

Научная и когнитивная графика в информационных системах по атомной спектроскопии

В.В. Казаков, В.Г. Казаков, О.И. Мешков, К.Б. Жумадилов

Аннотация— В статье описываются возможности и перспективы использования графических средств представления научных данных в веб. Обосновывается важное значение таких инструментов для поддержки научных исследований и подготовки специалистов. Описываются графические возможности, предоставляемые научной информационной системой по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов». Рассматриваются такие средства визуализации научных данных, как инструменты построения спектрограмм и диаграмм Гротриана. Описана уникальная для информационных Интернет ресурсов по атомной спектроскопии возможность сравнительного анализа экспериментально полученных спектров с эталонными спектрами атомных систем, сформированными по базе данных ресурса. Впервые представлена экспериментальная круговая диаграмма спектров, наиболее наглядно показывающая структуру и процессы атомной системы. Описаны подходы и алгоритмы реализации представленных графических инструментов.

Ключевые слова— информационные системы, базы данных, спектроскопия, научная визуализация, диаграммы Гротриана, когнитивная графика, сравнительный анализ спектров, мультимедиа.

I. ВВЕДЕНИЕ

Обеспечение доступа ученых и разработчиков к информации по спектрам атомных систем является одной из наиболее сложных и актуальных задач поддержки исследований в целом ряде научных и технических направлений фундаментальной физики и

Статья получена 20 октября 2017.

Казаков Владислав Витальевич. Новосибирский государственный университет, научный сотрудник. Новосибирский государственный университет экономики и управления, доцент.
e-mail: vkazakov@phys.nsu.ru

Казаков Виталий Геннадьевич. Новосибирский государственный университет экономики и управления, декан. Новосибирский государственный университет, научный сотрудник.
e-mail: v.g.kazakov@nsuem.ru

Мешков Олег Игоревич. Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, зав. сектором. Новосибирский государственный университет, профессор.
e-mail: O.I.Meshkov@inp.nsk.su

Жумадилов Каир Бекбатырович. Новосибирский государственный университет.
e-mail: zhumadilov@nsu.ru

Работа выполняется при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №16-37-60094, проект №16-07-00910).

прикладных областях от астрофизики и физики газовых лазеров до элементного анализа и археологии. Информационные ресурсы по атомной спектроскопии прошли длительный путь от справочных табличных до компьютерных систем и представлены сегодня, прежде всего, Интернет ресурсами, организованными как информационно-поисковые системы с Веб интерфейсом [1].

Печатные справочные издания по спектроскопии, в том числе содержащие массивы спектральных данных и диаграммы спектров, в течение десятилетий были основным и незаменимым способом представления информации о спектрах атомных систем. Однако, печатный способ публикации информации, а особенно массивов данных, неэффективен по целому ряду причин. Прежде всего, бумажные издания требуют долгого и затратного производственного цикла. Результатами последних исследований они пополняться не могут – для этого требуется проходить издательский цикл заново, поэтому они быстро теряют свою актуальность. Важной чертой печатных изданий является и то, что информация в них упорядочена и отобрана по некоторому принципу, не всегда совпадающему с потребностями конкретного исследования. При этом возможности адаптации структуры информации к произвольной задаче отсутствуют.

В случае потребности обработки некоторого массива данных автоматизированным, программным способом, требуется ручной ввод большого объема данных с бумажного носителя в файл или программу. Поиск информации в бумажных изданиях достаточно трудоемок, а фильтрация данных по каким-либо параметрам невозможна. Особенно критично это для данных, представляемых в графической форме: читатель может получить только небольшое количество изображений, подготовленных автором индивидуально.

Преодоление указанных недостатков стало возможным в связи с развитием компьютерных способов хранения, обработки и представления информации. На сегодняшний день компьютерные системы предоставляют возможность создания информационных ресурсов, которые могут быстро и часто пополняться новыми данными, обеспечивают пользователю широкие возможности выборки, фильтрации и сортировки данных в соответствии с задачей исследования. Графическая визуализация в

современных информационных систем (ИС) может генерироваться «на лету» с учетом самых последних и

актуальных данных, сопровождаясь необходимыми инструментами выборки и фильтрации.

