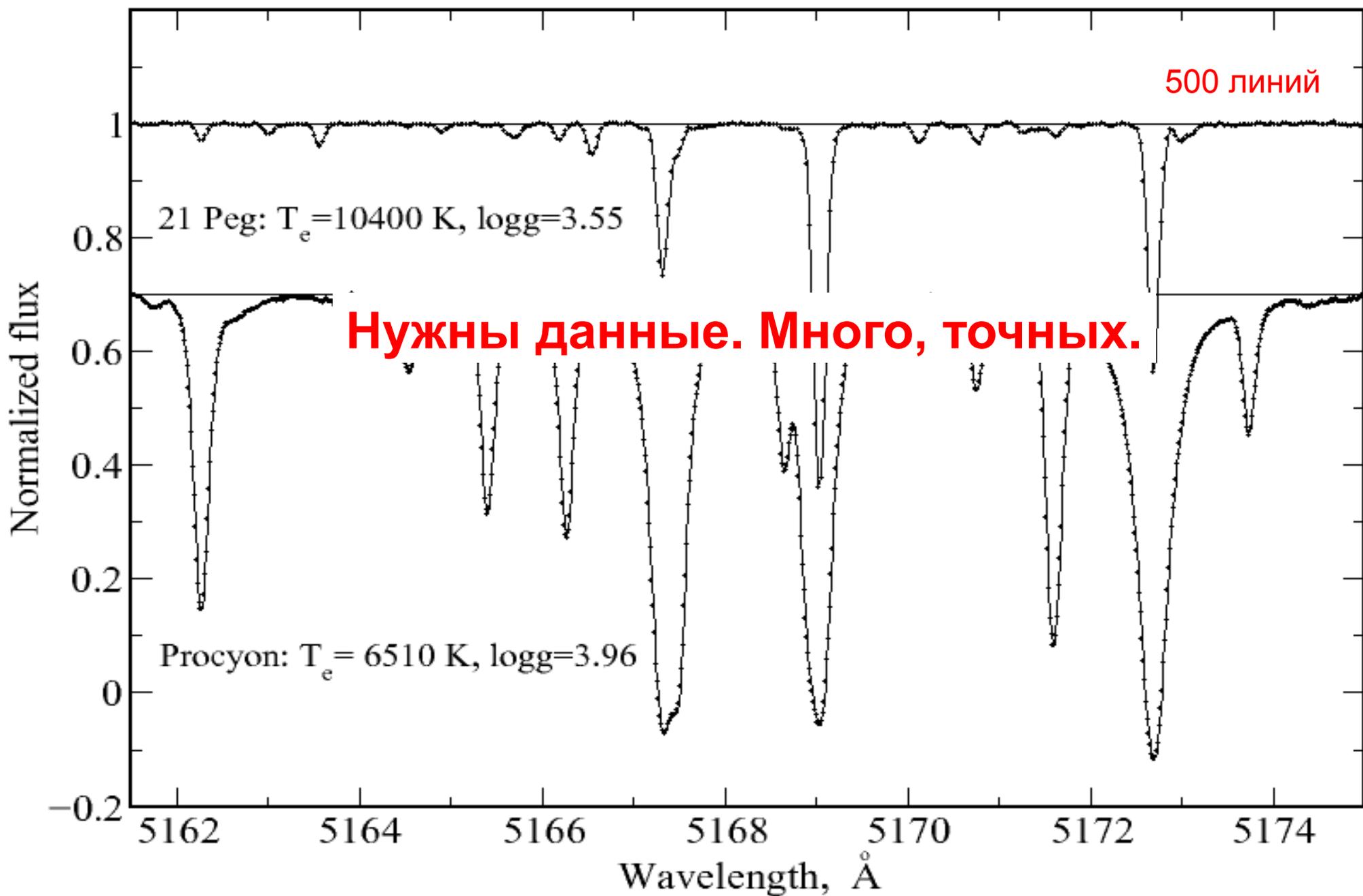


Структура Венской базы атомных параметров спектральных линий (VALD3) и ее интеграция в виртуальный центр атомных и молекулярных данных (VAMDC)

Ю.В.Пахомов¹, Н.Е.Пискунов², Т.А.Рябчикова¹, Р.Л.Куруц³, Г.К.Стемпельс², У.Хайтер²

