

**Опыт решения информационных задач в
количественной спектроскопии в
рамках подхода *Semantic Web*.
Анализ информационных ресурсов**

Фазлиев А.З.



Институт оптики атмосферы СО РАН, пл. В.Е.Зуева 1, Томск



Содержание

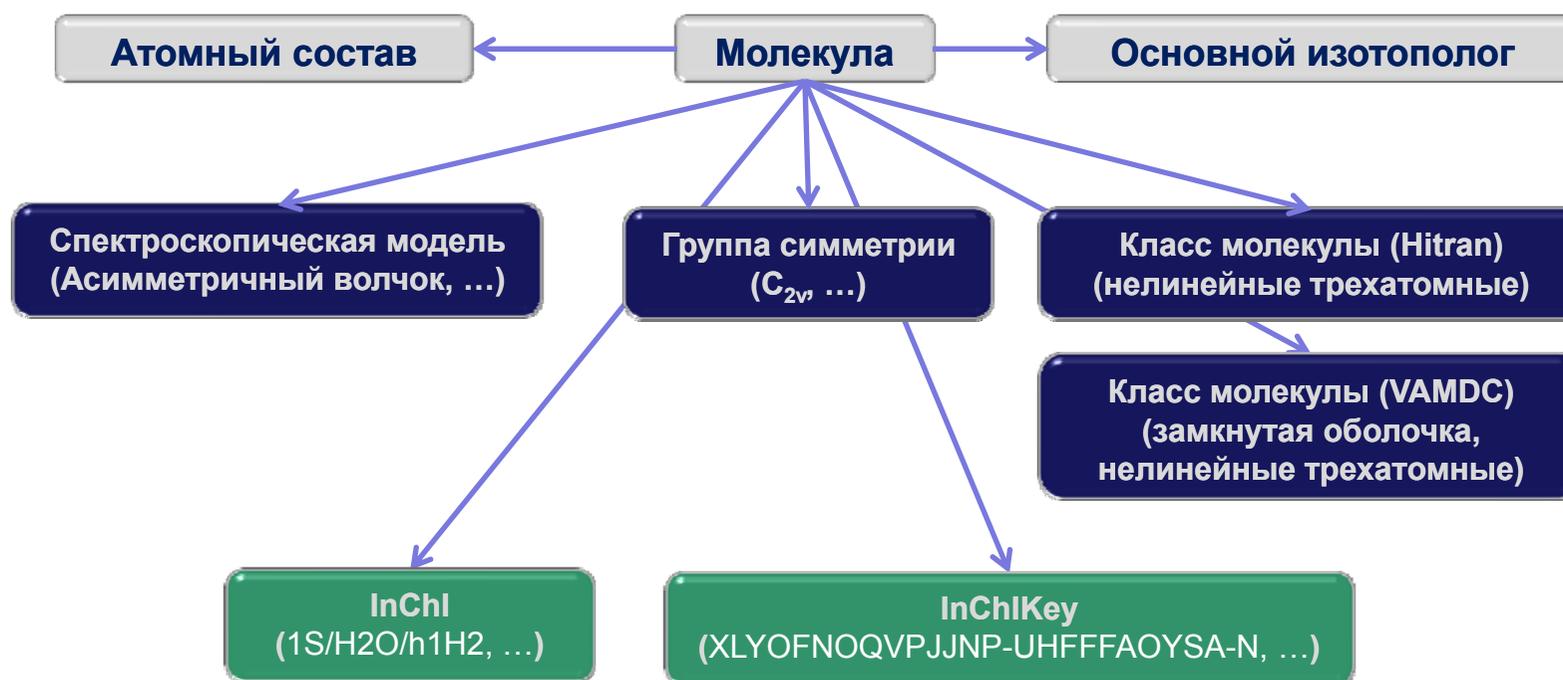
1. Введение. Основная задача Semantic Web
2. Обзор предметных областей. Вещество, количественная спектроскопия, информационные объекты
3. Качество данных. Доверие и достоверность
4. Проверка достоверности. Статистика
5. Онтологическое представление проверки достоверности
 - Структуры индивидов
 - Примеры определения классов
6. Оценка доверия. Стадии жизненного цикла экспертных данных
7. Критерий опубликования и задача декомпозиции
8. Результаты декомпозиции
9. Онтологическое представление оценки доверия
 - Структура индивида
 - Пример определения класса
 - Модульность онтологии
10. Электронная библиотека публикаций
11. Заключение

Почему нужно цифровое сохранение?

- 1. Физическое сохранение (передача данных в системы хранения** (файловые системы, кодировки, относительные ссылки, защита от копирования и т.д.), обеспечение резервирования, доступ, безопасность, обнаружение ошибок, восстановление,....)
- 2. Логическое сохранение** (специальные средства для доступа (для файлов программы, для программ операционные системы (ОС), для ОС аппаратное обеспечение))
- 3. Семантический слой: информационный объект** (Как интерпретировать данные (информацию, знания) в объектах? Изменения терминов, изменение понятий, модификации устройств, источники изменений, контекст объектов и т.д.). Аутентичность и интерпретация. Корректная интерпретация и понимание через длительный период времени.
 - Роль *Semantic Web*

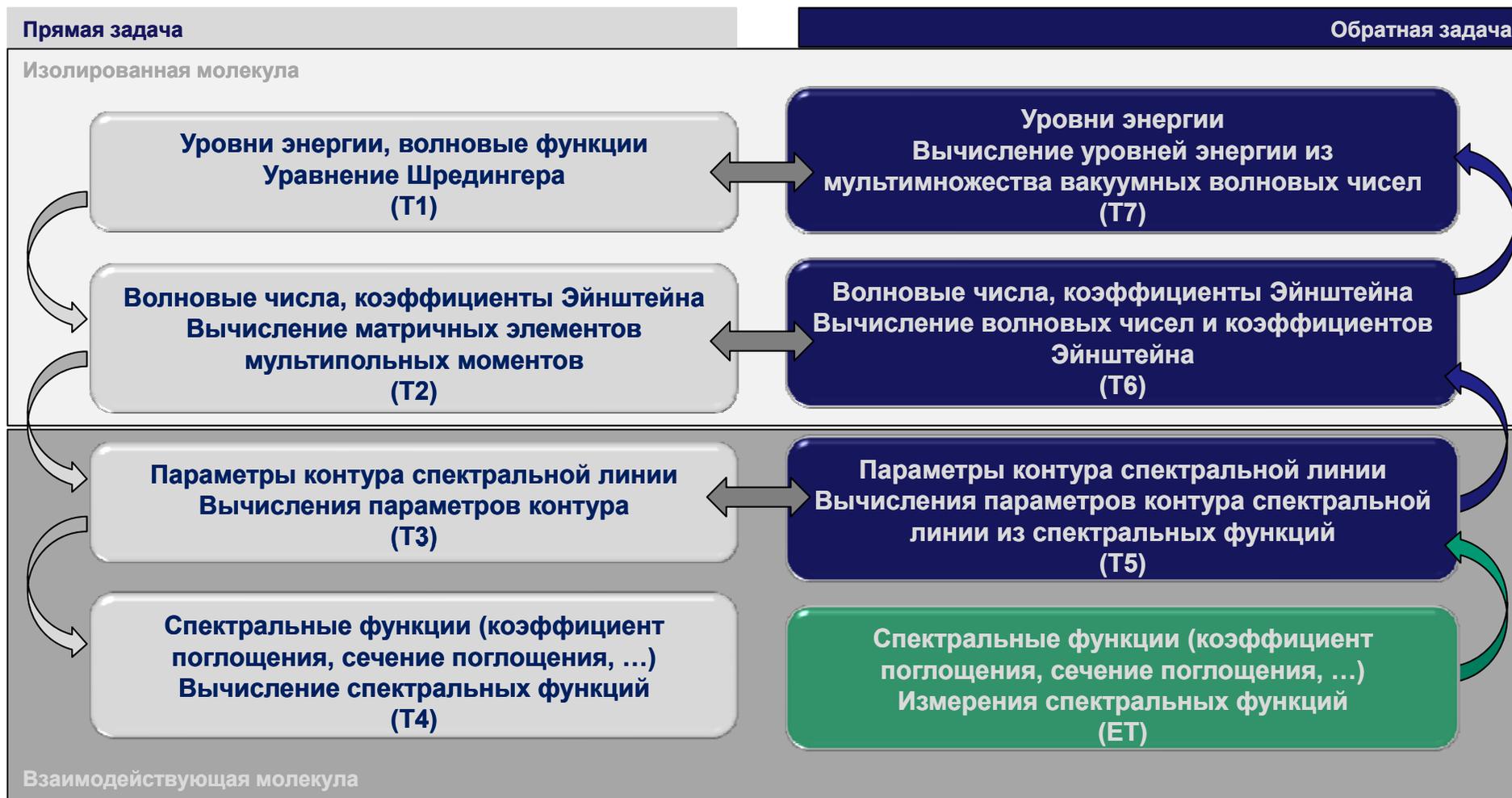


Упрощенная модель вещества





Упрощенная иерархия задач количественной спектроскопии





Упрощенная модель данных для количественной спектроскопии





Информационные объекты





Качество данных, информации и знаний

Формальные ограничения

Тип данных – квантовые числа – positiveInteger,

интенсивность, волновые числа, уровни энергии – positiveFloat,

Интервалы изменения – $0 < \text{волновые числа} < 100000 \text{ cm}^{-1}$, 10^{-16} cm/mol
 $< \text{интенсивность} < 10^{-32} \text{ cm/mol}$, точные квантовые числа – $J < 60$, $0 < s < 5$,

