

# Настраиваемая система экспорта данных молекулярной спектроскопии в XML.

**Козодоев А.В.**

**Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск**

# Распределенная ИВС по молекулярной спектроскопии



Распределенная ИВС по атмосферной радиации

# Общая физическая идея

Физической идеей для систематизации данных в молекулярной спектроскопии является разделение множества физических понятий на четыре части, связанные с основными задачами предметной области.

- Первая часть содержит идентифицированные уровни энергии молекул.
- Вторая часть содержит допустимые переходы, их квантовые числа и коэффициенты Эйнштейна. (Данные этих частей связаны с изолированной молекулой и не зависят от термодинамических параметров. )
- Третья часть характеризует молекулярный газ параметры которого зависят от термодинамических характеристик и содержит физические величины, описывающие взаимодействие между молекулами, обусловленные столкновениями.
- Четвёртая часть включает в себя результаты измерений и вычислений спектральных функций.

# Отображение данных

## 2009\_RoGoBaBe\_H2O-air

L.S. Rothman, I.E. Gordon, A. Barbe, D.Chris Benner, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, L.R. Brown, A. Campargue, J.-P. Champion, K. Chance, L.H. Coudert, V. Dana, V.M. Devi, S. Fally, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, A. Goldman, etc, The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2009, v. 110, Issue 9, p. 533-572.

Показать

100

строк от

0

Всего строк 2193

>

>>

Настройки

Интенсивность $I_1$ (см/мол)	Вакуумная частота перехода $\omega_1$ (см <sup>-1</sup> )	$\nu_1^{up}$	$\nu_2^{up}$	$\nu_3^{up}$	$J^{up}$	$K_a^{up}$	$K_c^{up}$	$\nu_1^{low}$	$\nu_2^{low}$	$\nu_3^{low}$	$J^{low}$	$K_a^{low}$	$K_c^{low}$
5.285E-20	18.577385	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1	0	1
5.042E-20	37.137125	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0
2.532E-20	32.95369	0	0	0	2	0	2	0	0	0	1	1	1
3.483E-20	25.085124	0	0	0	2	1	1	0	0	0	2	0	2
4.349E-19	55.702029	0	0	0	2	1	2	0	0	0	1	0	1
3.234E-19	99.026795	0	0	0	2	2	0	0	0	0	1	1	1
4.835E-20	40.987981	0	0	0	2	2	0	0	0	0	2	1	1
1.01E-18	92.529898	0	0	0	2	2	1	0	0	0	1	1	0
1.83E-19	55.405255	0	0	0	2	2	1	0	0	0	2	1	2
4.06E-19	57.265273	0	0	0	3	0	3	0	0	0	2	1	2
2.543E-20	38.464169	0	0	0	3	1	2	0	0	0	2	2	1
1.645E-19	36.60415	0	0	0	3	1	2	0	0	0	3	0	3
2.689E-19	72.187672	0	0	0	3	1	3	0	0	0	2	0	2
7.785E-23	6.114567	0	0	0	3	1	3	0	0	0	2	2	0
9.753E-19	132.65998	0	0	0	3	2	1	0	0	0	2	1	2
1.793E-19	38.790556	0	0	0	3	2	1	0	0	0	3	1	2
3.998E-19	111.125489	0	0	0	3	2	2	0	0	0	2	1	1

# Форматы файлов XML

## Задачи молекулярной спектроскопии

Показать  строк от

Всего строк 9

[Настройки](#)

N	Имя загрузки	Описание	Редактировать	Удалить
1	saga	Спектрокопия атмосферных газов	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
2	saga-test		<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
3	saga2-energy-inverse	SAGA2 Ввод данных по обратной задаче определения уровней энергии	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
4	saga2-energy-direct	SAGA2 Ввод данных по прямой задаче определения уровней энергии	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
5	saga2-energy-direct-v2	SAGA2 Ввод данных по прямой задаче определения уровней энергии (версия 2)	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
6	saga2-energy-inverse-v2	SAGA2 Ввод данных по обратной задаче определения уровней энергии (версия 2)	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
7	saga2-transition-direct	SAGA2 Ввод данных по прямой задаче определения переходов	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
8	saga2-transition-invers	SAGA2, Задача T5, обратная задача с идентифицированными переходами	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>
9	saga2-transition-inverse	SAGA2 Ввод данных по обратной задаче определения переходов	<a href="#">Редактировать</a>	<a href="#">Удалить</a>

