

Мультимедийные средства представления научных данных по атомной спектроскопии

В.В. Казаков^{1, 2}, В.Г. Казаков^{2, 1}, О.И. Мешков^{3, 1}, А.С. Яценко^{4, 1}

¹ Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

² Новосибирский государственный университет экономики и управления

³ Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН

⁴ Институт автоматики и электрометрии СО РАН

vkazakov@phys.nsu.ru, v.g.kazakov@nsuem.ru,
O.I.Meshkov@inp.nsk.su, grotrian@nsu.ru

Аннотация

В статье описываются графические средства представления спектральных данных, предоставляемые информационной системой «Электронная структура атомов» для поддержки научных исследований и подготовки специалистов. 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. Представлены подходы и алгоритмы реализации таких инструментов.

Ключевые слова: информационные системы, базы данных, спектроскопия, научная визуализация, диаграммы Гротриана, сравнительный анализ спектров

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 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].

В настоящее время существует целый ряд таких систем (около 20), развиваемых и поддерживаемых ведущими научными организациями мира. Например, в США национальным институтом стандартов и технологий (NIST) поддерживается система ASD [2]. Аналогичны ей системы NIFS (Япония) [3], AMODS (Корея) [4], VALD (Австрия) [5], VAMDC (международный проект) [6]. Каждая из систем имеет обширную базу данных по спектрам атомов и/или ионов.

В России одним из известных информационных ресурсов является банк данных по спектроскопическим свойствам атомов и ионов SPECTR-W3, созданный и развиваемый в Российском Федеральном Ядерном центре (г. Снежинск) [7]. Кроме того, в России с 2005 года опубликована в Интернет и активно развивается информационная система по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов» (ИС ЭСА), сопоставимая по основным параметрам с ведущими мировыми аналогами. [8, 9].

Информационные системы по атомной спектроскопии, как правило, имеют много общего, что связано с общей задачей предоставления пользователю максимально точных и достоверных данных о спектрах атомных систем. Все такие ресурсы имеют возможность предоставлять по запросам пользователя данные в табличном виде, включая фильтрацию и сортировку, что является существенным шагом вперед по сравнению с печатными источниками табличных данных.

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 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. Информационная система «Электронная структура атомов» при этом является значительно 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.

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.

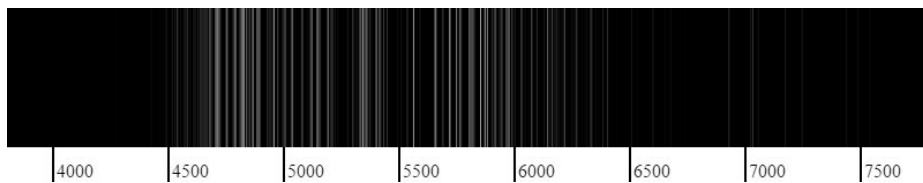


Рис 1. Спектрограмма нейтрального атома неона Ne I в видимом диапазоне

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 [10].

Инструменты построения спектрограмм присутствуют и в нескольких других ресурсах по спектроскопии — ASD NIST, SPECTR-W3, VAMDC. Решения, представленные в этих системах, однако, обладают рядом существенных 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 ASD NIST и 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.

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 [11].

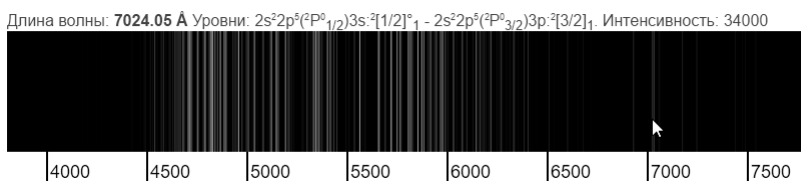


Рис 2. Отображение информации о спектральной линии (сверху: длина волны, конфигурация уровней, интенсивность) в ИС ЭСА

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).

