

Интеграция пользовательских интерфейсов информационных систем в области неорганической химии

© В.А. Дударев^{1,2}

© Н.Н. Киселева¹

¹ФГБУН Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН (ИМЕТ РАН),

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ),
Москва

vic@imet.ac.ru

kis@imet.ac.ru

Аннотация

Часто при поиске данных по свойству того или иного вещества неискушенный пользователь не знает к какой информационной системе по свойствам неорганических веществ и материалов (ИС СНВМ) стоит прибегнуть для первичного сбора информации. Поэтому актуальным является создание специализированной ИС, позволяющей потребителю данных по свойствам неорганических веществ получить возможность просмотра связанной информации по свойствам заданной химической системы в разных ИС СНВМ из одного места, которое условно называется “единой точкой входа”. Созданию именно такой ИС, являющейся единой точкой входа для пользователя в ИС СНВМ, посвящена настоящая работа [1]. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 16-07-01028, 14-07-00819 и 15-07-00980.

1 Поиск релевантной информации

Основная идея заключается в предоставлении пользователю возможности выбора химических элементов (из периодической таблицы Менделеева), образующих химическую систему. Имея набор выбранных пользователем элементов, ИС единой точки входа должна осуществить поиск ИС СНВМ, содержащих сведения о свойствах фаз выбранной химической системы, для чего используется метабаза – специализированная база данных, хранящая справочные сведения о содержимом интегрируемых ИС СНВМ. Метабаза и механизмы ее наполнения были разработаны ранее при создании интегрированной ИС СНВМ [2].

Опишем содержимое метабазы в терминах теории множеств [3]. В метабазе содержится информация по интегрируемым ИС (множество D),

химическим системам (множество S) и их свойствам (множество P). Для описания взаимосвязи между элементами множеств D , S и P было определено тернарное отношение W на множестве $U = D \times S \times P$. Принадлежность элемента (d, s, p) отношению W , где $d \in D, s \in S, p \in P$, интерпретируется следующим образом: “в интегрируемой ИС d содержится информация по свойству p химической системы s ”.

Поиск релевантной информации s сводится к определению вида отношения R , являющегося подмножеством декартова произведения $S \times S$ (иными словами, $R \subset S^2$). Таким образом, о любой паре $(s_1, s_2) \in R$ можно сказать, что система s_2 является релевантной системе s_1 . Т.е., чтобы решить задачу поиска релевантной информации в интегрируемых информационных системах, необходимо определить отношение R .

При построении ИС единой точки входа в ИС СНВМ отношение релевантности строится следующим образом: для любых множеств $s_1 \in S, s_2 \in S$, состоящих из химических элементов e_{ij} , $s_1 = \{e_{11}, e_{12}, \dots, e_{1n}\}, s_2 = \{e_{21}, e_{22}, \dots, e_{2m}\}$ верно, что если $s_1 = s_2$, то $(s_1, s_2) \in R$. Как видно из условия, отношение R симметрично. Таким образом, получим в качестве релевантных только те химические системы, вещества и модификации, которые состоят из одного и того же набора химических элементов (одинаковые химические системы). Как правило, этот способ построения отношения R является наиболее часто используемым при поиске всех свойств заданного химического вещества или системы через единую точку входа.

Поскольку поиск релевантной информации выполняется в метабазе, единая точка входа

Труды XVIII Международной конференции DAMDID/RCDL'2016 «Аналитика и управление данными в областях с интенсивным использованием данных», Ершово, 11-14 октября 2016

предоставляется для всех ИС СНВМ, описанных в метабазе. В настоящее время интегрированная ИС СНВМ консолидирует все разработанные в ИМЕТ РАН информационные системы: Фазы, Elements, Диаграмма, Кристалл и Bandgap [4], а также ИС “ТКВ” по термическим константам веществ, разработанную в ОИВТ РАН и МГУ. Благодаря проделанной работе по международной интеграции, удалось включить в состав интегрированной системы ИМЕТ РАН ИС AtomWork (разработанную в National Institute for Materials Science (NIMS), Япония), содержащую информацию о более чем 23 тыс. неорганических веществ [5, 6]. Потенциально, в состав интегрированной ИС СНВМ можно включить все ИС из списка наиболее значимых ИС в области неорганической химии и материаловедения [7].

