

Визуализация парных отношений источников данных в количественной спектроскопии

З.В. Апанович¹, П.С. Винокуров¹, А.Ю.Ахлестин², А.И. Привезенцев², А.З.Фазлиев²

¹Институт систем информатики СО РАН,

² Институт оптики атмосферы СО РАН

apanovich@iis.nsk.su, lexa@iao.ru, remake@iao.ru, faz@iao.ru

Аннотация

В работе рассмотрено табличное и графическое представление индивидов, характеризующих бинарные отношения между источниками данных в фактологической части онтологии информационных ресурсов по молекулярной спектроскопии.

1. Введение

Построение онтологий предметных областей в рамках подхода Semantic Web предоставляет пользователю возможность передачи знаний в явном виде и автоматической проверки согласованности логической теории предметной области, представляемой ими. Как следствие, онтологическое представление знаний облегчает автоматическую интеграцию информационных ресурсов. Недостаточная развитость инструментария, позволяющего проводить анализ фактологической части онтологий, до сих пор заставляет пользователей проводить его вручную. Чаще всего подобный анализ необходим для понимания качественного состояния предметной области, например, качества данных или полноты и непротиворечивости экспертных массивов данных.

При работе пользователя с онтологиями важным является визуализация индивидов [1], входящих в нее. В работе рассмотрена задача визуализации парных отношений индивидов, входящих в онтологию информационных ресурсов по молекулярной спектроскопии.

Описание предметной области «Молекулярная спектроскопия», структур данных и метаданных в ней и построение индивидов и классов ее онтологии дано в работах [2,3]. При работе с индивидами онтологии существует задача качественной и количественной оценки индивидов, характеризующих парные отношения. Как правило, они используются при анализе информационных ресурсов для определения качества данных, содержащихся в них.

Структура предметной области такова, что информационные ресурсы, извлеченные из публика-

ций, отнесены к одной их молекул. Это отнесение позволяет вычислять значения парных отношений, хранящиеся как в базе данных, так и в онтологии информационных ресурсов.

В силу того, что спектральные свойства молекул изучены для разных молекул неравномерно (т.е. для одних молекул достаточно подробно, а для других только фрагментарно), визуализация значений свойств парных отношений требует разных подходов. Для одних молекул, таких как сероводород или фосфин, достаточно ограничиться табличным представлением, а для других, таких как вода или диоксид углерода, приходится использовать графическое представление.

Есть две причины использования графического представления для анализа однотипных парных отношений в молекулярной спектроскопии. Во-первых, для ряда молекул число источников информации превышает сотню. В этом случае предоставляемая в табличном виде матрица становится визуально необозримой. Во-вторых, даже для слабо изученных молекул публикации содержат десятки идентичных колебательных полос и их представление в виде таблицы требует использования многомерных матриц, что в значительной мере осложняет анализ качества данных.

В работе рассмотрены как табличное, так и графическое представление парных отношений на примере молекул фосфина, сероводорода и воды.

2. Предметная область «Молекулярная спектроскопия»

Построенная в [3] онтология информационных ресурсов по молекулярной спектроскопии основана на модели предметной области, показанной на рис.1. Фактологическую основу этой модели представляют решения шести задач молекулярной спектроскопии, которые наиболее часто используются в прикладных задачах. В работе рассматриваются только опубликованные решения задач. Эти решения разбиты на части каждая из которых содержит опубликованное решение, относящееся к одной публикации, одной молекуле, одной спектральной задаче и методу ее решения.

Такая часть называется источником данных. Свойства решения, аккумулированного в источнике данных, называются источником информации. В

рассматриваемой модели предметной области источник информации представляется некоторыми индивидами онтологии информационных ресурсов молекулярной спектроскопии.

Число индивидуальных свойств источника данных, т.е. свойств, независимых от других источников данных, постоянно и не меняется во времени, вследствие факта опубликования. Число свойств,

характеризующих парные отношения, изменяется по мере появления новых источников данных. Оценка непротиворечивости спектральных данных по ряду критериев может меняться по мере совершенствования измерительной аппаратуры и, следовательно, требуется постоянный анализ качества фактов (в том, числе проверка их непротиворечивости).

