

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра математической кибернетики и компьютерных наук

**ПРОЕКТИРОВАНИЕ И СОЗДАНИЕ ВЕБ-ИНТЕРФЕЙСА С
ВНЕДРЕНИЕМ ФУНКЦИОНАЛА МОДУЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ KVIEW**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 411 группы
направления 02.03.02 — Фундаментальная информатика и информационные
технологии
факультета КНиИТ
Барановского Константина Руслановича

Научный руководитель

к. ф.-м. н., доцент

А. С. Иванов

Заведующий кафедрой

к. ф.-м. н., доцент

С. В. Миронов

Саратов 2025

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. В эпоху развития современных технологий веб-приложения становятся всё более востребованными. Не требуется установка дополнительного программного обеспечения, достаточно только открыть браузер и перейти по ссылке. Такой подход обеспечивает удобство, кроссплатформенность и широкую доступность. По заданию физического факультета потребовалась модернизация двух десктопных программных модулей: вычислительного модуля Kvazar и графического модуля KView. Сложность и большой объём работы потребовали формирования коллектива разработчиков. Было принято решение о создании удобного веб-приложения, которое будет предоставлять пользователям полный доступ к функционалу исходного графического интерфейса KView и вычислительного ядра Kvazar.

Цель. Целью моей работы является разработка веб-интерфейса KView, реализующего взаимодействие с вычислительным модулем Kvazar и предоставляющего обучающимся возможность создавать и редактировать наноструктуры.

Для достижения поставленной цели необходимо выполнить такие задачи:

1. Провести анализ существующей архитектуры десктопного графического модуля KView.
2. Выбрать стек веб-технологий.
3. Перенести логику графического модуля KView в веб-интерфейс с помощью React-компонент.
4. Настроить взаимодействие клиентской части с серверным API для запуска вычислений и обработки данных.

Структура и объём работы. Для решения поставленных задач выполнена выпускная квалификационная работа, включающая в себя введение, 2 основные главы, заключение, список использованных источников из 21 наименования и 3 приложения. Работа изложена на 51 странице. Первая глава имеет название «Анализ предметной области» и содержит основную информацию о десктопных программных модулях KView и Kvazar, а также о доступных на текущий момент технологиях разработки веб-приложений. Вторая глава имеет название «Внедрение функционала модуля KView в веб-интерфейс», данная глава содержит подробное описание процесса выполнения работы. Выпускная квалификационная работа заканчивается заключением, списком использованных источников, а также приложениями с кодом А-В.

Первый раздел «Анализ предметной области»

Описание вычислительного модуля Kvazar

Kvazar — многофункциональное программное средство для молекулярного моделирования наноструктур, включающее в себя метод сильной связи, метод молекулярной динамики, силовые поля REBO, AIREBO. С помощью программного пакета Kvazar можно изучать механические, эмиссионные и электронно-энергетические свойства наноструктур. Он предоставляет возможность проектирования геометрии исследуемых объектов, а также задания периодических и внешних условий.

Описание графического модуля KView

KView — это графический интерфейс, состоящий из двух подмодулей для предобработки и постобработки. Подмодуль предобработки предназначен для построения и модификации наноструктур. Подмодуль постобработки ориентирован на работу с выходными файлами, создающимися в результате работы вычислительного модуля.

Основу визуализации составляет система 3D-отображения, реализованная с использованием библиотеки PyOpenGL, где атомы представляются в виде трёхмерных сфер, расположенных в пространстве согласно их координат. Связи между атомами отображаются в виде линий. Размеры и цвета сфер зависят от типа атома. Остальные модули интерфейса включают в себя панели инструментов, средства для построения, редактирования и отображения молекулярных объектов, а также блоки управления параметрами моделирования. Все компоненты пользовательского интерфейса реализованы с использованием библиотеки PyQt4.