1. Институт астрономии Российской академии наук, Москва, Россия
2. Отделение физики и астрономии, Уппсальский университет, Уппсала, Швеция
3. Гарвард-Смитсонианский центр астрофизики, Гарвардский университет, Кэмбридж, США





Для описания профиля спектральной линии мы должны знать атомные параметры:

λ - центральная длина волны

E_i и E_j - потенциал возбуждения нижнего и верхнего уровня

X_n – потенциал ионизации

J_i и J_j - квантовые числа полного углового момента для нижнего и верхнего уровня

f_{ij} или A_{ji} – вероятности перехода

$\gamma_R \gamma_4 \gamma_6$ – константы уширения

g_i и g_j – Ландэ факторы

A и B – константы сверхтонкого расщепления для нижнего и верхнего уровня

I – квантовое число магнитного момента ядра

+ величина изотопического сдвига

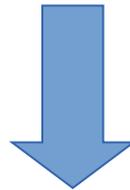
+ величины сечений радиативных и ударных взаимодействий для неЛТР расчетов



Разные лаборатории, предоставляющие данные, публикуют их

В разных форматах

В разных единицах измерения



Данные надо собрать и привести в один формат

1991 – в Вене (Австрия) группа астрофизиков из Австрии, России и Швеции приступила к созданию открытой базы данных атомных параметров VALD

Основа VALD – компиляция данных из разных источников.

1994 - VALD-1 содержала данные для около 1 миллионов линий

1999 – VALD-2 более 2 миллионов линий наблюдаемых и более 40 миллионов рассчитанных

2012 – VALD-3 около 250 миллионов линий атомов и около 1.5 миллиардов линий некоторых двухатомных молекул (TiO, CN, CH, C₂, O₂, SiH, FeH, MgH и др.) и воды.

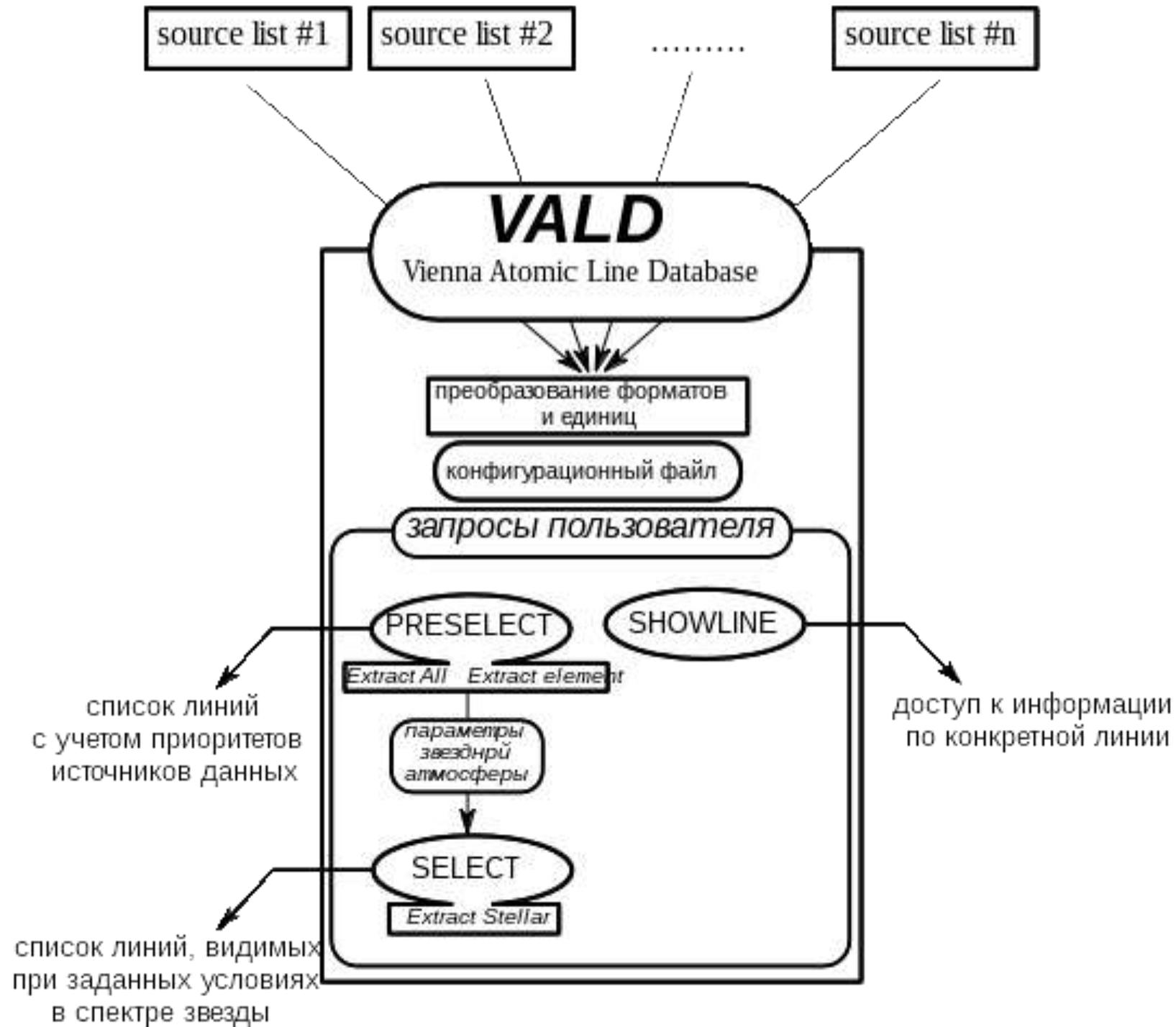
!!! База данных создана теми, кто использует эти данные