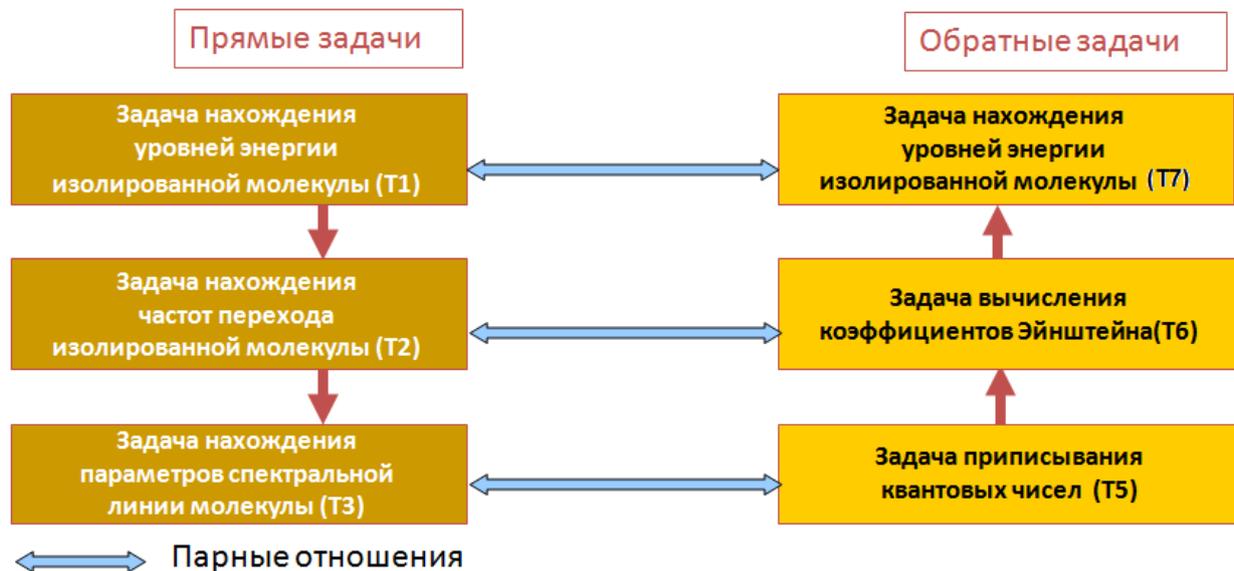


Рис.1. Иерархия задач предметной области «Молекулярная спектроскопия».

Ниже рассмотрены три типа парных отношений: максимальная разность вакуумных волновых чисел среди всех пар идентичных переходов сравнимых источников данных, среднеквадратические отклонения по отдельной колебательной полосе или по всем идентичным колебательным полосам и характеристики разупорядочения источников данных.

В работе рассмотрены примеры относящиеся к двум задачам (Т1 и Т6) представленным на рис.1.

3. Парные отношения в количественной спектроскопии

Значительную долю данных, связанных с решениями задач количественной спектроскопии, занимают значения некоторых бинарных отношений между источниками данных. Здесь рассмотрены только три вида бинарных отношений, связанных с максимальной разностью вакуумных волновых чисел, среднеквадратическими отклонениями решений задач спектроскопии (на примере задач Т2 и Т6) и сравнением упорядочений квантовых чисел по связанным с ними значениями волновых чисел.

3.1. Максимальное значение разности вакуумных волновых чисел идентичных переходов

Решения задач Т2 и Т6 представляют собой списки переходов. Каждый переход описывается волновыми числами, квантовыми числами и, реже, коэффициентом Эйнштейна. Идентификатором, одно-

значно характеризующим переход, являются квантовые числа. Различия в значениях волнового числа для идентичных переходов могут быть обусловлены, с одной стороны, точностью измерений, а, с другой стороны, некорректным приписыванием квантовых чисел. Современные типовые измерения положений центров линий в инфракрасном диапазоне проводятся с точностью до 0.001 см⁻¹. Некорректное приписывание может давать ошибки существенно превосходящие величину ошибки измерений. Мы полагаем, что значения разности волновых чисел, превышающие 0.05 см⁻¹, как правило, всегда указывают на некорректное отнесение. Следовательно, данное отношение позволяет выделять наиболее грубые ошибки в приписывании квантовых чисел.

3.2. Среднеквадратическое отклонение

В спектроскопии используется среднеквадратическое отклонение для сравнения разницы между двумя измерениями, ни одно из которых нельзя считать «эталонном». При разных измерениях два списка переходов можно представить в виде векторов

$$A_1=(x_{qn1}^1, x_{qn2}^1, \dots, x_{qnm}^1) \text{ и } A_2=(x_{qn1}^2, x_{qn2}^2, \dots, x_{qnm}^2),$$

где x_{qnj}^i — значения волновых чисел, а qnj — соответствующие им квантовые числа, — число идентичных переходов. В этом случае формула для стандартного отклонения имеет вид:

$$RMSD(A_1, A_2)=(\sum_{i=qn1}^{qnm}(x_{i-}^1 - x_{i-}^2)/m)^{1/2}. \quad (1)$$

В некоторых представлениях квантовые числа можно разбить на две группы. Одна группа называется колебательными квантовыми числами, а другая – колебательно-вращательными квантовыми числами. Ниже такое разделение представлено в виде

$$qn=(qn_{vib}, qn_{v-r}).$$

При описании переходов вводят понятие «колебательная полоса спектральных линий» которому соответствует набор спектральных линий с разными наборами колебательно-вращательных квантовых чисел, но с фиксированными значениями колебательных квантовых чисел. В количественной спектроскопии часто используют формулу для расчета, в которой среднее квадратическое значение рассчитывается для каждой колебательной полосы. В этом случае в формуле (1) суммирование ведется только по колебательно-вращательным квантовым числам выбранной полосы. Для описания такого отклонения используется термин «отклонением по отдельной колебательной полосе» и такое отклонение определяется формулой

$$RMSD(A_1(qn_{vib}, qn_{v-r}), A_2(qn_{vib}, qn_{v-r})) (qn_{vib}=\text{const}) = (\sum_{i=a}^b (x_i^1 - x_i^2)/k)^{1/2}. \quad (2)$$

В формуле (2) a является минимальным значением колебательно-вращательной части квантовых чисел, b – максимальным значением, k представляет число колебательно-вращательных квантовых чисел содержащихся в наборе квантовых чисел qn с фиксированным значением $qn_{vib}=\text{const}$. Введенное выше стандартное отклонение, заданное формулой (1) будем называть отклонением по всем полосам или интегральным среднее квадратическим отклонением.

