

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МОДУЛЬ «УНАРНЫЕ ОПЕРАЦИИ» В ИВС «МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ»

Козодоев А.В., Козодоева Е.М.

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Томск, Россия

kav@iao.ru, klen@iao.ru

Аннотация

В работе описывается подход использованный при разработке и реализации модуля выполняющего унарные операции над данными в ИВС «Молекулярная спектроскопия». Приводится краткое описание унарных операций с учётом особенностей предметной области. Описан подход, использованный в программной реализации, позволяющий использовать один набор скриптов для работы с имеющимися базами данных по различным веществам и несколькими типами спектроскопических данных.

Введение

В естественных науках, опирающихся на значительные объёмы данных (спектроскопия, химия, генетика и др.), определяющую роль играют структуры и типы данных, используемые предметными приложениями, вычисляющими количественные характеристики. В силу приближенного характера измерений и вычислений на практике используется дополнительная классификация частей таких структур данных. Универсальная детальная классификация, применимая ко всем наукам, вряд ли возможна. Однако некоторые её элементы, относящиеся к систематизации информационных ресурсов, такие как первичные и составные источники данных, применяются в значительном числе предметных областей. Среди составных источников данных выделяют экспертные данные. Основная их цель - предоставить неискушенному в конкретной области пользователю достоверные и согласованные данные, которым он может доверять [1]. Как правило, объем таких данных на порядок ниже объёма данных предметной области.

Полностью автоматизированное построение экспертных данных практически не реализовано, так как некоторые, принимаемые экспертами, решения не поддаются алгоритмизации. По этой причине эксперты применяют средства манипуляции данными. Построение таких автоматизированных средств опирается на анализ алгебры операций, характерной для манипуляций данными в конкретной предметной области.

Для построения экспертных данных могут использоваться первичные данные (документированные данные измерений и вычислений) и эталонные данные. Эталонные данные получаются в результате точных аналитических расчетов. Примером таких данных в количественной спектроскопии являются вакуумные волновые числа, вычисляемые в соответствии с принципом Ридберга-Ритца, с помощью уровней энергии.

В статье рассмотрена задача построения приложения, обеспечивающего реализацию манипуляций данными в количественной спектроскопии. Рассмотрены манипуляции, основанные на использовании пары унарных операций. Более общая постановка задачи дана в [2]. Нам неизвестны решения альтернативные предлагаемому в данной работе.

Постановка задачи

В количественной спектроскопии значительный объем исследований связан с измерениями и вычислениями. Предсказанные переходы являются результатами теоретических расчетов (глобальная подгонка или *ab initio* расчеты) и характеризуются набором значений физических величин. Мультимножество [3] измеренных переходов состоит из характеристик переходов, определенных при обработке экспериментальных данных и эталонных переходов вычисленных из уровней энергии молекул по правилу Ридберга - Ритца. Необходимым условием для использования в приложениях первичных предсказанных и измеренных данных является их согласование. Последнее не всегда достижимо в полном объеме и создает трудности для алгоритмизации процесса построения экспертных данных.

В зависимости от решаемых задач в спектроскопии используются разные структуры данных. Структура экспертных спектральных данных, относящихся к процессам поглощения, формировалась последние сорок лет (см. последние версии [4,5]) и ориентирована на их использование в задачах переноса излучения. В работах [6,7,8] предложены структуры спектральных данных для систематизации решений шести задач спектроскопии, которые применимы для построения экспертных данных разного назначения.

Использование, упомянутых выше, структур данных означает, что мультимножества уровней энергии, переходов и параметров профилей линий представляют собой набор решений трех обратных задач спектроскопии, а предсказанные (рассчитанные) уровни энергии, переходы и параметры профилей линий - набор решений трех прямых задач спектроскопии. Поскольку структуры решений прямых и обратных задач подобны, то необходимо рассмотреть операции манипуляции с данными только трех структур.

Решение каждой задачи в ИВС «молекулярная спектроскопия» [8] представляет собой независимый информационный объект, называемый набором данных, содержащий первичные или композитные данные. Манипуляции данными для получения экспертных данных являются сложными операциями, которые строятся путем комбинирования базовых операций. Базовые операции делятся на унарные и бинарные по количеству массивов данных участвующих в операции. С учётом особенностей предметной области к базовым унарным операциям относятся операции:

- 1) выбор/удаление данных удовлетворяющих условию;
- 2) выбор/удаление атрибутов из массива данных.