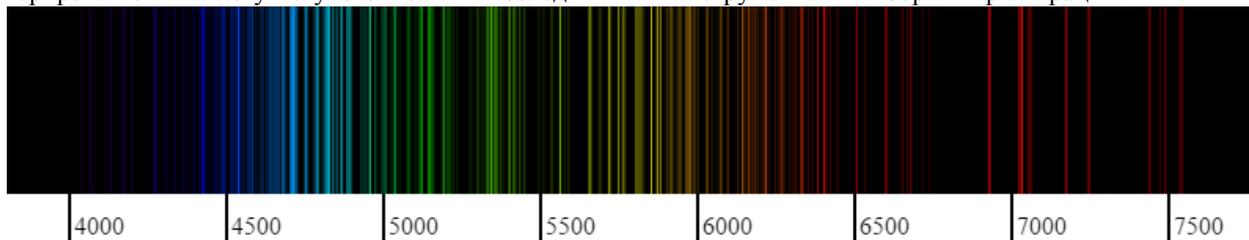


Рис 1. Спектрограмма нейтрального атома неона Ne I в видимом диапазоне

При этом себестоимость поддержки, актуализации, наполнения данными ИС значительно ниже стоимости публикации бумажных изданий.

В связи с этим в настоящее время компьютерные информационные ресурсы постепенно вытесняют традиционные печатные издания. В последние два десятка лет активно развивается тенденция замены печатных справочных изданий по атомным и молекулярным спектрам компьютерными базами данных и ИС на их основе.

На сегодняшний день такие системы являются наиболее перспективным механизмом предоставления информации и в области атомной спектроскопии. Будучи опубликованными в Интернете, такие системы мгновенно предоставляют каждому пользователю, подключенному к Интернету, самые актуальные и точные данные. Пользователь получает доступ к данным мгновенно сразу после их размещения в ИС. Таким образом, сокращается время между получением новых данных и их доставкой до конечного потребителя. Сегодня практически все ведущие научные державы создают и поддерживают информационные ресурсы по атомной спектроскопии для информационного обеспечения национальных исследований и оперативного введения новых данных в научный оборот. Среди них такие ведущие проекты, как ASD NIST (США) [2], SPECTR-W3 (Россия) [3], ИС «Электронная структура атомов» (ЭСА) (Россия) [4,5], VAMDC (международная кооперация) [6] и др.

Дальнейшее развитие технических средств представления информации о спектрах атомных систем позволило предоставить для исследователей и обучающихся более мощные инструменты анализа и обработки массивов научных данных, такие как научная графика, когнитивная визуализация и интерактивные средства анализа данных.

Например, ИС ЭСА, ASD NIST и некоторые другие ресурсы позволяют использовать имеющиеся массивы данных для построения спектрограмм и/или диаграмм Гротриана, которые графически представляют электронную структуру атомных систем. Отечественная ИС ЭСА при этом в плане научной графики является более развитой, чем мировые аналоги. Ее средства научной визуализации и анализа данных активно используются при решении широкого круга научных и инженерных задач, а также в обучении специалистов-физиков.

Развитие мультимедийных средств поддержки

научных исследований является важной задачей и имеет значимый эффект для проведения исследований и обучения.

II. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СПЕКТРОВ В ВИДЕ СПЕКТРОГРАММ В ИС ЭСА

Данные о спектрах атомных систем представляют собой перечни энергетических уровней и радиационных переходов между этими уровнями. Каждый уровень энергии является определенным состоянием атомной системы, характеризующимся положениями электронов на орбиталях – электронной конфигурацией. Каждой такой конфигурации соответствует определенная энергия, необходимая атомной системе для существования в данном состоянии.

Переход с более высокого энергетического уровня на более низкий называется радиационным переходом. При таком переходе излишек энергии – разница энергий уровней – выделяется испусканием электромагнитной волны. Длина такой волны соответствует количеству выделенной энергии. В некоторых случаях длина волны соответствует видимому человеческим глазом диапазону и воспринимается определенным цветом. Если длина волны находится за пределами видимого диапазона, она невидима для человеческого глаза, не имеет цвета, но может быть зарегистрирована техническими средствами. Большинство источников излучения испускают большое количество волн разной длины одновременно. Набор всех волн, испускаемых определенным веществом, называется спектром излучения.