Формальные индивидуальные критерии: **правила отбора** – $k_a + k_c = J$ или $J+1$,

Согласование данных (Δ , σ , A_{00} , A_{01} , A_{10})

Формальный относительный критерий: $\Delta = |\lambda_1 - \lambda_2|$

Формальный относительный критерий : СКО (σ)

Формальный относительный критерий : факторы упорядочения (A_{00} , A_{01} , A_{10})



Классификация квантовых чисел и правил отбора

Состояния

Normal Modes	SV	$H_2^{16}O, H_2^{17}O, H_2^{18}O, HD^{16}O, HD^{17}O, HD^{18}O, D_2^{16}O, D_2^{17}O, D_2^{18}O, HT^{16}O, DT^{16}O, T_2^{16}O,$	v_1, v_2, v_3 Квантовые числа колебательного состояния v_1 is the excitation multiplicity of the 1st vibration, integer. v_2 is the excitation multiplicity of the 2nd vibration, integer. v_3 is the excitation multiplicity of the 3rd vibration, integer.
	C2v	1 $H_2^{32}S, H_2^{33}S, H_2^{34}S, HD^{32}S, HD^{33}S, HD^{34}S, D_2^{32}S,$ $^{32}S^{16}O_2, ^{32}S^{17}O_2, ^{32}S^{18}O_2, ^{32}S^{17}O^{18}O,$ $^{33}S^{16}O_2, ^{33}S^{16}O^{17}O, ^{33}S^{16}O^{18}O,$ $^{33}S^{17}O^{18}O, ^{33}S^{17}O_2, ^{33}S^{18}O_2, ^{34}S^{16}O_2,$ $^{34}S^{17}O_2, ^{34}S^{18}O_2,$	J, k_a, k_c Квантовые числа вращательного состояния J – значение полного углового момента молекулы. k_a – значение проекции полного углового момента на главную ось молекулы с наименьшим моментом инерции ($k_a \leq J$). k_c – значение проекции полного углового момента на главную ось молекулы с наибольшим моментом инерции ($k_c \leq J$).
Normal Modes	SR	1 $^{16}O_3,$	

Переходы

Normal Modes	TAb	C2v 1	$H_2^{16}O, H_2^{17}O, H_2^{18}O, HD^{16}O, HD^{17}O, HD^{18}O, D_2^{16}O, D_2^{17}O, D_2^{18}O, HT^{16}O, DT^{16}O, T_2^{16}O,$	(верхнее (')) и нижнее (") состояния)
			$H_2^{32}S, H_2^{33}S, H_2^{34}S, HD^{32}S, HD^{33}S, HD^{34}S, D_2^{32}S,$ $^{32}S^{16}O_2, ^{32}S^{17}O_2, ^{32}S^{18}O_2, ^{32}S^{17}O^{18}O,$ $^{33}S^{16}O_2, ^{33}S^{16}O^{17}O, ^{33}S^{16}O^{18}O,$ $^{33}S^{17}O^{18}O, ^{33}S^{17}O_2, ^{33}S^{18}O_2,$ $^{34}S^{16}O_2, ^{34}S^{17}O_2, ^{34}S^{18}O_2,$ $^{16}O_3,$	Квантовые числа переходов $v_1', v_2', v_3' J', k_a', k_c' - v_1'', v_2'', v_3'' J'', k_a'', k_c''$ (upper (')) and lower (") states) Quantum numbers of the transitions $v_1', v_2', v_3' J', k_a', k_c' - v_1'', v_2'', v_3'' J'', k_a'', k_c''$



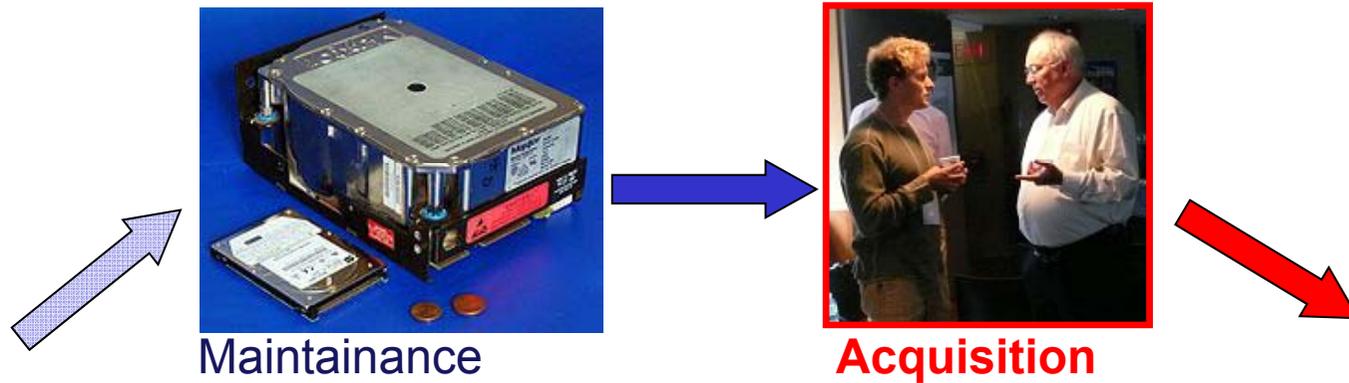
Классификация правил отбора и ограничений на состояния

Subject	Ab	N	Number of rule	Rule	Molecules
T	Ab		0	Разрешенные переходы $\Delta J = 0$ or -1 or $+1$	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$, all isotopologues , H_2^{16}O , H_2^{17}O , H_2^{18}O , HD^{16}O , HD^{17}O , HD^{18}O , D_2^{16}O , D_2^{17}O , D_2^{18}O , HT^{16}O , DT^{16}O , T_2^{16}O , H_2^{32}S , H_2^{33}S , H_2^{34}S , HD^{32}S , HD^{33}S , HD^{34}S , D_2^{32}S , $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{33}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}_3$...
T	Ab	C2v	1	Разрешены переходы с квантовыми числами, удовлетворяющими равенству $(k_c' - k_c'' = 2n+1)$	H_2^{16}O , H_2^{17}O , H_2^{18}O , HD^{16}O , HD^{17}O , HD^{18}O , D_2^{16}O , D_2^{17}O , D_2^{18}O , HT^{16}O , DT^{16}O , T_2^{16}O , H_2^{32}S , H_2^{33}S , H_2^{34}S , HD^{32}S , HD^{33}S , HD^{34}S , D_2^{32}S , $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{33}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}_3$, ...