Необходимо рассмотреть применимость этих операций к данным молекулярной спектроскопии с учётом особенностей предметной области.

С учётом рассмотренных особенностей структур данных и особенностей выполнения унарных операций требуется создать программное обеспечение, которое позволит автоматизировать часть не формализуемых операций при составлении экспертных массивов данных в молекулярной спектроскопии.

Для достижения полного доверия по критерию опубликования [1] к созданным экспертным данным необходимо наложить ограничения на источники данных с которыми проводятся манипуляции. Создание таких экспертных наборов данных должно основываться на унарных операциях только с наборами данных первичных источников, их частями или наборами производными от первичных данных. В остальном пользователь не ограничен в применении унарных операций.

В виду наличия данных содержащих решения прямых и обратных спектроскопических задач по уровням энергии, спектральным переходам и профилям спектральных линий для достаточно большого количества веществ и их изотопологов требуется создать программный модуль для выполнения унарных операций, имеющий возможность настройки под соответствующие структуры данных, так как создание большого количества отдельных модулей со схожей функциональностью требует больших трудозатрат. Настройка модуля должна позволять распространять его функциональность на данные по новым веществам.

Структура спектральных данных в количественной спектроскопии

Как уже упоминалось ранее, структура спектральных данных зависит от того для решения каких задач они предназначены. В экспертных банках данных [4,5] структура данных определяется структурой входных данных для программ расчета потоков излучения в атмосферах планет и представляется набором строк. В задачах расчета эталонных уровней энергии и вакуумных волновых чисел используется структура данных, характеризующая решения этих двух задач спектроскопии [9,10].

Решение обратной задачи описания состояний молекулы включает в себя значения уровней энергии и квантовые числа состояний. Обратная задача описания переходов изолированной молекулы в качестве решения имеет вакуумные волновые числа и квантовые числа переходов. Решения обратных задач описания переходов молекулы в газовой среде характеризуются квантовыми числами и набором значений параметров контура спектральной линии. Физические величины, входящие в решение первых двух задач обязательно должны присутствовать в них. Решения третьей задачи должны содержать квантовые числа переходов и хотя бы один из параметров контура спектральной линии.



Рисунок 1: Структуры данных решений спектроскопических задач

Рассматриваемые нами прямые и обратные задачи спектроскопии имеют сходные структуры данных. Следовательно, достаточно рассмотреть операции манипуляции с данными только трех структур (рисунок 1).

Большая часть физических величин, входящих в структуру спектральных данных не зависят от выбора конкретной молекулы. Квантовые числа состояния молекулы являются единственным набором физических величин которые меняются при переходе от молекулы одного спектрального класса молекул к другому, а также от n -атомной к m -атомной молекуле. Среди наборов квантовых чисел выделяют подмножества определяющие, так называемые, спектральные полосы. Эти подмножества так же меняются в зависимости от конкретной молекулы.

Квантовые числа зависят от физического процесса, в котором участвует вещество, и его электронного состояния. Мы рассматриваем квантовые числа в нормальных модах, как наиболее часто используемые для веществ в условиях близких к атмосферным и находящихся в основном электронном состоянии. В таких квантовых числах выделяют две части: колебательные и колебательно-вращательные квантовые числа. Колебательные квантовые числа являются подмножеством квантовых чисел определяющих спектральные полосы переходов. Нами используются квантовые числа предложенные в проекте VAMDC для процессов поглощения молекул в основном электронном состоянии[6,7].

В качестве примера различий в квантовых чисел у разных веществ возьмём состояния молекул основных изотопологов CO_2 и H_2O . Квантовые числа описывающие состояние CO_2 обозначаются как $\nu_1, \nu_2, l_2, \nu_3, r, \text{Sym}, J$. Первые пять являются колебательными квантовыми числами. Для H_2O квантовые числа следующие $\nu_1, \nu_2, \nu_3, J, K_a, K_c$, а колебательными являются первые три.

Определение унарных операций в количественной спектроскопии

Для формального определения операций воспользуемся аппаратом алгебры кортежей (АК) [11]. Приведём определения используемых понятий.