2 Разработка Web-приложения ИС

Рассмотрим кратко особенности разработки Web-приложения единой точки входа, располагаемого по адресу <http://meta.imet-db.ru>. Web-приложение ASP.Net написано на языке C# (.Net Framework 4.5) с использованием ADO.Net для доступа к метабазе. Для построения запросов используются языковые средства Transact-SQL, являющегося диалектом языка Structured Query Language (SQL), который используется в системе управления базами данных (СУБД) Microsoft SQL Server 2014.

Пользовательский интерфейс является интерактивным за счет использования библиотеки jQuery, облегчающей взаимодействие с HTML DOM (Document Object Model – объектная модель документа) и предоставляющей удобный интерфейс (API) для работы с AJAX (Asynchronous Javascript and XML – асинхронный JavaScript и XML).

iMet@base

Ряды	Ряд	ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ																
		I	II	III	IV	V	VI	VII								VIII		
1	1	H ¹																He ²
2	2	Li ³	Be ⁴	B ⁵	C ⁶	N ⁷	O ⁸	F ⁹										Ne ¹⁰
3	3	Na ¹¹	Mg ¹²	Al ¹³	Si ¹⁴	P ¹⁵	S ¹⁶	Cl ¹⁷										Ar ¹⁸
4	4	K ¹⁹	Ca ²⁰	Sc ²¹	Ti ²²	V ²³	Cr ²⁴	Mn ²⁵	Fe ²⁶	Co ²⁷	Ni ²⁸							Kr ³⁶
5	5	Cu ²⁹	Zn ³⁰	Ga ³¹	Ge ³²	As ³³	Se ³⁴	Br ³⁵										Xe ⁵⁴
6	6	Ru ⁴⁴	Sr ³⁸	Y ³⁹	Zr ⁴⁰	Nb ⁴¹	Mo ⁴²	Tc ⁴³	Ru ⁴⁴	Rh ⁴⁵	Pd ⁴⁶							
7	7	Ag ⁴⁷	Cd ⁴⁸	In ⁴⁹	Sn ⁵⁰	Sb ⁵¹	Te ⁵²	I ⁵³										
8	8	Cs ⁵⁵	Ba ⁵⁶	Ln ⁵⁷	Hf ⁷²	Ta ⁷³	W ⁷⁴	Re ⁷⁵	Os ⁷⁶	Ir ⁷⁷	Pt ⁷⁸							
9	9	Au ⁷⁹	Hg ⁸⁰	Tl ⁸¹	Pb ⁸²	Bi ⁸³	Po ⁸⁴	At ⁸⁵										Rn ⁸⁶
10	10	Fr ⁸⁷	Ra ⁸⁸	Ac ⁸⁹	Rf ¹⁰⁴	Db ¹⁰⁵	Sg ¹⁰⁶	Bh ¹⁰⁷	Hn ¹⁰⁸	Mt ¹⁰⁹								
		ЛАНТАНОИДЫ																
		La ⁵⁷ Ce ⁵⁸ Pr ⁵⁹ Nd ⁶⁰ Pm ⁶¹ Sm ⁶² Eu ⁶³ Gd ⁶⁴ Tb ⁶⁵ Dy ⁶⁶ Ho ⁶⁷ Er ⁶⁸ Tm ⁶⁹ Yb ⁷⁰ Lu ⁷¹																
		АКТИНОИДЫ																
		Ac ⁸⁹ Th ⁹⁰ Pa ⁹¹ U ⁹² Np ⁹³ Pu ⁹⁴ Am ⁹⁵ Cm ⁹⁶ Bk ⁹⁷ Cf ⁹⁸ Es ⁹⁹ Fm ¹⁰⁰ Md ¹⁰¹ No ¹⁰² Lr ¹⁰³																