Наиболее стандартным способом визуального представления спектров являются спектрограммы, состоящие из множества линий, соответствующих переходам, по оси X соответствующих длинам волн радиационных переходов (рис. 1). Такой вид представления спектров берет свое начало от оптических спектроскопов, в которых исследователь наблюдает картину спектра, развернутого в фокальной плоскости за счет преломления света в оптической призме. ИС ЭСА может подобным образом отображать спектры, информация о которых содержится в базе данных этого ресурса [7].

Инструменты построения спектрограмм присутствуют и в нескольких других ресурсах по спектроскопии – ASD NIST, SPECTR-W3, VAMDC. Решения, представленные в этих системах, однако, обладают рядом недостатков. Так, спектрограммы указанных ИС (кроме ИС ЭСА) – черно-белые даже в оптическом

диапазоне, без возможности интерактивной настройки для просмотра, например, тонкого и сверхтонкого расщепления линий, спектральных серий и т.п. Спектрограммы VAMDC не отображают информации об интенсивности спектральных линий, а диаграммы

SPECTR-W3 построены вручную, для небольшого кол-ва атомных систем и не способны отображать изменения, осуществленные в базе данных при вводе новой информации.

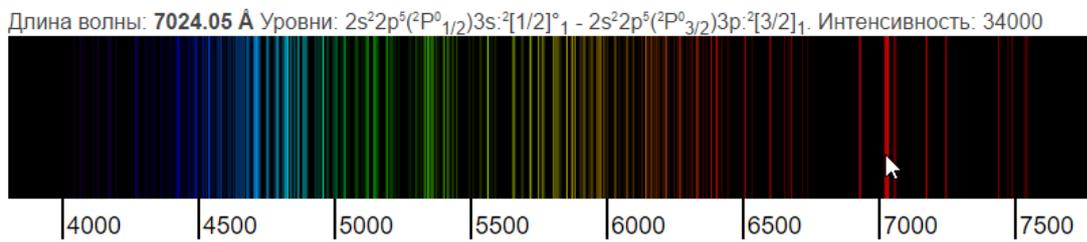


Рис 2. Отображение информации о спектральной линии (сверху: длина волны, конфигурация уровней, интенсивность) в ИС ЭСА

Разработанные для ИС ЭСА средства построения спектрограмм позволяют генерировать их автоматически по информации об уровнях и переходах, хранящихся в БД системы. Поскольку такие диаграммы готовятся программным алгоритмом в момент запроса, они могут быть построены для любой атомной системы, на основе актуальных данных и с учетом дополнительных настроек, накладываемых пользователем. При этом по качеству спектрограммы ИС ЭСА превосходят спектрограммы других информационных ресурсов.

Существенным параметром диаграмм спектров является разрешение, напрямую связанное с количеством информации, которое может быть размещено на экране. В ИС ЭСА используется векторная графика и реализованы инструменты масштабирования, позволяющие увеличивать выбранный участок спектра, что обеспечивает возможность просмотра тонких и сверхтонких структур линий. Разрешение спектрограмм ИС ЭСА

неограниченно, а проблема конечности разрешения пользовательского экрана решается путем организации скроллинга (прокрутки, перемещения) спектрограммы по экрану. Таким образом, спектрограммы ИС ЭСА остаются достаточно читаемыми при любом количестве линий атомной системы.

Грамотное использование цветовых решений может существенно облегчать работу пользователя с научной графикой. В ИС ЭСА спектральные линии оптического диапазона изображаются цветом, соответствующим восприятию человеческим глазом светового потока с данной длиной волны [8].

Важной характеристикой является наличие информации о параметрах переходов. На спектрограммах ИС ЭСА размечена шкала длин волн переходов, при этом подробная информация о характеристиках конкретных переходов отображается при наведении курсора мыши на соответствующую линию. Это существенно повышает читаемость спектрограммы (рис. 2).