Показать  строк от

Всего строк 9

[Настройки](#)

# Шаблоны XML

К задачам привязываются элементы загрузки соответствующие физическим величинам.

Элементы могут иметь различные параметры в разных задачах загрузки.

## Редактирование схемы данных задачи

Имя-код:

Краткое описание (rus):

Краткое описание (eng):

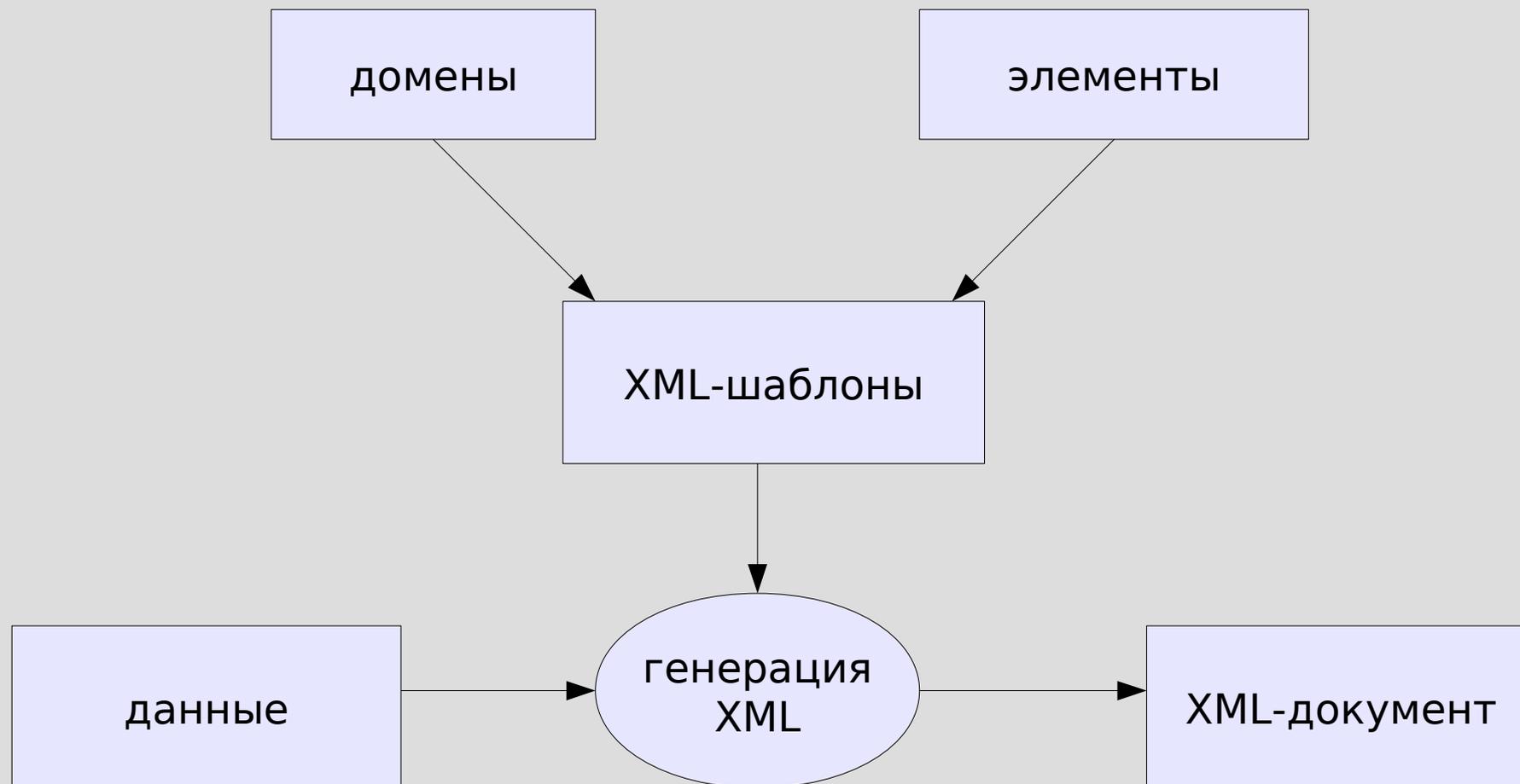
XML-шаблон: 