Алгебра кортежей – это алгебраическая система, носитель которой – совокупность многоместных отношений, выраженных в специфических структурах (элементарный кортеж, S -кортеж, S -система, D -кортеж, D -система), называемых АК-объектами.

Под *атрибутом* понимается имя некоторого свойства системы или ее части, представленное множеством непосредственно заданных или вычисляемых значений (*доменов*). Возможны случаи, когда одному и тому же домену соответствует несколько атрибутов. Тогда такие атрибуты относятся к одному *сорт*у.

Элементарный кортеж – это последовательность элементов, каждый из которых есть элемент *домена* соответствующего *атрибута* из схемы отношения. Например, если задан элементарный кортеж $T[XYZ]=(a,b,c)$, то подразумевается, что $a \in X$, $b \in Y$ и $c \in Z$. В АК элементарные кортежи принадлежат множествам (отношениям), выраженных другими типами АК-объектов.

Компонентами называются множества, представляющие собой подмножества доменов соответствующих атрибутов. Среди компонент имеются две *фиктивные* компоненты. Полная и пустая компоненты. В этой работе будет использоваться только одна – *полная* компонента. Полная компонента «*» равна домену соответствующего (по месту ее расположения в кортеже) атрибута.

S-кортежем называется заданный в определенной схеме отношения кортеж компонент. S -кортеж эквивалентен некоторому множеству элементарных кортежей – это множество можно перечислить, если вычислить декартово произведение компонент

С-кортежа. Для изображения С-кортежей используются прямые скобки. Например, означает, что $A \subseteq X$, $B \subseteq Y$, $C \subseteq Z$ и $R[XYZ] = A \times B \times C$.

С-системой называется множество однотипных С-кортежей, которые записываются в виде матрицы, ограниченной прямыми скобками. Строки этой матрицы содержат С-кортежи.

С-система эквивалентна множеству элементарных кортежей. Это множество равно объединению множеств элементарных кортежей, принадлежащих соответствующим

С-кортежам. Например, С-систему $Q[XYZ] = \begin{bmatrix} A_1 & B_1 & C_1 \\ A_2 & B_2 & C_2 \end{bmatrix}$

можно представить как множество элементарных кортежей, вычисляемое по формуле

$$Q[XYZ] = (A_1 \times B_1 \times C_1) \cup (A_2 \times B_2 \times C_2).$$

С точки зрения АК таблицы в СУБД могут быть представлены как множество элементарных кортежей или как С-система, где все компоненты есть одноэлементные множества. Для простоты рассмотрим случай, когда все данные представлены в одной таблице. Как упоминалось ранее нам необходимы две операции — проекция и селекция.

Проекция создает из отношения $Q[X']$ отношение $Q_p[X' \setminus Y']$, где для множеств атрибутов X' и Y' справедливо $Y' \subset X'$.

Для операции *селекции* необходимо задать ограничения на один или несколько произвольных атрибутов схемы отношения, чтобы затем выбрать кортежи удовлетворяющие этим ограничениям. Пусть ограничение любого атрибута задаётся в виде условий $X \Delta c$ связанных операторами конъюнкции и дизъюнкции, в комплексе отражающее требуемое ограничение атрибута, где c — элемент или множество элементов сорта, соответствующего данному атрибуту, Δ — одно из множества отношений сравнения $\{<, \leq, =, \neq, \geq, >\}$. Применимость отношений сравнения к конкретному атрибуту определяется типом домена этого атрибута. Обозначим ограничения на атрибут с доменом X как X_c . Тогда ограничение можно выразить как С-кортеж, у которого выбранные атрибуты X_i представлены элементами или подмножествами соответствующих сортов (соответствующими условиям $X_i c$), а остальные атрибуты данной схемы отношения — фиктивными компонентами. Например, для отношения $P[XYZV]$ С-кортеж $Q = [* \{a\} * \{d, f\}]$ является селектором с ограничениями ($Y = a$) и ($V = d$ или $V = f$). Селекция данных по таким ограничениям формируется при пересечении этого С-кортежа с отношением P . Операция удаление сводится к пересечению $P \cap \bar{Q}$.

Если результат селекции обозначить как $R_s = P \cap Q$, а результат удаления как $R_D = P \cap \bar{Q}$, то $R_D \cup R_s = P$. Таким образом из операций селекции и удаления достаточно одной, так как результат второй можно получить инвертировав условие.

