
БИЗНЕС-ИНФОРМАТИКА

УДК 539.184

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ ПО АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ: ОТ ИНФОРМАЦИОННО-ПОИСКОВЫХ К СИСТЕМАМ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ*

В.Г. Казаков

Новосибирский государственный университет
экономики и управления «НИНХ»,
Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет

В.В. Казаков, В.С. Ковалев

Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет

А.М. Федотов

Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет,
Институт вычислительных технологий СО РАН

А.С. Яценко

Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет,
Институт автоматизации и телеметрии СО РАН
E-mail: grotrian@nsu.ru

В статье рассматриваются вопросы развития информационных ресурсов по атомной спектроскопии. Предлагается новый подход к построению ресурсов: замена информационно-поисковых систем системами поддержки принятия решений. Обсуждается ряд механизмов и алгоритмов, способных существенно повысить эффективность работы исследователя: визуализации данных в виде диаграмм спектров с интеллектуальным отбором уровней и переходов, а также моделей спектрограмм, построение средств моделирования эталонных спектрограмм и средств их сравнения с экспериментальными спектрами изучаемых образцов; обеспечение интероперабельности системы с наиболее известными хранилищами данных, обеспечение достоверности данных, в том числе контролем на соответствие физическим законам (например, правилам отбора); анализ спектроскопических данных методами стати-

* Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты №13-07-00973-а, 12-07-00472-а, №12-07-31127-мол_а.

стической и интеллектуальной обработки. Представлены новые элементы функциональности, реализованные в информационной системе «Электронная структура атомов» и планы их дальнейшего развития.

Ключевые слова: база данных, атомная спектроскопия, информационно-поисковая система, система поддержки принятия решений, диаграммы Гротриана, интероперабельность.

INFORMATION SYSTEMS ON ATOMIC SPECTROSCOPY: FROM INFORMATION RETRIEVAL TO DECISION SUPPORT SYSTEMS

V.G. Kazakov

Novosibirsk State University of Economics and Management,
Novosibirsk National Research State University

V.V. Kazakov, V.S. Kovalev

Novosibirsk National Research State University

A.M. Fedotov

Novosibirsk National Research State University,
Institute of Computational Technologies Siberian Branch
of the Russian Academy of Sciences

A.S. Yatsenko

Novosibirsk National Research State University,
Institute of Automation and Electrometry,
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
E-mail: grotrian@nsu.ru

The article is covered with the issues of development of the information resources on Atomic Spectroscopy. A new approach for building resources is suggested: replacement of information retrieval systems by decision support systems. Considered a number of mechanisms and algorithms that can improve the efficiency of the research: data visualization in the form of diagrams of the spectra with intelligent selection of levels and transitions, as well as models of spectrograms, build modeling tools reference spectrograms and their comparison with the experimental spectra of samples; ensuring the interoperability of the system with the most famous stores of data, ensuring the reliability of the data, including the monitoring of the compliance of the physical laws (for example, rules of selection); analysis of spectroscopic data by statistical methods and intelligence processing. Presented new elements of the functionality implemented in the information system «Electronic structure of atoms» and further development plans.

Key words: database, atomic spectroscopy, information retrieval system, expert decision system, Grotrian diagram, interoperability.

Информационные ресурсы по атомной спектроскопии: текущее состояние и новые функции

Организация информационного обеспечения научных исследований является важной задачей информатики. Одним из наиболее значимых направлений развития такого обеспечения является создание информационных ресурсов, обеспечивающих исследователя экспериментальными и теоретическими данными о свойствах физических процессов и явлений. Развитие

методов построения подобных информационных ресурсов, расширение их функциональности способны существенно повышать эффективность научных исследований.

Одними из наиболее востребованных и значимых типов информационных ресурсов для науки и техники являются ресурсы по спектрам атомных систем и молекул. Интерес к ним определяется тем, что спектральный анализ занимает ключевое место в исследованиях в целом ряде научных направлений фундаментальной физики, а также прикладных областях, от материаловедения [2] и нанотехнологии [8] до геологии [1] и медицины [10].

