

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ КОНСОРЦИУМ УНИВЕРСИТЕТОВ РОССИИ

Труды Международной суперкомпьютерной
конференции

**Научный сервис в сети Интернет:
многообразие суперкомпьютерных миров**



Российская академия наук
Суперкомпьютерный консорциум университетов России

Сборник трудов

Международная суперкомпьютерная
конференция

Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров

Конференция молодых ученых
Теория и практика параллельного программирования

г. Новороссийск, 22-27 сентября 2014 г.

Издательство Московского университета
2014

УДК 519.7
ББК 22.18
Н 34

- Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров:** Труды Международной суперкомпьютерной конференции (22-27 сентября 2014 г., г. Новороссийск).
– М.: Изд-во МГУ, 2014. – 497 с.

Данный сборник содержит доклады, включенные в программу Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров» и Всероссийской конференции молодых ученых «Теория и практика параллельного программирования». Конференции проводятся с 22 по 27 сентября 2014 года. Подробную информацию о конференциях можно найти в сети Интернет по адресу <http://agora.guru.ru/abrau2014>

Конференция проводится при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

ОГЛАВЛЕНИЕ

НАПРАВЛЕНИЕ 1: ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ.....	3
MJOLNIRR: ГИБРИДНЫЙ ПОДХОД К ОРГАНИЗАЦИИ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ.....	4
<i>Д.И. Савченко, Г.И. Радченко</i>	
АВТОМАТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ И ОПИСАНИЕ СЕТЕВОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА.....	10
<i>В.В. Воеводин, К.С. Стефанов</i>	
АВТОМАТИЧЕСКОЕ ОТОБРАЖЕНИЕ ФОРТРАН-ПРОГРАММ НА КЛАСТЕРЫ С УСКОРИТЕЛЯМИ.....	17
<i>В.А. Бахтин, М.С. Клинов, А.С. Колганов, В.А. Крюков, Н.В. Поддерюгина, М.Н. Притула</i>	
АДАПТАЦИЯ СИСТЕМЫ ВЕДЕНИЯ ЗАДАЧ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ SLURM С ЦЕЛЬЮ УЧЁТА ЛИЦЕНЗИЙ ANSYS.....	23
<i>А.Н. Сальников, В.Д. Никоноров, П.И. Каледа</i>	
АЛГОРИТМ ПЛАНИРОВАНИЯ РЕСУРСОВ ROS ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ПРОБЛЕМНО- ОРИЕНТИРОВАННЫХ СРЕД.....	26
<i>А.В. Шамакина</i>	
АЛГОРИТМ РЕПРЕЗЕНТАТИВНОГО СЭМПЛИНГА ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РЕЛЯЦИОННЫХ СИСТЕМ БАЗ ДАННЫХ.....	32
<i>Д.Д. Янцен, М.Л. Цымблер</i>	
АЛГОРИТМЫ СЕМЕЙСТВА DIAMONDTILE ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО ВОЛНОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА GPGPU.....	41
<i>В.Д. Левченко</i>	
АНАЛИЗ ИНФОРМАТИВНОСТИ ДАННЫХ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ NVIDIA.....	45
<i>А.И. Васильев, А.П. Карпенко, Е.Л. Штанов</i>	
АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ИНФОРМАЦИОННОГО ГРАФА ТЕСТА HPCG.....	49
<i>А.В. Киселев, Е.А. Киселев, В.В. Корнеев</i>	
АНАЛИЗ ТРАФИКА УЧРЕЖДЕНИЯ КАК СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УЯЗВИМОСТИ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ КОРПОРАТИВНОЙ СЕТИ.....	52
<i>Г.М. Михайлов, Ю.П. Rogov, А.М. Чернецов</i>	
АРХИТЕКТУРА ОПЫТНО-ПРОМЫШЛЕННОГО ОБРАЗЦА КЛАСТЕРНОЙ ГИБРИДНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ НА БАЗЕ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ.....	54
<i>Д.Ш. Ахмедов, С.А. Елубаев, Ф.Н. Абдолдина, Т.М. Бопеев, Д.М. Муратов</i>	
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЙ ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ В ENTERPRISE DESKTOP GRID НА БАЗЕ BOINC.....	58
<i>Е.Е. Ивашко, Н.Н. Никитина, S. Möller</i>	

ГИБРИДНЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ СОПОСТАВЛЕНИЯ СТЕРЕО- ИЗОБРАЖЕНИЙ В ЗАДАЧЕ РЕКОНСТРУКЦИИ 3D-СЦЕН.....	61
<i>В.А. Фурсов, Е.В. Гошин, А.П. Котов</i>	
ЗАДАЧА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАГРУЗКИ ПРИ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ РАСШИРЕННЫХ СЕТЕЙ ПЕТРИ В ЗАДАЧЕ МИКРОСКОПИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДОРОЖНОГО ДВИЖЕНИЯ.....	66
<i>Н.М. Ершов</i>	
ЗАДАЧИ И ВОЗМОЖНЫЕ РЕШЕНИЯ В ОБЛАСТИ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ОТКАЗОУСТОЙЧИВОСТИ В РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ.....	71
<i>А.А. Бондаренко, М.В. Якобовский</i>	
ИНФОРМАЦИОННО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ АЭРОКОСМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ И ГЛОБАЛЬНОГО МОНИТОРИНГА ЗЕМЛИ ДЛЯ ПРОГНОЗА ПОСЛЕДСТВИЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛИ.....	74
<i>Т.А. Сушкевич, С.А. Стрелков, С.В. Максакова, В.В. Козодеров, Б.А. Фомин, А.Н. Андрианов, А.Н. Волкович, П.П. Григорьева, Е.В. Дмитриев, Л.Д. Краснокутская, В.А. Фалалеева, А.С. Кузьмичев, А.А. Николенко, П.В. Страхов, Б.М. Шурыгин</i>	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ КЛАССА «DATA INTENSIVE».....	79
<i>А.С. Колганов</i>	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДАННЫХ СИСТЕМНОГО МОНИТОРИНГА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФАКТОРОВ, УМЕНЬШАЮЩИХ МАСШТАБИРУЕМОСТЬ ПРИЛОЖЕНИЯ.....	87
<i>А.С. Антонов, А.М. Теплов</i>	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ ЗАДАЧ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ.....	97
<i>К.А. Баркалов</i>	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ КОЛОНОЧНЫХ ХЕШ-ИНДЕКСОВ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ЗАПРОСОВ К СВЕРХБОЛЬШИМ БАЗАМ ДАННЫХ.....	102
<i>Е.В. Иванова</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГРАФЕНА НА ОСНОВЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ.....	105
<i>А.А. Книжник, А.С. Минкин, Б.В. Потапкин</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОСРЕДСТВОМ АВ ИНИТЮ МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	111
<i>М.С. Зеленина, О.А. Козлова, В.Р. Стемпицкий</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ СЖАТИЯ ПРИ ПЕРЕДАЧЕ ДАННЫХ ИЗ ОСНОВНОЙ ПАМЯТИ В ПАМЯТЬ СОПРОЦЕССОРА INTEL XEON PHI.....	114
<i>К.Ю. Беседин, П.С. Костенецкий</i>	

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МНОГОЯДЕРНЫХ СОПРОЦЕССОРОВ INTEL XEON PHI В СУБД ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ АГРЕГАТНЫХ ФУНКЦИЙ.....	120
<i>А.С. Порозов, П.С. Костенецкий</i>	
К 50-ЛЕТИЮ ПЕРВОЙ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ЭВМ «ВЕСНА» И ОТЕЧЕСТВЕННОЙ КОМПЬЮТЕРНОЙ ГРАФИКИ.....	122
<i>Т.А. Сушкевич</i>	
К МОДЕЛИ УПРАВЛЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ И РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ВЫЧИСЛЕНИЯМИ В БОЛЬШИХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СРЕДАХ.....	126
<i>Ю.С. Затуливетер</i>	
К СОЗДАНИЮ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ЭЛЕМЕНТНОЙ БАЗЫ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ И РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА ОСНОВЕ ОПЕРЕЖАЮЩИХ КОМПЬЮТЕРНЫХ АРХИТЕКТУР.....	135
<i>Ю.С. Затуливетер, Е.А. Фищенко, С.Е. Артамонов</i>	
КВАЗИПЛАНИРОВЩИК ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОСТАИВАЮЩИХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДУЛЕЙ МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ПОД УПРАВЛЕНИЕМ СУППЗ.....	141
<i>А.В. Баранов, Е.А. Киселёв, Д.С. Ляховец</i>	
КЛАСТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ КАК СЕРВИС НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ ОТ СКВАЖИН НА СЕВЕРНЫХ НЕФТЕГАЗОВЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЯХ.....	147
<i>А.Ю. Берсенева, Н.А. Ваганова, П.А. Васев, А.С. Игумнов, М.Ю. Филимонов</i>	
КОМПЬЮТЕРНЫЙ ИНЖИНИРИНГ - ПЛАТФОРМА МОДЕРНИЗАЦИИ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ.....	152
<i>Ю.Я. Болдырев, А.И. Боровков, В.С. Заборовский</i>	
КРУПНОМАСШТАБНОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ АЛЮМИНИЯ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ «ЛОМОНОСОВ».....	154
<i>В.В. Писарев, С.В. Стариков, В.В. Стегайлов</i>	
МЕТОДЫ И ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА МАКРОМОДУЛЬНОЙ РАЗРАБОТКИ ПРОГРАММ.....	157
<i>А.А. Сиднев</i>	
МОДЕЛИРОВАНИЕ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ В ЗАДАЧАХ ВОЛНОВОЙ ТОМОГРАФИИ С УЧЕТОМ ПОГЛОЩЕНИЯ.....	160
<i>С.Ю. Романов</i>	
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОПРОЦЕССОРОВ INTEL XEON PHI.....	168
<i>И.А. Сурмин, С.И. Бахраков, А.А. Гоносков, Е.С. Ефименко, И.Б. Мееров</i>	
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ.....	174
<i>Л.И. Стамов, Е.В. Михальченко</i>	

