

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

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

Кафедра информатики и программирования

РАЗРАБОТКА КЛИЕНТСКОЙ ЧАСТИ ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ KVAZAR
АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 441 группы

направления 02.03.03 Математическое обеспечение и администрирование
информационных систем

факультета компьютерных наук и информационных технологий

Шмидта Дениса Борисовича

Научный руководитель:

старший преподаватель

Е. В. Булавина

Заведующий кафедрой

доцент, к. ф.-м. н.

М. В. Огнева

Саратов 2025

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы.

Визуализация данных играет ключевую роль в современной науке, особенно в области физики и химии. С развитием вычислительных технологий и увеличением объема доступных данных, визуализация стала неотъемлемой частью научных исследований, позволяя ученым интерпретировать сложные данные и выявлять скрытые закономерности. В физике визуализация молекул позволяет исследователям изучать структуру и динамику молекул, что является критически важным для разработки новых материалов и лекарственных препаратов.

Создание приложения для визуализации молекул представляет собой важную задачу, так как оно предоставляет инструмент для более глубокого понимания молекулярных структур и взаимодействий. Визуализаторы молекул позволяют исследователям наглядно представлять трехмерные структуры молекул, анализировать их свойства и предсказывать поведение в различных условиях. Это особенно актуально в контексте современных исследований, где требуется высокая точность и детализация данных.

26 марта 2015 года в Образовательно-научном институте наноструктур и биосистем состоялась презентация первого открытого российского проекта KVAZAR, ориентированного на компьютерное моделирование в области нанотехнологий и биомедицинских исследований. Разработчиками проекта являются сотрудники ОНИ НС и БС, в частности, отдел математического моделирования и кафедра радиотехники и электродинамики физического факультета. Руководителем проекта является начальник отдела математического моделирования д.ф.-м.н. О.Е. Глухова.

Данный проект разрабатывался с 1995 года и в настоящее время с помощью данного программного комплекса ведутся разработки и выполняются гранты РФФИ и РНФ. Также с программой работают университеты Сингапура, Тайваня, Финляндии и США.

Программный комплекс KVAZAR предназначен для моделирования различных молекулярных структур, в частности биомакромолекулярных структур и композитов. Комплекс охватывает три уровня моделирования – атомно-электронный, молекулярный и мезоуровень. Проект устроен таким образом, что позволяет переходить от атомных структур до композитов и задействовать соответствующие удобные методы. Kvazar является гибким инструментом для мультимасштабного компьютерного моделирования. Программный комплекс использует методы молекулярной динамики с применением квантового метода сильной связи, крупнозернистого и атомистического моделирование. Программа помогает определить связи, которые возникают между молекулами, или, наоборот, их разрывы.

Но данный программный комплекс изначально был написан на языке Python2 под операционную систему Ubuntu. Так как данная система имеет ряд ограничений, связанных с привязкой к конкретной операционной системе определенной версии, руководитель научной группы «Glukhova Research Group» Глухова Ольга Евгеньевна, обратилась модернизировать программный комплекс, сделав его более доступным для пользователей. Также расширить возможности, чтобы можно было обращаться к Kvazar с любого устройства, имеющего доступ в интернет. Для улучшения работы и производительности возникла проблема в необходимости переписать программный комплекс на язык программирования C++ вместо интерпретируемого Python. В связи с этим заказ научной группы состоял в необходимости разработки серверной и клиентской части программного комплекса Kvazar. В данной выпускной квалификационной работе рассматривается создание frontend-части web-приложения.

Цель бакалаврской работы – разработка клиентской части web-приложения, основанной на графическом модуле Kvazar под названием kview.

Поставленная цель определила **следующие задачи**:

1. изучение программного комплекса молекулярного моделирования структуры приложения kvazar и kview;
2. исследование технологий, используемых в вычислительном и графическом модулях;
3. изучение и выбор подходящего инструментария для реализации клиентского графического модуля;
4. реализация перехода функций kview на typescript;
5. разработка клиентского web-приложения: Scene (сцена), компонент toolbar (панель инструментов), header (панель кнопок).

Методологические основы разработки клиентской части приложения для kvazar представлены в классических исследованиях в области электронной структуры и молекулярной динамики: ключевыми являются работы У. Харрисона по электронным свойствам твёрдых тел [1] и Лэя, Бухвалова и Зацепина по теории функционала плотности [2], а также практические методики, изложенные О. Е. Глуховой [3] и Г. В. Савостьяновым в рамках комплекса Kvazar [4]. Технологические подходы и методы создания интерактивного интерфейса — на публикациях Э. Дабасса по Plotly [5] и Дж. Дакетта по JavaScript-разработке [6].

Практическая значимость бакалаврской работы заключается в разработке лёгкого и доступного браузерного интерфейса для молекулярного моделирования, который объединяет высокопроизводительное вычислительное ядро и интерактивную трёхмерную визуализацию без необходимости установки специализированного ПО. Полученное решение позволяет оперативно загружать и анализировать результаты расчётов, модифицировать молекулярные структуры в режиме реального времени, а

также строить графики ключевых физических характеристик, что существенно упрощает исследовательские и учебные задачи в области наноструктур и квантово-химических расчётов и расширяет возможности дистанционной и кроссплатформенной работы.

Структура и объём работы. Бакалаврская работа состоит из введения, 2 разделов, заключения, списка использованных источников и 6 приложений. Общий объем работы – 144 страницы, из них 53 страницы – основное содержание, включая 22 рисунка и 2 таблицы, список использованных источников информации – 20 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первый раздел «Программный комплекс молекулярного моделирования» посвящен комплексному описанию программного продукта Kvazar, разработанного для молекулярного моделирования наноструктур и основанного на сочетании методов молекулярной динамики и приближённого расчёта электронной структуры. В рамках этого раздела даётся общее представление о возможностях пакета: изучении механических (включая прочностные), эмиссионных и электронно-энергетических свойств, проектировании геометрии исследуемых объектов и задании периодических граничных условий, таких как температура, давление и механическая нагрузка.