Организация эффективной работы исследователя с большим, постоянно растущим массивом спектральных данных является сложной задачей, требующей применения современных информационных технологий. Информационные ресурсы по атомной и молекулярной спектроскопии прошли значительный путь от печатных изданий до компьютерных приложений и в последние десятилетия приняли облик информационных систем (ИС), опубликованных в Интернет. Известно значительное количество подобных систем, представляющих собой базы данных атомных систем и молекул с интерфейсами, организующими выборку данных по запросу, их фильтрацию и сортировку. Такие ИС можно классифицировать как информационно-поисковые.

На сегодняшний день в передовых странах мира существуют крупные информационные ресурсы по спектроскопии, в том числе атомной – ASD NIST [17] (США), NIFS [16] (Япония, Франция), VALD [18] (Австрия) и др. В России также имеются системы по атомным спектрам. Так, в Российском федеральном ядерном центре (г. Снежинске) имеется база данных SPECTR-W3 по оптическим спектрам ионов изоэлектронных рядов [15]. В Новосибирском научном центре поддерживается ИС «Электронная структура атомов» [14].

В наиболее крупных и функционально развитых информационных ресурсах по спектроскопии замечен спад в развитии интерфейсного функционала систем, уже реализованы возможности обработки: фильтрация, поиск, сортировка, а также отображения расчетных значений, библиографических ссылок и дополнительной информации по спектральным данным. В последние годы с большей интенсивностью ведутся работы по достижению интероперабельности систем и обмена данными. В частности многие ИС переходят на использования схемы XSAMS (XML Schema for Atomic & Molecular Spectroscopy), что позволяет в дальнейшем производить интеграцию в международные проекты, например VAMDC [11, 19]. Это, в свою очередь, порождает новые задачи, связанные с большими массивами информации из разных источников, которые необходимо обрабатывать, верифицировать, бороться с дублированием. Таким образом, прежняя функциональность информационно-поисковых систем по выборке и представлению данных должна быть дополнена широким спектром средств анализа информации и помощи пользователю в решении его содержательных научных и инженерных задач. Можно сформулировать текущую тенденцию как развитие ИС по спектроскопии от информационно-поисковых к системам поддержки принятия решений.

Тенденции и перспективы развития

Визуализация спектров и средства спектрального анализа. Одним из самых популярных и эффективных способов организации данных является их визуализация. Некоторые средства визуализации уже присутствуют в ИС по атомной спектроскопии. Так, например, в ASDNIST имеются возможности построения спектрограмм – изображений атомных спектров.

Можно с уверенностью говорить, что данное направление будет активно развиваться и далее. Прежде всего, актуально улучшение качества спектрограмм и обеспечение возможностей интерактивной работы с ними, например, масштабирования или оперативной навигации по спектральной области.

Спектрограммы, наглядно представляя спектры, и сами по себе дают определенную почву для анализа. Однако их особое значение – в возможности визуального сравнения спектров. Пользователь, подгружая в ИС свои экспериментальные спектры, сравнивает их с эталонными спектрами атомов и ионов, генерируемыми по базе данных системы, делая заключение о присутствии составляющих в составе анализируемого спектра.

Графические представления электронной структуры атома. История диаграмм, отражающих электронную структуру атома, берет свое начало от Н. Бора (1923). Диаграммная техника претерпела ряд преобразований, и в 1928 г. В. Гротриан предложил решение, ставшее общепризнанным. Тем не менее в рамках общего решения, восходящего к Гротриану, можно найти различные варианты диаграмм, различающиеся по технике, что определялось конкретными задачами, например, в астрофизике [13].

При построении диаграммы возникает проблема, связанная с тем, что спектры атомных систем зачастую содержат тысячи линий и переходов и отображение всех их на диаграмме сделало бы ее нечитаемой. Для решения этой проблемы в [12] предложено на каждый элемент использовать несколько десятков диаграмм. Чтобы разместить основные данные на одной диаграмме, исследователь проводит такой отбор линий и переходов для размещения, который, сохраняя читаемость диаграммы, в то же время обеспечивал бы качественное представление основных особенностей структуры отображаемого спектра. Такая работа требует от специалиста, ее выполняющего, высокой квалификации и немалых трудозатрат. В связи с этим наблюдался постоянный дефицит диаграмм Гротриана. Поэтому естественно, что одни из первых работ по расширению функциональности ИС по атомной спектроскопии были связаны с разработкой средств автоматического построения диаграмм по базе данных системы. Так, например, ASDNIST [17] имеет встроенные средства автоматического построения диаграмм Гротриана. При этом проблема отбора элементов для размещения на диаграмме производится пользователем при помощи настроек фильтров.