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».

Следует отметить, что такие сгенерированные спектрограммы не могут отображать точную спектральную картину по ряду причин. Интенсивность переходов является относительной характеристикой и зависит от эксперимента. Таким образом, если в таблице спектров одной атомной системы присутствуют данные из разных источников (и соответственно, полученные в разных

экспериментах), то сопоставление интенсивностей будет отдельной проблемой актуализации БД. Для теоретически полученных, расчетных данных значения интенсивности не приводятся вообще. Однако, несмотря на определённые труднопреодолимые неточности в представлении сгенерированных спектров, для многих задач качество спектрограмм ИС ЭСА является удовлетворительным, а общая картина спектра большинства атомных систем близка к картине экспериментального спектра.



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»

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 подходящей 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. Исключительно просто реализуются также события наведения на спектральную линию для отображения информации о соответствующем радиационном переходе и его энергетических уровнях.

Массив спектральных данных для компоненты SVG 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 опорных цветов:

- 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 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. 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.

В соответствии 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. Причем, чем выше «чувствительность», тем больше 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.

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 [12]

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. Такая ситуация достаточно распространена, поскольку эти программы не являются свободно распространяемыми и, как правило, поставляются в составе анализаторов спектров и других спектрометрических комплексов.

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.

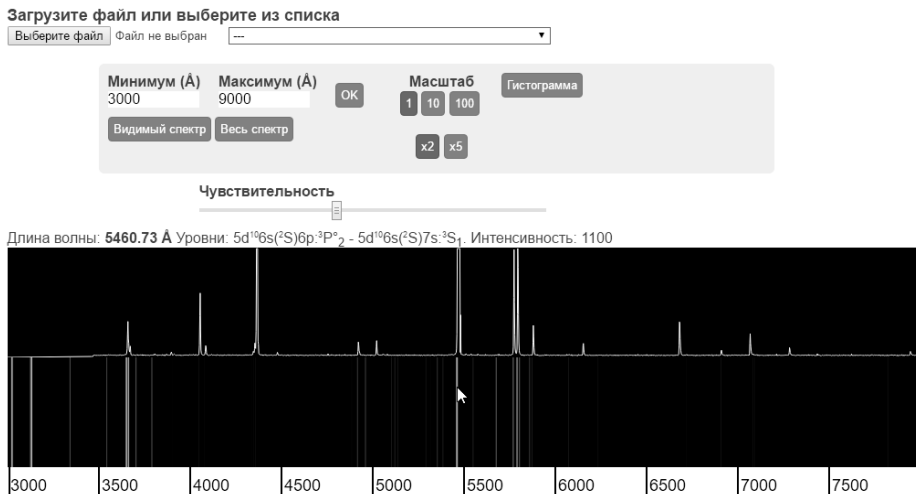


Рис.4. Интерфейс сравнительного анализа спектров ИС ЭСА. Верхний спектр — экспериментальный спектр ртутной лампы, загруженный из CSV-файла. Нижний — спектр нейтрального атома ртути из базы данных системы.

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.

Таким образом, реализованный сервис может быть особенно интересен для ряда задач определения элементного состава образцов по их спектрам в научных и образовательных целях, поскольку предоставляет простые, доступные и эффективные инструментальные средства для сравнительного анализа спектров, а также для целей общего спектрального анализа. Многие из этих задач могут быть полезны при подготовке высококвалифицированных специалистов – физиков.

Построение диаграмм Гротриана

Еще одним способом визуализации спектров атомных систем являются графические представления электронной структуры атома в виде диаграмм Гротриана. Такое представление незаменимо для целей общего анализа электронной структуры атомов и ионов [13].