Вычислительный модуль kvazar, являющийся ядром комплекса, объединяет методы молекулярной динамики для моделирования движения атомов и приближённого расчёта электронной структуры для оценки энергетических характеристик систем. Его трёхуровневая архитектура обеспечивает сочетание высокопроизводительных C++-ядер с обёртками на Python и простого консольного интерфейса, что позволяет эффективно настраивать расчёты и интегрировать их в автоматизированные рабочие процессы. Поддержка популярных силовых полей, таких как REBO, AIREBO и MARTINI, делает модуль универсальным инструментом как для детального, так и для крупнозернистого моделирования.

Графический модуль kview предназначен для подготовки входных данных и визуализации результатов вычислений. Он включает два подмодуля: препроцессинга, обеспечивающий построение и редактирование молекулярных структур, и постпроцессинга, реализованный в виде классического видеоплеера с управлением воспроизведением траекторий молекулярной динамики и встроенным инструментарием для построения графиков зависимости энергии и температуры от времени.

Для разработки нового клиентского графического модуля был выбран современный веб-стек: JavaScript и TypeScript позволяют создавать интерактивный интерфейс с явной статической типизацией, а использование React обеспечивает декларативное управление компонентами и виртуальный DOM для плавного обновления данных. Библиотека визуализации React-Plotly.js позволяет рендерить трёхмерные модели молекул прямо в браузере и динамически строить графики результатов, а использование Web Workers обеспечивает параллельную обработку данных без блокировки интерфейса.

Таким образом, программный комплекс Kvazar представляет собой универсальный инструмент для исследователей наноструктур, объединяющий в себе высокопроизводительные вычисления и удобный графический интерфейс. Модульная архитектура пакета обеспечивает гибкость и масштабируемость: вычислительная часть может функционировать автономно или в составе скриптов, а графическая — служить как средство быстрой подготовки и анализа данных. Для реализации проекта были рассмотрены технологии и выбраны инструменты.

Второй раздел «Практическая часть» посвящен описанию практической реализации клиентской части веб-приложения для визуализации и управления молекулярными структурами на основе ранее созданного вычислительного модуля. Основной упор сделан на компоненты интерфейса: интерактивную трёхмерную сцену для отображения молекул, панель инструментов для выполнения операций с элементами структуры и верхнюю панель для управления загрузкой данных, настройкой отображения и экспортом результатов. При этом внимание сосредоточено на том, как обобщённые классы и модули приложения обеспечивают хранение и обновление полной информации об атомах и связях, загружаемой из файлов различных форматов.

В процессе работы были созданы универсальные механизмы для парсинга входных данных, их асинхронной обработки в фоновом потоке и преобразования в объекты, пригодные для отображения в браузере. Базовая структура данных включает все необходимые параметры молекулы (координаты, заряды, связи, физические характеристики) и связана с визуальными компонентами через динамическое обновление состояния. Это обеспечивает возможность интерактивного изменения конфигурации молекулы, добавления или удаления связей, выбора атомов по заданным критериям и мгновенного отображения результатов без перезагрузки страницы.

В завершение раздела подводятся итоги проделанной работы: демонстрируется работоспособность клиентского приложения в среде браузера, подтверждается возможность интерактивного анализа и модификации молекулярных структур, а также показывается, что предложенные решения по организации данных и их визуализации создают надёжную платформу для дальнейшего расширения функционала и интеграции новых видов анализа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выпускная квалификационная работа была посвящена решению актуальной задачи модернизации и повышения доступности графического модуля kview и обеспечению кроссплатформенного доступа к возможностям визуализации KVAZAR через веб-браузер. В ходе работы были успешно решены поставленные задачи:

- Изучена архитектура программного комплекса KVAZAR, уделено особое внимание структуре и функционалу исходного графического модуля;
- исследованы технологии, используемые в модулях, что определило требования к новой реализации;
- проведен анализ и осуществлен выбор современного инструментария для разработки клиентской части;
- Реализован перенос функционала kview на язык TypeScript, что стало основой для новой веб-ориентированной версии модуля визуализации.
- Разработаны ключевые компоненты клиентского веб-интерфейса: сцена — основной компонент для отображения и взаимодействия с моделями молекул; панель инструментов и головная панель, которая обеспечивает доступ к основным функциям приложения, таким как загрузка файлов, модификация структур.

Основные источники информации:

1. Харрисон У., Электронная структура и свойства твёрдых тел: Пер. с англ. — М.: Мир, 1983. — 382 с.
2. Лэй С., Бухвалов Д. В., Зацепин А. Ф., Основы и приложения теории функционала плотности: Учеб. пособие. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2021. — 128 с.
3. Информация о ПК Kvazar / Наноквазар [Электронный ресурс]. — URL: <https://nanokvazar.ru/kvazar> (Дата обращения 25.12.2024).
4. О. Е. Глухова, Г. В. Савостьянов, Вычислительный практикум по моделированию наноструктур в программном комплексе Kvazar, 2015 г. — 44 с.
5. Элиас Дабасс, Интерактивные дашборды и приложения с Plotly и Dash. Используем полноценный веб-фреймворк в Python, ДМК-Пресс, 2022 г. — 306 с.
6. Джон Дакетт, Javascript и jQuery. Интерактивная веб-разработка, Эксмо, 2020 г. — 640 с.