Модуль предобработки

Модуль предобработки представляет собой пользовательский интерфейс, в котором можно загружать, создавать, редактировать и сохранять наноструктуры. Основную часть интерфейса занимает трёхмерная сцена, в которой визуализируются атомные структуры. Она содержит систему координат с осями X, Y, Z и поддерживает следующее управление:

- вращение сцены — при помощи зажатой левой кнопки мыши;
- масштабирование — с помощью колёсика мыши;
- перемещение по экрану — при зажатой правой кнопки мыши.

KView поддерживает автоматическую генерацию следующих типов нано-

структур: Graphene, Armchair Tube, Zigzag Tube, Chiral Tube, Armchair Torus и Zigzag Torus.

Модификация геометрии выбранного участка структуры может быть выполнена следующими способами: Set shift, Translate selected structure, Stretching or contracting, Set rotation, Bend selected structure, Convolve selected structure, Set new center, Passivate selected structure, Recalc links, Calculate separate mols.

Модуль постобработки

Модуль постобработки предназначен для визуализации результатов, полученных в результате работы вычислительного модуля Kvazar. Он представляет собой проигрыватель, интерфейс которого появляется только после загрузки файла с траекторией расчёта. Запись можно ставить на паузу и запускать, а также изменять угол обзора сцены для детального анализа траектории движения атомов. Также модуль постобработки позволяет строить графики изменения энергии и температуры молекулярной системы от времени.

Средства и технологии разработки

Для переноса функционала с десктопной версии KView в веб-среду одной из ключевых задач стало определение подходящего набора технологий, способных обеспечить необходимую функциональность, производительность и удобство использования. Основными критериями при выборе стека разработки были: кроссплатформенность, поддержка визуализации наноструктур, удобная работа с файлами и возможность взаимодействия с вычислительным модулем Kvazar.

В качестве основы пользовательского интерфейса был использован фреймворк React в сочетании с языком TypeScript. Для визуализации результатов моделирования использовалась библиотека Plotly.js, а также React-Plotly.js для лучшей интеграции с компонентами React. Для обработки файлов, содержащих результаты расчетов, были применены следующие библиотеки:

- JSZip — для работы с архивами формата .zip;
- Npyjs — для чтения бинарных файлов формата .npy, которые используются в библиотеке NumPy.

Структура и отображение веб-страницы

В основе любого веб-интерфейса лежат HTML-документ и CSS-стили, к которым подключается код на JavaScript.

HTML (Hypertext Markup Language) — это язык разметки, отвечающий

за логическую структуру содержания веб-страницы. Он представляет собой веб-разметку, где каждый тег описывает определённую часть содержимого.

CSS (Cascading Style Sheets) — это язык иерархических правил, который отвечает за описание внешнего вида HTML-документа. С его помощью задаются цвета, шрифты, отступы, расположение элементов на странице, а также стилизация интерфейса под разные устройства.

React — это JavaScript-библиотека с открытым исходным кодом. Основная идея библиотеки заключается в компонентном подходе к построению интерфейса. Само приложение разбивается на независимые блоки (компоненты), каждый из которых управляет своим собственным состоянием и логикой отображения. Данные компоненты можно использовать неоднократно. React-компоненты — это повторно используемые части кода, которые возвращают React-элементы для отображения на странице.

TypeScript — язык программирования, который является расширением языка JavaScript. TypeScript является строго типизированным и компилируемым языком. Хотя на выходе компилятор создает все тот же JavaScript, который затем исполняется браузером. Однако строгая типизация уменьшает количество потенциальных ошибок, которые могли бы возникнуть при разработке на JavaScript.

Второй раздел «Внедрение функционала модуля KView в веб-интерфейс»

В процессе работы над проектом был спроектирован веб-интерфейс, включающее в себя функционал десктопного приложения KView. Веб-интерфейс поддерживает два языка: английский и русский.

Реализация модуля предобработки

Взаимодействие пользователя с функционалом веб-интерфейса KView, в основном, осуществляется через панель меню. Пример визуального отображения содержания пункта меню показан на рисунке 0.1.