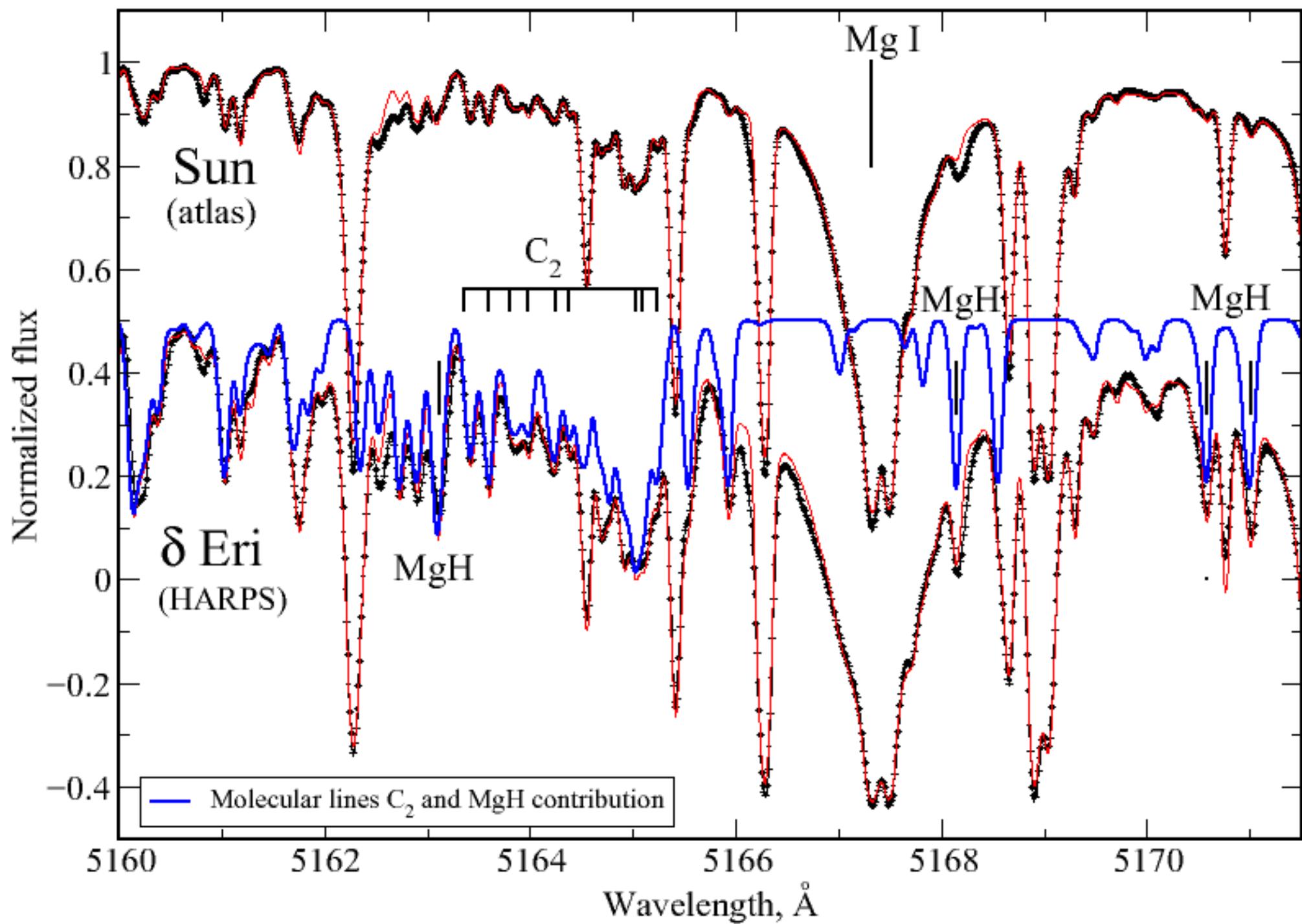
VALD

1. Написана с 0 на языках FORTRAN, C
2. Реляционная
3. Основана на файлах (каждый файл соответствует конкретной работе, статье, ...)
4. Индексация данных
5. Использует сжатие

Отличия от стандартных СУБД SQL

1. Уникальным считается объект — спектральная линия и ее параметры, которые могут содержаться в нескольких записях и, поэтому различаться.
2. Имеет механизм идентификации спектральной линии
3. Имеет систему приоритетов для используемых файлов данных
4. Значительный выигрыш в скорости выполнения запросов и потребляемым ресурсам: память и процессор
