

# Проверка качества атомарных и молекулярных данных колебательно-вращательной спектроскопии в рамках европейского проекта VAMDC

А.И. Привезенцев<sup>1</sup>, А.З. Фазлиев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск

e-mail: remake@iao.ru, faz@iao.ru

**Аннотация.** В атомарной и молекулярной спектроскопии накоплены большие массивы количественных данных. Разные группы спектроскопистов поддерживают массивы данных, представляя данные в собственных форматах хранения и передачи. Данные разных групп могут быть уникальными, противоречивыми и дублирующими друг друга. Кроме этого, данные могут быть некорректными в соответствии с принятой физической моделью представления, что можно проверить по соответствующим правилам. Проект VAMDC предназначен для построения виртуального центра атомарных и молекулярных данных. В проекте разработан стандарт VAMDC-XSAMS для обмена спектроскопическими данными. Для анализа качества данных и проведения их коррекций на серверах поставщиков данных нами разработан программный модуль проверки по ряду формальных критериев для атомарных и молекулярных данных в формате VAMDC-XSAMS. Разработана XML-схема, расширяющая VAMDC-XSAMS-схему, в которой сами правила проверки записываются на языке MathML.

## Введение

Целью проекта Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC)[1-3] является создание инфраструктуры, которая, с одной стороны, позволяет извлекать данные из существующих хранилищ и, с другой стороны, позволяет достаточно гибко приспособлять данные к нуждам широкого круга пользователей из академического и промышленного сообщества. Проект нацелен на построение ядра сообщества, развертывание инфраструктуры и разработку программного обеспечения. Ключевым моментом для достижения такой цели является преодоление фрагментации в сообществе исследователей, занимающихся атомарными и молекулярными базами данных. Проект VAMDC нацелен на развитие самой большой и наиболее представительной разделяемой атомной и молекулярной инфраструктуры, поддерживаемой и расширяемой всеми учеными европейского союза, а также на обеспечение распределенной европейской инфраструктуры доступной и используемой широким европейским исследовательским сообществом.

Реализация проекта VAMDC осуществлена в виде центрального сервера (виртуального центра) для поиска спектральных данных и множества серверов поставщиков данных, которые предоставляют данные в открытый доступ в формате VAMDC-XSAMS[3].

Определение качества данных, предоставляемых через виртуальные центры, необходимо по ряду причин. Важнейшей из них является возможность передачи некорректных данных от производителя до поставщика и далее через виртуальный центр к потребителю. Неопределенность в качестве атомных и молекулярных данных, используемых в качестве входных данных в задачах прикладных предметных областей (астрономии, атмосферной оптики и т.д.), приводит к сомнениям при интерпретации результатов вычислений, в которых они используются. По этой причине центры данных проводят систематическую проверку состоятельности и целостности хранимой информации, а при экспорте данных пользователь должен быть поставлен в известность об оценке качества данных и о критериях, по которым проводилась эта оценка.

Качество данных связано с их достоверностью, определяемой по формальным критериям и доверием, обусловленным рядом неформальных критериев. Под формальными критериями здесь понимаются критерии, проверка которых может быть алгоритмизирована и автоматически проведена независимо от экспертов.

В количественной спектроскопии формальные критерии определяются физическими моделями атома (молекулы), а также процессов, характеризующих их взаимодействие с излучением. Физическая модель атома (молекулы) описывает ограничения на возможные состояния атома (молекулы). Описание взаимодействия атомов (молекул) с излучением приводит к формулированию ряда ограничений на переходы между состояниями называемыми правилами отбора. Наконец, модель накладывает ограничения на области значений физических величин, таких как волновые числа, интенсивность, и т. д. В программном обеспечении эта часть ограничений проверяется в соответствии с VAMDC-XSAMS-схемой[4].

Проверка ограничений на состояния и описание спектральных данных требует указания набора точных квантовых чисел и меток. Точные квантовые числа присутствуют практически во всех нотациях, тогда как метки могут быть разными в разных нотациях. Квантовые числа являются неизмеримыми физическими величинами и их приписывание, как правило, осуществляется вручную экспертами. Приписывание осуществляется путем сравнения данных измерений с результатами теоретического расчета параметров состояний и переходов. Теоретический расчет базируется на физической модели молекулы.

Правила отбора существенно зависят от того для каких физических процессов используется математическая модель. Более того, для описания молекулы в разных электронных состояниях иногда требуются разные математические модели, так как симметрия молекулы может быть разной в разных электронных состояниях.

Для решения задачи проверки качества данных был создан специализированный программный модуль для автоматического выполнения правил отбора на данных о состояниях и переходах в XML-документе, полученном в результате запроса к базам данных поставщиков информационных ресурсов, входящих в число участников проекта VAMDC.

### **Состояния и переходы колебательно-вращательной спектроскопии**

Базовыми понятиями при описании спектральных характеристик атомов и молекул являются состояния и переходы. Для идентификации этих понятий используются квантовые числа. Квантовые числа можно разделить на две группы. В группу точных квантовых чисел входят полный угловой момент и четность. В каждом состоянии значение физических величин, связанных с этими квантовыми числами, сохраняется во времени. Все остальные квантовые числа входят в группу приближенных квантовых чисел.

