

WWW-MINCRYST: РЕАЛИЗАЦИЯ В ИНТЕРНЕТЕ ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОХИМИИ МИНЕРАЛОВ

Д.А. Варламов

WWW-MINCRYST (<http://mincryst.iem.ac.ru>) в качестве Интернет-ориентированной базы данных возник достаточно давно и стал одним из первых в РФ научных интерактивных Интернет-ресурсов (первый полностью работоспособный вариант WWW интерфейса был представлен пользователям в декабре 1997 года!). Ресурс был призван обеспечить интерактивный доступ Интернет-пользователям к накапливавшимся с 1985 года данным по кристаллическим структурам (авторским экспериментальным и литературным) и многочисленным разработкам авторов проекта по обработке этих данных и анализу. Методология создания и технические детали текущей реализации информационно-вычислительной системы (ИВС) уже освещались ранее [1,2], а в данном докладе хотелось бы осветить текущее состояние ИВС и перспективы ее развития в рамках проекта РФФИ 12-07-00742-а.

Сейчас WWW-MINCRYST представляет собой многоуровневую ИВС, содержащую данные о более чем 8000 структур минералов и их аналогов (более 3000 уникальных фаз), при этом постоянно пополняющуюся (добавляется не менее 300 новых структур в год). Суммарный объем базы составляет около 500 Мб. Технологически эта система основана на ставшей во многом стандартом de-facto для информационных проектов среднего масштаба серверной программной связке LAMP (Linux+Apache+MySQL+PHP+Java), реализованной на сервере баз данных ИЭМ РАН (<http://database.iem.ac.ru>). ИВС является двуязычной, включая содержание и языки интерфейса: русский и английский. В систему входят следующие компоненты: (а) комплексные поисковые интерфейсы, (б) мультимедийные интерактивные формы представления структурной и спектральной информации (через Java-апплеты); (в) классификационные схемы; (г) системы динамически формируемых ссылок на внешние информационные ресурсы; (д) WWW-ориентированный инструментальный разработчика; (е) прикладные программы по обработке кристаллографической информации (WWW-XrayPol и WWW-MixiPol).

Каждая запись для индивидуального кристаллического вещества содержит информацию о названии (в соответствии с классификацией International Mineralogy Association или рекомендациями по наименованию неорганических веществ IUPAC), химическом составе, симметрии, параметрах элементарной ячейки, координатах атомных позиций с изотропными температурными факторами и заселенностями, информацию о межплоскостных расстояниях, HKL-индексах и интенсивностях сильнейших рефлексов рентгенодифракционной картины поликристалл-фазы, а также ссылки на соответствующие публикации по расшифровке или уточнению кристаллической структуры. Запись может быть специфицирована по полезным свойствам, особенностям химического состава и структуры, а также по *PT*-условиям синтеза. Каждая запись содержит «монокристалльные» и «поликристалльные» характеристики кристаллической фазы. Минералы классифицированы в соответствии с таксонами структурно-химической систематики минералов А.А. Годовикова (А.А. Годовиков, 1997) и кристаллохимической классификации М. Чириотти. Для 2000 фаз сделаны экспресс-оценки потенциальной энергии кристаллической решетки по Л. Глэссеру и Г.Д.Б. Дженкинсу (Glasser, Jenkins, 2000).

Для всех записей БД через встроенный апплет WWW-Crystpic (Java-3D) доступны динамически создаваемые интерактивные изображения моделей кристаллических структур в шарах-сферах и в полиэдрических проекциях (до 138 позиций и до 1500(!) атомов на структуру) в соответствии с основными канонами минералогии и кристаллографии. Программа позволяет делать всевозможные манипуляции с моделью структуры, включая непрерывное и/или автоматическое дискретное вращение вокруг «экранных» осей X,Y,Z, ориентацию по кристаллографическим осям, hkl-фрагментацию структуры (на hkl-ориентированные фрагменты толщиной $d(hkl)$), наращивание элементарных ячеек вдоль любых выбранных направлений для формирования "сверхструктур" и мотивов, а также прямой "ручной" и автоматизированный для малых полиэдров (тетраэдров и октаэдров) расчет любых межатомных расстояний и углов в структуре. Программа изображает любые полиэдры, включая «дефектные» с необычно малыми («плохими») межатомными расстояниями. Более детальное описание возможностей апплета приведено здесь: <http://mincryst.iem.ac.ru/rus/crystpic.php>). В настоящее время из-за проблем с работой с библиотеками OpenGL в составе новых версий Java рассматривается возможность переноса апплета на новые программные платформы типа встроенных средств HTML5

Также в WWW-MINCRYST интегрирован апплет WWW-MixiPol, предназначенный для графического представления полных расчетных спектральных профилей поликристалл-рентгенограмм с возможностями манипулирования спектрами для разных источников излучения и разных типов спектральных шкал. Также модуль способен формировать рентгенограммы смесей фаз (до 6 фаз одновременно) при возможности варьирования относительными содержаниями компонентов смеси.