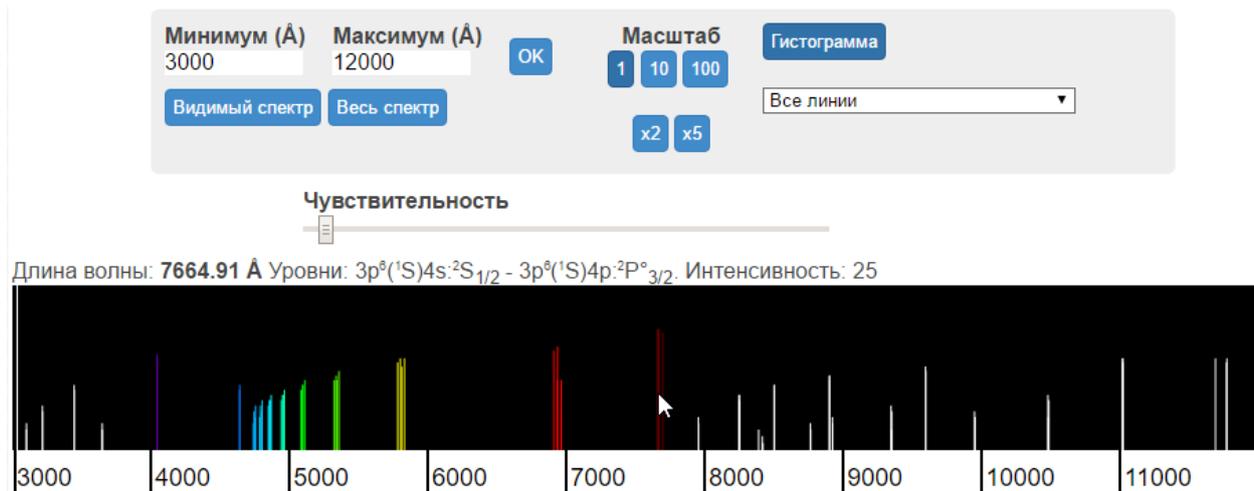


Рис.3. Интерфейс сервиса построения спектрограмм ИС ЭСА при работе со спектром К I. Для работы выбран участок спектра от 3000 до 12000 Å без увеличения.

На рисунке сверху: панель инструментов интерактивного управления виртуальным спектрометром: окна выбора участка спектра, кнопки выбора масштаба увеличения и переключения в режим гистограммы, окно выбора спектральной серии, инструмент настройки чувствительности. Снизу: спектрограмма рассматриваемого участка спектра в режиме «гистограмма»

Для многих задач полезно визуальное представление интенсивности линий. Эта характеристика присутствует на спектрограммах только двух мировых ИС по спектроскопии, при этом только в ИС ЭСА отображение

интенсивности отражает соответствующие значения из базы данных и может гибко настраиваться пользователем для наилучшего восприятия характеристик спектра. Так, в ИС ЭСА есть

возможность усиливать слабые, невидимые линии, что соответствует такому механизму настройки спектрографа, как «экспозиция».

На эффективность работы со спектрограммой влияют возможности ее настройки на конкретную задачу (рис. 3). Так, возможности выбора диапазона спектра и фильтрация отображаемых переходов по определенным параметрам, например, по длине волны, способны существенно компенсировать малое разрешение спектрограмм. В ИС ЭСА, в отличие от аналогов, такие возможности представлены широким спектром инструментов. Так, спектрограммы ИС ЭСА интерактивны и позволяют на лету ограничивать диапазон длин волн (например, для отображения только видимого излучения), а также, для некоторых атомных систем выделять серии переходов. В интерактивном режиме регулируется и усиление слабых линий.

Веб-компонента построения спектрограмм выполнена, как браузерное приложение на основе технологии векторной графики SVG. По сравнению с другими технологиями векторной графики (HTML5 Canvas, Adobe Flash) SVG является наиболее удобной для реализации сервиса построения спектрограмм. Элементы графики SVG являются элементами DOM-структуры документа. Таким образом, взаимодействие с ними основано на тех же принципах, что и с HTML-объектами. Благодаря этому, к объектам SVG применимы свойства CSS, а поведение и события можно описывать скриптами JavaScript. Таким образом, легко реализовать каждую спектральную линию отдельным объектом, интерактивно управляемым скриптами в браузере (`<line>`). Исключительно просто реализуются также события наведения на спектральную линию для отображения информации о соответствующем радиационном переходе и его энергетических уровнях, используя событие `onmouseover` SVG-линии `<line>`. Минусом SVG является низкая производительность при отрисовке большого количества графических объектов. В описываемой ИС присутствует несколько атомных систем с количеством переходов более 5000, для которых снижение производительности в зависимости от используемого браузера и мощности компьютера может стать критичным (например, нейтральный атом железа Fe I). Среди браузеров Microsoft Internet Explorer, Microsoft Edge, Mozilla Firefox и Google Chrome наилучшую производительность компоненты демонстрирует Chrome, а наихудшую – Firefox. При этом, у браузера Chrome наблюдаются незначительные помехи перерисовки (например, фантомные линии, не удаленные при перерисовке сцены). Это является известной проблемой движка Google Chrome.