Рисунок 1 Выбор химической системы по набору элементов

Опишем принцип работы Web-приложения. Основной элемент интерфейса пользователя – интерактивная таблица Менделеева (рис. 1). Пользователю предоставляется возможность выбора химических элементов из таблицы Менделеева, образующих химическую систему. При нажатии на каждый химический элемент (выбор или снятие

выбора) происходит его подсветка за счет применения классов из каскадных таблиц стилей (CSS) с помощью библиотеки jQuery (язык программирования JavaScript):

```

$(".Mendeleev .element").click(function()
{ // клик на элементе
  $(this).toggleClass("selected"); //
  переключаем класс
  var arr = [];

$(".Mendeleev .selected").each( function(
)
{ arr.push($(this).children(".name").text
());
});
arr.sort();
var st = arr.join("-");
$(".result").html("");
if (st == "") {
  $(".Mendeleev .inactive").show();
  $(".Mendeleev .active").hide();
}
else {
  $(".Mendeleev .inactive").hide();
  $(".Mendeleev .active").show();
  ProcElements(st);
}

$(".Mendeleev .selectedSystem").html(st);
});

```

Одновременно в случае наличия выбранных химических элементов происходит вызов функции ProcElements, которая обеспечивает отправку асинхронного AJAX-запроса к HTTP-обработчику http://meta.imet-db.ru/JSON_Elements.ashx, являющемуся сервисом поиска релевантной информации:

```

function ProcElements(elements) {
  $(".result").html("<center><img
src='/i/loaderlight.gif'
alt='подождите...' width=24 height=24
/></center>");
  $.ajax({
    type: "post",
    url: "/JSON_Elements.ashx",
    data: { "mode":
"getelementsinfo", "elements":
elements },
    dataType: "json",
    error: function(XMLHttpRequest,
textStatus, errorThrown) {

$(".result").html("<center><span
class='err'>ajax error textStatus=" +
textStatus + ", errorThrown=" +
errorThrown + "</span></center>");
},
    success: function(json) {
      if (json.MsgRu != "" ||
json.MsgEn != "") {

$(".result").html("<center><span
class='err ru'>" + json.MsgRu +
"</span><span class='err en'>" +
json.MsgEn + "</span></center>")
      return;
}
}
}

```

```

        var st = "";
        if
(json.Data.Table[0].Row.length == 0) {
            st = "<center><span
class='err ru'>нет данных</span><span
class='err en'>нет
данных</span></center>";
        }
        else {
            st =
RenderDataAsTable_PopUp(json); // список-
попап
        }
        $("result").html(st);
    });
}

```

При выборе, например, химической системы As-Ga будет отправлен следующий POST запрос на адрес: http://meta.imet-db.ru/JSON_Elements.ashx содержащий данные `mode=getelementsinfo&elements=As-Ga`. Задача сервиса поиска релевантной информации – по множеству выбранных химических элементов вернуть перечень ИС СНВМ, содержащих сведения о заданной химической системе. Поскольку клиентская часть отработки информации реализована на JavaScript, как стандартном языке сценариев, поддерживаемом всеми браузерами, то сервис поиска формирует ответ в формате JSON (JavaScript Object Notation – нотация объектов JavaScript), который является естественным при использовании языка JavaScript. Приведем пример возвращаемого документа при поиске информации по элементу Ga (исключительно для краткости, т.к. по As-Ga размер JSON документа на порядок больше):

```

{"MsgRu":"","MsgEn":"","Data":{"Table":
[{"Row":[{"Col":["5","31","-Ga-
","1","Ga","","1"],"Свойства
элемента","","/elements/properties_all_gi
ven.aspx?elem=#IDS#","Элементы","http://p
has.es.imet-
db.ru/elements/","","post","http://phases
.imet-
db.ru/elements/GateElements.asp?chk=#CHKS
UM#&t=#TOKEN#","ru"]},
{"Col":["7","16027","-Ga-
","1","Ga","","1"],"Information","","","At
omWork (NIMS,
Japan)","http://crystdb.nims.go.jp/index_
en.html","","link","https://login-
matnavi.nims.go.jp/sso/UI/Login?goto=http
%3A%2F%2Fcrystdb.nims.go.jp%2Fcrystdb%2Fs
earch-materials-
list%3FisVisiblePeriodicTable%3Dtrue%26co
ndition_type%3Dchemical_system%26need_mor
e_type%3Dprototype_number%26condition_val
ue%3D#ELEMENTS_PLUSinURL#&IDToken1=#CHKSU
M#&IDToken1=#TOKEN#","en"]} ]}}