Применение операции селекции, описанной выше, к данным количественной спектроскопии не имеет ограничений накладываемых предметной областью. В то время как операция проекции имеет ограничения, так как некоторые атрибуты являются обязательными, например, квантовые числа. А другие не имеют смысла без базового атрибута. Например, величина ошибки полуширины не имеет смысла без значения самой полуширины. Так же к ограничениям можно отнести неизменность исходного набора данных, т.е. в результате операции получается новый набор данных.

Реализация модуля «Унарные операции»

Описанные выше унарные операции над наборами данных реализованы в виде отдельного модуля ИВС «Молекулярная спектроскопия» (<http://www.saga.iao.ru>). Ранее мы описывали прототип модуля унарных операций на примере данных CO_2 и задачи спектральных переходов [12]. Функционал модуля, с точки зрения пользователя системы, подробно рассматривать не будем, так как он поменялся не значительно и был описан ранее. Как дальнейшее развитие ИВС, мы предполагали расширение возможностей этого модуля в сторону работы с данными по различным веществам и их изотопологам. В виду

необходимости выполнения манипуляций со спектральными данными относящимся к решениям разных задач количественной спектроскопии, требования к функционалу модуля были расширены работой с данными различных структур, которые определяются соответствующими задачами рассмотренными ранее. Таким образом универсальность модуля охватывает три различные структуры данных с изменчивой частью в виде квантовых чисел. Далее описывается подход позволивший реализовать такую универсальность.

Как было сказано выше, данные различных задач имеют свою структуру (рисунок.1). В дополнение к задаче, структура данных определяется квантовыми числами присущими конкретному веществу. Таким образом комбинация задачи и вещества определяет множество элементов структуры данных соответствующих квантовым числам, физическим характеристикам и другим данным. Обычно, знания о них используются в качестве априорных при написании программы, что приводит к жёсткой привязке элементов структуры данных и связанных с ними обработчиков в программе, и не позволяет использовать программу для других структур данных. Этого можно избежать если связь элементов структуры данных и соответствующих им обработчиков указать в качестве свойств этих элементов, создав отдельное описание структуры данных вне программы.

Для конкретной задачи и вещества нам известны как элементы структуры так и действия, которые выполняются ними. Количество видов действий при выполнении унарных операций ограничено (конечно и не велико). Соответственно, можно внести признаки таких действий в свойства элементов структуры. Таким образом, подразумеваемые знания об элементах указываются явно и являются настройкой (конфигурационной информацией) для работы программы. Степень детализации и уровень абстракции при выделении таких свойств определяются функциональностью разрабатываемого модуля, и для получения искомой универсальности далеко не все действия требуется выносить в свойства элементов структуры. Для реализации унарных операций над наборами спектроскопических данных были выделены свойства необходимые: для сопоставления элементов структуры данных и полей в таблицах базы данных, для преобразования квантовых чисел в человеко читаемый вид, для группировки квантовых чисел при выборке данных по спектральной полосе, для задания типа условия накладываемого на данные при селекции данных из набора данных (задание диапазона значения величины или выбор значения из списка) и некоторые другие.

В программах модуля использующего такое описание структуры данных в качестве настроек, не заложено информации о том, что какой-то конкретный элемент множества является, например, квантовым числом. Программы модуля перебирают элементы конфигурационного массива и выполняют действия соответствующие значениям свойств этих элементов. Таким образом мы получили требуемую степень универсальности и, что более важно для нас, возможность расширения области применимости разработанного модуля дополнением элементов конфигурационного массива данными описывающими новые структуры данных при наполнении ИВС данными по новым веществам.

На рисунках 2,3 и 4 представлены интерфейсы модуля унарных операций: для параметрического выбора исходного набора данных, задания условий для унарной операции и их логической комбинации и просмотра результата с созданием нового набора данных.

Разработанное программное обеспечение выполнено с применением языка программирования PHP. В качестве веб-сервера используется Apache. Хранение и обработка данных в ИВС осуществляется с помощью реляционной СУБД MySQL.