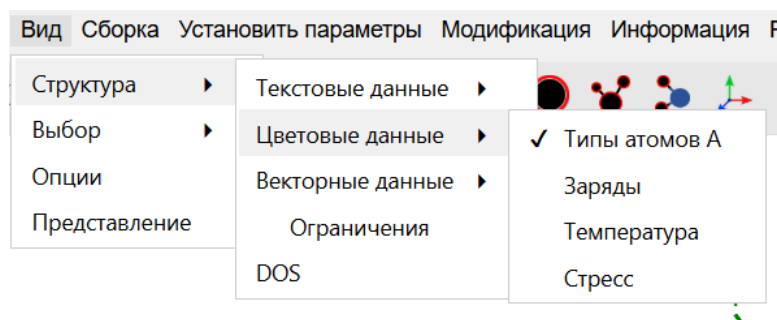


Рисунок 0.1 – Содержание пункта меню «Вид»

Пункт меню «Файл»

Пункт меню «Файл» включает в себя следующие функции работы с наноструктурами:

- Загрузка наноструктуры из файла;
- Добавление наноструктуры — объединяет загруженную наноструктуру с той, которая находится в уже существующей сцене;
- Сохранение текущего состояния наноструктуры в файл.

Сохраняемый файл имеет формат .ACD, данный файл сохраняет в себе информацию о геометрии, свойствах и других параметров атомной структуры.

Пункт меню «Сборка»

Пункт меню «Сборка» включает в себя функционал для построения шести видов углеродных структур:

- Graphene — построение геометрии графена по параметрам n и m (см. рисунок 0.2);
- Armchair Tube — построение геометрии нанотрубки типа Armchair по параметрам n и m (см. рисунок 0.3);

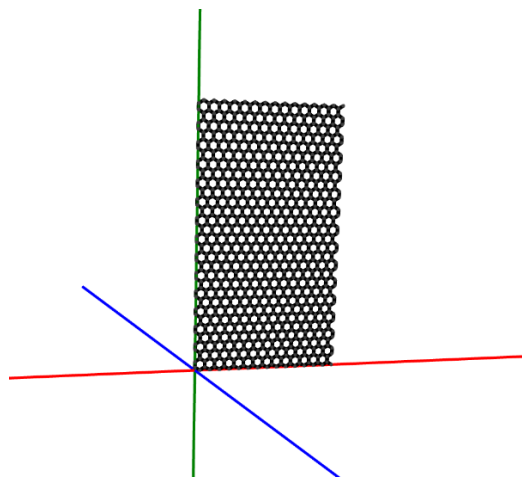


Рисунок 0.2 – Структура графена

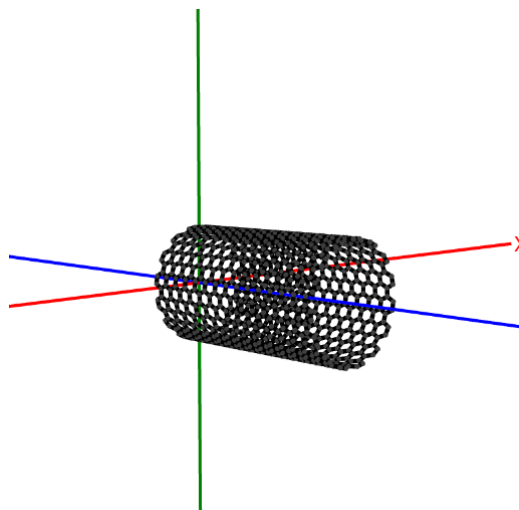


Рисунок 0.3 – Структура нанотрубки типа Armchair

- Zigzag Tube — построение геометрии нанотрубки типа Zigzag по параметрам n и m (см. рисунок 0.4);
- Chiral Tube — построение нанотрубки заданной длины по числам киральности n , m и $length$ (см. рисунок 0.5);
- Armchair Torus — построение геометрии нанотора типа Armchair по параметрам n и m (см. рисунок 0.6);

