всего строк 629 | | Настройки | |
|---|---------------------------------|---------------------------------------|--|--------------------------------------|--|
| исключить/оставить | Квантовые числа | Вакуумные волновые числа (ω) | Неопределенность вакуумных волновых чисел ($\Delta\omega$) | Выбранные колонки | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 7 2 5 0 2 0 7 5 2 | 401.14868 | 0.0008 | <input checked="" type="checkbox"/> | исключить/оставить |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 1 7 3 1 4 0 2 0 1 8 4 1 5 | 401.8306 | 0.0008 | <input checked="" type="checkbox"/> | Квантовые числа |
| <input type="checkbox"/> | 0 2 0 8 4 5 0 2 0 9 5 4 | 402.92637 | 0.0008 | <input checked="" type="checkbox"/> | Вакуумные волновые числа (ω) |
| <input type="checkbox"/> | 0 2 0 6 6 0 0 2 0 7 7 1 | 405.03481 | 0.0008 | <input checked="" type="checkbox"/> | Неопределенность вакуумных волновых чисел ($\Delta\omega$) |
| <input type="checkbox"/> | 0 2 0 7 5 3 0 2 0 8 6 2 | 406.54199 | 0.0008 | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 1 8 5 1 4 0 2 0 1 9 4 1 5 | 407.79716 | 0.0008 | <input type="button" value="Выбор"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 1 9 3 1 7 0 2 0 2 0 2 1 8 | 409.62144 | 0.0008 | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 2 0 1 1 9 0 2 0 2 1 2 2 0 | 409.69432 | 0.0008 | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 2 0 2 1 9 0 2 0 2 1 1 2 0 | 409.80903 | 0.0008 | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 0 2 0 1 9 2 1 7 0 2 0 2 0 3 1 8 | 410.08299 | 0.0008 | | |
| Показать 10 строк от 0 | | Всего строк 629 | | Настройки | |
| Сохранение источника данных в ИС с учётом выбранных колонок и строк. | | | | | |
| Название сохраняемого источника данных: | | | | | |
| <input type="text" value="NewSet from 2012_YuPeDrMa_H2O"/> | | | | | |
| <input type="button" value="Сохранить созданный источник данных в ИС"/> | | | | | |



Благодарю за внимание