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КАТАЛИЗА И ПРОТОННОГО ТРАНСПОРТА В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ.....	178
<i>В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.В. Волохов, Г.А. Покатович</i>	
МОДЕЛЬ И АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ДВУХ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ FIFO-ОЧЕРЕДЕЙ В ОБЩЕЙ ПАМЯТИ.....	185
<i>А.В. Соколов, Е.А. Барковский</i>	
НУ И ЧТО ЖЕ НАМ ТЕПЕРЬ ДЕЛАТЬ С ЭТИМ МНОГООБРАЗИЕМ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ МИРОВ? ПОПЫТКА КОНСТРУКТИВНОГО СИСТЕМАТИЧЕСКОГО ПОДХОДА К СОПОСТАВЛЕНИЮ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ АРХИТЕКТУР.....	188
<i>С.С. Андреев, С.А. Дбар, А.О. Лацис, Е.А. Плоткина, Г.П. Савельев</i>	
О ПРОБЛЕМЕ АВТОМАТИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ.....	191
<i>Л.В. Городняя</i>	
ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К МОДЕЛИРОВАНИЮ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ.....	197
<i>П.А. Швеи, В.В. Воеводин, С.И. Соболев</i>	
ОРГАНИЗАЦИЯ ДОСТУПА К ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ РЕСУРСАМ В HPC COMMUNITY CLOUD.....	205
<i>С. А. Вайцель, М. А. Городничев</i>	
ОЦЕНКА ЗАДЕРЖКИ И ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ СЕТИ С ТОПОЛОГИЕЙ «МНОГОМЕРНЫЙ ТОР» ПРИ НАЛИЧИИ ОТКАЗАВШИХ КАНАЛОВ СВЯЗИ.....	211
<i>И.А. Пожилов</i>	
ОЧИСТКА ТЕКСТОВ НА ЕСТЕСТВЕННОМ ЯЗЫКЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ APACHE SPARK....	218
<i>Д.А. Усталов, П.А. Блинов, М.А. Черноскотов</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ MAPREDUCE И HADOOP.....	221
<i>А.В. Созыкин, Д.А. Усталов, М.А. Черноскотов</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ПРЕДОБУСЛАВЛИВАТЕЛЯ ПРИ РЕШЕНИИ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА РЕГУЛЯРНЫХ ДВУМЕРНЫХ РАЗНОСТНЫХ СЕТКАХ	229
<i>Н.А. Ежова, О.Н. Иванова</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСКРЕТНЫХ СОБЫТИЙ: ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ.....	234
<i>Л.Н. Щур</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ УСВОЕНИЕ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ В ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ВЫСОКОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ.....	236
<i>М.Н. Кауркин, Г.М. Михайлов, К.П. Беляев, Р.А. Ибраев, А.Н. Сальников, Н.П. Тучкова</i>	