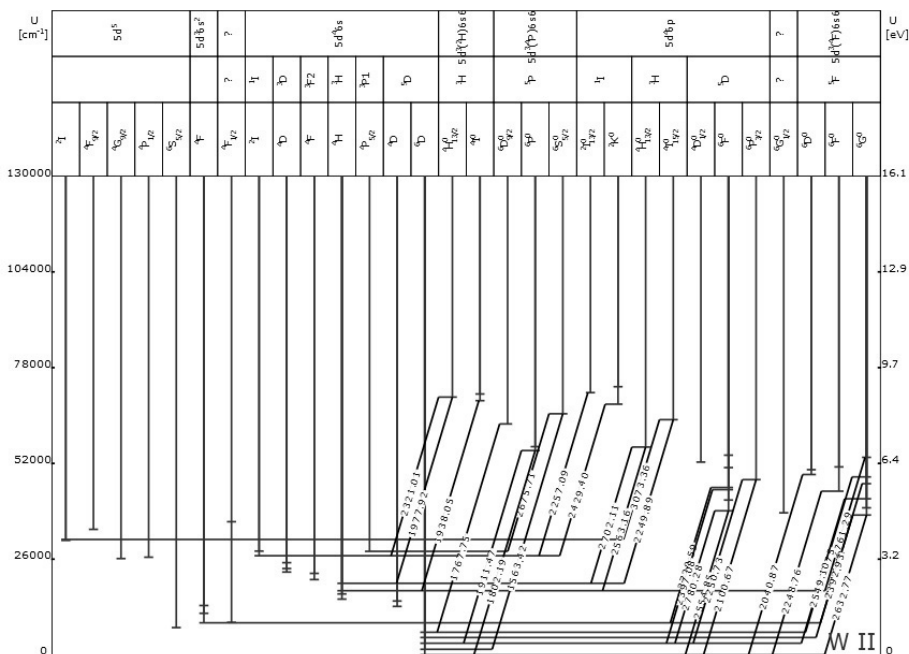


Рис. 5. Диаграмма Гротриана для однократного иона вольфрама W II в ИС ЭСА.

Диаграммы Гротриана являются сложными графическими конструкциями (рис. 5) и до определенного времени создавались «вручную» специалистами. Процесс создания диаграмм весьма трудоемок и в последние годы различными научными коллективами был сделан ряд попыток компьютеризировать процесс их построения. На сегодняшний день такая возможность присутствует в двух информационных интернет ресурсах по атомной спектроскопии: ASD NIST и ИС ЭСА.

В ИС ЭСА, как и в ASD NIST, построение диаграмм Гротриана осуществляется динамически по запросу пользователя и по спектральной информации, хранящейся в базе данных уровней и переходов атомных систем. Главным и наиболее принципиальным преимуществом ИС ЭСА является использование специального алгоритма, обеспечивающего отбор информации для размещения на диаграмме, т.к. во многих атомных системах количество уровней и переходов настолько велико, что невозможно их все вместить на диаграмму без потери читаемости. Используемый в ИС ЭСА алгоритм содержит основы интеллектуального анализа данных и отбирает линии, имитируя решения специалиста по построению диаграмм. Алгоритм классифицирует уровни и переходы по ряду признаков и, затем, отбирает из каждой группы для размещения на диаграмме такое количество, чтобы при соблюдении общей читаемости представить все основные особенности отображаемого спектра.

Реализация компоненты построения диаграмм Гротриана в ИС ЭСА схожа с алгоритмом построения спектрограмм. Однако для диаграмм Гротриана был реализован интеллектуальный алгоритм отбора отображаемых переходов, а расположение линий определяется сложной системой, соответствующей правилам построения этих диаграмм.

Заключение

Средства визуализации атомных спектров в виде спектрограмм, реализованные в ИС ЭСА существенно превосходят соответствующие средства в аналогичных ресурсах в части удобства работы. Это достигается за счет реализации в виде интерактивных приложений и использования векторной графики. Использование средств визуализации эффективно для целей аналитической работы со спектрами и в задачах подготовки кадров в спектроскопии и смежных областях. Из-за простоты и интуитивной понятности интерфейса ИС ЭСА, работа со спектрограммами может быть рекомендована даже при обучении в средней школе.