По-видимому, будущее в автоматическом построении диаграмм электронной структуры атомов лежит за сложными алгоритмами отбора линий, при этом, вероятно, будет разрабатываться множество алгоритмов, дающих для одного и того же спектра различные диаграммы, ориентированные на различные задачи. В числе наиболее типичных задач – астро-

физические задачи с присутствием запрещенных переходов, задачи поиска лазерных переходов и др.

Интероперабельность. БД ИС по атомной спектроскопии достаточно сильно различаются по составу и количеству хранимых данных, но в то же время имеют существенные пересечения между собой. Ограничения по количеству данных вызываются трудоемкостью их сбора, верификации и поддержки, так что группы сопровождения систем вынуждены ограничивать их объем, работая в первую очередь с данными, наиболее актуальными для той группы задач и пользователей, на которые ориентирована система. В то же время в природе существует конечное число атомных систем. А многие весьма различные задачи требуют работы с одними и теми же спектральными данными, что определяет наличие в базах данных различных систем общих информационных блоков.

Это определяет две потенциальные смежные потребности в развитии ИС по атомной спектроскопии. Во-первых, пользователям по запросам актуально получать сведения не из одной системы, а интегрированные данные из многих БД, в идеале очищенные от повторов и единообразно отсортированные и отфильтрованные. Во-вторых, группам поддержки информационных ресурсов актуально пополнять свои БД на основании данных, уже имеющихся в других системах, и при этом по возможности автоматическим образом. Представляется вероятным, что решение этих двух задач станет еще одним направлением развития ресурсов по атомной спектроскопии.

На настоящий момент можно наблюдать определенные шаги в решении первой из этих задач. Так, в ИС по молекулярной спектроскопии высокого разрешения [9] Института оптики атмосферы СО РАН хранятся наборы данных из различных ИС – первоисточников. Пользователь по запросу может получить данные того источника, который считает предпочтительным. Очень интересен опыт международного проекта Virtual Atomic and Molecular Data Center (VAMDC), в котором построена единая точка доступа к информационным ресурсам по спектроскопии [10]. В проекте фактически заложены основы интероперабельности информационных ресурсов по атомной и молекулярной спектроскопии, основанные на формате данных XSAMS. Службы проекта VAMDC действуют следующим образом. Пользователь на центральном сервере проекта составляет запрос (с помощью специального мастера или непосредственно на языке запросов) на получение данных. Центральный сервер проекта транслирует этот запрос всем информационным ресурсам, подключенным к проекту, и получает ответы от тех, которые могут выполнить запрос. Пользователь получает список таких ресурсов и для каждого из этих ресурсов параметры ответов, среди которых общее число записей в ответе. Далее пользователь может выбирать и просматривать результаты каждого из ответов в текстовом виде. Очень интересной особенностью проекта является предусмотренная возможность развивать дополнительные сервисы по обработке полученных данных. Так, например, имеется утилита, формирующая на основе данных XSAMS список библиоссылок на полученный массив информации в формате BibTEX. Таким образом, показано, что развитие интероперабельности позволяет в ряде случаев не дублировать сервисы по обработке данных в каждом из информационных ресурсов, а централизовать их.

В то же время работа по развитию интероперабельности информационных ресурсов по спектроскопии находится в самом начале. Так, никаких средств объединения данных из разных информационных ресурсов и их совместной обработки не предлагается. Конечно, необходимо заметить, что это является достаточно сложной задачей, требующей, например, нахождения в ответах нескольких систем записей, соответствующих одним и тем же уровням и переходам, и их исключения (или слияния) в объединенном ответе. Для этого потребуются однородность исходных данных и надежные алгоритмы проверок.