3.3. Сравнение упорядочений

При анализе решений задач спектроскопии можно добиться требуемой малости значений разности волновых чисел идентичных переходов и требуемых значений среднее квадратических отклонений. Однако этого бывает недостаточно для согласования решений задач спектроскопии (T_2 и T_6).

Пусть есть два набора A_1 и A_2 вакуумных волновых чисел и соответствующих им квантовых чисел. При этом положим, что каждому набору квантовых чисел qn_i соответствует тождественный ему набор квантовых чисел qn_j , другими словами в наборах A_1 и A_2 существуют попарно идентичные переходы. Упорядочим последовательности значений вакуумных волновых чисел по возрастанию. Припишем порядок возрастания, относящийся к волновым числам, к квантовым числам. В общем случае порядок следования квантовых чисел в двух наборах может быть различным. Например, сравнение двух экспертных массивов [4-6] показывает, что он нарушается для более 700 переходов в случае молекулы воды. Заметим, что эти массивы имеют более тридцати тысяч идентичных переходов.

Количественная оценка разупорядочения может определяться разными способами. В данной работе

при описании табличного отображения разупорядочения используется следующий алгоритм. Фиксируется порядок в одном из массивов и вычисляется число перестановок N_{disorder} , после которых оба упорядочения квантовых чисел становятся одинаковыми.

4. Визуализация данных и онтологий

Импорт источников данных в информационную систему по спектроскопии сопровождается автоматической генерацией значений свойств этих данных и формированием прикладных онтологий. Значения этих свойств хранятся в реляционной базе данных в соответствующих таблицах. Наряду с этими свойствами там же хранятся высказывания прикладных онтологий в форме триад. Пользователям прикладные онтологии доступны в XML/RDF представлении (см., например, для изотопологов молекул воды и сероводорода [7]).

В зависимости от молекулы число высказываний в онтологии меняется в широких пределах. Так, например, для молекул воды и диоксида углерода их число превышает 10^6 , тогда как для молекул сероводорода (H_2S) [8] или фосфина (PH_3) [9] всего лишь несколько тысяч.

Для количественного анализа данных, относящихся к парным отношениям между импортированными источниками данных, можно применять табличное представление. Подобное представление показано на рис. 1 и 2. Оно удобно при детальном анализе качества данных и на этапе выбраковки некачественных данных. Однако такое представление требует значительного времени для анализа. Более того, табличное представление среднее квадратических отклонений по отдельным полосам является громоздким и необозримым.

Качественное понимание непротиворечивости решений задач спектроскопии существенно проще достичь при визуализации парных отношений между источниками данных в форме направленных графов, цвет и толщина ребер которых позволяет качественно оценивать уровень согласования данных, относящихся к сотне пар источников данных. Примеры таких графов приведены на рис. 4, 5 и 7.

4.1. Табличное представление данных

На приведенных ниже рис.2 и 3 дано табличное представление значений бинарных отношений между всеми экспериментальными источниками данных, связанных с выбранной молекулой.

Рис. 2 относится к молекуле фосфина и содержит количественные характеристики соответствующих бинарных отношений. Качественное представление бинарных отношений, связанных с данными по молекуле воды ($H_2^{17}O$) [10], показано на рис.3, где темные ячейки таблицы (оранжевого цвета) определяют не соответствующие ограничениям значения, а не окрашенные ячейки означают отсутствие идентичных переходов в сравниваемых источниках данных.

Переходы. Представление парных отношений источников данных

Задайте параметры представления

Вещество:

Выделить результаты больше:

Типы источников данных:

- Эксперимент
- Экспертный источник
- Частично первичный источник
- Референтные переходы

Вид отображения:

- Таблица
- Цветная карта
- Прямоугольная (с двух сторон)

Тип отображаемых данных:

- Максимальное значение разности вакуумных волновых чисел идентичных переходов
- Среднеквадратическое отклонение
- Результаты сравнения упорядочений

Создать / обновить таблицу

Скрыть выбранные строки | Показать все данные | 8 скрытых источников.