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ПОПУЛЯЦИОННЫЕ АЛГОРИТМЫ ОДНО- И МНОГОЦЕЛЕВОЙ ОПТИМИЗАЦИИ.....	240
<i>А.П. Карпенко</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ПОИСКА ПОХОЖИХ ПОДПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ВРЕМЕННОГО РЯДА ДЛЯ СОПРОЦЕССОРА INTEL XEON PHI.....	245
<i>А.В. Мовчан, М.Л. Цымблер</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ФОРМИРОВАНИЯ ЭТАЛОННЫХ ПОДПРОСТРАНСТВ В ТЕХНОЛОГИИ РАСПОЗНАВАНИЯ ПО ДИАГРАММАМ РАССЕЯНИЯ РАДИОЛОКАЦИОННЫХ СИГНАЛОВ.....	252
<i>Д.А. Жердев, В.А. Фурсов</i>	
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА В КРУПНОГАБАРИТНОМ НАГНЕТАТЕЛЕ.....	258
<i>В.Я. Модорский, А.Ф. Шмаков, Л.Н. Бутымова, Д.Ф. Гайнутдинова, Е.В. Мехоношина, С.Л. Калюлин</i>	
ПОДДЕРЖКА ТЕХНОЛОГИИ GPUDIRECT RDMA В СЕТИ «АНГАРА».....	263
<i>М.А. Гильмендинов</i>	
ПОИСК ОБЪЕКТОВ В ХРАНИЛИЩАХ ВИДЕОДАННЫХ НА ОСНОВЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ СУБД И СОПРОЦЕССОРОВ INTEL XEON PHI.....	270
<i>М.С. Миниахметова, М.Л. Цымблер</i>	
ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ И МНОГОМАСШТАБНЫХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ.....	275
<i>А.Ю. Куксин, А.В. Ланкин, И.В. Морозов, Г.Э. Норман, Н.Д. Орехов, В.В. Писарев, Г.С. Смирнов, С.В. Стариков, В.В. Стегайлов, А.В. Тимофеев</i>	
ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ЗАПРОСОВ НАД СЖАТЫМИ ДАННЫМИ В ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ БАЗ ДАННЫХ.....	277
<i>С.О. Приказчиков, П.С. Костенецкий</i>	
ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ ЖИДКОСТНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ В ПЕРСОНАЛЬНОЙ ГИБРИДНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ НА БАЗЕ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ.....	280
<i>Д.Ш. Ахмедов, С.А. Елубаев, Ф.Н. Абдолдина, Т.М. Бопеев, Д.М. Муратов</i>	
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ NVIDIA CUDA ДЛЯ ПОИСКА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ МАТРИЦ.....	289
<i>А.В. Высоцкий, Н.Е. Тимофеева, А.Н. Савин, К.И. Шоломов</i>	
ПРОГРАММИРОВАНИЕ РЕКОНФИГУРИРУЕМЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПЛИС VIRTEX-7 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОФТ-АРХИТЕКТУР.....	296
<i>И.И. Левин, А.И. Дордопуло, В.Б. Коваленко, В.А. Гудков, А.А. Гуленок</i>	
ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА GPU-СИСТЕМАХ ПЕТАФЛОПНОГО УРОВНЯ.....	301
<i>П.В. Павлухин, И.С. Меньшов</i>	