Набор квантовых чисел (нотация) должен однозначно характеризовать состояния и переходы, присущие атомам и молекулам. При описании состояний и переходов исследователи могут использовать разные наборы квантовых чисел. Причина такого разнообразия обусловлена использованием исследователями разных приближений при создании математических моделей атомов и молекул.

Нотация соответствует выбору определенного набора меток и точных квантовых чисел, относящихся к математической модели молекулы. Для определенности далее используется термин «квантовые числа» под которым понимается набор меток и точных

квантовых чисел. Каждая математическая модель молекулы и физический процесс, обуславливающий переходы между состояниями, накладывает ряд ограничений на значения квантовых чисел. Эти ограничения называют правилами отбора для переходов и ограничениями на квантовые числа состояний.

В молекулярной спектроскопии состояние молекулы определяется не только характеристиками ядер и электронов атомов, входящих в молекулу, но и взаимными колебаниями и вращениями отдельных атомов или групп атомов. Квантовые числа, используемые для описания состояния молекулы, делят на несколько групп: электронные, колебательные, вращательные квантовые числа и четность.

Знание химической структуры молекулы, находящейся в определенном электронном состоянии, позволяет определять ее группу симметрии. При переходе из одного электронного состояния в другое симметрия молекулы может изменяться.

Причины выбора разных нотаций при описании одного и того же состояния молекулы могут быть тесно связаны с выбором исследователями разных ориентаций молекулярно-фиксированной системы координат, с различным выбором образующих элементов в группе симметрии молекулы, с выбором разных правил при установлении порядка следования характеристик колебательного состояния и т.д.

В спектроскопии под переходом понимается смена стационарных состояний. До перехода молекула (атом) находится в одном состоянии, а после перехода молекула (атом) находится в другом состоянии. Причины, вызывающие переход, могут иметь разную физическую природу (например, излучение или поглощение фотона или неупругое соударение). Для каждого физического процесса существуют правила, определяющие запрет или разрешение перехода. Эти правила называют правилами отбора. С формальной точки зрения правила отбора представляют алгебраические выражения (равенства и неравенства).

### **Описание структуры данных в VAMDC-XSAMS-схеме**

Основное назначение VAMDC-XSAMS-схемы [4] состоит в обеспечении корректного обмена данными между исследователями. Стоит отметить, что даже простые проверки данных, допустимые стандартом XML, а тем более проверка качества данных, не являются целевой функцией этой схемы. Хотя VAMDC-XSAMS требует включения библиографических ссылок или идентификаторов ресурсов, вопросы проверки корректности данных остаются за их производителем. Это означает, что в результате обмена пользователь может получить такие экзотические наборы данных, которые могут содержать отрицательные интенсивности, частоты и значения квантовых чисел.

На рис. 1 показан корневой XML-элемент XSAMSData и его элементы наследники. Для проверки качества атомарных и молекулярных данных колебательно-вращательной спектроскопии нам нужны XML-элементы, содержащие данные о идентифицирующих состояниях и переходах. Данные о колебательно-вращательной спектроскопии идентифицирующих состояний атомов и молекул относятся, соответственно к XML-элементам Atoms и Molecules, а переходы между идентифицирующими состояниями описываются путем ссылки на начальное и конечное состояние в XML-элементе Radiative.

Перечень квантовых чисел, характеризующих состояние произвольного атома, находится в элементах-наследниках элемента Atoms и включает в себя State parity, Total angular momentum, Relativistic parameter kappa, Hyperfine momentum и др.