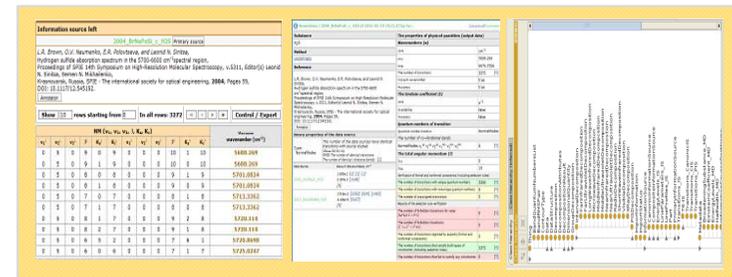
Subject	SG	Number of rule	Rule	Molecules
S	C2v	1	Разрешены состояния вращательные квантовые числа которых удовлетворяют равенству $(k_a+k_c = J$ or $k_a+k_c = J+1)$.	H_2^{16}O , H_2^{17}O , H_2^{18}O , HD^{16}O , HD^{17}O , HD^{18}O , D_2^{16}O , D_2^{17}O , D_2^{18}O , HT^{16}O , DT^{16}O , T_2^{16}O , H_2^{32}S , H_2^{33}S , H_2^{34}S , HD^{32}S , HD^{33}S , HD^{34}S , D_2^{32}S , $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{33}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{33}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}_3$,



Жизненный цикл данных, информации и знаний



Publishing

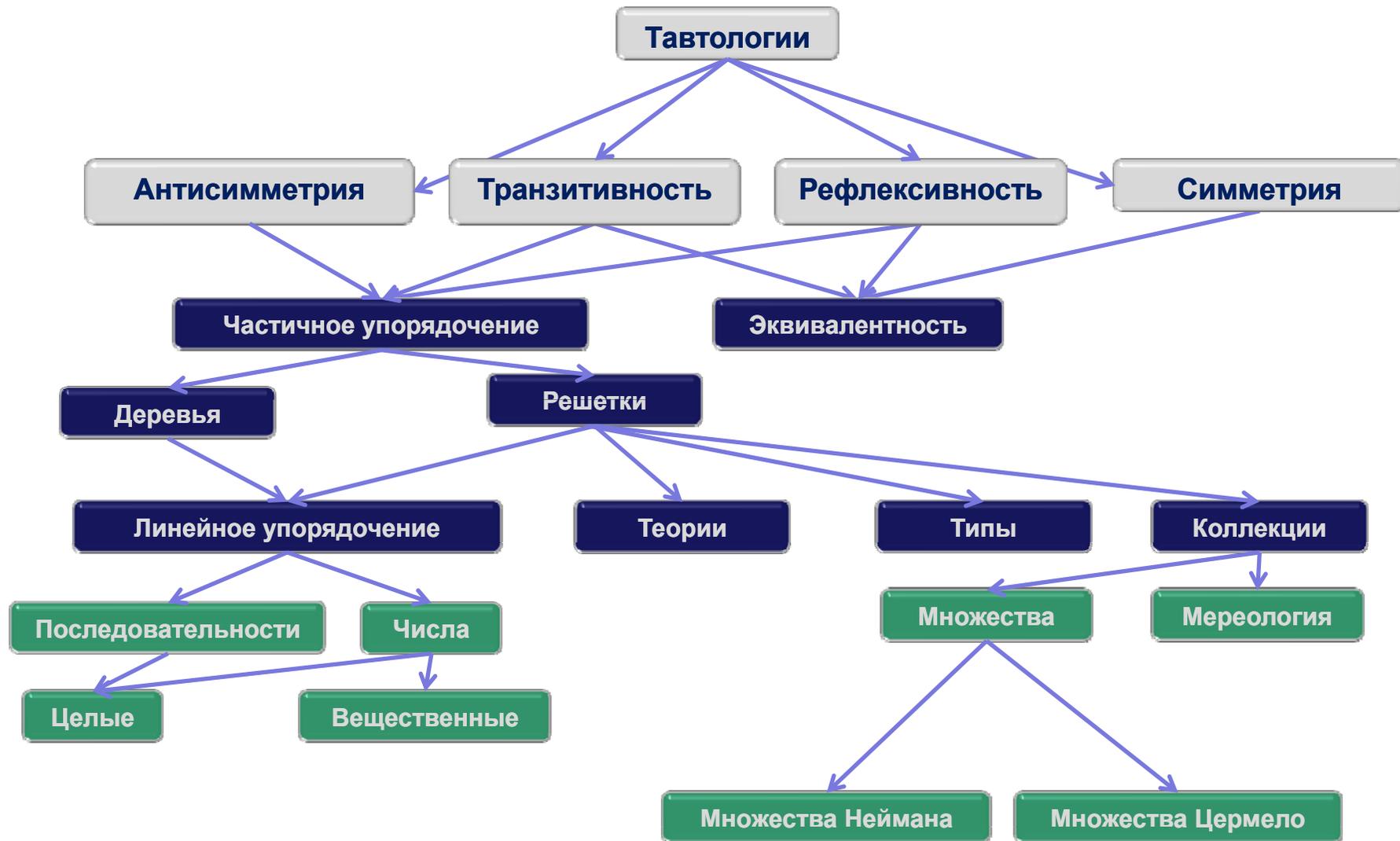


Modelling





Иерархия математических теорий





Отношения транзитивности и рефлексивности в количественной спектроскопии

Транзитивность

$$a=b \ \& \ b=c \Rightarrow a=c$$

Рефлексивность

$$a = a$$

Симметрия

$$a=b \Rightarrow b=a$$

Антисимметрия

$$a = < b \ \& \ b = < a \Rightarrow a = b$$



Статистика достоверных источников

H ₂ O																																													
Вещество																																													
Вещество	T1. Определение состояний									T2. Определение переходов						T3. Определение столкновительных параметров						T5. Определение столкновительных параметров						T6. Определение переходов						T7. Определение состояний											
	BT2 нотация			Нормальные моды			Нотация Швенке			BT2 нотация			Нормальные моды			BT2 нотация			Нормальные моды			BT2 нотация			Нормальные моды			BT2 нотация			Нормальные моды			BT2 нотация			Нормальные моды			Нотация Швенке					
	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C			
H ₂ O	8	8	2	8	4	2	2	2	8	4	4	6	10	6	0	6	6	20	26	10	0	-	-	314	314	267	0	-	-	122	122	73	0	1	1	32	33	29	0	-	-	33			
H ¹⁸ OH	3	3	2	4	4	1	1	1	4	4	4	3	7	6	0	4	3	15	19	17	0	-	-	60	60	53	0	-	-	76	76	42	0	-	-	18	18	18	0	-	-	18			
H ¹⁷ OH	3	3	1	3	3	1	2	2	2	4	4	2	6	5	0	4	3	4	8	6	0	-	-	31	31	30	0	-	-	55	55	36	0	-	-	18	18	15	0	-	-	18			
HOD	1	1	1	2	1	0	1	1	1	2	2	4	6	5	0	3	3	6	9	7	0	-	-	16	16	15	0	-	-	106	106	54	0	-	-	32	32	28	0	-	-	32			
H ¹⁸ OD	-	-	1	1	1	0	-	-	1	2	2	1	3	2	0	2	2	3	5	4	0	-	-	16	16	16	0	-	-	26	26	25	0	-	-	9	9	8	0	-	-	9			
D ₂ O	-	-	2	2	2	0	-	-	2	3	3	1	4	3	0	3	3	2	5	4	0	-	-	9	9	8	0	-	-	41	41	33	0	-	-	19	19	10	0	-	-	19			
D ₂ ¹⁸ O	-	-	1	1	1	0	-	-	1	2	2	1	3	2	0	2	2	2	4	3	0	-	-	3	3	3	0	-	-	6	6	5	0	-	-	5	5	5	0	-	-	5			
H ¹⁷ OD										2	2	0	2	2	0	2	2	1	3	3	0	-	-	12	12	12	0	-	-	12	12	10	0	-	-	3	3	3	0	-	-	3			
D ₂ ¹⁷ O										2	2	0	2	2	0	2	2	1	3	3	0	-	-	2	2	2	0	-	-	2	2	2	0	-	-	1	1	1	0	-	-	1			
HTO										-	-	1	1	0	0	-	-	1	1	0	0							-	-	2	2	0	0												
Итого	15	15	10	21	16	4	6	6	19	25	25	19	44	33	0	28	26	55	83	57	0	0	0	463	463	406	0	0	0	448	448	280	0	1	1	137	138	117	0	0	0	138			

Примечание:

A - источники с хотя бы одним идентифицированным переходом

B - источники с идентифицированными переходами, удовлетворяющие всем правилам отбора