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПЕРСОНАЛЬНОЙ ГИБРИДНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ С ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ BLADE-МОДУЛЕМ.....	304
<i>Д.Ш. Ахмедов, С.А. Елубаев, Ф.Н. Абдолдина, Т.М. Бопеев, Д.М. Муратов</i>	
ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ КУЭТТА ПРИ УСТОЙЧИВОЙ СТРАТИФИКАЦИИ.....	309
<i>Е.В. Мортиков</i>	
РАЗРАБОТКА ГЛОБАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ.....	311
<i>М.А. Толстых</i>	
РАЗРАБОТКА ДЕКЛАРАТИВНОГО СРЕДСТВА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ. СПЕЦИФИКАЦИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ЗАДАЧИ. АЛГОРИТМ ПОИСКА ПРИМЕНИМОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ.....	312
<i>Р.А. Ескин, И.Л. Артемьева</i>	
РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ДИНАМИЧЕСКОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА НА ИЗОЛИРОВАННЫЕ ЧАСТИ.....	321
<i>К.В. Бородулин, П.С. Костенецкий, Ф.М. Мелёхин</i>	
РАСЧЁТ ВЛИЯНИЯ ИЗМЕНЧИВОСТИ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОГЛОЩЁННОЙ ДОЗЫ ПРИ РАДИОТЕРАПИИ.....	323
<i>С.А. Немнюгин, О.В. Рубан</i>	
РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА МАКРОЧАСТИЦ ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ НА ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЯХ.....	325
<i>А.Ю. Перепёлкина, В.Д. Левченко</i>	
РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА ЧАСТИЦ-В-ЯЧЕЙКАХ В СИСТЕМЕ ФРАГМЕНТИРОВАННОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ LUNA.....	328
<i>В.Э. Малышкин, В.А. Перепелкин</i>	
СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ МНОГОШАГОВЫМИ ЗАДАНИЯМИ ДЛЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ И КЛАСТЕРОВ.....	335
<i>Ю.А. Чернышов, Н.Н. Попова</i>	
СО-ДИЗАЙН ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ В ЗАДАЧАХ ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ И АСТРОФИЗИКИ.....	339
<i>Б.М. Глинский, И.М. Куликов, А.В. Снытников, И.Г. Черных, В.А. Вишневков</i>	
СПЕЦИАЛИЗАЦИЯ КАК ПРОЦЕСС ДОСТИЖЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ.....	344
<i>В.С. Горбунов</i>	
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВАРИАНТОВ РАЗВЕРТЫВАНИЯ ПРОГРАММНЫХ ПЛАТФОРМ ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ.....	349
<i>О.С. Аладышев, А.В. Баранов, Р.П. Ионин, Е.А. Киселев, В.А. Орлов</i>	

СРЕДСТВА ДЕДУКТИВНОГО СИНТЕЗА ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ДАННЫХ ДЛЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ЭНЕРГЕТИКИ.....	355
<i>О.В. Курганская</i>	
СРЕДСТВА МОНИТОРИНГА И ВЕБ-ИНТЕРФЕЙС INFINIBAND НА ВК «ЗУБР».....	363
<i>Г.И. Артемьева, А.Ю. Озорнин, А.И. Мельников</i>	
ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ РЕЗЕРВЫ МНОГОМЕРНЫХ ТОРОВ.....	368
<i>В.С. Подлазов, М.Ф. Каравай</i>	
УСКОРЕНИЕ РАСЧЕТОВ ЗАДАЧ ГРАВИТАЦИОННОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ С ПОМОЩЬЮ СПЕКТРАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА НА GPU.....	375
<i>Б.П. Рыбакин</i>	
ФОРМАТ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МНОГОРАЗРЯДНЫХ ЧИСЕЛ С ПЛАВАЮЩЕЙ ТОЧКОЙ, ОРИЕНТИРОВАННЫЙ НА ПАРАЛЛЕЛЬНУЮ ОБРАБОТКУ.....	381
<i>А.Н. Мальцев, К.С. Исупов</i>	
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО НАТЕКАНИЯ ПОТОКА ВОДЫ НА ОДИН И ДВА РЯДА ТРЕХМЕРНЫХ ПРЕПЯТСТВИЙ.....	388
<i>А.И. Храбрый, Д.К. Зайцев, Е.М. Смирнов, В.Д. Горячев</i>	
ЭМУЛЯТОР PCI EXPRESS ДЛЯ HDL-МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	395
<i>А.Б. Шворин</i>	
НАПРАВЛЕНИЕ 2: НАУЧНЫЙ СЕРВИС В СЕТИ ИНТЕРНЕТ.....	401
WWW-MINCRYST: ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА ПО КРИСТАЛЛОХИМИИ И МИНЕРАЛОГИИ — ТЕХНИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ, ВОЗМОЖНОСТИ, ПЕРСПЕКТИВЫ.....	402
<i>Д.А. Варламов, Т.Н. Докина, Н.А. Дрожжина, О.Л. Самохвалова</i>	
НАУЧНАЯ ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В АКТИВНОЙ СЕЙСМОЛОГИИ.....	406
<i>Л.П. Брагинская, А.П. Григорюк, С.В. Кратов</i>	
НАУЧНАЯ ПУБЛИКАЦИЯ В РОССИИ: ТРУДНАЯ ДОРОГА В ОНЛАЙН.....	410
<i>М.М. Горбунов-Посадов</i>	
О СВЯЗНОСТИ И ДИНАМИКЕ ВЕБ-ГРАФА НАУЧНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ.....	411
<i>А.А. Печников</i>	
ОНЛАЙНОВАЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНО-ГРАФИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХАРАКТЕРИСТИК АТОМНЫХ ЯДЕР, ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ И РАДИОАКТИВНЫХ РАСПАДОВ.....	415
<i>В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков</i>	