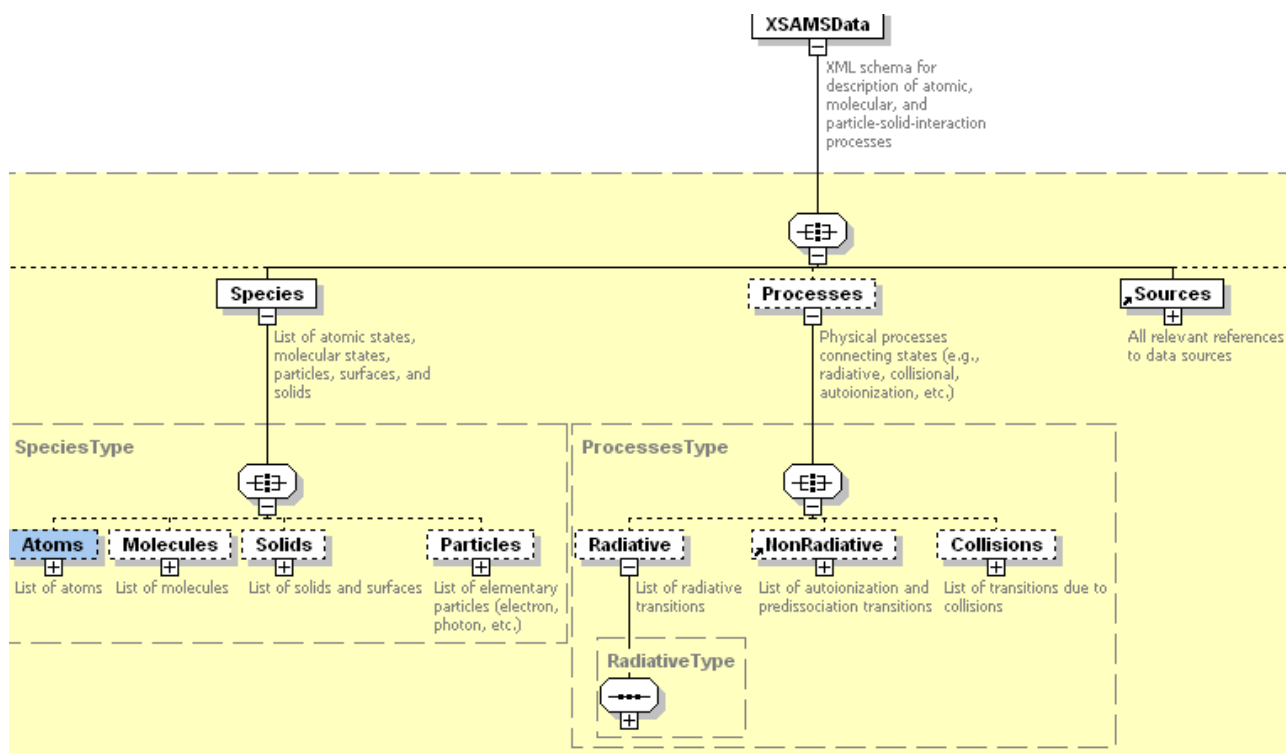


Рис. 1. Корневой элемент VAMDC-XSAMS-схемы и его наследники

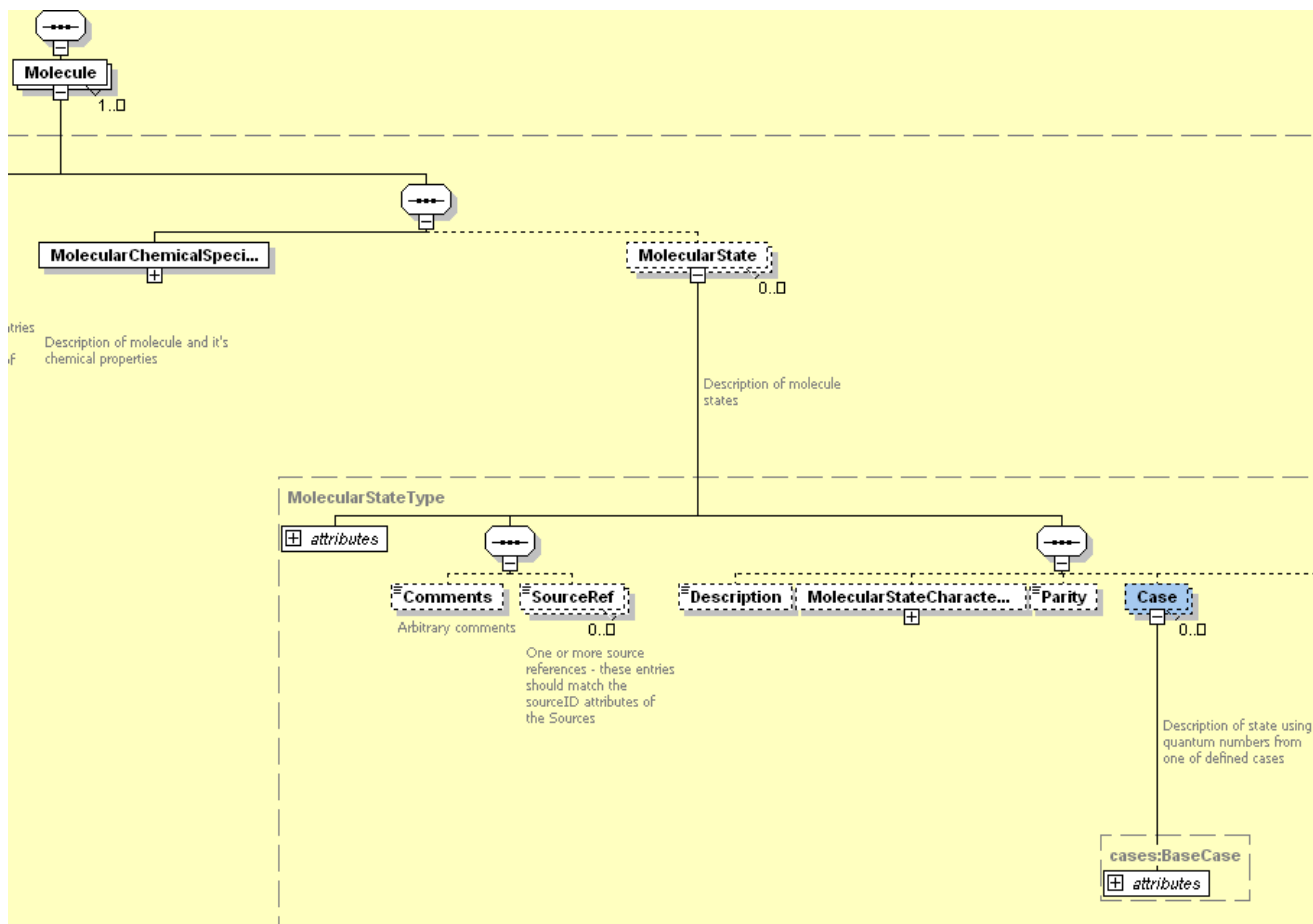


Рис. 2. Элемент Molecule VAMDC-XSAMS-схемы и его наследники

XML-элемент Molecules имеет дочерние элементы Molecule (рис. 2). У которых нам нужны дочерние элементы MolecularState с его дочерним элементом Case. На рис. 3 показана