Массив спектральных данных для компоненты SVG в ИС ЭСА генерируется на сервере PHP-скриптом на основе базы данных. В БД атомные спектры представлены в следующих структурах:

1. Таблица радиационных переходов (transition) с полями:
 - a. идентификатор записи (id)
 - b. идентификатор атомной системы (atom_id)

- c. идентификатор нижнего уровня (lower_level_id)
- d. идентификатор верхнего уровня (upper_level_id)
- e. длина волны излучения (wavelength)
- f. интенсивность перехода (intensity)
- g. и др.

2. Таблица энергетических уровней (level) с полями:
 - a. идентификатор записи (id)
 - b. идентификатор атомной системы (atom_id)
 - c. электронная конфигурация уровня (config)
 - d. энергия уровня (energy)
 - e. и др.

Для выбранной атомной системы (например, однократный ион атома натрия) выбираются необходимые данные для построения спектрограммы с помощью стандартного SQL-запроса. Далее PHP-скрипт вычисляет цвет, соответствующий длине волны каждого выбранного перехода. В алгоритме заданы 7 формальных опорных цветов, наиболее удобных для отображения на компьютере:

- фиолетовый (3800 Å),
- голубой (4400 Å),
- бирюзовый (4900 Å),
- зеленый (5100 Å),
- желтый (5800 Å),
- оранжевый (6450 Å),
- красный (7800 Å).

Остальные цвета вычисляются методом линейной интерполяции. Цвета за пределами видимого диапазона (длина волны меньше, чем для фиолетового или больше чем для красного цвета) отображаются белым цветом. После того, как извлечены записи по всем переходам атомной системы и им сопоставлены цвета в палитре RGB, PHP-скрипт упаковывает данные в JSON-массив для передачи на страницу в скрипт (JavaScript), исполняемый на компьютере клиента в браузере.

На стороне клиента исполняемый скрипт строит спектрограмму в соответствии с пользовательскими настройками. Для каждого элемента из JSON-массива переходов строится вертикальная SVG-линия `<line>`. В соответствии с длиной волны перехода такая линия занимает определенное положение по оси X (атрибуты `x1` и `x2` объекта `<line>`).

В случае если диапазон длин волн ограничен (например, видимым диапазоном), из отображаемой спектрограммы исключаются линии, выходящие за пределы этого диапазона. Для исследования тонких и сверхтонких расщеплений реализован просмотр фрагментов спектров в повышенном разрешении. Увеличить участок спектра можно в 2, 5, 10, 20, 50, 100, 200, 500 раз. Эти изменения регулируются алгоритмом установки атрибутов `x1` и `x2` SVG-объекта `<line>` (JavaScript).

В соответствие с выбранной «чувствительностью» отдельные линии затемняются или делаются более яркими в зависимости от интенсивности соответствующего перехода. Это достигается в SVG за счет использования прозрачности – альфа-канала в

палитре RGBA. Более яркие линии получают большее значение непрозрачности Alpha. Для более удобного просмотра, интенсивность отображается с логарифмической поправкой для возможности одновременного просмотра линий, интенсивности которых отличаются на порядки.

Чем выше «чувствительность», тем больше устанавливается основание логарифма. Таким образом, слабые линии становятся видимыми, а сильные не «зашкаливают». В режиме «гистограмма» интенсивность отображается не яркостью отрисованной линии, а ее высотой. Алгоритм инструмента «чувствительность»

при этом работает аналогично стандартному режиму.

При выборе определенной спектральной серии, на экран выводятся только переходы, относящиеся к данной серии. Все настройки применяются на лету, без перезагрузки страницы. Каждая линия генерирует программное событие при наведении на нее указателем мыши, в результате которого на экран выводится подробная информация о соответствующем переходе – значение длины волны, интенсивность, электронные конфигурации и термы энергетических уровней (EcmaScript + jQuery).