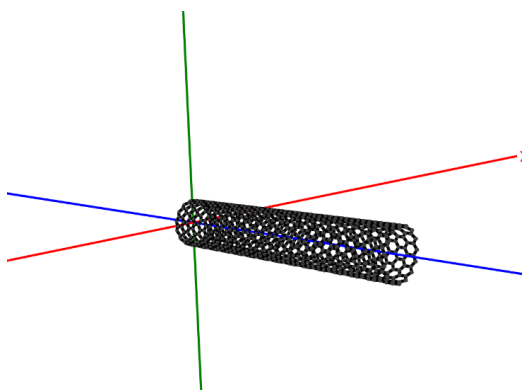


Рисунок 0.4 – Структура нанотрубки типа Zigzag

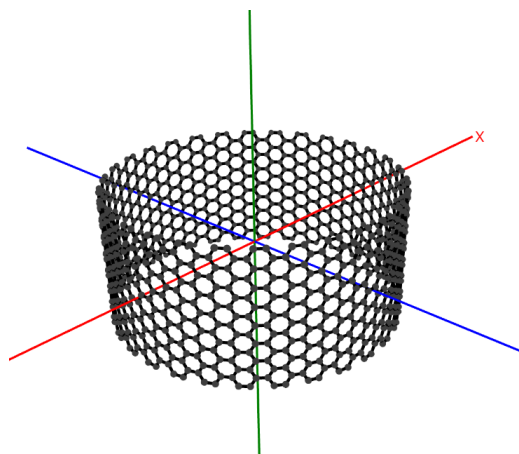


Рисунок 0.5 – Структура нанотрубки заданной длины по числам киральности

- Zigzag Torus — построение геометрии нанотора типа Zigzag по параметрам n и m (см. рисунок 0.7).

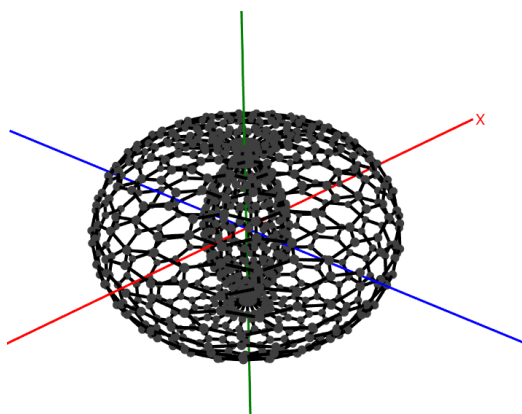


Рисунок 0.6 – Структура нанотора типа Armchair

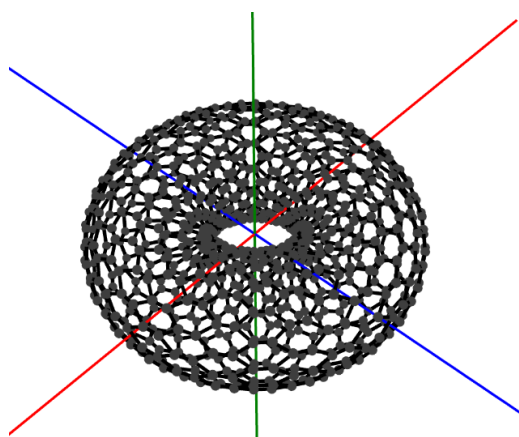


Рисунок 0.7 – Структура нанотора типа Zigzag

Пункт меню «Модификация»

Пункт меню «Модификация» включает в себя следующие функции работы с наноструктурами:

- Set shift — линейный сдвиг выделенных атомов на указанный вектор. Вектор смещения задается по координатам X , Y , Z . Наноструктура также может быть добавлена к текущей;
- Translate selected structure — выполняет многократную трансляцию (копирование) выбранных атомов вдоль одного или нескольких векторов.

Данная модификация поддерживает два режима работы:

- по координатам — указываются координаты X , Y , Z для вектора трансляции;

- по номерам атомов — вектор находится как разность координат двух заданных атомов.