5. Выдает данные только по тем спектральным линиям, которые могут наблюдаться



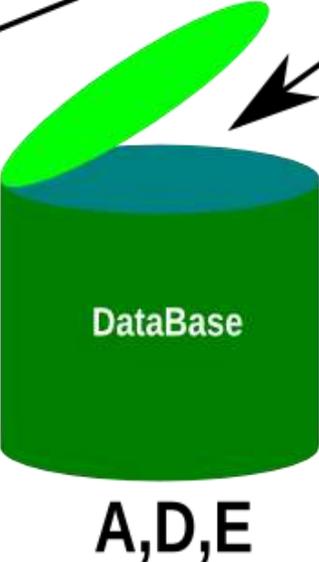
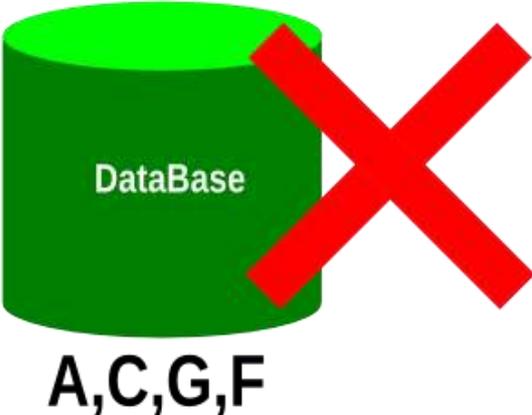


VALD в настоящее время

1. Пять зеркал:
 1. Uppsala Universitet (Швеция)
 2. Институт Астрономии РАН (Москва)
 3. Wien Universitat (Австрия)
 4. Goettingen University (Германия)
 5. NASA (США)
2. Сотни зарегистрированных пользователей из 52 стран мира
3. Около 50 запросов в месяц
4. Более 1500 ссылок на статьи по VALD в высокорейтинговых международных журналах
 1. 467 на VALD-1 (25 ссылок в год)
 2. 785 на VALD-2 (52 ссылки в год или 1 в неделю)