связь элемента Case с набором квантовых чисел для нелинейных трехатомных молекул с замкнутой оболочкой, к которым относится молекула H<sub>2</sub>O.

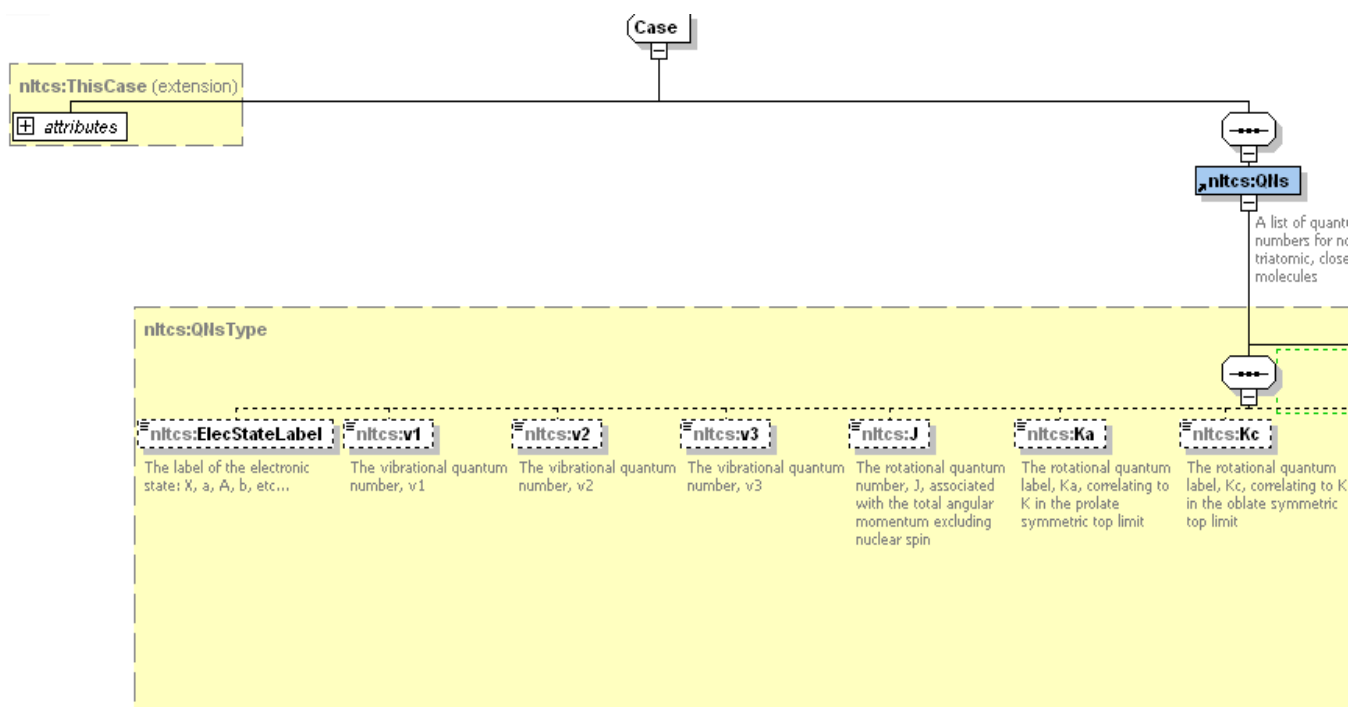


Рис. 3. Элемент Case VAMDC-XSAMS-схемы и его наследники

XML-элемент Radiative имеет элементы-наследники UpperStateRef и LowerStateRef, которые указывают на MolecularState верхнего и нижнего идентифицирующих состояний молекулы, таким образом идентифицируя переход.