В обоих режимах работы задается параметр «Повторения», он определяет количество повторений вдоль определенного вектора;

- Stretching or contracting — растяжение или сжатие координат выделенных атомов;
Set rotation — задать поворот выделенных атомов на заданный угол вокруг вектора;
- Bend selected structure — задать изгиб выделенной наноструктуры по оси, углу и плоскости. Данная модификация поддерживает два режима работы для определения плоскости:
 - по осям;
 - по номерам трёх атомов;
 - по трём координатам.
- Convolve selected structure — скрутить выделенную наноструктуру по углу и вектору поворота. Данная модификация поддерживает два режима работы для определения вектора вращения:
 - по оси;
 - по номерам двух атомов;
 - по двум координатам.
- Set new center — установить новый центр координат;
- Passivate selected structure — присоединение к атомам выделенной наноструктуры атомов водорода;
- Recalc links — пересчёт химических связей наноструктуры;
- Calculate separate mols — функция, выполняющая пересчет молекул, отображаемых на сцене.

Пункт меню «Информация»

Пункт меню «Информация» предоставляет информацию по следующим свойствам наноструктуры:

- Minimax distances — выводит минимальное и максимальные расстояния между каждой парой атомов;
- Minimax links — выводит минимальные и максимальные расстояния между каждой парой связанных атомов;
- Show coords — данное всплывающее окно показывает координаты выде-

ленных атомов. А также, в данном интерфейсе можно вводить и изменять координаты атомов;

- Show velocity — модальное окно показывает скорость выделенных атомов. А также, в данном интерфейсе можно вводить и изменять скорость атомов;
- Objects — модальное окно имеет две кнопки «Найти» и «Найти и перенумеровать», представляет возможность найти объекты на сцене и посчитать количество атомов;
- Pyramid angles — всплывающее окно, позволяющее рассчитать углы пирамидализации только для атомов с 3 связями.

Модуль постобработки

Модуль KView был спроектирован для взаимодействия с вычислительным модулем Kvazar через брокер сообщений Apache Kafka и фреймворк Spring. Чтобы сформировать запрос, пользователю необходимо в интерфейсе KView выбрать необходимые конфигурации для вычислительного модуля. После чего запрос передается через Kafka в Kvazar, где в дальнейшем формируется ответ в формате JSON, содержащий результат моделирования. Использование Apache Kafka обеспечивает надежность и отказоустойчивость. Kafka гарантирует доставку сообщений, что важно при длительной обработке данных вычислительным модулем Kvazar.

Для запуска модуля постобработки KView необходимо отправить запрос в Kvazar или загрузить файл формата .nmd через пункт меню «Файл». На рисунке 0.8 представлена демонстрация работы данного модуля.

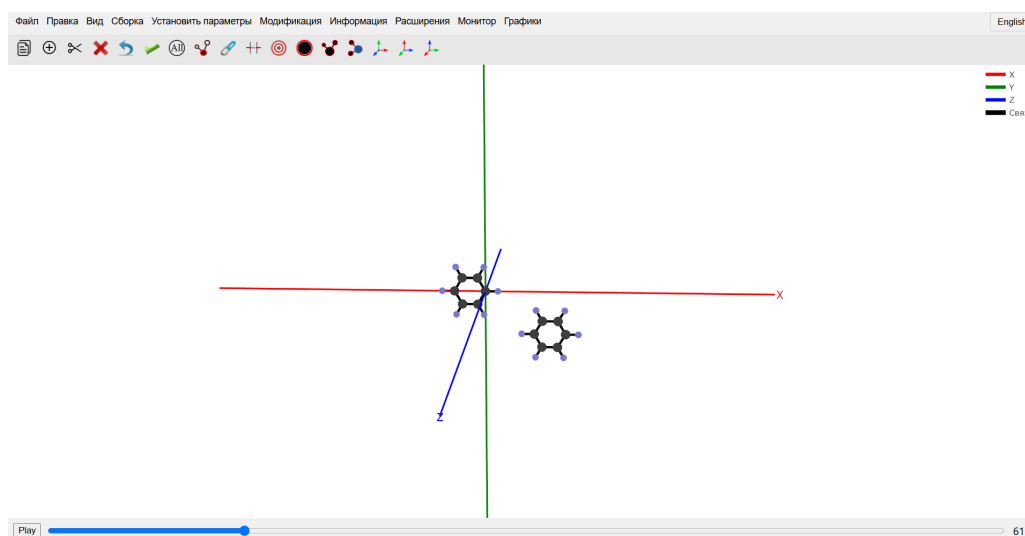


Рисунок 0.8

В модуль постобработки загружен файл, содержащий результаты взаи-

модействия двух молекул бензола, который был просчитан предварительно в вычислительном модуле.