Источники данных	#1	#2	#3	#4	#7	#8	#9	#12	#13	#15	#17	#19
1973_ChOk_PH3 #1			3.00e-5/14									#1
1973_MaSaOl_PH3 #2												9.45e-2/8 #2
1974_ChOk_PH3 #3	3.00e-5/14											#3
1974_YiRa_PH3 #4					7.69e-1/290	1.30e-2/7	1.84e-1/148	1.38e+2/23	2.97e-1/19	1.84e-1/20	5.84e-1/252	#4
1981-TaDaGo_PH3 #7				7.69e-1/290	0/11	0/11	9.46e-2/230	1.38e+2/139	2.68e-1/60	9.16e+0/67	2.00e+0/921	#7
1983_Rutt_PH3 #8				1.30e-2/7	0/11		8.39e-3/5	7.00e-3/2			2.67e-2/10	#8
1985_PrPaKaBe_PH3 #9				1.84e-1/148	9.46e-2/230	8.39e-3/5		1.38e+2/6	3.89e-3/16	1.40e-2/22	8.06e-2/186	#9
1989_PaBiMaJo_PH3 #12				1.38e+2/23	1.38e+2/139	7.00e-3/2	1.38e+2/6		2.70e-1/7	6.17e-4/3	1.38e+2/113	#12
1991_KsSiCuJo_PH3 #13				2.97e-1/19	2.68e-1/60		3.89e-3/16	2.70e-1/7		2.41e-4/3	2.69e-1/43	#13
1996_AiHaSpKr_PH3 #15				1.84e-1/20	9.16e+0/67		1.40e-2/22	6.17e-4/3	2.41e-4/3		9.20e+0/50	#15
2002_BrSaKlCo_PH3 #17				5.84e-1/252	2.00e+0/921	2.67e-2/10	8.06e-2/186	1.38e+2/113	2.69e-1/43	9.20e+0/50		#17
2007_Kshirsag_PH3 #19		9.45e-2/8										#19

Источники данных

Источники данных	#1	#2	#3	#4	#7	#8	#9	#12	#13	#15	#17	#19
1973_ChOk_PH3 #1			2.54e-5/14									#1
1973_MaSaOl_PH3 #2												3.38e-2/8 #2
1974_ChOk_PH3 #3	2.54e-5/14											#3
1974_YiRa_PH3 #4					8.56e-2/290	6.48e-3/7	3.58e-2/148	2.88e+1/23	7.88e-2/19	5.85e-2/20	6.33e-2/252	#4
1981-TaDaGo_PH3 #7				8.56e-2/290	0/11	0/11	1.51e-2/230	1.17e+1/139	4.19e-2/60	1.12e+0/67	7.02e-2/921	#7
1983_Rutt_PH3 #8				6.48e-3/7	0/11		6.05e-3/5	5.44e-3/2			1.07e-2/10	#8
1985_PrPaKaBe_PH3 #9				3.58e-2/148	1.51e-2/230	6.05e-3/5		5.64e+1/6	1.57e-3/16	3.23e-3/22	1.19e-2/186	#9
1989_PaBiMaJo_PH3 #12				2.88e+1/23	1.17e+1/139	5.44e-3/2	5.64e+1/6		1.23e-1/7	3.85e-4/3	1.30e+1/113	#12
1991_KsSiCuJo_PH3 #13				7.88e-2/19	4.19e-2/60		1.57e-3/16	1.23e-1/7		1.86e-4/3	4.56e-2/43	#13
1996_AiHaSpKr_PH3 #15				5.85e-2/20	1.12e+0/67		3.23e-3/22	3.85e-4/3	1.86e-4/3		1.30e+0/50	#15
2002_BrSaKlCo_PH3 #17				6.33e-2/252	7.02e-2/921	1.07e-2/10	1.19e-2/186	1.30e+1/113	4.56e-2/43	1.30e+0/50		#17
2007_Kshirsag_PH3 #19		3.38e-2/8										#19

Источники данных

Источники данных	#1	#2	#3	#4	#7	#8	#9	#12	#13	#15	#17	#19
1973_ChOk_PH3 #1			0/14									#1
1973_MaSaOl_PH3 #2												0/8 #2
1974_ChOk_PH3 #3	0/14											#3
1974_YiRa_PH3 #4					3/290	0/7	11/148	19/23	3/19	0/20	4/252	#4
1981-TaDaGo_PH3 #7				3/290		0/11	15/230	118/139	0/60	9/67	3/921	#7
1983_Rutt_PH3 #8				0/7	0/11		0/5	0/2			0/10	#8
1985_PrPaKaBe_PH3 #9				11/148	15/230	0/5		3/6	0/16	0/22	7/186	#9
1989_PaBiMaJo_PH3 #12				19/23	118/139	0/2	3/6		0/7	0/3	97/113	#12
1991_KsSiCuJo_PH3 #13				3/19	0/60		0/16	0/7		0/3	0/43	#13
1996_AiHaSpKr_PH3 #15				0/20	9/67		0/22	0/3	0/3		9/50	#15
2002_BrSaKlCo_PH3 #17				4/252	3/921	0/10	7/186	97/113	0/43	9/50		#17
2007_Kshirsag_PH3 #19		0/8										#19

Источники данных

Рис.2. Значения свойств, характеризующих пары первичных экспериментальных источников данных по молекуле фосфина. А) Максимальное значение разности вакуумных волновых чисел идентичных переходов, Б) Среднеквадратическое отклонение, В) Результаты сравнения упорядочений.