Загрузите файл или выберите из списка

Выберите файл Файл не выбран ---

Минимум (Å) Максимум (Å) Масштаб Гистограмма
 3000 9000 1 10 100
 Видимый спектр Весь спектр x2 x5

Чувствительность

Длина волны: 5460.73 Å Уровни: $5d^{10}6s(^2S)6p^3P^2 - 5d^{10}6s(^2S)7s^3S_1$ Интенсивность: 1100

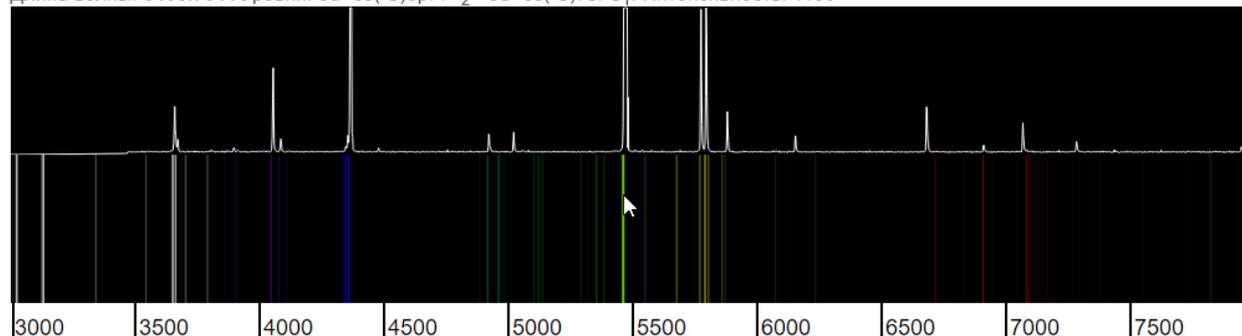


Рис.4. Интерфейс сравнительного анализа спектров ИС ЭСА. Верхний спектр – экспериментальный спектр ртутной лампы, загруженный из CSV-файла. Нижний – спектр нейтрального атома ртути из базы данных системы.

III. ВОЗМОЖНОСТИ СРАВНЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ЭТАЛОННЫХ СПЕКТРОГРАММ

В специализированном программном обеспечении, обычно прилагаемом к современным спектрометрам, имеется возможность сравнения экспериментально полученного спектра с эталонными. Такое может быть полезно, например, для обнаружения в экспериментальном образце примесей по наличию в полученном спектре линий, характерных для спектров определенных веществ. Например, такая возможность существует в приложении АТОМ [9].

В современных информационных Интернет ресурсах по атомной спектроскопии (кроме ИС ЭСА) подобные возможности отсутствуют. В то же время их наличие может быть полезным в ряде случаев, когда у пользователя имеется экспериментально полученный спектр и отсутствует специализированное локальное программное обеспечение, позволяющее выполнять подобные сравнения.

В ИС ЭСА имеется возможность сравнивать экспериментально полученные спектры пользователя с эталонными спектрами атомных систем, находящимися в базе данных информационного ресурса. При этом

загружаемый экспериментальный спектр должен быть файлом формата CSV (поддерживается, например, MS Excel), содержащим пары значений: длина волны – интенсивность.

Сервис сравнения спектров в ИС ЭСА выполнен на основе инструмента построения спектрограмм этой системы. Общий вид интерфейса приведен на рис. 4. На скриншоте приведено сравнение экспериментально полученной спектрограммы ртутной лампы со спектром нейтрального атома ртути, сгенерированным в ИС ЭСА. Особенностью интерфейса является то, что спектрограммы изображаются связанными парами: полная спектрограмма экспериментального спектра размещена совместно с эталонной спектрограммой и имеет общую ось координат со значениями длин волн.

Помимо возможности загружать для анализа пользовательские спектры, в системе имеется ряд демонстрационных экспериментальных спектров, например, спектры ртутной, водородной, натриевой ламп и др.

Реализованный сервис может быть особенно интересен для ряда задач определения элементного состава образцов по их спектрам в научных и образовательных целях, поскольку предоставляет

спектрограмм. Однако для диаграмм Гротриана был реализован интеллектуальный алгоритм отбора отображаемых переходов, а расположение линий определяется сложной системой, соответствующей правилам построения этих диаграмм. Приоритет линий (кроме п.4) вычисляется с помощью хранимой процедуры используемой СУБД, в то время, как расположение линий вычисляется достаточно сложным алгоритмом EsmaScript, который 1) разносит на левую и правую половину диаграммы энергетические уровни по принципу четности конфигурации; 2) выполняет группировку энергетических уровней по общим признакам их электронных конфигураций и в зависимости от соотношения количества таких групп к разрешению окна браузера; 3) удлинняет «полку» уровня в соответствии с количеством переходов, связанных с этим уровнем; 4) отображает переходы при условии возможности их расположения без наложения друг на друга.