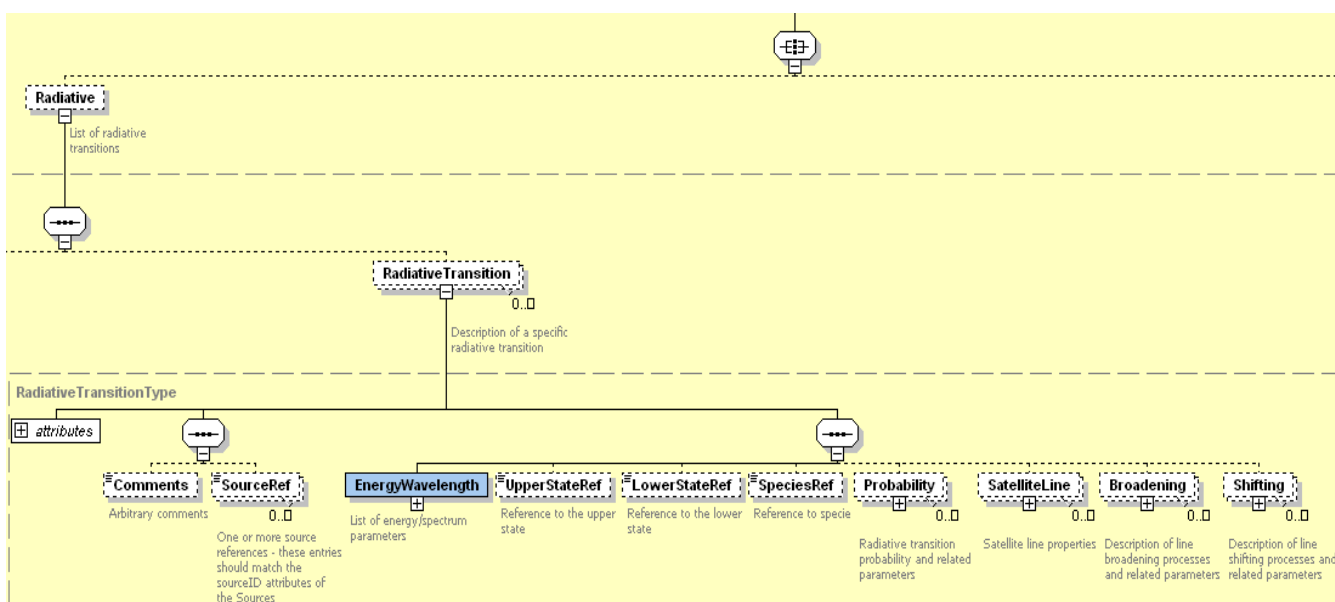


Рис. 4. Элемент Radiative VAMDC-XSAMS-схемы и его наследники

### Правила проверки качества данных

Ограничения на значения связаны с математическими моделями молекул и

физическими ограничениями на рассматриваемые в предметной области процессы. Характерным для количественной спектроскопии примером являются правила отбора для переходов, следующие из математической модели молекулы. С формальной точки зрения этим ограничениям соответствует проверка истинности утверждения о том, что тот или иной переход относится к переходам рассматриваемой молекулы. При рассмотрении физических процессов к правилам отбора могут быть добавлены дополнительные ограничения или изменены правила отбора.

Для атомной колебательно-вращательной спектроскопии приняты следующие два правила отбора для переходов, соответствующих однофотонному поглощению для любых атомов.

Правило 1:  $\Delta J = J_{\text{up}} - J_{\text{low}} = 0$  или  $\pm 1$ , и  $\Delta J \neq 0$ , если  $J_{\text{up}} = 0$  или  $J_{\text{low}} = 0$ . Полный угловой момент при переходе может не изменяться или увеличиваться на единицу.

Правило 2: Четность нижнего состояния не равна четности верхнего состояния.

Для молекулярной колебательно-вращательной спектроскопии правила отбора зависят от выбранной нотации квантовых чисел и выбранной молекулы. Например, для основного изотополога молекулы CO в стандартной нотации, есть три правила.

Правило 1:  $\Delta J = J_{\text{up}} - J_{\text{low}} = \pm 1$ , если переходы не относятся к чисто вращательному спектру. Полный угловой момент при переходе должен изменяться на единицу.

Правило 2: Если переход относится к чисто вращательному спектру  $\Delta v = 0$ , то в поглощении  $\Delta J = J_{\text{up}} - J_{\text{low}} = 1$ .

Правило 3:  $\Delta v = v_{\text{up}} - v_{\text{low}} < 6$ .

Проверка на состояния или переходы равносильна вычислению истинности набора высказываний, структура которых ограничена.

Для проверки ограничений, относящихся к атомным состояниям и переходам, используется фиксированный набор правил, относящийся ко всем атомам, изотопам и ионам. Механизм проверки правил отбора в атомных спектрах состоит в проверке одного и того же набора алгебраических выражений, связанных логическими операциями для разных переходов.

Проверка правил отбора, относящихся к молекулярным состояниям и переходам, значительно сложнее. Это связано со следующими обстоятельствами.

1. Для описания молекулы в фиксированном электронном состоянии могут использоваться разные математические модели. Это приводит к разным наборам меток для описания состояний в зависимости от используемой модели. В общем случае, можно указать полный набор меток, характерный для всех математических моделей. С нотациями связаны наборы некоторых меток и точных квантовых чисел из полного набора меток.