На рис.2 приводятся результаты значений бинарных отношений 21 источника данных. Только 12 источников данных содержат переходы для которых можно найти идентичные, хотя бы в одном из оставшихся 11 источников. В таблице приведены аббревиатуры публикаций, и в соответствующей ячейке таблицы приведено отношение двух чисел. Числитель отношения указывает значение бинарного отношения, а знаменатель – число идентичных переходов в этих источниках данных. Источники данных, не содержащие идентичных переходов с другими публикациями, в таблице не приведены. Светлая ячейка таблицы (розовый цвет), содержащая отношение, означает, что соответствие между идентичными переходами удовлетворяет заданному критерию, а темное (оранжевый цвет) – не удовлетворяет критерию.

Из анализа таблиц на рис. 2 следует, что сравниваемые данные могут удовлетворять одним критериям, но не удовлетворять другим. В таблицах в явном виде указаны количественные значения парных отношений. При числе источников данных, превышающем сотню, представление таблиц становится неэффективным, т.к. отсутствует возможность просмотра данных на экране монитора.

Для решения некоторых задач анализа качества данных можно ограничиться качественным просмотром данных, приведенных в таблице. В этом случае из таблиц удаляются количественные характеристики, и вводят цветное разделение на пары, удовлетворяющие количественным критериям и неудовлетворяющие им. Представленная на рис.3 таблица содержит достаточно большое число несогласованных вакуумных волновых чисел в источниках данных.

4.2. Графическое представление данных

В приведенных ниже примерах выбраны следующие ограничения на значения максимального отклонения волновых чисел ($|\omega_1 - \omega_2| < 0.01 \text{ см}^{-1}$) и интегрального среднеквадратического значения ($\text{RMSD} < 0.05$), при выполнении которых решения задач считаются согласованными.

На рис.4. представлены эти два типа парных отношений для 50 источников данных (как экспертных, так и первичных (экспериментальных и расчетных)) по молекуле H_2^{17}O [12]. Название круга соответствует идентификатору источника данных. Первые 4 цифры указывают на год публикации, а

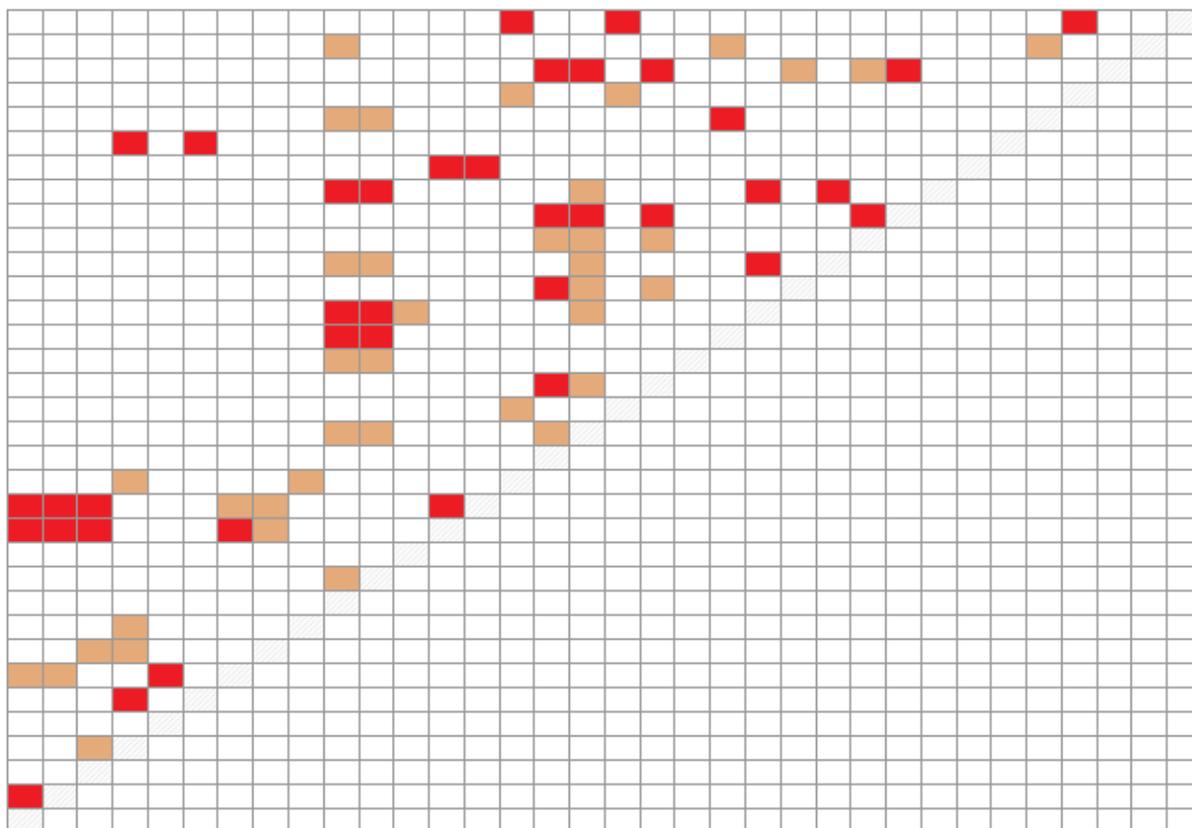


Рис.3. Цветная карта для анализа максимальных разностей волновых чисел идентичных переходов для первичных экспериментальных источников информации по молекуле H_2^{17}O . (Обозначения: ■ — максимальная разность волновых чисел меньше 0.01 см^{-1} , ■ — максимальная разность волновых чисел больше 0.01 см^{-1}).