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<%51$s xsi:noNamespaceSchemaLocation="http://saga.atmos.iao.ru/data/xsd/tasks
/version3/substance/%51$s.xsd" xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-
instance"> <T5.2> %s </T5.2> </%51$s>
```

## Допустимые сущности для моделируемой задачи

Выбор	Аббре-виатура	Единица измерения	Название величины	XML шаблон	Глобальные элементы всех схем	Обязательные элементы данной схемы	Значение по умолчанию	Константа
<input checked="" type="checkbox"/>	s2t52_PP	atm	Парциальное давление	<pre>&lt;PhysicalCondition&gt; &lt;[#%53\$s#]BroadeningSubstance name="%53\$s"&gt; &lt;Pressure&gt;%s&lt;/Pressure&gt; &lt;/[#%53\$s#]BroadeningSubstance&gt; &lt;/PhysicalCondition&gt;</pre>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	s2t52_TF	cm <sup>-1</sup>	Частота перехода	<pre>&lt;_l&gt; &lt;WN&gt;%s&lt;/WN&gt; &lt;/_l&gt;</pre>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	s2t52_PSh_err		Ошибки в температурной зависимости сдвига	<pre>&lt;_l&gt; &lt;TDD&gt; &lt;[#%53\$s#]_l broadening="%53\$s"&gt; &lt;PSh error="%s"&gt; &lt;/PSh&gt; &lt;/[#%53\$s#]_l&gt; &lt;/TDD&gt; &lt;/_l&gt;</pre>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	s2t52_I-NM		Квантовые числа перехода (Нормальные моды)	<pre>&lt;_l&gt; &lt;Transition&gt; &lt;TransitionNormalMode&gt; &lt;Upper&gt; &lt;v1&gt;%s&lt;/v1&gt; &lt;v2&gt;%s&lt;/v2&gt; &lt;v3&gt;%s&lt;/v3&gt; &lt;J&gt;%s&lt;/J&gt; &lt;Ka&gt;%s&lt;/Ka&gt; &lt;Kc&gt;%s&lt;/Kc&gt; &lt;/Upper&gt; &lt;Lower&gt; &lt;v1&gt;%s&lt;/v1&gt; &lt;v2&gt;%s&lt;/v2&gt; &lt;v3&gt;%s&lt;/v3&gt; &lt;J&gt;%s&lt;/J&gt;</pre>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>

# Ввод данных: интерфейс



# Формат XML-шаблонов

## Шаблон основы документа

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>  
<TaskT1T6 xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"  
xsi:noNamespaceSchemaLocation="http://saga.atmos.iao.ru/data/xsd/TaskT1T6_v3.xsd">  
%s  
</TaskT1T6>
```

## Шаблон элементов

```
<Head> <Temperature> <K>  
<value>%s</value> </K> </Temperature> </Head>
```

```
<Item> <NormalMode> <%51$s> <Vibrational>  
<Upper> <v1>%1$d</v1> <v2>%2$d</v2> <v3>%3$d</v3> </Upper>  
<Lower> <v1>%4$d</v1> <v2>%5$d</v2> <v3>%6$d</v3> </Lower>  
</Vibrational> <Rotational>  
<Upper> <J>%7$d</J> <Ka>%8$d</Ka> <Kc>%9$d</Kc> </Upper>  
<Lower> <J>%10$d</J> <Ka>%11$d</Ka> <Kc>%12$d</Kc> </Lower>  
</Rotational> </%51$s> </NormalMode> </Item>
```