C - источники с неидентифицированными переходами



Представление парных отношений источников данных

Переходы. Представление парных отношений источников данных

Задайте параметры представления

Вещество

H¹⁸OD

Источники данных		#23	#22	#21	#20	#18	#17	#16	#15	#14	#13	#12	#9	#8	#7	#6	#5	#4
<input type="checkbox"/> 1976_FIGi_HD_180	#1						9.33e-3/17								1.81e-4/1			1.20e-2/6
<input type="checkbox"/> 1978_Lovas_HD_180	#2						3.42e-5/27											
<input type="checkbox"/> 1983_MeDeHe_HD_180	#3						3.42e-5/24											
<input type="checkbox"/> 1985_Johns_HD_180	#4						5.19e-4/191											
<input type="checkbox"/> 1993_ToTh_HD_180	#5	8.05e-2/633				1.09e-1/346	7.63e-2/704					1.19e-4/397						
<input type="checkbox"/> 2005_ToTh_HD_180	#6											3.61e-4/67						
<input type="checkbox"/> 2006_ZeBaKuRi_HD_180	#7						8.10e-5/1											
<input type="checkbox"/> 2007_JeDaReTy_HD_180	#8		1.02e-2/5		1.59e-2/5					0/37	1.06e-2/5							
<input type="checkbox"/> 2007_MaToCa_HD_180	#9																	
<input type="checkbox"/> 2008_JaScChCr_HD_180	#12	4.78e-4/404					2.85e-4/70	1.37e-4/438										
<input type="checkbox"/> 2009_LiNaKaCa_HD_180	#13		4.54e-3/1067		2.76e-2/721					5.93e-3/314								
<input type="checkbox"/> 2009_MiTaPuSt_HD180	#14		5.67e-3/787	5.86e-3/6	2.92e-2/337													
<input type="checkbox"/> 2010_NaBeLeCa_HD_180	#15																	
<input type="checkbox"/> 2011_LeNaCa_HD_180	#16																	
<input type="checkbox"/> 2011_LiSoNiHu_a_HD_180	#17	3.37e-2/891					6.53e-4/1302											
<input type="checkbox"/> 2011_LiSoNiHu_b_HD_180	#18	4.44e-2/513																
<input type="checkbox"/> 2012_DoTeOrCh_HD_180	#20		3.50e-2/1186															
<input type="checkbox"/> 2012_LeMiMoKa_HD_180	#21		6.44e-3/8															
<input type="checkbox"/> 2012_MiNaNiVa_HD_180	#22																	
<input type="checkbox"/> 2012_OuReMiTh_HD_180	#23																	
Источники данных		#23	#22	#21	#20	#18	#17	#16	#15	#14	#13	#12	#9	#8	#7	#6	#5	#4

Скрыть выбранные строки

Показать все данные



Представление парных отношений источников данных

Переходы. Представление парных отношений источников данных

[2011_LiSoNiHu_b_HD_180](#) Первичный источник

An-Wen Liu, Ke-Feng Song, Hong-Yu Ni, Shui-Ming Hu, Olga V. Naumenko, Irina A. Vasilenko, Semen N. Mikhailenko,
(0 0 0) and (0 1 0) energy levels of the HD¹⁸O and D₂¹⁸O molecules from analysis of their ν_2 bands,
Journal of Molecular Spectroscopy, 2011, Volume 265, Issue 1, Pages 26-38,
DOI: 10.1016/j.jms.2010.10.007.

Annotation

1275.11002	1303.27725	1403.35763	1460.7512	1551.10982	1804.03606
1275.11011	1303.27811	1403.35751	1460.747	1551.1109	1804.0357

[1993_Toht_HD_180](#) Первичный источник

R.A.Toht,
HD¹⁶O, HD¹⁸O, and HD¹⁷O Transition Frequencies and Strengths in the ν_2 Bands,
Journal of Molecular Spectroscopy, 1993, Volume 162, Issue 1, Pages 20-40,
DOI: 10.1006/jmsp.1993.1266.

Annotation

Таблица сравнения источников данных

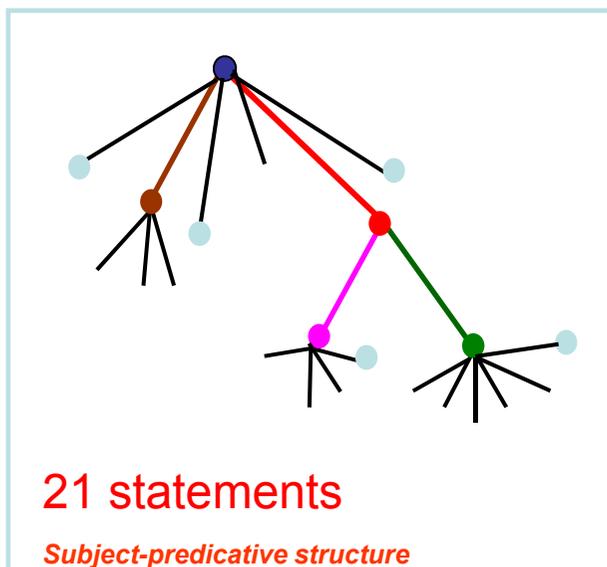
Число идентичных переходов в полосах	$\Delta\omega_{\max}$	Вакуумные волновые числа СКО	A ₀₀	A ₀₁	A ₁₀
346	1.50e+0	1.09e-1	4	4	4

Таблица сравнения источников данных по идентичным колебательно-вращательным полосам

ν_1^{\downarrow}	ν_2^{\downarrow}	ν_3^{\downarrow}	ν_1^{\uparrow}	ν_2^{\uparrow}	ν_3^{\uparrow}	Число идентичных переходов в полосах	$\Delta\omega_{\max}$	Вакуумные волновые числа СКО	A ₀₀	A ₀₁	A ₁₀
0	1	0	0	0	0	346	1.50e+0	1.09e-1	0	4	4



Структура индивида



V4_T1_102_2006_BaTeHaTo_c_H2O
hasMethod **DVR3D**
hasSubstance **H2O**
hasInputData_MD **V3_T1_102_T1-InputData_MD**
isSolutionOf **T1**
hasOutputData_MD **V3_T1_102_T1-OutputData_MD**
date 2009-03-25 18:18:00
publisher faz
comment Quantum numbers - BT2
label 2006_BaTeHaTo_c_H2O
hasReference **R.J.Barber, J. Tennyson, G.J. Harris, R.N. Tolchenov, A High Accuracy Computed Water Line List - BT2. // Mon. Not. R. Astron. Soc., 2006, v. 368, p. 1087-1094**

V4_T1_102_T1-InputData_MD
hasAtomicMass 10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x
hasBasicWaveFunction 10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x
hasPotentialEnergyFunction 10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x

V4_T1_102_T1-OutputData_MD
hasQuantumNumber_MD **V3_T1_102_QuantumNumbers_MD_for_BT2**
hasEnergyLevel_MD **V3_T1_102_EnergyLevel_MD**

V4_T1_102_EnergyLevels_MD
hasUnit **cm-1**
hasNumberOfEnergyLevels 221097
hasMinEnergyLevel 0
hasMaxEnergyLevel 29999.840396

V4_T1_102_QuantumNumbers_MD_for_BT2
hasQuantumNumberType **BT2**
hasNumberOfNonuniqueQuantumNumbers 0
hasNumberOfUnlabeledQuantumNumbers 0
hasNumberOfUniqueQuantumNumbers 221091
hasTotalMaxAngularMomentum 50
hasTotalMinAngularMomentum 0



Individual «Information source

V4_T7_269_NaMaLeTe_D2O_to_V4_T1_284_ShZoPo_D2O_by_EnergyLevels_on_NormalModes_RMSPair»

V4_T7_269_NaMaLeTe_D2O_to_V4_T1_284_ShZoPo_D2O_by_EnergyLevels_on_NormalModes_R

MSPair

hasRMSMember V4_T7_269_NaMaLeTe_D2O
hasRMSMember V4_T1_284_ShZoPo_D2O
hasPhysicalQuantity EnergyLevels
hasRMSBandPair V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_v1_v2_v3_RMSBandPair
hasTotalRMSDeviationValue 34.800
hasTotalMaxDifferenceValue 225.9971
hasTotalNumberCorrelationLines 530

V4_T7_269_NaMaLeTe_D2O_to_V4_T1_284_ShZoPo_D2O_by_EnergyLevels_on_NormalModes_ident_v1_v2_v3_RMSBandPair

hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_0_3_3_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_1_1_3_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_1_3_2_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_2_1_2_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_2_3_1_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_3_1_1_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_3_3_0_RMSStateBand
hasRMSStateBand V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_4_1_0_RMSStateBand

hasNumberOfRMSBands 8

V4_T1_284_ShZoPo_D2O

.....
hasReference S.V. Shirin, N.F. Zobov, O.L. Polyansky, Theoretical line list of D₂¹⁶O up to 16000 cm⁻¹ with an accuracy close to experimental, J. Quant. Spectr. Rad. Trans., 109 (2008) 549

V4_T7_269_NaMaLeTe_D2O

.....
hasReference O.V.Naumenko, F. Mazzotti, O.M. Leshchishina, J. Tennyson and A. Campargue, Intracavity laser absorption spectroscopy of D₂O between 11 400 and 11 900 cm⁻¹. // Journal of Molecular Spectroscopy, 2007, v. 242, no. 1, p. 1-9