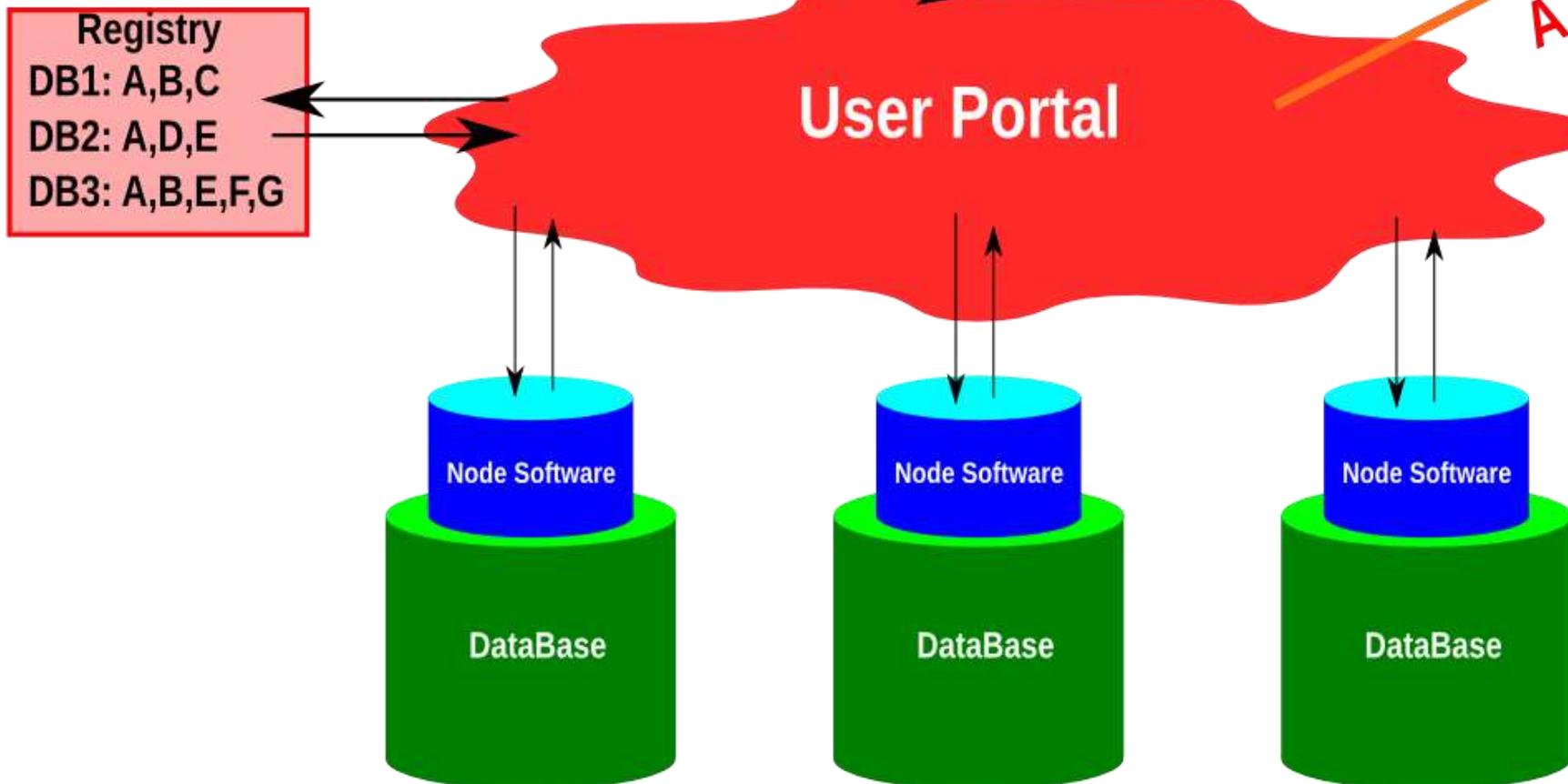


Проблема

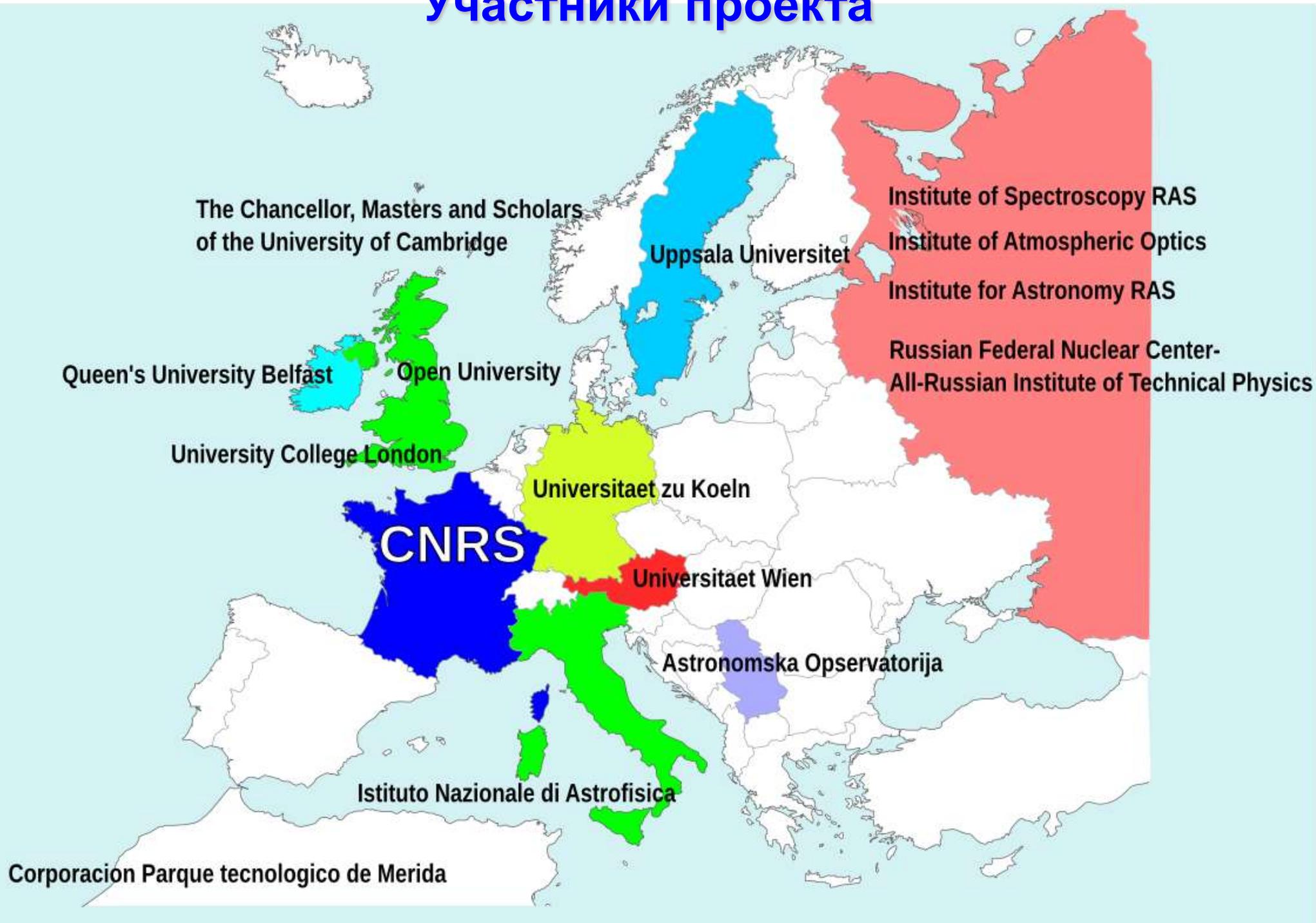


Решение

только стандартные запросы
VALD представлена в виде объединенного
списка в СУБД MySQL



Участники проекта



- Query by...
- Species
 - Processes
 - Environment
 - Advanced

Atoms Clear Remove

Atom symbol

Mass number to

Nuclear charge to

Ion charge to

InChIKey

State energy to 1/cm

Equivalent to to 1/cm

Radiative Clear Remove

Wavelength to A

Equivalent Wavelength 5000.0 to 5001.0A

Upper state energy to 1/cm

Equivalent to to 1/cm

Lower state energy to 1/cm

Equivalent to to 1/cm

Probability, A to 1/s

Find data Save query

Legend

available, can answer
 available, don't support query
 unsupported keyword

- ▶ Cologne Database for Molecular Spectroscopy: VAMDC-TAP service
- ▶ ICB Dijon Methane
- ▶ VALD (atoms)
- ▶ Carbon Dioxide Spectroscopic Databank (VAMDC-TAP)
- ▶ BASECOL: VAMDC-TAP interface
- ▶ TOPbase : VAMDC-TAP interface
- ▶ Theoretical spectral database of polycyclic aromatic hydrocarbons
- ▶ Chianti
- ▶ TIPbase : VAMDC-TAP interface
- ▶ GSMA Reims S&MPO
- ▶ GSMA Reims Ethylene
- ▶ TAP-XSAMS for GhoSST database
- ▶ Lund laboratory spectroscopy database
- ▶ Stark-b
- ▶ Spectr-W3
- ▶ Water internet Accessible Distributed Information System
- ▶ HITRAN-UCL resource
- ▶ VALD sub-set in Moscow (obs)
- ▶ KIDA: VAMDC-TAP interface