Пункт меню «Монитор»

Веб-интерфейс позволяет строить график траектории атомов из модуля постобработки. Для его построения используется библиотека React-Plotly.js.

Взаимодействие клиентской части с серверным API

Для выполнения расчетов в вычислительном модуле Kvazar прямо с клиентской части KView было спроектировано API, позволяющее запускать вычисления и обрабатывать данные.

В графическом интерфейсе происходит настройка пользователем необходимых параметров конфигурации для моделирования: метод расчета (MARTINI, TB, REBO, AIREBO), режим моделирования (одиночный расчет или молекулярная динамика), а также дополнительные параметры — термостат, температура, размеры расчетной области и так далее. Данное всплывающее окно, отображаемое в графическом интерфейсе, можно увидеть на рисунке 0.9.

Рисунок 0.9 – Всплывающее окно настройки конфигурации

Для запуска моделирования пользователю необходимо указать конфигурацию для расчета, а также построить на сцене наноструктуру, для которой будет выполняться расчет. Затем данные объединяются в единый JSON-объект, который отправляется на сервер Kvazar с помощью POST-запроса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При выполнении выпускной квалификационной работы был разработан веб-интерфейс KView, который реализует взаимодействие с вычислительным модулем Kvazar и предоставляет обучающимся возможность создавать и редактировать наноструктуры.

В процессе выполнения данной работы удалось выполнить все поставленные задачи.

Во-первых, был проведён анализ существующей архитектуры десктопного графического модуля KView. Именно этой части работы было уделено особое внимание, так как из-за большой структуры проекта и устаревших технологий, использованных в оригинальном проекте, потребовалось больше времени для осуществления всех замыслов.

Во-вторых, был выбран стек веб-технологий.

В-третьих, логика перенесена в веб-компоненты.

И наконец, произведена настройка взаимодействия клиентской части с северным API для запуска вычислений и обработки данных.

Нашей командой разработчиков была спроектирована клиент-серверная архитектура, позволяющая объединить два отдельных модуля. Реализованный функционал графического модуля KView был совмещен с вычислительным модулем Kvazar. В ходе работы был получен функционал, позволяющий моделировать разные молекулярные наноструктуры и изучать их механические, эмиссионные и электронно-энергетические свойства.

ОСНОВНЫЕ ИСТОЧНИКИ ИНФОРМАЦИИ

1. Информация о ПК Kvazar / Наноквазар [Электронный ресурс]. — URL: <https://nanokvazar.ru/kvazar> (Дата обращения 25.05.2025). Загл. с экр. Яз. рус.
2. Welcome to Kvazar's documentation! [Электронный ресурс]. — URL: https://nanokvazar.ru/kvazar_docs/ (Дата обращения 25.05.2025). Загл. с экр. Яз. англ.
3. *Прохоренок*, Python 3 и PyQt. Разработка приложений / Прохоренок. — Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2012. — С. 703.
4. Структура документа и веб-сайта - MDN Web Docs - Mozilla [Электронный ресурс]. — URL: http://developer.mozilla.org/ru/docs/Learn_web_development/Core/Structuring_content/Structuring_documents (Дата обращения 25.05.2025). Загл. с экр. Яз. рус.
5. React [Электронный ресурс]. — URL: <https://react.dev/learn> (Дата обращения 23.05.2025). Загл. с экр. Яз. англ.
6. Введение в TypeScript [Электронный ресурс]. — URL: <https://metanit.com/web/typescript/1.1.php> (Дата обращения 25.05.2025). Загл. с экр. Яз. рус.