2. Молекула в разных электронных состояниях может иметь разную симметрию. Это означает, что полный набор квантовых чисел может быть разным для разных электронных состояний.

3. Переходы между состояниями в молекулах обусловлены разными физическими процессами. Простейшим примером являются одно- и много-фотонные процессы поглощения. В зависимости от процесса правила отбора имеют разный вид.

Механизм проверки правил отбора в спектре молекулы состоит в проверке набора алгебраических выражений, связанных логическими операциями, который соответствует

некоторому физическому процессу, электронному состоянию молекулы и правилам отбора, относящимся к используемой математической модели.

### Запись правил проверки в расширении VAMDC-XSAMS-схемы

Для описания ограничений на состояния и переходы выбран язык разметки математических выражений MathML[5]. Причина такого выбора связана с тем, что этот язык разметки MathML имеет XML представление и правила отбора можно записать в виде XML-документа. Для проверки состояний и переходов по правилам отбора используется язык Python в код которого преобразуются правила представленные на языке разметки MathML. Перевод кода MathML в код Python осуществляется с помощью библиотеки MathDOM. В программном модуле допускается формулировка правил отбора и ограничений на состояния в коде Python.

Описание правил отбора для некоторых молекул размещены в файлах, находящихся по адресу [http://github.com/VAMDC/NodeSoftware/other/verificaton/xsd/rule/cases/\\*.xsd](http://github.com/VAMDC/NodeSoftware/other/verificaton/xsd/rule/cases/*.xsd)

В каждом файле, содержащем кодированные правила отбора, размещены две группы правил:

1. Правила для проверки ограничений на квантовые числа состояния [название файла + StateRules]
2. Правила для проверки ограничений на квантовые числа переходов [название файла + TransitionRules]

Правила определяются в виде XML-элементов. XML-элемент правила должен иметь имя, созданное в соответствии со структурой: [название файла + Rule + S|T + двухзначный порядковый номер], где символ S указывает на проверку ограничений для состояний, а символ T указывает на проверку ограничений для переходов. Пример записи такого элемента:

```
<xs:element name="atomRuleT01" type="xs:boolean" nillable="true" minOccurs="0">.
```

Дочерними элементами являются:

```
<xs:annotation><xs:appinfo><rule></rule><xs:appinfo></xs:annotation>
```

, где элемент `<rule>` содержит описание правила в формате MathML и необязательный атрибут `forInChIList` для описания условий применения правила. Атрибут `forInChIList` будет иметь значение в виде списка регулярных выражений разделенных пробелом на соответствие InChI. Пример записи элемента `rule`: `<rule forInChIList="InChI=1S/CO/c1-2'.*'">`.

Здесь приведены примеры вариантов описания значений атрибута `forInChIList`:

`InChI=1S/CO/c1-2'.*' применять только для всех молекул CO;`

`InChI=1S/C2H2/c1-2/h1-2H'($/i(1[HDT]?,2[HDT]?,1+0[HDT]?,2+0[HDT]?,1+1[HDT]?,2+1[HDT]?,1+2[HDT]?,2+2[HDT]?))'` применять только для C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> группы симметрии `Dinf_h` (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>D<sub>2</sub>, <sup>13</sup>C<sub>2</sub>D<sub>2</sub>, ...);

`InChI=1S/CO2/c2-1-3'.*' InChI=1S/N2O/c1-2-3'.*' применять только для всех молекул CO2 и N2O;`

`InChI=1S/CO2/c2-1-3'($/i1+[01]($,2+0,3+0|,2+2,3+2))'` применять только для молекул CO<sub>2</sub>, <sup>13</sup>CO<sub>2</sub>, C<sup>18</sup>O<sub>2</sub>, <sup>13</sup>C<sup>18</sup>O<sub>2</sub>;

`InChI=1S/CO2/c2-1-3'($/i1+[01]($,2+0,3+0|,2+1,3+1|,2+2,3+2))'` применять только для симметричных изотопмеров CO<sub>2</sub> (CO<sub>2</sub>, <sup>13</sup>C<sup>17</sup>O<sub>2</sub>, C<sup>18</sup>O<sub>2</sub>, ...);

InChI=1S/H2O/h1H2'(\$/i(1+d)?(\$/h[HDT]2)) применять только для H<sub>2</sub>O группы симметрии C<sub>2v</sub> (H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub><sup>17</sup>O, ...);

InChI=1S/CH4/h1H4'(\$/i1+d[HDT]4)' применять только для молекул CH<sub>4</sub>, <sup>13</sup>CH<sub>4</sub>, CD<sub>4</sub>, CT<sub>4</sub>, ...

Запись ограничений в формате MathML [4] начинаются с элемента <math>. Затем вложенный элемент <apply> (Function Application). В нём проверяемое отношение <eq> (равно), <neq> (не равно), ... А далее вложенные конструкции для правой и левой части отношения каждая заключённая в свой <apply> или число <cn> или идентификатор <ci>.