V. КОГНИТИВНАЯ ГРАФИКА

Рассмотренные нами графические инструменты можно считать в какой-то мере традиционными, имеющими свою историю и получившие лишь умеренную модификацию при переходе на современные средства вычисления и отображения графики. Когнитивная графика, напротив, есть попытка совершенно новым, оригинальным способом отобразить научные данные, что может дать исследователю новые знания за счет наглядного проявления некоторых закономерностей отображаемых данных (по А.А. Зекнину[11]). Другие существующие определения когнитивной графики не завязаны на возможности получения новых знаний, но при этом отмечают важность наглядного отображения физических (или математических и др.) свойств представляемых данных.

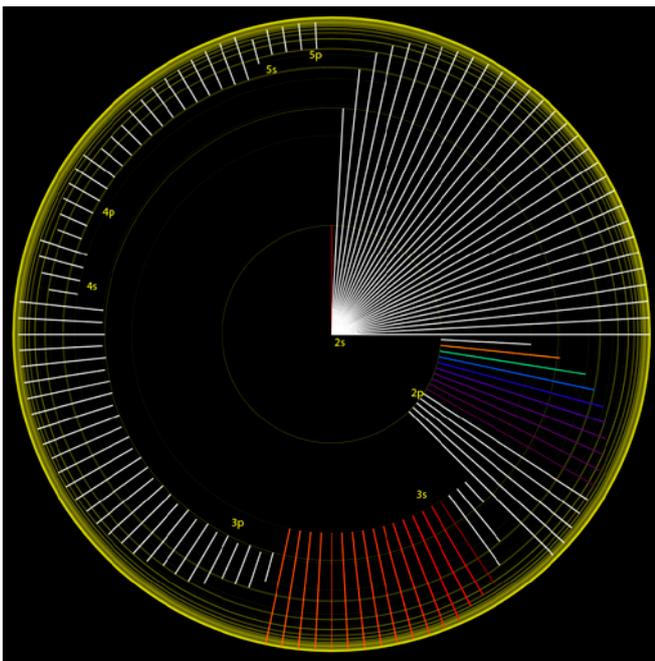


Рис.6. Круговая спектральная диаграмма атома Лития (Li I)

была осуществлена попытка создания такой когнитивной диаграммы спектров (рис. 6), которая бы отображала спектральные линии не в традиционном плоском поле спектрограммы или диаграммы Гротриана, а на круговой модели Бора.

На такой диаграмме уровни энергии представлены концентрическими окружностями, что приблизительно соответствует орбитам электронов. Радиационные переходы представлены цветными отрезками, соединяющими соответствующие верхний и нижний энергетический уровень.

Естественно, создавая такое оригинальное представление можно предвидеть некоторый скепсис со стороны специалистов. Круговая модель – слишком упрощенное представление и применима в какой-то степени только для одноэлектронных атомных систем. Однако, с другой стороны, «физика» энергетических уровней и радиационных переходов здесь более наглядна по сравнению с плоскими спектрограммами и диаграммами Гротриана. В данном представлении также наиболее хорошо видны серии переходов.

Отметим также простоту реализации таких новых графических представлений, вытекающей из использования объектной модели графических элементов SVG. Так, реализация экспериментальной круговой диаграммы была выполнена на основе алгоритмов построения спектрограмм ИС ЭСА с заменой линейного способа позиционирования переходов на радиальный и добавления отображения энергетических уровней с помощью SVG элементов <circle>

VI. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показаны подходы и способы реализации научной и когнитивной графики для поддержки научных исследований на примере визуализации данных из области атомной спектроскопии. Средства визуализации атомных спектров в виде спектрограмм, реализованные в ИС ЭСА, построены в виде интерактивных приложений с использованием векторной графики и эффективны для целей аналитической работы со спектрами и в задачах подготовки кадров в спектроскопии и смежных областях.