V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_1_1_3_RMSStateBand
hasEnergyLevels_on_NormalModes_2_3_1_RMSStateBand
V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_1_3_2_RMSStateBand
hasEnergyLevels_on_NormalModes_3_1_1_RMSStateBand
V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_2_1_2_RMSStateBand
hasEnergyLevels_on_NormalModes_4_1_0_RMSStateBand
V4_T7_269_to_V4_T1_284_by_EnergyLevels_on_NormalModes_0_3_3_RMSStateBand
hasQuantumNumberBand QuantumNumbers_on_NormalModes_0_3_3_Band
hasEnergyLevels_on_NormalModes_3_3_0_RMSStateBand
hasBandMaxDifferenceValue 121.42
hasQuantumNumbers_on_NormalModes_3_3_0_Band
hasBandNumberCorrelationLines 45
hasBandRMSDeviationValue 23.717

(131 + 5N_{bands}) statements



Колебательные полосы в прямых задачах

VibrationalBand **and inverse** hasQuantumNumbersOfBand **some**
(**inverse** hasVibrationalBand_MD **some**
(**inverse** hasTransitionQuantumNumbers_MD **some**
(**inverse** hasOutputData_MD **some**
(InformationSource **and**
(isSolutionOf **value** T2 **or** isSolutionOf **value** T3)))))).

Источники данных, содержащие переходы в выбранном диапазоне волновых чисел

(T2-IS **or** T3-IS **or** T5-IS **or** T6-IS) **that**
hasOutputData_MD **some**
(hasWavenumbers_MD **some**
(Wavenumbers_MD **and**
((hasMinWavenumber **some** float[>=0.0,<10.0]) **or**
(hasMaxWavenumber **some** float[>=0.0,<10.0]))))

Примеры ограничений при определении классов



Качество данных, информации и знаний

Неформальные ограничения

Доверие

Неформальный индивидуальный критерий: Критерии опубликования (D_k).
Экспертные данные содержат только опубликованные данные

Неформальный относительный критерий: Оценка экспертов

Ссылки на статьи, содержащие переходы отклоненные экспертами

Вода

1. J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, *et al.*, **IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part I. Energy Levels and Transition Wavenumbers for H₂¹⁷O and H₂¹⁸O**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, July 2009, V.110, no.9-10, P.573-596.
2. J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, *et al.*, **IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part II. Energy Levels and Transition Wavenumbers for HDO, HD¹⁷O and HD¹⁸O**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2010, v.111, no.15, p. 2160-2184.
3. J.Tennyson, Peter F. Bernath, L.R. Brown, *et al.*, **IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part III. Energy Levels and Transition Wavenumbers for H₂¹⁶O**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2013, v.117, p.29-58.

Сероводород

1. E. R. Polovtseva, N. A. Lavrentiev, S. S. Voronina, *et al.*, **Information System for Molecular Spectroscopy. 5.Ro-vibrational Transitions and Energy Levels of the Hydrogen Sulfide Molecule**, Atmospheric and Oceanic Optics, 2012, Vol. 25, No. 2, pp. 157–165.

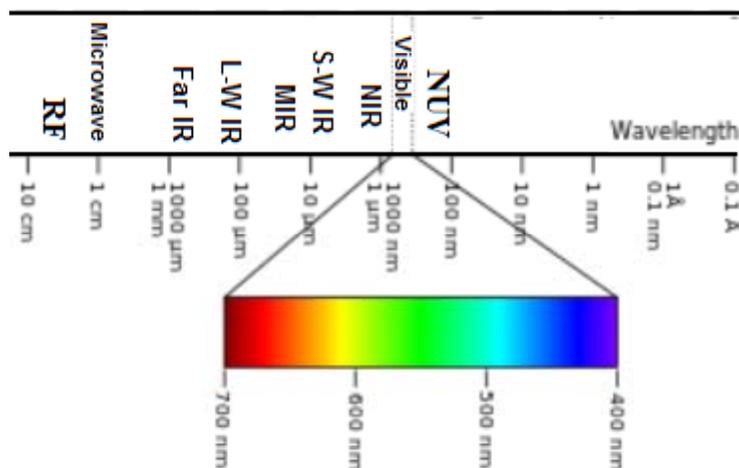


Критерий опубликования

Ограничение на физические величины в критерии опубликования

$$|p_{i,\text{expert}} - p_{i,\text{primary}}| < D_k,$$

здесь $p_{i,\text{expert}}$ и $p_{i,\text{primary}}$ значения экспертных и первичных величин, соответственно, и D_k – отклонение допустимое в k -спектральном интервале.



Отклонения, допустимые в спектральных интервалах, определяются при решении конкретных задач. Для задачи оценки доверия к спектральным данным применяемым в задачах расчета восходящих и нисходящих потоков излучения в микроволновом диапазоне предельная точность 0.00001 cm^{-1} , в дальнем (Far IR), длинно-волновом (L-W IR), среднем (MIR), ближнем ИК (NIR) и видимом диапазонах, $D_k = 0.005 \text{ cm}^{-1}$, в коротко-волновом ИК (S-W IR), $D_k = 0.01 \text{ cm}^{-1}$.

Задача декомпозиции

Декомпозиция проводится несколькими способами: декомпозиция по экспериментальным первичным данным, по теоретическим первичным данным, по экспериментальным и теоретическим данным и, если возможно, по эталонным данным. Эти способы применяются для всех физических величин. Результаты декомпозиции предназначены для двух типов пользователей: исследователей и программных агентов.

**Опыт решения информационных задач в количественной спектроскопии
в рамках подхода Semantic Web. Анализ информационных ресурсов**



Интервалы декомпозиции	Вакуумные волновые числа						
	Микро- волновой	Дальний ИК	Длинно- волновой ИК	Средний ИК	Коротко- волновой ИК	Ближний ИК	Все интервалы
$^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$	2009_RoGoBaBe (128170)						
		13	53	84	26	27	202
	2011_JaCrArBo (165181)						
		0	0	0	0	0	0
	2005_JaScChGa (32692)						
	0	0	12	1017	157	1186	
	2005_RoJaBaBe (27979)						
	13	57	342	205	33	650	
$^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	2009_RoGoBaBe (19264)						
		38	187	29	926	0	1180
	2011_JaCrArBo (18969)						
	0	0	0	6	0	6	
$^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	2009_RoGoBaBe (79958)						
	7	79	944	214	433	0	1677
	2011_JaCrArBo (110136)						
		0	0	0	0	0	0
	2005_JaScChGa (13445)						
		0	0	3	906	0	909
	2005_RoJaBaBe (17417)						
	7	377	944	216	905	0	2449
$^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$	2009_RoGoBaBe (49777)						
		0	0	81	41	1	123
	2011_JaCrArBo (66657)						
		0	0	0	0	0	0
	2005_JaScChGa (11122)						
	0	0	0	162	1	163	
	2005_RoJaBaBe (8836)						
	0	0	81	250	1	332	
$^{13}\text{C}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	2009_RoGoBaBe (2953)						
		127	364	590	0		1089
	2011_JaCrArBo (1584)						
		0	0	0	0		0
	2005_JaScChGa (1584)						
	128	375	590	219		1329	
	2005_RoJaBaBe (1593)						
	166	413	590	219		1388	

Таблица 1. Результаты декомпозиции экспертных данных для пяти изотопологов диоксида углерода

[2009_RoGoBaBe \(128170 \)](#)

[2009_RoGoBaBe](#) – ссылка на публикацию

128170 - число переходов в БД

2009_RoGoBaBe

L.S. Rothman, et al., *J. Quant. Spectros. Rad. Transfer*, **2009**, v. 110, no. 9, p. 533-572

2005_RoJaBaBe

L.S. Rothman, et al., *J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transfer*, **2005**, v 96, p. 139-204

2011_JaCrArBo

N. Jacquinet-Husson, L. et al., *J. Quant. Spectros. Rad. Transfer*, **2011**, v. 112, p. 2395-2445

2005_JaScChGa

N. Jacquinet-Husson, et al., *J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transfer*, **2005**, v. 95, p. 429-467

Декомпозиция по измеренным и вычисленным первичным данным

**Опыт решения информационных задач в количественной спектроскопии
в рамках подхода Semantic Web. Анализ информационных ресурсов**