ОРГАНИЗАЦИЯ КОЛЛЕКТИВНОЙ ЭКСПЕРТНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В ЭНЕРГЕТИКЕ НА ОСНОВЕ ИНТЕГРАЦИИ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ И ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ РЕСУРСОВ.....	422
<i>Л.В. Массель А.Н. Копайгородский, А.Г. Массель</i>	
ОРГАНИЗАЦИЯ ПЕРСОНАЛЬНОГО ИНФОРМАЦИОННОГО ПРОСТРАНСТВА НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ АВТОРА.....	429
<i>Е.И. Моисеев, А.А. Муромский, Н.П.Тучкова, А.М. Меденников</i>	
ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ ИНТЕРНЕТ-ВИДЕОЛЕКЦИИ.....	432
<i>Ф.О. Каспаринский, Е.И. Полянская</i>	
СЕРВИСЫ ПОДДЕРЖКИ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ЭЛЕКТРОННЫХ НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ.....	436
<i>А.М. Елизаров, Д.С. Зув, Е.К. Липачёв</i>	
ТЕХНОЛОГИЯ РАЗРАБОТКИ ПРИЛОЖЕНИЙ ДЛЯ ПОДДЕРЖКИ СИНХРОННЫХ МНОГОЯЗЫКОВЫХ МНОГОПРЕДМЕТНЫХ КОНТЕСТНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ.....	439
<i>И.Л. Артемьева, М.А. Болгов</i>	
ЧТО ДЕЛАТЬ С БОЛЕЗНЯМИ БИБЛИОГРАФИЧЕСКИХ БАЗ.....	443
<i>Т.А. Полилова</i>	
КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ: УЧЕНЫХ ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ.....	445
АЛГОРИТМ И ПРОГРАММА МОДЕЛИРОВАНИЯ 2D-ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ В ОБЛАСТЯХ С КРИВОЛИНЕЙНОЙ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ.....	446
<i>П.А. Титов</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВРАЩЕНИЯ НА ЕСТЕСТВЕННУЮ КОНВЕКЦИЮ В СФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГИБРИДНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ.....	456
<i>И.В. Бычин</i>	
МОДЕЛЬ ПРЕДВЫЧИСЛЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОЯДЕРНЫХ УСКОРИТЕЛЕЙ.....	461
<i>Р.М. Миниахметов</i>	
ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ WEB-ЛАБОРАТОРИИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ХИМИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ 4-ТРЕТ- БУТИЛФЕНОЛА.....	464
<i>Л.В. Еникеева, Н.Ф. Мурзаева</i>	
РАСПРЕДЕЛЕННАЯ СИСТЕМА ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ DCACHE.....	470
<i>Е.Ю. Куклин</i>	
РАСШИРЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ МЕНЕДЖЕРА РЕСУРСОВ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА SLURM.....	472
<i>С.Н. Леоненков</i>	

СИСТЕМА МОНИТОРИНГА ТОЧЕК ПРЕДЕЛЬНОЙ НАГРУЗКИ В КЛАСТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЯХ.....	477
<i>К.В. Иванов</i>	
УСКОРЕНИЕ ПОИСКА В ШИРИНУ НА GPU-АРХИТЕКТУРЕ С ПОМОЩЬЮ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАГРУЗКИ.....	481
<i>М.А. Черноскотов</i>	
ОГЛАВЛЕНИЕ.....	486
АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ АВТОРОВ.....	495

WWW-MINCRYST: ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА ПО КРИСТАЛЛОХИМИИ И МИНЕРАЛОГИИ — ТЕХНИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ, ВОЗМОЖНОСТИ, ПЕРСПЕКТИВЫ

Д.А. Варламов, Т.Н. Докина, Н.А. Дрожжина, О.Л. Самохвалова

Институт экспериментальной минералогии РАН, г.Черноголовка

В статье описывается созданная в 1997 году и активно развиваемая вплоть до настоящего времени ориентированная на Интернет-пользователя информационно-вычислительная система (ИВС) WWW-MINCRYST со свободным доступом. Цель создания ИВС WWW-MINCRYST с ее инструментарием — обеспечить кристаллохимической и минералогической информацией максимально широкий круг пользователей во всех областях науки, оперирующих с кристаллическим веществом (геология, геохимия, кристаллография, физика твердого тела) достоверной и актуальной информацией в области кристаллохимии и кристаллографии минералов, их синтетических аналогов и элементов, а также дать дополнительный толчок в развитии методов обработки и визуализации кристаллоструктурных данных.