Внутри <apply> можно использовать любые MathML арифметические (plus, ...), алгебраические (root, ...), логические операции (or, ...).

Идентификатор <ci> содержит название квантового числа определенного в VAMDC-XSAMS-схеме в соответствии с правилами:

[префикс пространства имён + : + название квантового числа + [@ + название атрибута квантового числа + = + значение атрибута + ] + # + UpperStateRef | LowerStateRef + ?], где: «префикс пространства имён + :» необходим для указания квантовых чисел молекул, для атомов он не используется[3];

«название квантового числа» присутствует всегда и совпадает с названием соответствующего XML-элемента из VAMDC-XSAMS-схемы;

«[@ + название атрибута квантового числа + = + значение атрибута + ]» присутствует, если у соответствующего XML-элемента из VAMDC-XSAMS-схемы есть уточняющий атрибут с определенным значением;

«# + UpperStateRef | LowerStateRef» указывается, только если правило применяется для переходов и важно, где квантовое число верхнего, а где нижнего состояния;

«?» признак того, что квантовое число может отсутствовать и это не будет считаться ошибкой при применении правила.

Примеры представления квантовых чисел при составлении правил отбора и ограничений на состояния даны ниже:

- TotalAngularMomentum — атомное квантовое число TotalAngularMomentum;
- Parity#UpperStateRef — атомное квантовое число Parity для верхнего состояния;
- dcs:J#UpperStateRef — молекулярное квантовое число J из пространства имён dcs для верхнего состояния;
- lpcs:vi[@mode=5]#LowerStateRef — молекулярное квантовое число vi со значением атрибута mode=5 из пространства имён lpcs для нижнего состояния;
- sphcs:S#UpperStateRef? — квантовое число S из пространства имён sphcs для верхнего состояния может отсутствовать.

Пример правила отбора № 1 для молекулы CO, описанного выше, имеет вид:

```
<xs:element name="dcsRuleT01" type="xs:boolean" nillable="true" minOccurs="0">
  <xs:annotation>
    <xs:appinfo>
      <rule forInChIList="InChI=1S/CO/c1-2'.*"'>
        <math xmlns="http://www.w3.org/1998/Math/MathML">
          <apply>
            <eq/>
            <apply>
              <abs/>
```



```

<apply>
  <minus/>
  <ci>dcs:J#UpperStateRef</ci>
  <ci>dcs:J#LowerStateRef</ci>
</apply>
</apply>
<cn>1</cn>
</apply>
</math>
</rule>
</xs:appinfo>
</xs:annotation>
</xs:element>

```

## Проверка данных

В рамках виртуального центра VAMDC возможны разные сценарии выдачи сообщений о результате верификации. Эти сценарии описываются параметром RETURN, принимающим значения ALL, BAD, GOOD. При значении ALL в выходном документе размещаются сообщения как об удовлетворяющих ограничениям состояниях и переходах, так и неудовлетворяющих. При значении BAD в выходном документе размещаются сообщения о не удовлетворяющих ограничениям состояниях и переходах. При значении GOOD в выходном документе размещаются сообщения об удовлетворяющих ограничениям состояниях и переходах. Ниже дан пример запроса, который отправляет виртуальный центр VAMDC своим поставщикам данных.

Пример запроса, <http://vamdc.saga.iao.ru/node/wadis/tap/sync/?LANG=VSS1&FORMAT=VERIFICATION&FORMAT=BAD&QUERY=SELECT+All+WHERE+RadTransWavenumber+%3E+1239+AND+RadTransWavenumber+%3C+1240>

Если у вас есть, готовый VAMDC-XSAMS-документ, то можно сделать локальную проверку запустив программный модуль проверки: `python check.py in.xsams out.xsams`

В результате проверки правил отбора формируется XML-документ, проверяемый на соответствие XML-схеме, доступной по адресу <https://github.com/VAMDC/NodeSoftware/blob/master/other/verification/verification.xsd>, расширяющей VAMDC-XSAMS-схему. Ниже приведён пример, получаемого XML-документа для молекулы CO, где жирным шрифтом выделены добавленные элементы, необходимые для отображения результатов проверки.

```

<?xml version="1.0" ?>
<VerificationData xmlns:cml="http://www.xml-cml.org/schema" xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
xmlns="http://vamdc.org/xml/xsams/0.3" xsi:schemaLocation="http://vamdc.org/xml/xsams/0.3 ../verification.xsd" >
  <VerificationResult>
    <NumberOfRadiativeTransitions correct="1" incorrect="2" total="3" unidentified="0"/>
    <NumberOfVerificationByRule name="dcsRuleT01" correct="2" incorrect="1" unidentified="0"/>
    <NumberOfVerificationByRule name="dcsRuleT02" correct="2" incorrect="1" unidentified="0"/>
    <NumberOfVerificationByRule name="dcsRuleT03" correct="2" incorrect="1" unidentified="0"/>
  </VerificationResult>
  <XSAMSData>
    <Species>
      <Molecules>
        <Molecule speciesID="XHIT-UGFAIRIUMAVXCW-OUBTZVSYSA-N">
          <MolecularChemicalSpecies>
            <InChi>InChi=1S/CO/c1-2/i1+1</InChi>
          </MolecularChemicalSpecies>
          <MolecularState stateID="SHIT-6957"/>
          <MolecularState stateID="SHIT-6958"/>
        </Molecule>
      </Molecules>
    </Species>
  </XSAMSData>
</VerificationData>