Обеспечение достоверности данных. В информационных ресурсах по атомной спектроскопии, как и в любых других, неизбежно наличие некоторого количества ошибок. Одними из источников являются ошибки в интерпретации результатов эксперимента и погрешности первичного ввода информации из научных публикаций в ресурс. Безусловно, внимательный подход к формированию базы данных и отбор только заслуживающих доверие источников способны существенно повысить достоверность данных. «Ручной» ввод информации в базу данных, являясь источником ошибок, может, с другой стороны, быть и существенным фактором повышения достоверности. Дело в том, что квалифицированный специалист может легко обнаруживать многие ошибки в данных исходя из знания физических закономерностей.

Пополнение баз данных заимствованиями из других информационных ресурсов вносит опасность дублирования и распространения ошибок. При заимствованиях включаемый объем информации не просматривается столь подробно, поскольку именно в сокращении трудозатрат состоит основная причина обращения к данным из других ресурсов. Развитие интероперабельности будет способствовать увеличению обмена данными между ИС атомной спектроскопии, особенно когда эти обмены будут происходить автоматизировано или даже полностью автоматически. Несложно представить, что в недалеком будущем ИС будет способна опрашивать другие системы в поисках новых данных, подходящих по критериям, и интегрировать их в собственную базу данных. Таким образом, все более актуальной будет становиться проблема обеспечения достоверности данных.

Перспективным способом повышения качества данных при автоматическом копировании их из других источников представляется их проверка на соответствие физическим закономерностям. Если для некоторого набора данных обнаружено невыполнение определенных физических законов, это свидетельствует о необходимости анализа с целью выявления возможных ошибок. В случае если основные закономерности выполняются, вероятность ошибки существенно уменьшается.

Еще одним методом увеличения качества данных и снижения количества ошибок может быть использование методов интеллектуального анализа в базах данных по спектроскопии. Применение статистического анализа, а также алгоритмов искусственного интеллекта к данным дает возможность определять вероятно ошибочные значения и включать их в «черный список», который впоследствии предоставляется специалисту для проверки.

Информационная система «Электронная структура атома»

Одним из информационных ресурсов по атомной спектроскопии является информационная система «Электронная структура атомов» (ИС ЭСА) [14], которая реализуется и поддерживается объединенным коллективом из НИУ НГУ и ИАиЭ СО РАН. В этой информационной системе активно развиваются средства сложной обработки спектральных данных, обзор таких средств, а также ближайших планов их развития может представлять определенный интерес.

1. С самой первой версии в ИС ЭСА (2005 г.) были реализованы средства автоматического построения диаграмм Гротриана [4, 5]. В настоящее время, кроме ИС ЭСА, подобная функциональность реализована также в ASDNIST. В обоих случаях соответствующими сервисами ИС строятся диаграммы атомных спектров в технике диаграмм Гротриана (некоторые не принципиальные особенности построения диаграмм в ИС ЭСА приведены в [4, 6]). Имеется возможность настройки вида диаграмм выбором ряда параметров и фильтров, например, ограничивающих диапазон уровней энергии или длины волн переходов.

Диаграммы формируются в интерактивной векторной графике, что дает ряд преимуществ по сравнению с более простой практикой построения статичных изображений определенного размера. Имеется возможность оперативно масштабировать изображение, вписывать его в отведенную область экрана. Обеспечивается ряд дополнительных сервисов чтения диаграммы, например, при наведении курсора на объект диаграммы отображается расширенная информация об объекте. Использование интерактивной векторной графики открывает значительные возможности настройки диаграммы для потребностей пользователя.

Также решения ИС ЭСА обладают рядом существенных особенностей, среди которых – наличие сложных алгоритмов отбора линий и переходов для размещения на диаграмме. Дело в том, что на конкретной диаграмме может разместиться небольшое количество линий (20–25). Попытка разместить на ней все уровни и переходы, которых в спектре зачастую многие тысячи, в большинстве случаев приводит к полной потере читаемости диаграммы, по существу она становится бесполезной.

В ИС ЭСА сделана попытка автоматизированного построения диаграмм Гротриана по БД системы путем имитации логики специалистов. Созданные алгоритмы позволили генерировать диаграммы, по качеству приближающиеся к диаграммам, построенным экспертами. В дальнейшем планируется развитие алгоритмов, в первую очередь в направлении ориентации диаграммы на представление особенностей структуры спектра, интересных пользователю в контексте конкретной исследовательской задачи, например, приоритет спектральной области или поиск пар линий перспективных лазерных переходов.