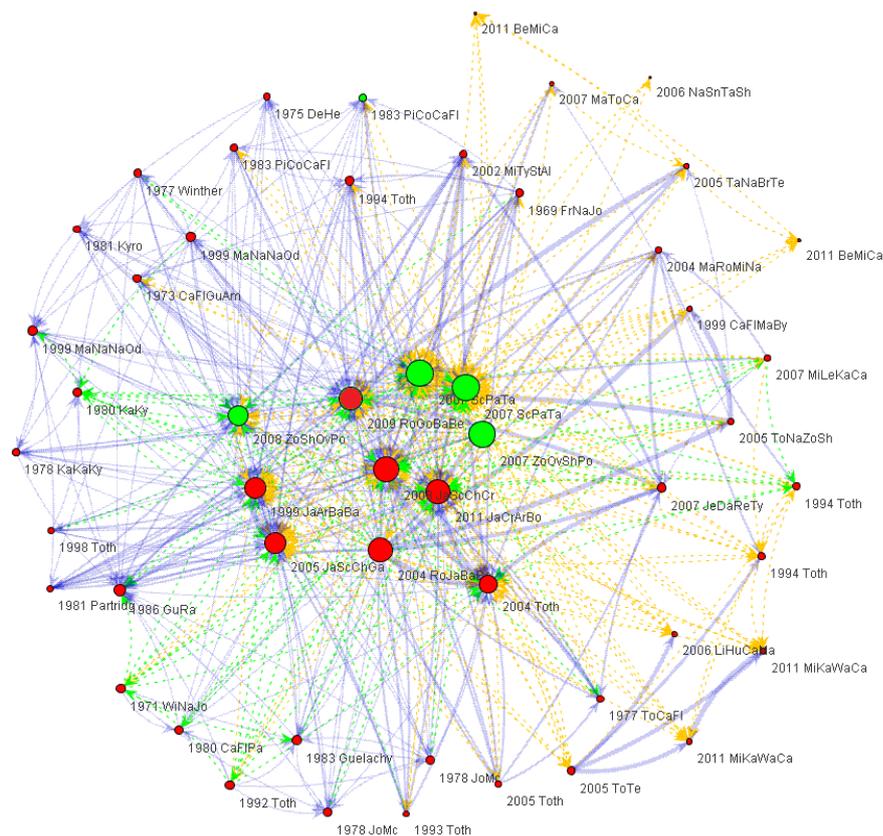


Рис.4. Визуализация двух типов бинарных отношений между источниками данных об изотопологе воды $H_2^{17}O$.

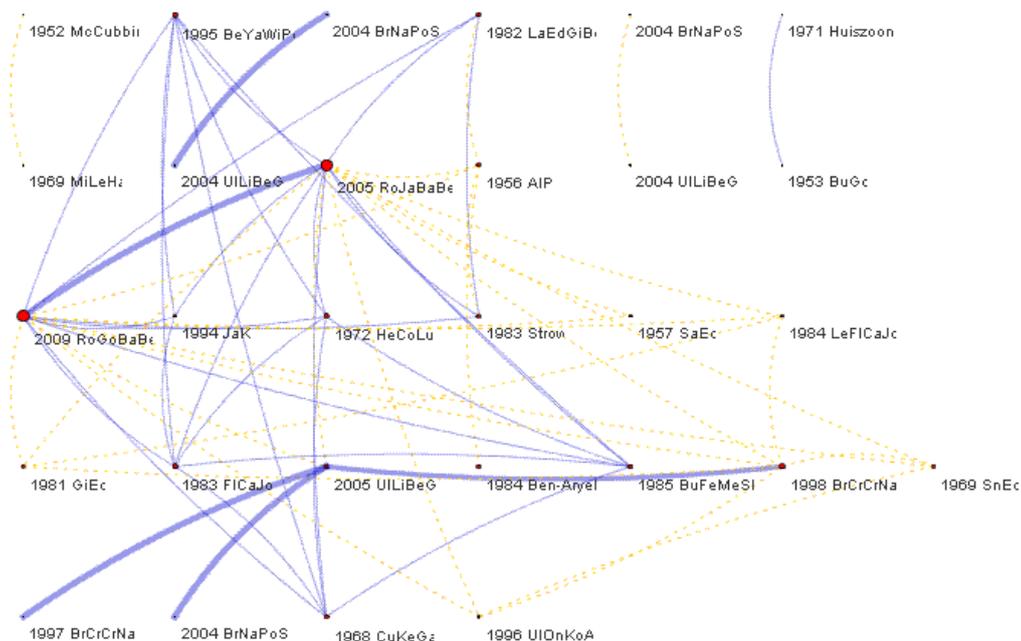


Рис.5. Интегральные среднеквадратические отклонения для основного изотополога молекулы H_2S . Пунктир соответствует плохому соответствию. Сплошная линия соответствует хорошему соответствию. Толстая сплошная линия соответствует хорошему соответствию критерию отклонений по отдельным полосам.