ИВС WWW-MINCRYST (<http://database.iem.ac.ru/mincryst>, <http://mincryst.iem.ac.ru>) в качестве Интернет-ориентированной базы данных возникла достаточно давно и стала одним из пионерских интерактивных научных Интернет-ресурсов как в России, так и в мире в области наук о Земле. Первый полностью работоспособный вариант WWW интерфейса был создан в рамках гранта РФФИ № 96-07-89162 и представлен пользователям в декабре 1997 года [1], таким образом система успешно функционирует и активно востребована пользователями уже почти 17 лет. На старте проекта ресурс был призван обеспечить интерактивный доступ Интернет-пользователям к накапливавшимся с 1985 года в рамках локальной ИВС МИНКРИСТ данным по кристаллическим структурам (прежде всего литературным, а также авторским аналитическим — всего около 3500 объектов на момент старта проекта). В ходе проекта в состав ИВС вводились программные разработки по обработке кристаллоструктурных и кристаллохимических данных, их анализу и мультимедийной визуализации. Главным инициатором и основным идеологом работ стал заведующий группой рентгеноспектрального анализа Института экспериментальной минералогии РАН выдающийся кристаллограф А.В. Чичагов (увы, безвременно ушедший от нас в 2010 году).

За 17 лет развития ИВС WWW-MINCRYST нарастил свой информационный фонд почти в 2,5 раза (более чем на 5000 объектов) и по праву вошел в первые ряды рентгеноструктурных и кристаллохимических баз данных, связанных с изучением минерального вещества, как по оценкам пользователей, так и по мнению составителей отраслевых каталогов информационных ссылок.

ИВС WWW-MINCRYST зарегистрирована в государственном регистре баз данных (НТЦ "Информрегистр") под номером 0229805169 (регистрационное свидетельство № 4873 от 11.02.99).

Основным компонентом ИВС является собственно база данных или Информационный фонд (на июнь 2014 года — около 8800 информационных объектов для более чем 3700 уникальных фаз, включая 3400 природных минералов и около 300 синтетических фаз, не имеющих пока натуральных аналогов). Информационный объект состоит из 4 базовых таблиц с 60 фиксированными и до 130 дополнительными полями (число последних варьирует в зависимости от сложности структуры) и 4 бинарных файлов. Поддерживается иерархическая система индексов и ряд вспомогательных таблиц. Общий объем базы данных составляет около 450 мбайт.

Информационный фонд в ИВС WWW-MINCRYST содержит информацию о большинстве минеральных видов (около 3400 из 4800 официально признанных на июнь 2014 года Международной Минералогической Ассоциацией - <http://www.ima-mineralogy.org/Minlist.htm>), кристаллические структуры которых расшифрованы к настоящему времени. Помимо природных объектов, в базе данных представлены синтетические минералы — их структурные аналоги, отличающиеся по составу (например, с заменой одного из катионов), и неорганические соединения (силикаты, фосфаты, бораты и др.), близкие по свойствам к природным веществам. Информационный фонд содержит данные структурных работ из более 120 иностранных и отечественных журналов за период от 1930-х годов по настоящее время. Ежегодный прирост новых или заново переопределенных/уточненных кристаллических структур минералов и их аналогов достаточно значителен, чтобы требовалась постоянная актуализация информационного фонда (в среднем, до 300-400 структур в год). В последние годы основной акцент был сделан на новые минералы, а также на кристаллические структуры, описанные в советских и российских журналах (которые в последние десятилетия были менее доступны web-пользователю, нежели зарубежные).