Молекула \ Интервал декомпозиции?	Вакуумные волновые числа									
	РЧ	МВ	Дальний ИК	ДВ ИК	Средний ИК	КВ ИК	Ближний ИК	Видимый	Ближний УФ	Все интервалы
H₂O Число сомнительных переходов	2013_RoGoBaBa (142045) (декомпозиция с учетом / без учета IUPAC эталонных переходов)									
	1/1	111/102	3446/839	519/3	110/17	739/359	9725/4571	4357/1758	38/22	19046/7672
	2011_JaCrArBo (41147), 2008_JaScChCr (41148)									
		16/16	616/57	426/40	1242/559	1909/559	1335/952	359/219	2/2	5905/1850
	2009_RoGoBaBe (37432)									
	1/1	6/6	612/8	462/1	1131/7	1343/50	521/191	3/1	0	4079/265
H₂¹⁷O	2013_RoGoBaBa (27544) (декомпозиция с учетом / без учета IUPAC эталонных переходов)									
		18/6	469/1	258/0	1280/0	2748/6	3151/14	647/27		8571/54
	2011_JaCrArBo (5468)									
	1/1	135/43	51/11	199/30	388/42	386/352	4/3			1164/482
	2009_RoGoBaBe (6992)									
		117/33	45/9	171/24	377/31	412/372	64/51			1186/520
H₂¹⁸O	2013_RoGoBaBa (39903) (декомпозиция с учетом / без учета IUPAC эталонных переходов)									
	1/1	29/19	702/9	414/5	1878/3	3377/47	5626/73	1335/414		13362/571
	2011_JaCrArBo (8360)									
	1/1	176/97	66/17	130/65	297/171	674/651	20/20			1364/1022
	2009_RoGoBaBe (9753)									
	1/1	28/28	139/52	66/17	130/65	153/40	936/861	3/3		1456/1067
HDO	2013_RoGoBaBa (13237)									
	3	24	523	84	204	619	59	76		1602
	2011_JaCrArBo (11980)									
	3	24	644	107	713	1242	15	0		2748
	2009_RoGoBaBe (13238)									
	3	24	523	84	204	620	59	76		1603
H₂¹⁶O	2005_RoJaBaBe (32365)									
	1/1	6/6	612/8	462/1	1131/7	1343/50	605/267	520/329	2/2	4682/671
	2005_JaScChGa (36701)									
		16/16	619/197	420/21	1337/195	2691/1611	2221/1996	516/327	2/2	7822/4365

Таблица 2.
Результаты декомпозиции экспертных данных для 4 изотопологов молекулы воды

19046/7672

A / B

A

Декомпозиция по измеренным и вычисленным первичным данным

B

Декомпозиция по измеренным и вычисленным первичным данным и эталонным данным

2013_RoGoBaBa
L.S. Rothman, et al.,
J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transfer, **2013**,
(preliminary data (June 2013) were used for assessment of trust)

2008_JaScChCr
N. Jacquinet-Husson, et al.,
J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transfer, **2008**,
v. 109, p. 1043-1059



Онтологическое представление оценки доверия

Описание свойств и классов (см, <http://wadis.saga.iao.ru>).

Структура индивидов

The structure of an individual **A** describing a complete assessment of trust in an expert data source is shown in Fig.2 where the trust is assessed for expert data as an example for the hydrogen sulphide molecule. Notably, the structure is the same for all molecules.

The minimum cardinality of property *hasVacuumWavenumberDescriptionClassifiedByPrimaryInformationSource* is 1, whereas its maximum cardinality is 3. The value of this property is an individual **B** describing one of three expert data decomposition techniques.

The maximum cardinality of property *hasVacuumWavenumberDecompositionDescriptionClassifiedByRange* corresponding to *hasP1* is 12, whereas its minimum cardinality is 1.

2009_RoGoBaBe_H2S

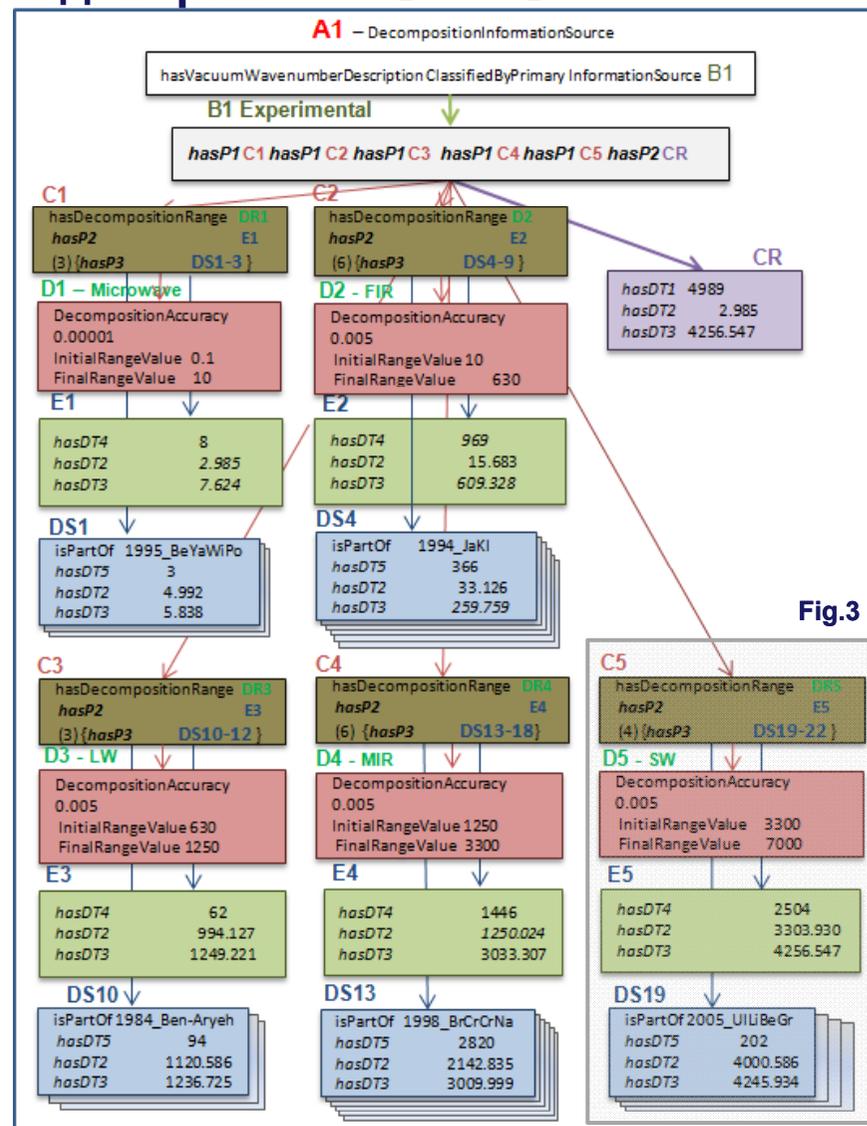


Fig.3

Figure 2. Subject-predicate structure of an individual describing the assessment of trust in the expert data on vacuum wavenumbers for the H₂S molecule.