следующие за ними буквы взяты из первых двух букв фамилий четырех авторов соответствующей публикации. Площадь круга, соответствующего источнику данных пропорциональна числу источников данных, с которым выбраный источник данных имеет идентичные переходы. Как правило, такими источниками являются источники, содержащие значительное число данных (экспертные или расчетные источники). Именно эти источники данных содержат наибольшее число рассогласованных по значению волновых чисел переходов. Красным цветом помечены экспертные и первичные экспериментальные источники данных, а зеленым – источники с расчетными данными.

Сплошные синие дуги указывают на то, что все данные пары источников согласованы. Пунктирные линии указывают на рассогласование источников данных (желтый цвет – соответствует рассогласованию по интегральному среднеквадратическому отклонению, а зеленый цвет – рассогласованию по интегральному среднеквадратическому отклонению и максимальному значению разности волновых чисел).

Как следует из рисунка, экспериментальные первичные источники данных согласуются хорошо. Это обстоятельство можно объяснить тем фактом, что в базе данных были сделаны исключения несогласованных данных в соответствии с публикацией [10]. Значительно хуже обстоят дела с согласованием экспертных и расчетных данных. Проверки показали, что экспертные данные содержат значительное число устаревших данных [12]. Проблемы рассогласования расчетных данных с экспериментальными обусловлены некорректными отнесениями квантовых чисел. Стоит отметить, что появившиеся в 2011 году работы [13,14], уточняющие расчетные данные, значительно расходятся как с расчетными данными, так и данными экспертных данных.

На рис. 5 показана ситуация с источниками данных по молекуле сероводорода. Сплошные дуги

указывают на малые значения среднеквадратических отклонений. Пунктирные дуги - на значения превышающие 0.05. Экспертные массивы (красные круги) [4,6] не включают ряд старых и новых опубликованных данных. Рисунок демонстрирует недостаточное хорошее качество данных экспертных массивов. Более того, экспертные данные практически не соответствуют почти всем экспериментальным данным, с которыми они имеют идентичные переходы.

Подтверждение сделанных выводов можно найти в публикации [8]. В частности на рис. 6, взятом из этой публикации, показано, насколько меньше данных содержится в последней версии экспертного массива HITRAN по сравнению с опубликованными данными, размещенными в ИВС W@DIS [11]. Рис.5 в полной мере характеризует факт отсутствия идентичных переходов в экспертных массивах данных демонстрирует отсутствие идентичных переходов с публикациями [15-18], содержащими значительный объем данных, опубликованный в последние годы.

Рис.7 иллюстрирует наиболее сложную ситуацию, возникающую при сравнении значений среднеквадратических отклонений по отдельным полосам. На этом рисунке отображены среднеквадратические отклонения по всем отдельным колебательным полосам основного изотополога молекулы воды ($H_2^{16}O$).

Представленный на рис.7 граф содержит в себе парные отношения между всеми опубликованными данными по основному изотопологу молекулы воды (экспериментальные, расчетные и экспертные) [19]. Состояние информационных ресурсов, отображаемых графом, соответствует ситуации в которой в ИВС внесены экспертные поправки для публикаций до 1990 года. Как следует из рис.7 основные расхождения связаны с периодом времени с 1991 по настоящее время.

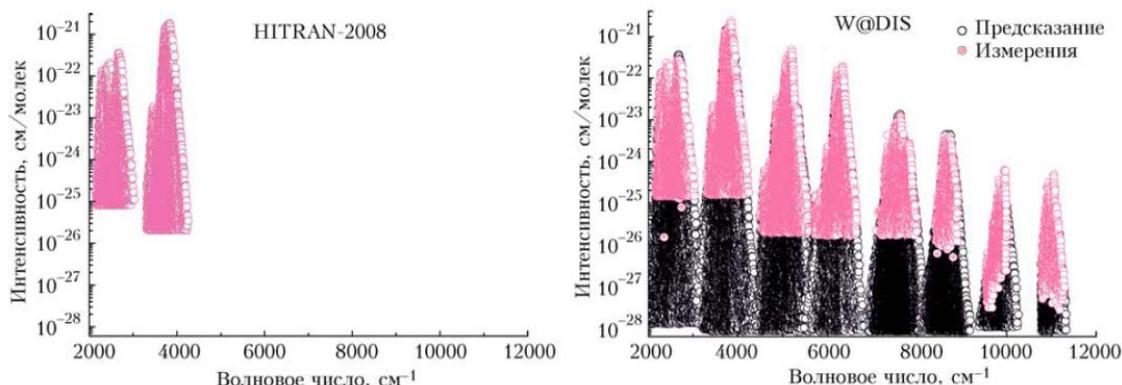


Рис. 6. Качественное сравнение объемов данных содержащихся в [4] и [8].