```

```

<MolecularState stateID="SHIT-6959">
  <Description/>
  <MolecularStateCharacterisation>
    <StateEnergy energyOrigin="Zero-point energy">
      <Value units="1/cm">9891.4191</Value>
    </StateEnergy>
    <TotalStatisticalWeight>182</TotalStatisticalWeight>
  </MolecularStateCharacterisation>
  <Case
caseID="dcs" xmlns:case="http://vamdc.org/xml/xsams/0.3/cases/dcs"
xsi:type="case:Case">
    <case:QNs>
      <case:ElecStateLabel>X</case:ElecStateLabel>
      <case:v>8</case:v>
      <case:J>46</case:J>
    </case:QNs>
  </Case>
</MolecularState>
<MolecularState stateID="SHIT-6960">
  <Description/>
  <MolecularStateCharacterisation>
    <StateEnergy energyOrigin="Zero-point energy">
      <Value units="1/cm">3947.6008</Value>
    </StateEnergy>
    <TotalStatisticalWeight>186</TotalStatisticalWeight>
  </MolecularStateCharacterisation>
  <Case
caseID="dcs" xmlns:case="http://vamdc.org/xml/xsams/0.3/cases/dcs"
xsi:type="case:Case">
    <case:QNs>
      <case:ElecStateLabel>X</case:ElecStateLabel>
      <case:v>0</case:v>
      <case:J>46</case:J>
    </case:QNs>
  </Case>
</MolecularState>
<MolecularState stateID="SHIT-6961"/>
<MolecularState stateID="SHIT-6962"/>
</Molecule>
</Molecules>
</Species>
<Processes>
  <Radiative>
    <RadiativeTransition id="P1"/>
    <RadiativeTransition id="P2">
      <EnergyWavelength>
        <Wavenumber>
          <SourceRef>BHIT-CO-nu-2</SourceRef>
          <Value units="1/cm">5943.8183</Value>
        </Wavenumber>
      </EnergyWavelength>
      <UpperStateRef>SHIT-6960</UpperStateRef>
      <LowerStateRef>SHIT-6959</LowerStateRef>
      <Verification>
        <dcsRuleT01>false</dcsRuleT01>
        <dcsRuleT02>true</dcsRuleT02>
        <dcsRuleT03>false</dcsRuleT03>
      </Verification>
    </RadiativeTransition>
  </Radiative>
</Processes>
</XSAMSData>
</VerificationData>

```

Созданное программное обеспечение размещено по адресу <https://github.com/VAM-DC/NodeSoftware/tree/master/other/verification>.

## Заключение

В рамках проекта VAMDC разработан стандарт VAMDC-XSAMS для обмена спектроскопическими данными. Для контроля качества данных и их последующей коррекции создан программный модуль проверки по ряду формальных критериев для атомарных и молекулярных данных в формате VAMDC-XSAMS. Для описания правил проверки модуля была разработана XML-схема, расширяющая VAMDC-XSAMS-схему, в которой сами правила проверки записываются на языке MathML.

Авторы выражают благодарность седьмой рамочной программе за поддержку проекта VAMDC.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1]. Virtual Atomic and Molecular Data Center. – Электрон. текстовые дан. – 2010. – Режим доступа: <http://vamdc.eu/>.
- [2]. M.L. Dubernet, V. Boudon, J.L. Culhane, M.S. Dimitrijevic, A.Z. Fazliev, C. Joblin, F. Kupka, G. Leto, P. Le Sidaner, P.A. Loboda, H.E. Mason, N.J. Mason, C. Mendoza, G. Mulas, T.J. Millar, L.A. Nuñez, V.I. Perevalov, et al., Virtual atomic and molecular data centre, J. Quant. Spectr. Rad. Transfer, 2010, V. 111, Issue 15, P. 2151-2159.
- [3]. Фазлиев А.З., Привезенцев А.И., Ахлестин А.Ю., Лаврентьев Н.А., Козодоев А.В. Инструмент публикации в проекте VAMDC. – Электрон. текстовые дан. – 2010. – Режим доступа: <http://conf.nsc.ru/dicr2010/ru/reportview/17559>. – Доклады XIII Российской конференции "Распределенные информационные и вычислительные ресурсы"(DICR'2010).
- [4]. VAMDC-XSAMS reference guide. XML Schema for Atoms, Molecules and Solids (XSAMS). – Электрон. текстовые дан. – 2012 – Режим доступа: <http://www.vamdc.eu/documents/standards/dataModel/vamdcxsams/index.html>.
- [5]. W3C Math Home. – Электрон. текстовые дан. – 1994 – Режим доступа: <http://www.w3.org/Math/>.