Поиск источников информации

Выбор задачи: Уровни энергии Профили линий Переходы

Вещество: H2O

Диапазон вакуумных частот (см⁻¹): 30000

Слова для поиска источников данных по контексту, содержащемуся в аннотации или ссылке на публикацию. (Фамилии авторов публикаций, журнал, год публикации, слова из названий статьи)

Искать источники информации

Выбрать источник информации

Показать 40

Всего строк 171

Настройки

Выбор	Название	Число записей	Аннотация
<input type="radio"/>	1962_BIPiBe_H2O	2	L. R. Blaine, E. K. Plyler, and W. S. Benedict, Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology, 1962, Volume 66A, Pages 223.
<input type="radio"/>	1962_RaBrSiWi_H2O	117	K. NARAHARI RAO, W. W. BRIM, V. L. SINNETT, and RALPH H. WILSON, Wavelength Calibrations in the Infrared. IV. Use of a 1000-Lines-per-Inch Bausch and Lomb Plane Replica Grating, Journal of Optical Society of America, 1962, Volume 52, Issue 8, Pages 862-865, DOI: 10.1364/JOSA.52.000862, http://www.opticsinfobase.org/josa/abstract.cfm?URI=josa-52-8-862 .
<input type="radio"/>	1964_GaCaHaBe_H2O	2	D. M. Gates, R. F. Calfee, D. W. Hansen, and W. S. Benedict, Monograph 71, U.S., Natl. Bur. Std., 1964.
<input type="radio"/>	1966_LiDeGa_H2O	5	M. Lichtenstein, V.E. Derr, J.J. Gallagher, Millimeter wave rotational transitions and the Stark effect of the water molecule, Journal of Molecular Spectroscopy, 1966, Volume 20, Issue 4, Pages 391-401, DOI: 10.1016/0022-2852(66)90010-5.

Рисунок 2: Интерфейс выбора набора данных

Условия для унарных операций

2012_YuPeDrMa_H2O

Shanshan Yu, John C. Pearson, Brian J. Drouin, Marie-Aline Martin-Drumel, Olivier Pirali, Michel Vervloet, Laurent H. Coudert, Holger S.P. Muller, Sandra Brunken, Measurement and analysis of new terahertz and far-infrared spectra of high temperature water, Journal of Molecular Spectroscopy, 2012, Volume 279, Pages 16–25, DOI: 10.1016/j.jms.2012.07.011, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jms.2012.07.011>.

Annotation

Выбор ограничений

Физические величины	Ограничения
Колебательная полоса	0 2 0 - 0 2 0
Полный угловой момент нижнего состояния $J_{\min} < J < J_{\max}$	1 20 (1 - 26)
Вакуумные волновые числа $\omega_{\min} < \omega < \omega_{\max}$	400 (9.85717 - 687.61435)
Неопределенность вакуумных волновых чисел $\Delta\omega_{\min} < \Delta\omega < \Delta\omega_{\max}$	(0.0008 - 0.02)

Сохранить ограничение

Таблица ограничений

Имя ограничения	Колебательная полоса	Полный угловой момент нижнего состояния (J)	Вакуумные волновые числа (ω)	Неопределенность вакуумных волновых чисел ($\Delta\omega$)
C0	0 0 0 0 1 0			
C1	0 2 0 0 2 0	1 - 20	400 -	

Очистить таблицу ограничений

Формирование условий и выполнение унарных операций

Условие: C0 OR C1

--- NOT OR AND BACK

Данные удовлетворяющие сформированному условию:

Выбрать Исключить

--- C0 C1

Рисунок 3: Интерфейс задания условий для унарной операции

Показать 10 строк от 0		Всего строк 629		Настройки	
исключить/оставить	Квантовые числа	Вакуумные волновые числа (ω)	Неопределенность вакуумных волновых чисел ($\Delta\omega$)	Выбранные колонки	
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 7 2 5 0 2 0 7 5 2	401.14868	0.0008	<input checked="" type="checkbox"/>	исключить/оставить
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 17 3 14 0 2 0 18 4 15	401.8306	0.0008	<input checked="" type="checkbox"/>	Квантовые числа
<input type="checkbox"/>	0 2 0 8 4 5 0 2 0 9 5 4	402.92637	0.0008	<input checked="" type="checkbox"/>	Вакуумные волновые числа (ω)
<input type="checkbox"/>	0 2 0 6 6 0 0 2 0 7 7 1	405.03481	0.0008	<input checked="" type="checkbox"/>	Неопределенность вакуумных волновых чисел ($\Delta\omega$)
<input type="checkbox"/>	0 2 0 7 5 3 0 2 0 8 6 2	406.54199	0.0008	<input type="button" value="Выбор"/>	
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 18 5 14 0 2 0 19 4 15	407.79716	0.0008		
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 19 3 17 0 2 0 20 2 18	409.62144	0.0008		
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 20 1 19 0 2 0 21 2 20	409.69432	0.0008		
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 20 2 19 0 2 0 21 1 20	409.80903	0.0008		
<input checked="" type="checkbox"/>	0 2 0 19 2 17 0 2 0 20 3 18	410.08299	0.0008		

Сохранение источника данных в ИС с учётом выбранных колонок и строк.