```

Как видно, полученный JSON-документ возвращает в числе прочих данных ссылки для перехода на ИС СНВМ с релевантной информацией. Однако ссылки нуждаются в дальнейшей обработке в частности для замены “#CHKSUM#” и “#TOKEN#”, которые

являются контрольной суммой (вычисленной с использованием хеш-функции MD5) с отпечатком параметров перехода и маркером безопасности (token) соответственно. За обработку и вывод пользователю информации из JSON-документа отвечает функция `RenderDataAsTable_PopUp(json)`, результат работы которой виден на рис. 2.

Выбранные элементы: **As-Ga**

Кристалл	<ul style="list-style-type: none"> • GaAs
Диаграмма	<ul style="list-style-type: none"> • As-Ga
Ширина запрещенной зоны	<ul style="list-style-type: none"> • GaAs
Crystal	<ul style="list-style-type: none"> • GaAs
AtomWork (NIMS, Japan)	<ul style="list-style-type: none"> • As-Ga

Рисунок 2 Список релевантной информации в ИС СНВМ для системы As-Ga

При наведении пользователем указателя на химическую сущность (систему, вещество или кристаллическую модификацию) выводится список свойств, доступных для просмотра в соответствующей ИС СНВМ (рис. 3).

Выбранные элементы: **As-Ga**

Кристалл	<ul style="list-style-type: none"> • GaAs
Диаграмма	<ul style="list-style-type: none"> • As-Ga
Ширина запрещенной зоны	<ul style="list-style-type: none"> • GaAs
Crystal	<ul style="list-style-type: none"> • GaAs
AtomWork (NIMS, Japan)	<ul style="list-style-type: none"> • As-Ga

- Аналитические обзоры
- Фазовые диаграммы
- Литературные ссылки
- Экспериментальные данные - точки фазовой диаграммы
- Расчитанные данные - точки фазовой диаграммы
- Уровень качества данных о системе

Рисунок 3 Список свойств в ИС “Диаграмма” для системы As-Ga.

Пользователь может, щелкнув по гиперссылке, прозрачно перейти через шлюз безопасности единой точки входа <http://meta.imet-db.ru/gate/gateSAP.aspx>, в ИС СНВМ с запрошенной информацией. При этом происходит автоматическое перенаправление на страницу с требуемой информацией, например, при переходе по ссылке “Фазовые диаграммы” пользователь увидит сразу затребованную информацию (рис. 4).

Таким образом, в работе на основе метода интеграции информационных систем (Enterprise Application Integration, EAI) реализована единая точка входа во все ИС СНВМ, описанные в каталоге информационных ресурсов метабаза (рис. 5). Желтыми стрелками на рисунке показаны потоки данных при запросах релевантной информации, зелеными стрелками показан переход пользователя

из единой точки входа в ИС СНВМ с релевантной информацией, а синими стрелками обозначен переход пользователя из контекста одной из ИС СНВМ в контекст ИС СНВМ с релевантной информацией.