Done

Modify query

Stop waiting

Save query

select * where (RadTransWavelength >= 5000.0 AND RadTransWavelength <= 5001.0) AND ((AtomSymbol = 'Fe'))

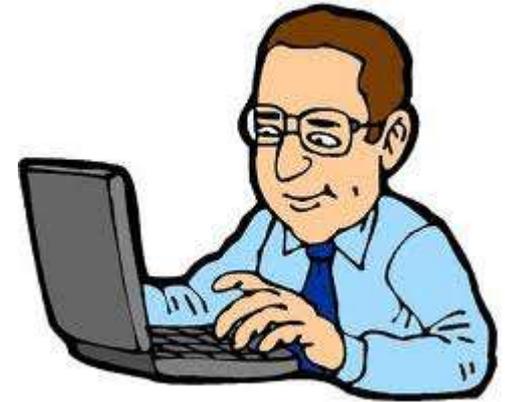
Comments

XSAMS processors

- BibTeX from XSAMS
- Table views of XSAMS
- Xsams2SME

Process

Name	Response	Download	Species	States	Processes	Radiative	Collisions	Non Radiative
<input type="checkbox"/> VALD (atoms)	OK	XSAMS	7	2265	1331	1331	0	0
<input type="checkbox"/> VALD sub-set in Moscow (obs)	OK	XSAMS	4	24	12	12	0	0
<input type="checkbox"/> Chianti	OK	XSAMS	1	6	3	3	0	0
<input type="checkbox"/> TOPbase : VAMDC-TAP interface	OK	XSAMS	1	2	1	1	0	0
<input type="checkbox"/> Lund laboratory spectroscopy database	OK	XSAMS	0	0	0	0	0	0
Spectr-W3	EMPTY		0	0	0	0	0	0
Stark-b	EMPTY		0	0	0	0	0	0



TAP — Transport Access Protocol

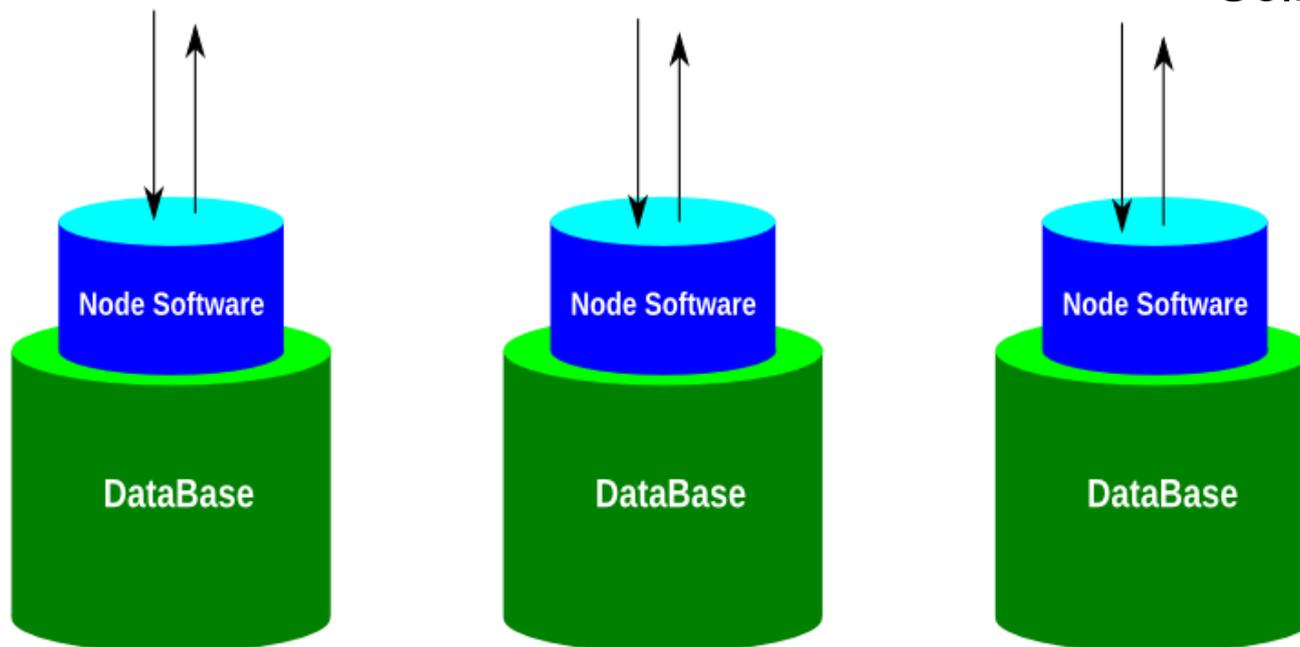
```
select * where (RadTransWavelength >= 5000.0 AND  
RadTransWavelength <= 5001.0) AND ((AtomSymbol = 'Fe'))
```