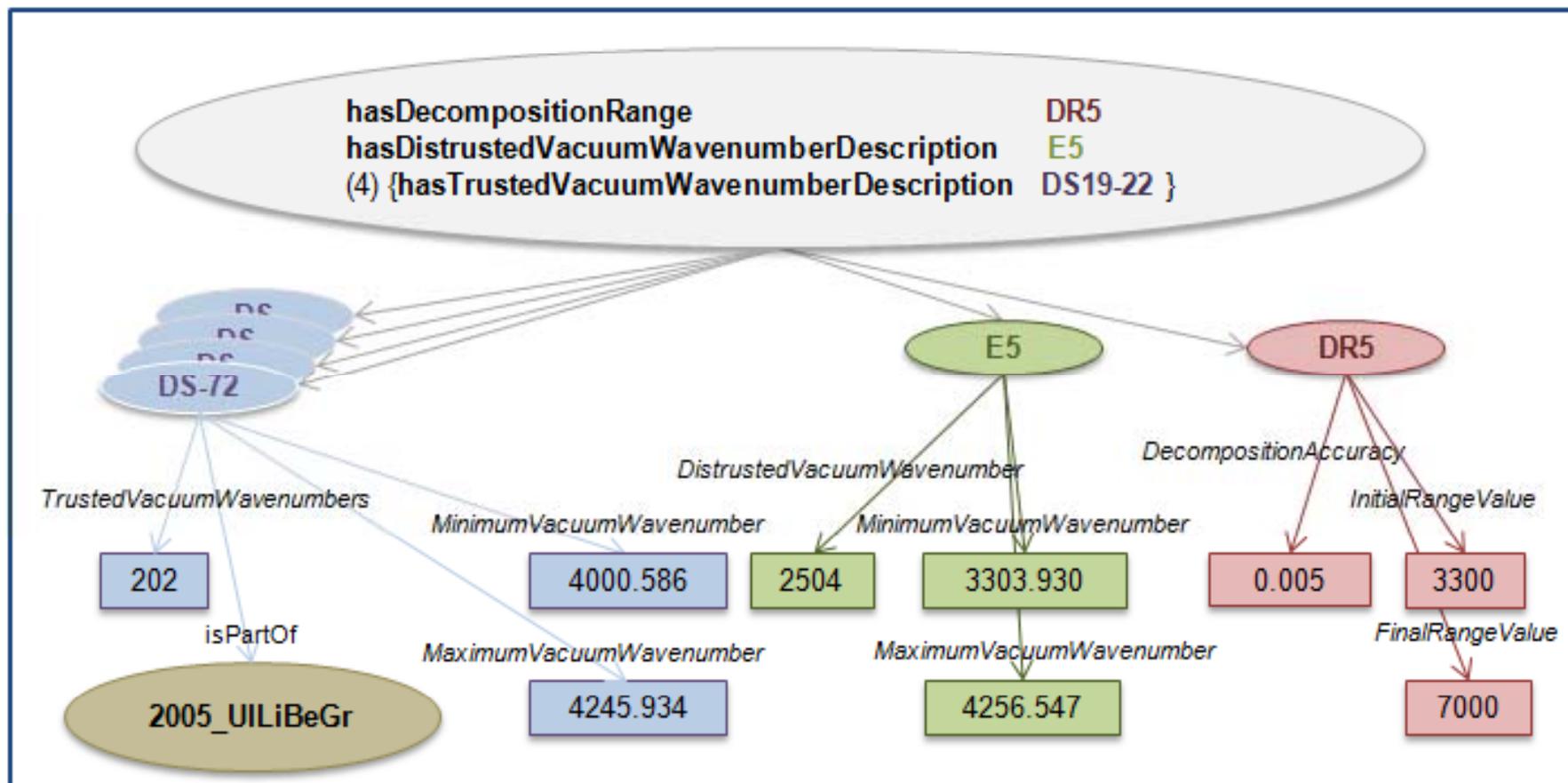


Figure 3. Fragment of Fig.2 with a detailed subject-predicate structure of an individual C5 of class **DecompositionInShortWaveInfraredRangeDescription**.

Свойства индивида 2005_UiLiBeGr не показаны. Этот индивид 2005_UiLiBeGr является источником информации описывающим решение задачи T6 и содержит около 100 высказываний.

2005_UiLiBeGr: O.N. Ulenikov, A.-W. Liu, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, L.-Y. Hao, S.-M. Hu, *High resolution Fourier transform spectrum of H₂S in the region of the second hexade*, Journal of Molecular Spectroscopy, **2005**, Volume **234**, Issue 2, Pages 270-278, DOI: 10.1016/j.jms.2005.09.010.



Таксономия и пример определения класса

Большая часть классов определяется ограничениями на свойства. Ограничения на свойства для определения класса **VacuumWavenumberDecompositionInVisibleRangeDescription**, записанное в манчестерском синтаксисе дано ниже:

```
(hasTrustedDescription some TrustedVacuumWavenumberDescription  
or  
hasUntrustedDescription some UntrustedVacuumWavenumberDescription)  
and  
(hasDecompositionRange value VisibleDecompositionRange).
```

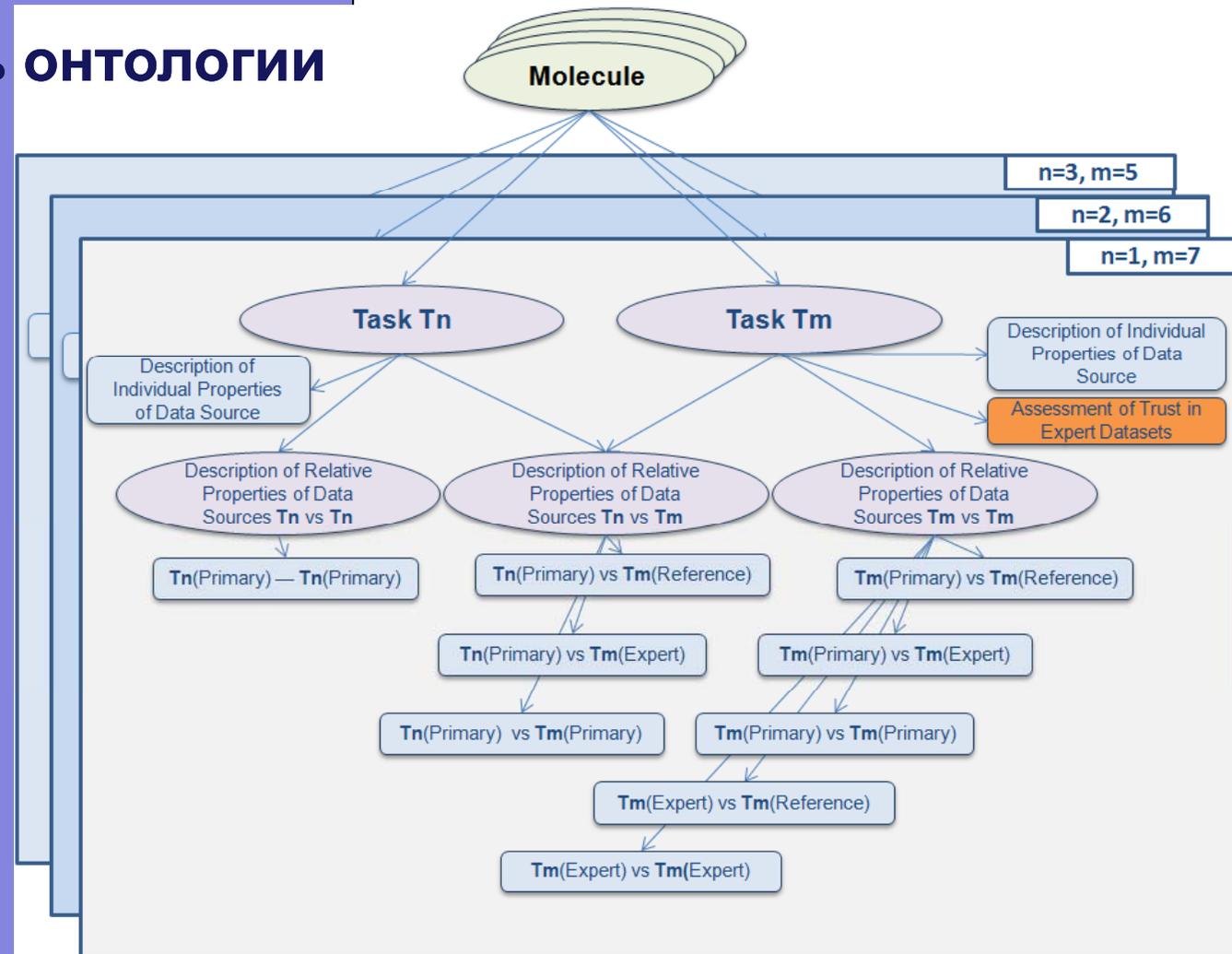
Этот класс содержит индивиды, каждый из которых специфицирует число доверительных и сомнительных переходов, указывает область изменения доверительных и сомнительных переходов в видимом диапазоне для одной молекулы и одного экспертного набора данных.

Онтология оценки доверия экспертным данным для количественной спектроскопии содержит 19 классов, 14 свойств и 9 типов структур индивидов, описывающих оценку доверия для молекулы, спектрального диапазона, отнесенного к этой молекуле, и числа первичных источников данных которое может меняться от 20 до 150 в данной информационной системе.

Оценка доверия дана для более чем 100 экспертных источников данных, относящихся к 35 изотопологам 9 молекул.