2. В ИС ЭСА присутствуют средства визуализации спектров в виде спектрограмм [18, 19]. В отличие от ряда других систем, в которых присутствует подобная функциональность (например, ASDNIST), спектрограммы ИС ЭСА так же, как и диаграммы, выполнены в векторной графике и интерактивны. На странице сайта системы пользователь наблюдает фрагмент

спектрограммы, соответствующий картинке, видимой в окуляре классического спектроскопа. При этом он может управлять масштабом и расположением видимого фрагмента. В таблице приведены особенности спектрограмм, построенных двумя ИС: NIST и ЭСА.

Сравнительный анализ спектрограмм

NIST	ЭСА
Черно-белая спектрограмма	Цветная видимая область
90 тыс. линий для нейтральных и однократных ионов 78 элементов	124 тыс. линий для нейтральных и однократных ионов 93 элементов
Статический объект	Динамический объект
Есть предварительный ввод, область задается параметрами	Можно задать область спектра во время просмотра
Масштабирование задается параметрами	Возможность масштабирования во время просмотра

В оптическом диапазоне линии спектрограммы на экране монитора представлены цветом, передающим цвет соответствующей линии длины волны. Линии инфракрасного и ультрафиолетового диапазонов – белые. У реализованных в настоящее время в ИС ЭСА и ASDNIST способа отображения спектрограмм есть существенный недостаток по сравнению с классическими изображениями спектров и тем более с изображениями спектрограмм на современных приборах: отсутствие средств передачи интенсивности линии. Впрочем, это связано не с трудностями реализации, а с особенностями данных, в которых параметр интенсивности линии обычно не приводится, поскольку его значение зависит от условий проведения эксперимента.

Проблему можно попытаться решить численными расчетами интенсивностей через вероятности переходов. Имея рассчитанные интенсивности можно смоделировать спектр и представлять его как в классическом виде, изображая интенсивность линий спектра яркостью линий спектрограммы, так и генерацией двумерной спектрограммы с явным изображением интенсивности по оси ординат. Если в модель спектра добавить расчет естественного уширения линий, то полученная спектрограмма будет достаточно близко соответствовать реальному. Подбор алгоритмов расчета интенсивностей и ширин линий спектра является одной из первоочередных работ по расширению функциональности ИС ЭСА. Кроме того, планируется развитие юзабилити интерфейсов диаграмм как в плане информативности, так и в плане управления интерактивными возможностями.

Механизмы моделирования и визуализации спектрограмм могут служить базой для развития средств анализа экспериментальных спектров. Пользователю может быть предоставлена возможность загружать в систему собственные спектры и осуществлять сравнение с эталонными спектрами атомных систем, присутствующих в ИС ЭСА. Развитие таких возможностей также входит в планы работ по ИС ЭСА. На первом этапе планируется реализация визуального сравнения экспериментальной диаграммы с диаграммами спектров атомов, генерируемых системой. Однако будет инте-

ресно изучить возможности появления в некоторой перспективе алгоритмов анализа пользовательских спектрограмм с прогнозом качественного, а возможно, и количественного состава сред, их породивших.

3. В настоящее время в рамках ранее упомянутого проекта VAMDC достигнут определенный прогресс в вопросах развития интероперабельности информационных ресурсов по атомной и молекулярной спектроскопии, позволяющий строить средства автоматизированного пополнения информационных ресурсов на новом уровне. Разработанный формат XSAMS и протоколы взаимодействия с ресурсами поддерживаются всеми участниками проекта и позволяют как интегрировать данные ИС ЭСА в общий пул ресурсов, так и получать из него необходимую информацию. В ближайшее время планируется выполнить первые работы в том и другом направлении. Во-первых, предполагается реализация интерфейса с центральным порталом VADMC, позволяющего включать в выборки данных, формируемые по запросам пользователей, и данные ИС ЭСА, обеспечивая возможность их получения в унифицированном виде. Во-вторых, планируется организовать постоянный автоматический мониторинг информационных ресурсов, участвующих в проекте, на предмет пополнения баз данных системы.