# Обработка XML-шаблонов

Данные (одна запись)

K=v1, L=v2, M=v3, N=v4

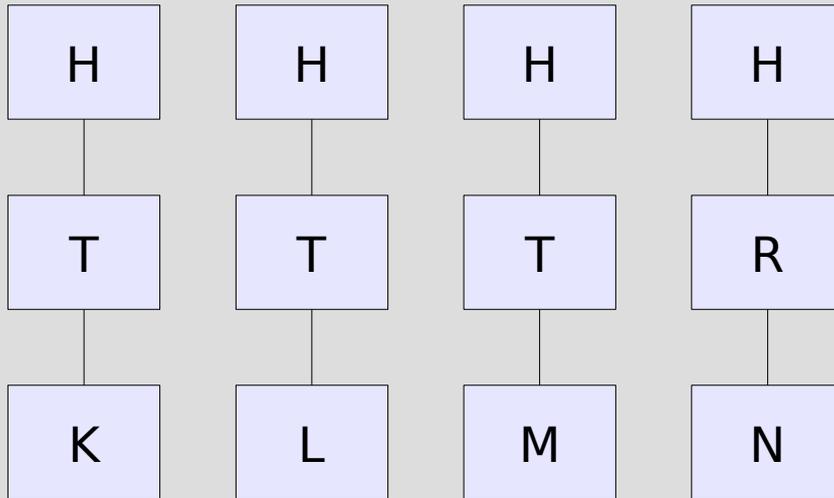
Заполненные XML-шаблоны

```
<H><T><K>v1</K></T></H>
<H><T><L>v2</L></T></H>
<H><T><M>v3</M></T></H>
<H><R><N>v4</N></R></H>
```

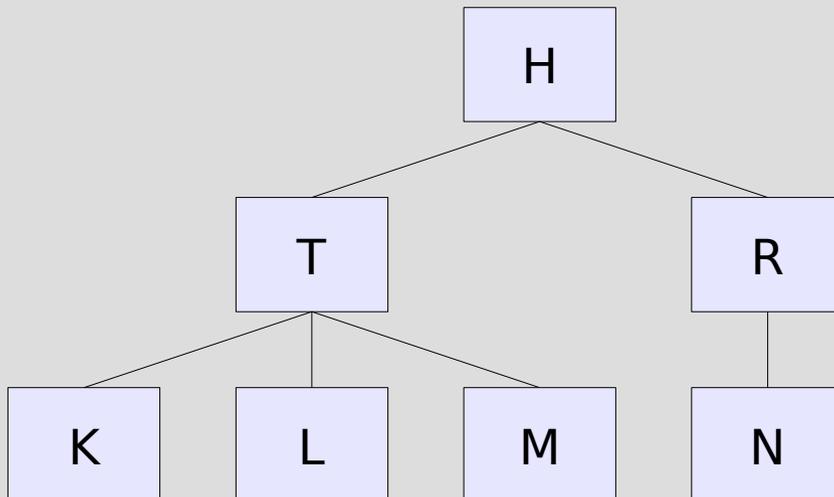
Результат слияния заполненных шаблонов

```
<H>
  <T>
    <K>v1</K> <L>v2</L> <M>v3</M>
  </T>
  <R>
    <N>v4</N>
  </R>
</H>
```

# Обработка XML-шаблонов



```
<H><T><K>v1</K></T></H>  
<H><T><L>v2</L></T></H>  
<H><T><M>v3</M></T></H>  
<H><R><N>v4</N></R></H>
```



```
<H>  
  <T>  
    <K>v1</K> <L>v2</L> <M>v3</M>  
  </T>  
  <R>  
    <N>v4</N>  
  </R>  
</H>
```

**Спасибо за внимание**