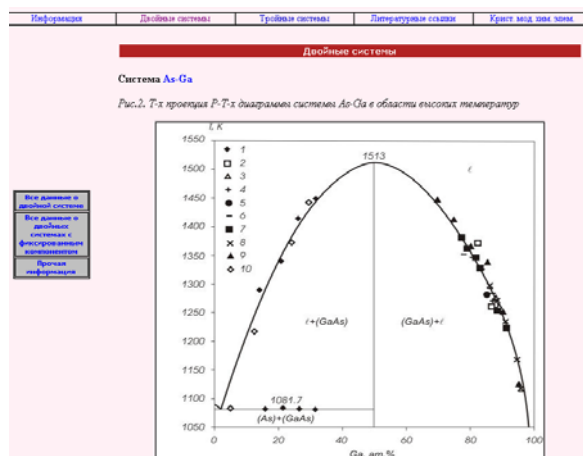


Рисунок 4 Фазовая диаграмма для системы As-Ga в ИС “Диаграмма”

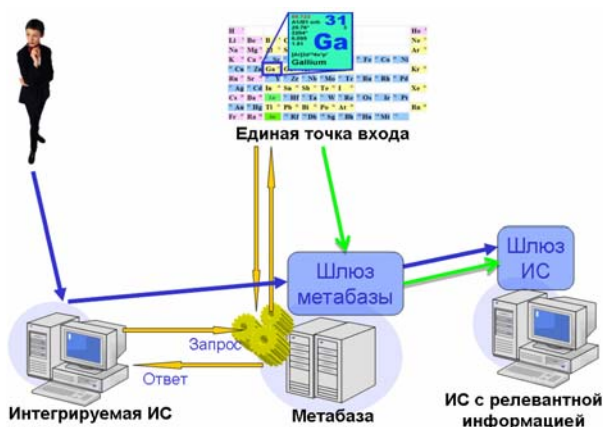


Рисунок 5 Реализации интеграции ИС СНВМ методом EAI

3 Заключение

На текущий момент разработанная интегрированная ИС СНВМ является единственной успешной попыткой интеграции материаловедческих ИС на территории России. Достоверность приведенных в работе выводов подтверждается практической реализацией интегрированной ИС, которая может использоваться конечными пользователями для поиска и сбора информации (EAI) по свойствам неорганических веществ и материалов.

Литература

- [1] Дударев В.А. Единая точка входа в информационные системы по свойствам неорганических веществ // X Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов “Физико-химия и технология неорганических материалов”. Сборник материалов. М.: ИМЕТ РАН, 2013. С. 84-86.
- [2] Дударев В.А., Филоретова О.А. Подход к интеграции баз данных по свойствам неорганических веществ на основе метабазы // Прикладная информатика, №4(46), 2013, с. 38-42.
- [3] Kornyshko V., Dudarev V. Software Development for Distributed System of Russian Databases on Electronics Materials // Int. Journal “Information Theories & Applications”, vol. 13, number 2, 2006. P. 121-126.
- [4] Киселева Н.Н., Дударев В.А. Информационная система по ресурсам неорганической химии и материаловедения // Вестник Казанского технологического университета, Т. 17, №19, 2014, с. 356-358.
- [5] Дударев В.А. Международная интеграция баз данных по свойствам неорганических веществ // VIII Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов “Физико-химия и технология неорганических материалов”. Сборник материалов. М.: ИМЕТ РАН, 2011. стр: 158-159.
- [6] Dudarev V.A., Kiselyova N.N., Xu Y., Yamazaki M. Virtual integration of the Russian and Japanese databases on properties of inorganic substances and materials // MITS 2009. Symposium on Materials Database. National Institute for Materials Science (NIMS). Materials Database Station (MDBS). 2009. p. 37-48.
- [7] Киселева Н.Н., Дударев В.А. База данных “Информационные ресурсы неорганической химии и материаловедения” // Информационные технологии, 2010, № 12, с. 63-66.

User interface integration for the information systems on inorganic chemistry

Victor A. Dudarev, Nadezhda N. Kiselyova

Often unexperienced user faces difficulties on materials science information search since it is unknown what information system should be used. Therefore, development of single access point application is of great importance for users searching for materials science information since it allows them to browse relevant data in heterogeneous information systems.