4. Контроль достоверности данных спектроскопических ресурсов, всегда актуальный, становится еще более важным в условиях, когда автоматизированное пополнение ресурса данными уже не предполагает никакого участия специалиста на этапе ввода и создает новые потенциальные возможности появления ошибок.

В ИС ЭСА реализован ряд элементов системы автоматического контроля достоверности данных на основе проверки физических закономерностей. На настоящий момент все данные, вводимые в систему, проверяются несколькими алгоритмами на предмет выполнения самых основных требований. Приведем несколько примеров. Так, каждая вводимая электронная конфигурация проверяется на соответствие числа имеющихся в ней электронов и заряду ядра атомной системы. Очевидно, что это правило в природе должно выполняться всегда, поскольку конфигурация, по самому своему смыслу, показывает особенности расположения электронов системы по различным орбитам.

Другой иллюстрацией автоматического контроля достоверности является проверка сохранения разности энергии для переходов: величина перехода должна быть равна разнице энергий уровней, его порождающих.

Список таких проверок можно существенно расширять, что и планируется делать в ближайшем будущем. Так, например, для многих пар уровней спектра атомной системы конфигурация определяет качественное соотношение их энергий. Так, например, для двух уровней водорода с конфигурациями при $(n + k)p$ более энергичным должен быть второй. Также можно сравнивать соответственные конфигурации в нейтральном атоме и его ионе, в изотопах и т.д. Подобные проверки способны будут выявлять очень значительную часть ошибочных данных.

Вторым направлением развития автоматического контроля достоверности является разработка методов проверки элементов базы данных на основе статистического анализа и применения интеллектуальных алгоритмов обработки.

Заключение. Развитие представленных механизмов и алгоритмов в информационных системах по атомной спектроскопии способно существенно повысить эффективность и качество работы исследователя с массивами спектральных данных. Одной из таких систем является ЭСА, в которой реализуются возможности визуализации данных в виде диаграмм спектров с интеллектуальным отбором уровней и переходов, а также моделей спектрограмм, построение средств моделирования эталонных спектрограмм и средств их сравнения с экспериментальными спектрами изучаемых образцов; обеспечение интероперабельности системы с наиболее известными хранилищами данных, обеспечение достоверности данных, в том числе контролем на соответствие физическим законам (например, правилам отбора). Система опубликована в открытом доступе в сети Интернет по адресу grotrian.nsu.ru. Алгоритмы и механизмы системы постоянно совершенствуются для обеспечения исследователей современными возможностями информационного поиска. Представленные алгоритмы могут быть применены в других системах по атомной спектроскопии, в том числе в международном интеграционном проекте VAMDC.

Литература

1. Внукова Н.Г., Лопатин В.А., Колоненко А.Л., Чурилов Г.Н. Анализ тяжелых фракций нефти методом эмиссионной спектроскопии // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия. 2010. Т. 3. № 3. С. 321–326.
2. Глазырин А.В., Кузнецов А.А. Оценка структурных параметров стали методом атомно-эмиссионной спектроскопии // Омский научный вестник. 2012. № 113. С. 253–258.
3. Казаков В.Г., Казаков В.В., Яценко А.С., Ковалев В.С. Цифровая эмуляция спектрографа // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. 2011. Т. 9. Вып. 3. С. 30–36.
4. Казаков В.Г., Раутиан С.Г., Яценко А.С. Компьютерное представление электронных оболочек атомов // Оптика и спектроскопия. 2008. Т. 106. № 1. С. 53–58.
5. Казаков В.Г., Тюменцев А.С., Яценко А.С. Информационная система «Электронная структура атомов» с динамическим построением графического представления спектральных данных // Автометрия. 2005. Т. 41. № 6. С. 115–123.
6. Казаков В.Г., Яценко А.С., Казаков В.В. Информационная система «Электронная структура атомов»: основные возможности и особенности // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика. 2011. Т. 6. Вып. 3. С. 64–70.
7. Казаков В.Г., Яценко А.С., Казаков В.В. Эмулированный анализатор оптического спектра // Патент на полезную модель № 117178. Зарегистрировано в Государственном реестре полезных моделей 20 июня 2012 г. Федеральная служба по интеллектуальной собственности. 2012 г.
8. Логинов В.Б., Борисюк П.В., Борман В.Д., Пушкин М.А., Менушенков А.П., Тронин В.Н., Троян В.И. XANES-Спектроскопия осажденных нанокластеров золота // Ядерная физика и инжиниринг. 2012. № 5. Т. 3. С. 474.
9. Михайленко С.Н., Бабилов Ю.Л., Головкин В.Ф. Информационно-вычислительная система «Спектроскопия атмосферных газов». Структура и основные функции // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т. 18. № 09. С. 765–776.
10. Одинак М.М., Труфанов А.Г., Фокин В.А., Вознюк И.А., Цыган Н.В., Резванцев М.В. Магнитно-резонансная спектроскопия по водороду в диагностике и мониторинге острых нарушений мозгового кровообращения по ишемическому типу // Вестник Российской военно-медицинской академии. 2009. Т. 2. С. 39–43.