Как для структур, так и для спектров минералов предусмотрены упрощенные варианты представления (для старых браузеров и маломощных персоналок) в виде традиционных шаровых структур и линейчатых спектров.

В состав WWW-MINCRYST встроен модуль Xraypol, который в связках с программами WWW-Crystpic и WWW-Mixipol, позволяет квалифицированному пользователю менять «на лету» ряд параметров структуры и рассчитывать новые варианты изображений моделей кристаллических структур и квазиреальных полных профилей расчетных поликристалл-рентгенограмм на основе временно извлекаемых и модифицируемых базовых BDM-файлов, тем самым решая конкретные задачи по модификации реальных структур, но не затрагивая основной фонд WWW-MINCRYST.

Одними из первых среди научных интернет-ориентированных баз данных была разработана система динамически формируемых перекрестных веб-ссылок для связи записей с записями для конкретных минералов в ведущих минералогических базах данных, размещенных в Интернете. Система генерации динамических гиперссылок на внешние информационные ресурсы (в основном, на минералогические базы данных) позволяет "прозрачно" для пользователя подключать большие внешние массивы данных, используя метод "генеральных" запросов. При этом пользователь сразу получает доступ к информации по интересующему его объекту, минуя стадии поиска или просмотра всей внешней базы. Кроме того, данный механизм реализует обратную связь, позволяя подобным же образом ссылаться этим базам уже на наши информационные объекты, что резко повышает востребованность WWW-MINCRYST внешними пользователями.

Наличие в WWW-MINCRYST почти 8 тысяч кристаллических структур и встроенный универсальный расчетный комплекс позволили помимо ориентированных на поиск и предоставление информации возможностей использовать ИВС в разработке нетрадиционных научных подходов к интерпретации и представлению некоторых кристаллических структур. WWW Xraypol позволил, например, выявить в традиционных структурах возможность гибкого использования полиэдров и почти автоматически формировать различные варианты структурных моделей минералов. Как выяснилось, для части минералов кристаллическое пространство можно не строго привязываться к традиционному катионно-анионному изображению, а формировать структуры на основе любых атомов, входящих в ее состав. Метод особенно эффективен для сложных "неправильных" бескислородных структур (например, фосфиды, сложные сульфиды и др.).

Востребованность WWW-MINCRYST хорошо подтверждается статистикой обращений (7.5 млн. успешных единичных запросов за 2011 год, более 60 Гб скачанной информации, около 33000 уникальных сайтов), а также а также большим количеством отзывов, благодарностей и внешних ссылок на WWW-MINCRYST (см. раздел "Ссылки" на сайте).

О перспективах развития WWW-MINCRYST следует сказать отдельно. В связи с очень быстрым развитием web-технологий и (соответственно) браузеров, возникла необходимость кардинальной переработки нынешнего клиентского интерфейса, уже не отвечающего как новым технологиям (и зачастую несовместимого с новым ПО), так и требованиям пользователей. Она будет включать изменение способа представления записи путем сведения разобренных сейчас полей (основные данные, CPDS карта, атомные позиции, структура, спектры, ссылки и др.) в единое информационное пространство, формируемое на базе динамического HTML (с использованием технологий Jason, DHTML, HTML-5, оверлейных структур). Предусматривается как переделка и рекомпиляция Java апплетов (в связи с устареванием и неполной совместимостью кода с последними реализациями Java VM), так и их замена на модули, использующие мультимедийные технологии стандартов HTML-5 или Adobe Flash (с использованием оригинального авторского расчетного кода). Также будут изменены в сторону повышения дружелюбности и простоты) дизайн и элементы управления предоставляемой пользователю информации. В ходе проекта предусмотрено пополнение базы данных дополнительной сугубо минералогической информацией (фото минералов и рисунки кристаллографических форм и др.). Несмотря на то, что по ряду параметров поиска WWW-MINCRYST до сих пор не имеет аналогов, будет расширен круг потенциальных поисковых запросов (прежде всего в области поисков по составу и кристаллографическим данным).

Проведение работ по описанной информационной системе было поддержано несколькими грантами РФФИ (в том числе в настоящее время - грант РФФИ 12-07-00742-а).

ЛИТЕРАТУРА:

1. А.В. Чичагов, Д.А. Варламов, Е.В. Ершов, Т.Н. Докина, Н.А. Дрожжина, О.Л. Самохвалова «Кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов (WWW-MINCRYST)» // Записки РМО, 2007, т.136, № 3, с.135-141
2. А.В. Чичагов, Д.А. Варламов WWW-MINCRYST-2007 - Интернет-ориентированная база данных по кристаллографии/кристаллохимии минералов и их аналогов // «Научный сервис в сети Интернет: технологии параллельного программирования. 15 лет РФФИ», Труды Всероссийской научной конференции, М., изд-во МГУ, 2007, с.390-392