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. Эти возможности могут быть востребованы как специалистами при решении научных и инженерных задач, связанных со спектроскопией, так в учебных задачах. 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 работу на локальном компьютере, и входящего, как правило, в состав современных спектрометров.

Представление атомных спектров в виде автоматически генерируемых по базе данных системы диаграмм Гротриана, реализованное в ИС ЭСА, является мощным инструментом для теоретического анализа спектров и подготовки специалистов в области атомной физики и спектроскопии. На сегодняшний день, помимо ИС ЭСА, автоматическое построение диаграмм Гротриана реализовано только в одном аналогичном ресурсе, ASD NIST. Однако алгоритмы построения, реализованные в ИС ЭСА, более соответствуют методике построения диаграмм специалистами «вручную» и генерируют более читаемые диаграммы, которые лучше подходят как для целей анализа электронной структура атомной системы, так и для обучения.

Таким образом, информационная система «Электронная структура атомов» обеспечивает поддержку научных исследований спектральными данными по атомным системам, предоставляя исследователю большой объем актуальной информации по широкому спектру параметров энергетических уровней и радиационных переходов не только в табличной, но и в графической форме в виде спектрограмм и диаграмм Гротриана. При этом общий уровень сервисов сопоставим с лучшими мировыми аналогами, а для некоторых целей, в том числе общей аналитики электронной структуры атомных систем и подготовки

специалистов в областях, связанных со спектроскопией, использование ИС ЭСА является предпочтительным.

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

Литература

- [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: 21.10.2016).
- [3] Информационная система по спектрам атомов и молекул NIFS Database. URL: <http://dbshino.nifs.ac.jp/> (дата обращения: 21.10.2016).
- [4] Информационная система по спектрам атомов и молекул AMODS. URL: <http://amods.kaeri.re.kr/> (дата обращения: 21.10.2016).
- [5] Информационная система по спектрам атомов и молекул VALD. URL: <http://vald.astro.uu.se/> (дата обращения: 21.10.2016).
- [6] Портал европейского консорциума VAMDC. URL: <http://portal.vamdc.org> (дата обращения: 21.10.2016).
- [7] База данных по спектральным свойствам атомов и ионов SPECTR-W3. URL: <http://spectr-w3.snz.ru/index.phtml> (дата обращения: 21.10.2016).
- [8] Казаков В.В., Казаков В.Г., Мешков О.И., Яценко А.С. Информационная система «Электронная структура атомов». URL: <http://grotrian.nsu.ru> (дата обращения: 27.10.2016).
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Казаков В.Г., Казаков В.В., Ковалев В.С., Яценко А.С. Цифровая Эмуляция спектрографа. // Вестник НГУ. Серия «Информационные технологии». 2001. Т. 9Ю № 3. С. 30-36.
- [12] 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.
- [13] 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.

Multimedia ways of presenting scientific data on atomic spectroscopy

V.V. Kazakov^{1,2}, V.G. Kazakov^{2,1}, O.I. Meshkov^{3,1}, A.S. Yatsenko^{4,1}

¹ Novosibirsk state university

² Novosibirsk state university of economics and management

³ Budker institute of nuclear physics

⁴ Institute of automation and electrometry SB RAS

The article presents a Russian atomic spectroscopy information system Electronic structure of atoms (IS ESA) and describes its multimedia options for support of research and training. Original means of visualization of scientific data in the form of spectrograms and Grotrian diagrams have been proposed. Presentation of spectral data in the form of interactive color charts facilitates understanding and analysis of properties of atomic system. The use of the spectral data of the information system Electronic structure of atoms together with its functionality is effective for solving various scientific problems and specialists training.

Keywords: information systems, databases, spectroscopy, science visualization, Grotrian diagrams, spectra analysis