11. *Рябчикова Т.А., Пахомов Ю.В., Пискунов Н.Е.* Новая версия Венской базы атомных параметров спектральных линий (VALD3) и ее интеграция в виртуальный центр атомных и молекулярных данных // Ученые записки Казанского университета. Серия: физико-математические науки. 2011. Т. 153. № 2. С. 61–66.
12. *Bashkin S., Stoner J.* Atomic Energy Levels and Grottrian Diagrams. Amsterdam: North-Holland Publ. Co, 1975–1982.
13. *Moore Ch., Merrill P.* Partial Grottrian Diagrams of Astrophysical Interest. US, NBS, NSRDS-NBS-23, Washington, 1968.
14. *Казаков В.Г., Яценко А.С., Казаков В.В., Ковалев В.С.* Информационная система «Электронная структура атомов» [Электронный ресурс] // НИУ НГУ, ИАиЭ СО РАН. URL: <http://grottrian.nsu.ru> (15.03.2013).
15. Atomic Database Spectr-W3 for Plasma Spectroscopy and Other Applications [Электронный ресурс] / All-Russian Institute of Technical Physics // Russian Federal Nuclear Center. URL: <http://spectr-w3.snz.ru> (15.03.2013).
16. Atomic & Molecular Numerical Databases [Электронный ресурс] / Department of Helical Plasma Research in NIFS // Atomic and Molecular Process Research Section, Fusion System Research Division. URL: <http://dbshino.nifs.ac.jp> (15.03.2013).
17. *Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J. and NIST ASD Team* (2012). NIST Atomic Spectra Database (version 5.0) [Электронный ресурс]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [15.03.2013]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
18. The Vienna Atomic Line Database [Электронный ресурс] / F.Kupka, T.A. Ryabchikova, N.E. Piskunov, H.C. Stempels, W.W. Weiss // VALD project Institut fur Astronomie. URL: <http://vald.astro.univie.ac.at/~vald/php/vald.php> (15.03.2013).
19. Virtual Atomic and Molecular Data Centre [Электронный ресурс] // VAMDC Project. URL: <http://www.vamdc-project.vamdc.eu> (15.03.2013).