X
S
A
M
S

User Portal

XSAMS

XML
Schema for
Atoms,
Molecules and
Solids



```
<XSAMSData
xsi:schemaLocation="http://vamdc.org/xml/xsams
s/0.3 http://vamdc.org/xml/xsams/0.3">
  <Sources></Sources>
  <Methods></Methods>
  <Environments></Environments>
  <Species></Species>
  <Processes></Processes>
</XSAMSData>
```

Спектральная линия

- Атом
 - Название, обозначение, заряд ядра
 - Изотоп
 - Масса
- Радиативный переход
 - Длина волны
 - А, см, nm, cm^{-1} , Hz, eV
 - Вакуум, воздух
 - Экспериментальная, расчетная, Ritz
 - Вероятность перехода
 - Сила осциллятора
 - Время жизни
 - Коэффициенты Эйнштейна
 - Уширяющие параметры
- Уровень энергии 1 и 2
 - Энергия
 - Квантовые числа
 - Тип связи
 - Терм
 - Конфигурация
- Свойства среды
 - T, P, n



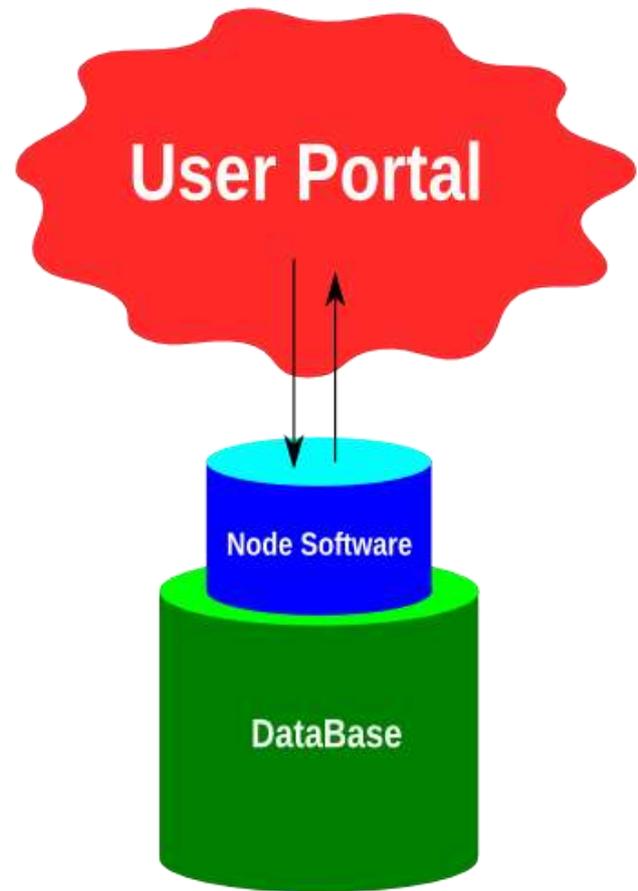
A,C,G,F



+



=



Структура Венской базы атомных параметров спектральных линий (VALD3) и ее интеграция в виртуальный центр атомных и молекулярных данных (VAMDC)

Ю.В.Пахомов¹, Н.Е.Пискунов², Т.А.Рябчикова¹, Р.Л.Куруц³, Г.К.Стемпельс², У.Хайтер²

1. Институт астрономии Российской академии наук, Москва, Россия
2. Отделение физики и астрономии, Уппсальский университет, Уппсала, Швеция
3. Гарвард-Смитсонианский центр астрофизики, Гарвардский университет, Кэмбридж, США