Модульность онтологии



	Аксиомы	
	Всего	Доверие
Water (H ₂ O)	1,600,000	30,000
Carbon Dioxide (CO ₂)	1,000,000	5,000



Import list

Ontologies list

Variables list

Show 40 rows starting from 0

N	Variable	Field	Value
1	_VERSION_	Off	V5
2	_ONTOLOGY_	On	http://ww/ontology
3	_NAMESPACE_	On	http://wa/saga2/n
4	_RMSNS_	Off	Depends_RMSSOL
5	_METHOD_	Off	NULL
6	_RMSSOURCE_	Off	NULL
7	_RMSBAND_	Off	NULL
8	_BANDNS_	Off	NULL
9	_COMPOSITION_	Off	NULL
10	_TASK_	Off	NULL
11	_SUBSTANCE_	Off	NULL
12	_BAND_	Off	NULL

Show 40 rows starting from 0

Show 20 rows starting from 0 In all rows 381

N	Substance	Composition	Task	Select
1	H2O	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
2	H_17OH	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
3	H_18OH	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
4	D2O	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
5	HOD	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
6	D2S	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
7	H2S	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
8	HDS	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
9	SO2	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
10	D2_18O	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
11	H_18OD	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
12	H_33SH	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
13	H_34SH	Primary	T1	<input type="checkbox"/>
14	H2O	Primary	T7	<input type="checkbox"/>
15	H_17OH	Primary	T7	<input type="checkbox"/>
16	H_18OH	Primary	T7	<input type="checkbox"/>
17	HOD	Primary	T7	<input type="checkbox"/>
18	D2O	Primary	T7	<input type="checkbox"/>
19	H_18OD	Primary	T7	<input type="checkbox"/>
20	H2S	Primary	T7	<input type="checkbox"/>

Show 20 rows starting from 0 In all rows 17 Control

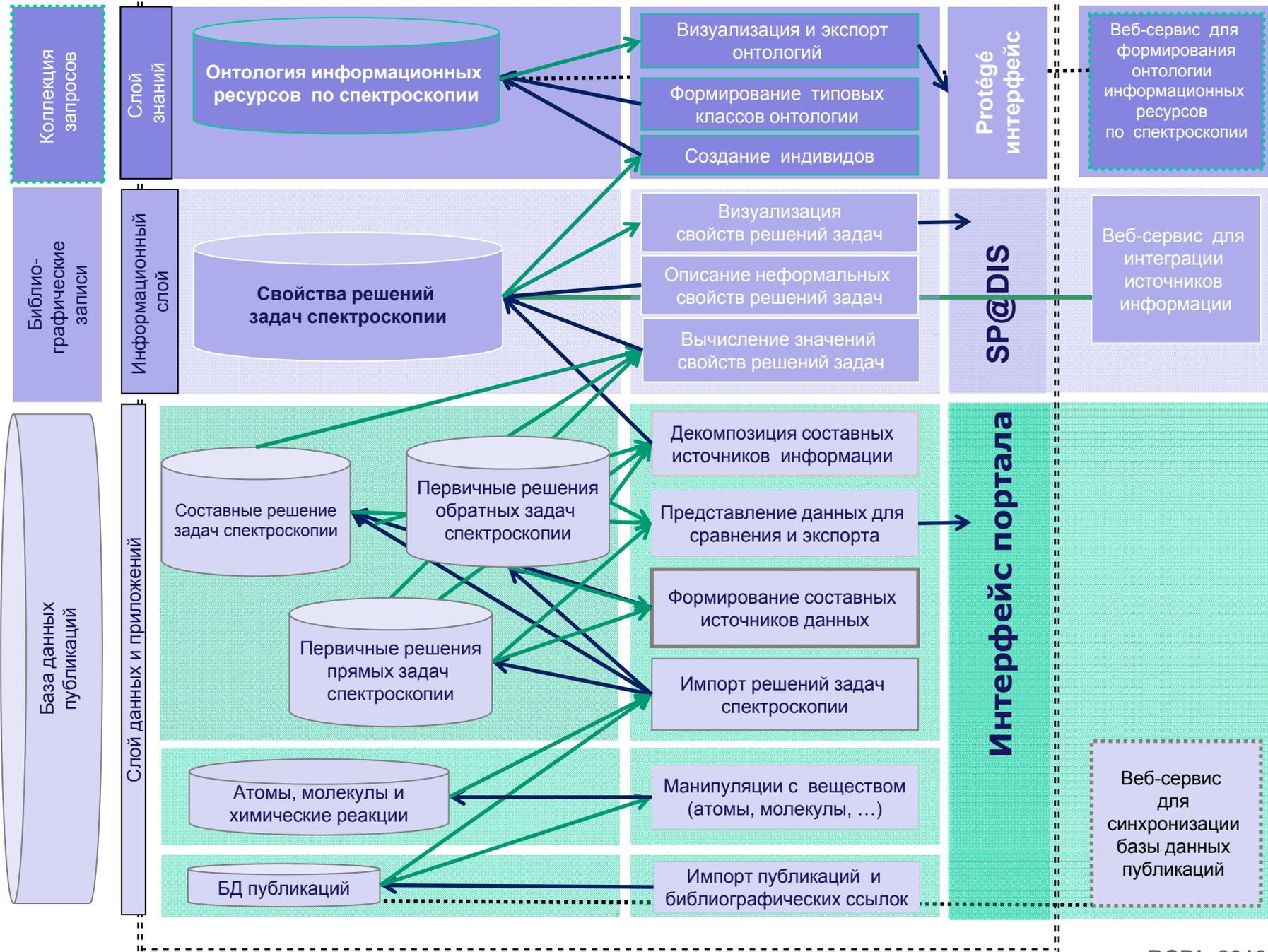
N	Ontology name in english	Edit	Download
1		Edit	Download
2		Edit	Download
3	Data sources containing a vibrational band	Edit	Download
4	All data sources including the root-mean-square deviation for selected vibrational bands	Edit	Download
5	Data sources containing transitions in chosen range of wavenumbers	Edit	Download
6	Data sources containing one vibrational band and solutions computed by definite method	Edit	Download
7	Data sources which satisfy the set of properties related to formal constraints	Edit	Download
8	Data sources have no transitions which were rejected by experts	Edit	Download
9	Data sources containing definite physical quantity	Edit	Download
10	Data source containing the same transitions as in definite data source	Edit	Download
11	Data sources containing only unique transitions	Edit	Download
12	Canonic information sources	Edit	Download
13	Pairs of information sources containing only primary measured data	Edit	Download
14	Pairs of information sources having only one vibrational band	Edit	Download
15	List of substances in the information system	Edit	Download
16	test	Edit	Download
17	Vibrational bands which can be found in direct tasks	Edit	Download



A list of classes corresponding to plausible user queries

- 1. *Vibrational bands found in direct tasks.***
- 2. Data sources containing a single vibrational band;**
- 3. All data sources including the root-mean-square deviation for selected vibrational bands ;**
- 4. *Data sources containing transitions in a selected range of wavenumbers;***
- 5. Data sources that satisfy a set of properties related to formal constraints;**
- 6. Data sources with no transitions rejected by experts;**
- 7. Data sources containing the same transitions as in the data source;**
- 8. Data sources containing only unique transitions;**
- 9. Canonical information sources;**
- 10. Pairs of correlated information sources containing only measured data;**
- 11. Pairs of correlated information sources containing only a selected vibrational band.**

Распределенная информационная система по количественной спектроскопии





Заключение

- Проверена достоверность и дана оценка доверия информационным ресурсам по количественной спектроскопии. Информационными ресурсами являются первичные и составные источники данных, связанные с 3500 публикациями. Все источники данных загружены в информационную систему **W@DIS** и снабжены семантическими аннотациями. Аннотации содержат информацию о проверках формальных индивидуальных и относительных критериях достоверности и доступны пользователям как в табличном виде, так и в форме OWL онтологии. Представлены структуры индивидов онтологии, описывающие свойства ряда задач спектроскопии.
- Для оценки доверия экспертных ресурсов применен критерий опубликования, количественная характеристика которого изменяется в 12 спектральных интервалах вакуумных волновых чисел. Дано описание структуры индивида, характеризующего оценку доверия экспертным данным. Структура содержит информацию о доверительных и сомнительных вакуумных волновых числах. Кратко описана таксономия классов и приведен пример определения класса ограничением на значения свойств.
- Работа ориентирована на применение вычисляемой онтологической базы знаний в экспертной системе для оценки качества информационных ресурсов в количественной спектроскопии, а также для организации семантического поиска информационных ресурсов. База знаний делает возможным представление результатов анализа качества данных экспертов, с одной стороны, и формирование экспертных данных, согласованных с первичными данными с другой стороны. В такой системе пользователи (исследователи и программные агенты) обладают количественными оценками достоверности и доверия к информационным ресурсам, решая основную задачу Semantic Web.
- Работа поддержана РФФИ (Гранты 11–07–00660 and 13–07–00411).

Информационная система **W@DIS** доступна по адресу: <http://wadis.saga.iao.ru>



Вопросы ?