Название сохраняемого источника данных:

Рисунок 4: Интерфейс просмотра результатов унарной операции и сохранения нового источника данных.

Заключение

В работе представлен подход к созданию универсального модуля выполняющего унарные операции над наборами данных содержащими решения таких прямых и обратных спектроскопических задач, как уровни энергии, спектральные переходы и профили спектральных линий, для различных веществ. Дано краткое описание созданных интерфейсов ИВС для выполнения унарных операций, позволяющих исключать или выбирать данные из исходного набора данных, удовлетворяющие условиям наложенным пользователем. Результат выполнения операций сохраняется в новый набор данных, обеспечивая сохранность исходного набора данных.

Следующими направлениями развития ИВС «Молекулярная спектроскопия» в области манипуляций со спектроскопическими данными предполагается создание модуля бинарных операций, основанного на аналогичных принципах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лаврентьев Н.А., Макогон М.М., Фазлиев А.З. Сравнение спектральных массивов данных HITRAN и GEISA с учетом ограничения на опубликование спектральных данных. Оптика атмосферы и океана, 2011, 24, 4, 279-292.
2. Козодоев А.В., Фазлиев А.З. Информационная система для решения задач молекулярной спектроскопии. 2. Операции преобразования наборов параметров спектральных линий. // Оптика атмосферы и океана, 2005, том 18, № 09, стр.760-764.
3. Петровский А.Б. Пространства множеств и мультимножеств, М.: Едиториал УРСС, 2003. – 248с.

4. N. Jacquinet-Husson, L. Crepeau, R. Armante, et al., The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2011, v. 112, Issue 15, p. 2395-2445
5. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A. et al. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database, *J. Quant. Spectrosc. & Rad. Transfer*. 2009. v. 110, No 9. p. 533-572.
6. Marie-Lise Dubernet, Vincent Boudon, J. L. Culhane, et al., Virtual Atomic and Molecular Data Centre. // *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 111 (2010), p.2151–2159, doi:10.1016/j.jqsrt.2010.05.004
7. The Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC), <http://www.vamdc.eu/>
8. Bykov A.D., Fazliev A.Z., Filippov N.N., Kozodoev A.V., Privezentsev A.I., Sinitsa L.N., Tonkov M.V., Tretyakov M.Yu. Distributed information system on atmospheric spectroscopy // *Geophysical Research Abstracts*, SRef-ID: 1607-7962/gra/EGU2007-A-01906. 2007. V. 9. P. 01906.
9. S.A. Tashkun, V.I. Perevalov, J.-L. Teffo. Global Fittings of the Vibrational – Rotational Line Positions of the $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{17}\text{O}$ and $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ Isotopic Species of Carbon Dioxide. *J.Mol.Spectrosc.* v.210, (2001), p.137–145.
10. Tibor Furtenbacher, Attila G. Császár, MARVEL: Measured active rotational–vibrational energy levels. II. Algorithmic improvements, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2012, Volume 113, Issue 11, Pages 929–935
11. Кулик Б.А., Зуенко А.А., Фридман А.Я. Алгебраический подход к интеллектуальной обработке данных и знаний. – СПб.: Изд-во Политехн. Ун-та, 2010. 235 с.
12. Козодоев А.В. Унарные операции над источниками данных в информационной системе CaD@DIS [Электронный ресурс]// XIV Российская конференция с участием иностранных ученых «Распределенные информационные и вычислительные ресурсы» - DICR-2012 (Новосибирск, Россия, 26.11 - 30.11.2012): Материалы конференции. - Новосибирск: ИВТ СО РАН, 2012. - Рег.номер 0321300118. - Режим доступа: <http://conf.nsc.ru/dicr2012/ru/reportview/141076>