- библиотеки. 2011. т. 14. в.2. URL: <http://elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2011/part2>.
- [3] Привезенцев А.И., Царьков Д.В., Фазлиев А.З. Базы знаний для описания информационных ресурсов в молекулярной спектроскопии 3. Базовая и прикладная онтологии [Электронный ресурс]. // Электронные библиотеки. 2012. т.15. в.2. URL: <http://elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2012/part2>
- [4] The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database / L.S. Rothman, et al. // *J. of Quant. Spectrosc. & Rad.Transfer.* 2009. v.110. 9. p. 533-572.
- [5] The GEISA spectroscopic database: Current and future archive for Earth and planetary atmosphere studies / N. Jacquinet-Husson, et al. // *J. of Quant. Spectrosc. & Rad.Transfer.* 2008. v. 109. No.6. p.1043-1059.
- [6] The HITRAN 2004 Molecular Spectroscopic Database / L.S. Rothman, et al. // *J. of Quant. Spectrosc. & Rad.Transfer.* 2005. v. 96. No. 2. p. 139-204.
- [7] Онтология информационных ресурсов по спектроскопии. [Электронный ресурс]. — URL: <http://wadis.saga.iao.ru/saga2/ontology/>.
- [8] Information System for Molecular Spectroscopy. 5. Ro-vibrational Transitions and Energy Levels of the Hydrogen Sulfide Molecule / E. R. Polovtseva, et al. *Atmospheric and Oceanic Optics.* 2012. v. 25, No. 2. p. 157–165.
- [9] Systematization of published data on phosphine molecule isotopologues / S.S. Voronina, et al. // Abstracts of reports of XVII Symp. on High Resolution Mol. Spectr. Tomsk. 2012. p.138.
- [10] IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part I. Energy Levels and Transition Wavenumbers for H₂¹⁷O and H₂¹⁸O / J. Tennyson, et al. // *J. of Quant. Spectrosc. & Rad.Transfer.* 2009. v.110. no.9-10. p.573-596.
- [11] Информационная система W@DIS. [Электронный ресурс] – URL: <http://wadis.saga.iao.ru>.
- [12] Сравнение спектральных массивов данных HITRAN и GEISA с учетом ограничения на опубликование спектральных данных / Н.А.Лаврентьев, М.М.Макогон, А.З. Фазлиев // *Оптика атм. и океана*, 2011. т.24. №4. с.279-292.
- [13] The absorption spectrum of water between 13540 and 14070 cm⁻¹: ICLAS detection of weak lines and a complete line list / S. Béguier, S. Mikhailenko, A. Campargue // *Journal of Molecular Spectroscopy.* 2011. v. 265. Issue 2. p. 106-109.
- [14] The absorption spectrum of water in the 1.25 μm transparency window (7408–7920 cm⁻¹) / S. Mikhailenko, et al. // *Journal of Molecular Spectroscopy.* 2011. v. 269. Issue 1. p. 92-103.
- [15] First hexad of interacting states of H₂S molecule / L. R. Brown, et al. // *Proc. of SPIE 12th Symposium and School on High-Resolution Molecular Spectroscopy*, 1 July 1996, Volume 3090, Editor(s) Leonid N. Sinitsa, Yurii N. Ponomarev, Valery I. Perevalov, St. Petersburg, Russia, SPIE - The international society for optical engineering, 1997. p. 111-113.
- [16] Hydrogen sulfide absorption spectrum in the 8400 - 8900 cm⁻¹ spectral region / L. R. Brown, et al. // *Proc. of SPIE Eleventh International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics/Atmospheric Physics*, July 2004, Tomsk, Volume 5743, Editor(s) Gennadii G. Matvienko, Vladimir P. Lukin, SPIE - The international society for optical engineering. 2004. p. 1-7.
- [17] Hydrogen sulfide absorption spectrum in the 5700-6600 cm⁻¹ spectral region / L.R. Brown, et al. // *Proceedings of SPIE 14th Symposium on High-Resolution Molecular Spectroscopy*, v.5311., Editor(s) L.N. Sinitsa, S.N. Mikhailenko, Krasnoyarsk, Russia, SPIE - The international society for optical engineering. 2004. p. 59.
- [18] On the study of high-resolution rovibrational spectrum of H₂S in the region of 7300–7900 cm⁻¹ / O.N. Ulenikov, et al. // *Journal of Molecular Spectroscopy.* 2004. v. 226. Issue 1. p. 57-70.
- [19] IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part III. Energy Levels and Transition Wavenumbers for H₂¹⁶O / J. Tennyson, et al. // *J. of Quant. Spectrosc. & Rad.Transfer.* 2012. (in press).
- [20] Проверка целостности данных в Виртуальном центре атомарных и молекулярных данных / А.И. Привезенцев, и др. // *Материалы 9 Российской конференции «Новые информационные технологии в исследовании сложных структур»*. Томск. Из-во НТЛ. 2012. 120с. с.44.
- [21] Virtual atomic and molecular data centre / Dubernet M.L., et al. // *J. Quant. Spectros. Rad. Transfer.* 2010. v. 111. p. 2151–2159.

Visualization of binary relations of data sources in quantitative spectroscopy

Z. Apanovich, P. Vinokurov, A. Akhlyostin,
A. Privezetsev, A. Fazliev

Tabular and graphic representation of individuals characterizing binary relations between data sources in A-box of an ontology of information sources on molecular spectroscopy is studied in this work.