В ИС ЭСА реализован широкий спектр инструментов работы со спектрограммами: выбора диапазона спектра, увеличение разрешения, фильтрация отображаемых переходов по определенным параметрам, выделение серий переходов, усиление слабых линий. Существенные возможности по поддержке научных исследований предоставляет также сервис сравнения экспериментально полученных спектров с эталонными спектрами атомных систем, эффективный при решении многих задач сравнительного анализа спектров. Подобный сервис является уникальным для информационных Интернет ресурсов по спектроскопии, а единственной альтернативой ему является использование дорогостоящего и сложного в работе программного обеспечения, ориентированного на

В рамках проекта поддержки и развития ИС ЭСА

работу на локальном компьютере, и входящего, как правило, в состав современных спектрометров.

Визуализация атомных спектров в виде автоматически генерируемых по базе данных диаграмм Гротриана, реализованная в ИС ЭСА, является удобным инструментом для теоретического анализа спектров и подготовки специалистов в области атомной физики и спектроскопии. Алгоритмы построения, реализованные в ИС ЭСА, близко соответствуют методике построения диаграмм специалистами «вручную» и генерируют хорошо-читаемые диаграммы, которые подходят как для целей анализа электронной структура атомной системы, так и для обучения.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Казаков В. Г., Яценко А. С. Структура, хранение и представление данных о спектрах атомных систем // Новосибирск, НГУ, учебное пособие, 2011.
- [2] Информационная система по атомной спектроскопии NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0). URL: <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm> (дата обращения: 20.10.2017)
- [3] База данных по спектральным свойствам атомов и ионов SPECTR-W3. URL: <http://spectr-w3.snz.ru/index.phtml> (дата обращения: 20.10.2017)
- [4] Казаков В.В., Казаков В.Г., Мешков О.И., Яценко А.С. Информационная система «Электронная структура атомов». URL: <http://grotrian.nsu.ru> (дата обращения: 20.10.2017)
- [5] Казаков В.Г., Казаков В.В., Яценко А.С. Патент на полезную модель «Эмулированный анализатор оптического спектра» № 117178. Зарегистрирован в госреестре полезных моделей РФ 20 июня 2012 г.
- [6] Портал европейского консорциума VAMDC. URL: <http://portal.vamdc.org> (дата обращения: 20.10.2017)
- [7] Казаков В.Г., Казаков В.В., Ковалев В.С., Федотов А.М., Яценко А.С. Информационные системы по атомной спектроскопии: от информационно-поисковых к системам поддержки принятия решений // Вестник НГУЭУ, 2014, № 2, С. 268-279.
- [8] Казаков В.Г., Казаков В.В., Ковалев В.С., Яценко А.С. Цифровая Эмуляция спектрографа. // Вестник НГУ, серия информационные технологии. – 2001 Т. 9, № 3, С. 30-36.
- [9] Гаранин В.Г. и др. Программное обеспечение для автоматизации атомно эмиссионного спектрального анализа – пакет «Атом» // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. Специальный выпуск. – 2007, Т. 73, С. 18-25
- [10] Казаков В.Г., Казаков В.В., Жакупов М.Б., Яценко А.С. Задача автоматического построения диаграмм атомных спектров и опыт ее решения в ИС ЭСА // Вестник НГУ, серия информационная техника – 2010, Т. 8, № 3, С. 66-78.
- [11] Зенкин А.А. Когнитивная компьютерная графика / Под ред. Д.А. Поспелова. М.: Наука, Гл. ред. Физ. Мат. Лит., 1991.

Scientific and cognitive graphics in information systems on atomic spectroscopy

V.V. Kazakov, V.G. Kazakov, O.I. Meshkov, K.B. Zhumadilov

Abstract— The article describes the possibilities and prospects for using graphical tools for presenting scientific data on the web. The importance of such tools for supporting scientific research and training specialists is substantiated. The graphical possibilities provided by the scientific information system on atomic spectroscopy "Electronic structure of atoms" are described. Such means of visualization of scientific data as tools for constructing spectrograms and Grotrian diagrams are considered. A unique possibility for information Internet resources in atomic spectroscopy is described: the possibility of comparative analysis of experimentally obtained spectra with reference spectra of atomic systems formed from a resource database. An experimental circular diagram of spectra is presented for the first time, which most clearly shows the structure and processes of the atomic system. The approaches and algorithms for implementing the presented graphic tools are described.

Key words: information systems, databases, spectroscopy, scientific visualization, Grotrian diagrams, cognitive graphics, comparative analysis of spectra, multimedia.