Bibliography

1. *Vnukova N.G., Lopatin V.A., Kolonenko A.L., Churilov G.N.* Analiz tjazhjoljyh frakcij nefti metodom jemissionnoj spektroskopii // Zhurnal Sibirskogo federal'nogo universiteta. Serija: Himija. 2010. T. 3. № 3. P. 321–326.
2. *Glazyrin A.V., Kuznecov A.A.* Ocenka strukturnyh parametrov stali metodom atomno-jemissionnoj spektroskopii // Omskij nauchnyj vestnik. 2012. № 113. P. 253–258.
3. *Kazakov V.G., Kazakov V.V., Jacenko A.S., Kovalev V.S.* Cifrovaja jemuljacija spektrografa // Vestnik Novosibirskogo gosudarstvennogo universiteta. Serija: Informacionnye tehnologii. 2011. T. 9. Vyp. 3. P. 30–36.
4. *Kazakov V.G., Rautian S.G., Jacenko A.S.* Komp'yuternoe predstavlenie jelektronnyh obolohek atomov // Optika i spektroskopija. 2008. T. 106. № 1. P. 53–58.
5. *Kazakov V.G., Tjumencev A.S., Jacenko A.S.* Informacionnaja sistema «Jelektronnaja struktura atomov» s dinamicheskim postroeniem graficheskogo predstavlenija spektral'nyh dannyh // Avtometrija. 2005. T. 41. № 6. P. 115–123.
6. *Kazakov V.G., Jacenko A.S., Kazakov V.V.* Informacionnaja sistema «Jelektronnaja struktura atomov»: osnovnye vozmozhnosti i osobennosti // Vestnik Novosibirskogo gosudarstvennogo universiteta. Serija: Fizika. 2011. T. 6. Vyp. 3. P. 64–70.
7. *Kazakov V.G., Jacenko A.S., Kazakov V.V.* Jemulirovannyj analizator opticheskogo spektra // Patent na poleznuju model' №117178. Zaregistrirvano v Gosudarstvennom reestre poleznyh modelej 20 ijunja 2012 g. Federal'naja sluzhba po intellektual'noj sobstvennosti. 2012 g.
8. *Loginov V.B., Borisjuk P.V., Borman V.D., Pushkin M.A., Menushenkov A.P., Tronin V.N., Trojan V.I.* XANES-Spektroskopija osazhdjonnyh nanoklasterov zolota // Jadernaja fizika i inzhiniring. 2012. № 5. T. 3. P. 474.

9. *Mihajlenko S.N., Babikov Ju.L., Golovko V.F.* Informacionno-vychislitel'naja sistema «Spektroskopija atmosfernih gazov». Struktura i osnovnye funkcii // Optika atmosfery i okeana. 2005. T. 18. № 09. P. 765–776.
10. *Odinak M.M., Trufanov A.G., Fokin V.A., Voznjuk I.A., Cygan N.V., Rezvancev M.V.* Magnitno-rezonansnaja spektroskopija po vodorodu v diagnostike i monitoringe ostryh narushenij mozgovogo krovoobrashhenija po ishemicheskomu tipu // Vestnik Rossijskoj voenno-medicinskoj akademii. 2009. T. 2. P. 39–43.
11. *Rjabchikova T.A., Pahomov Ju.V., Piskunov N.E.* Novaja versija Venskoj bazy atomnyh parametrov spektral'nyh linij (VALD3) i ejo integracija v virtual'nyj centr atomnyh i molekuljarnyh dannyh // Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta. Serija: fiziko-matematicheskie nauki. 2011. T. 153. № 2. P. 61–66.
12. *Bashkin S., Stoner J.* Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams. Amsterdam: North-Holland Publ. Co, 1975–1982.
13. *Moore Ch., Merrill P.* Partial Grotrian Diagrams of Astrophysical Interest. US, NBS, NSRDS-NBS-23, Washington, 1968.
14. *Kazakov V.G., Jacenko A.S., Kazakov V.V., Kovalev V.S.* Informacionnaja sistema «Jelektronnaja struktura atomov» [Jelektronnyj resurs] // NIU NGU, IAIJe SO RAN. URL: <http://grotrian.nsu.ru> (15.03.2013).
15. Atomic Database Spectr-W3 for Plasma Spectroscopy and Other Applications [Jelektronnyj resurs] / All-Russian Institute of Technical Physics // Russian Federal Nuclear Center. URL: <http://spectr-w3.snz.ru> (15.03.2013).
16. Atomic & Molecular Numerical Databases [Jelektronnyj resurs] / Department of Helical Plasma Research in NIFS // Atomic and Molecular Process Research Section, Fusion System Research Division. URL: <http://dbshino.nifs.ac.jp> (15.03.2013).
17. *Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J. and NIST ASD Team* (2012). NIST Atomic Spectra Database (version 5.0) [Jelektronnyj resurs]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [15.03.2013]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
18. The Vienna Atomic Line Database [Jelektronnyj resurs] / F. Kupka, T.A. Ryabchikova, N.E. Piskunov, H.C. Stempels, W.W. Weiss // VALD project Institut fur Astronomie. URL: <http://vald.astro.univie.ac.at/~vald/php/vald.php> (15.03.2013).
19. Virtual Atomic and Molecular Data Centre [Jelektronnyj resurs] // VAMDC Project. URL: <http://www.vamdc-project.vamdc.eu> (15.03.2013).