Интерфейс ИВС WWW-MINCRYST представляет собой многоуровневую информационную двуязычную (русский и английский, включая содержание и языки интерфейса) систему. В нее входят следующие компоненты: (а) комплексные поисковые интерфейсы, использующие как критерии поиска (в

различных комбинациях) названия минералов, химический состав, кристаллоструктурные параметры, литературные ссылки и вспомогательную информацию, причем возможны комбинации поисковых признаков; (б) модули мультимедийного представления информации (интерактивные полиэдрические и шаровые структуры, линейчатые и непрерывные спектры — через Java-апплеты WWW-CrystPic и WWW-MixiPol; (в) классификационные схемы; (г) модули организации взаимосвязей с внешними информационными ресурсами через систему динамически формируемых ссылок; (д) WWW-ориентированный инструментальный разработчика (включая систему импорта, проверки и редакции данных, а также их архивации и резервного копирования).

Технологически ИБС WWW-MINCRYST как web-сервис реализована на "классической" связке Linux-Apache-Mysql-PHP (LAMP) с использованием JavaScript и (для интерактивных апплетов) Java (на базе Sun/Oracle JDK). Размещена ИБС на сервере баз данных Института экспериментальной минералогии РАН (<http://database.iem.ac.ru>), доступ нелимитирован (скорость - до 100 Мбит/с на MSK-IX). На старте проекта ИБС WWW-MINCRYST стала в 1997 году (в реализации на ОС Digital Unix) одной из первых интернет-ориентированных баз данных в России, использовавшим данную технологию, причем за 15 лет она несколько не потеряла свою технологичность на стороне сервера.

В теоретической основе ИБС WWW-MINCRYST лежит ряд принципиальных "идеологических" моментов, реализация которых и обеспечила ему имеющееся признание кристаллографической и минералогической научной общественности. Синтез информации о кристаллической фазе, рассматриваемой как "монокристалл" и/или как "поликристалл" с заменой экспериментальных поликристалл-стандартов **расчетными** — базовая идея WWW-MINCRYST, которая и делает его универсальной, комплексной и оригинальной разработкой, поскольку позволяет существенно расширить информационную базу сравнительно с чисто аналитической. На базе введенной информации программный пакет эксперта-разработчика позволяет автоматически сформировать вторую, производную от первой (аналитической), базу расчетных поликристалл-стандартов, проводя синтез двух типов информации о кристаллической фазе. Связка "Кристаллическая структура фазы и ее расчетная поликристалл-рентгенограмма" является информационной основой ИБС WWW-MINCRYST и служит важнейшим инструментарием в руках пользователя (в особенности рентгеновского кристаллографа). Стержневая идея WWW-MINCRYST о синтезе двух типов кристаллоструктурной информации о кристаллической фазе реализует принципиально новый подход к формированию всей кристаллоструктурной информации о веществе и организации доступа к ней.

Основным источником информации для ИБС служат оригинальные журнальные статьи, опубликованные в открытой печати. Извлеченная кристаллоструктурная информация помещается (по специальному формату) в ASCII-файл с последующей программной (на локальных ПК) экспертизой по результатам расчета межатомных расстояний и других кристаллоструктурных характеристик и, в случае положительного решения, импортируется в ИБС специальными средствами группового или одиночного импорта. Возможен импорт кристаллоструктурной информации через общепринятый в кристаллографии специализированный файл (Crystallographic Information File, CIF), содержащий кристаллоструктурные характеристики расшифрованной кристаллической фазы (формат — <http://www.sdsc.edu/pb/cif/cif.html>).

Информационная запись для индивидуального кристаллического вещества содержит информацию о названии (в соответствии с классификацией International Mineralogy Association или рекомендациями по наименованию неорганических веществ IUPAC), химическом составе, симметрии, параметрах элементарной ячейки, координатах атомных позиций с изотропными температурными факторами и заселенностями, информацию о межплоскостных расстояниях, HKL-индексах и интенсивностях сильнейших рефлексов рентгенодифракционной картины поликристалл-фазы, а также ссылки на соответствующие публикации по расшифровке или уточнению кристаллической структуры. Запись может быть специфицирована по полезным свойствам, особенностям химического состава и структуры, Р-Т условиям синтеза, принадлежности к условным минеральным группам. Каждая запись содержит "монокристалльные" и "поликристалльные" характеристики кристаллической фазы. Минералы классифицированы в соответствии с таксонами структурно-химической систематики минералов А.А. Годовикова, кристаллохимической классификации М. Чириотти, в настоящее время вводится классификация по структурным типам минералов по Г.Б. Бокию. Для 2400 фаз сделаны экспресс-оценки потенциальной энергии кристаллической решетки.

В ИБС WWW-MINCRYST реализован импорт одобренной экспертами информации через web-интерфейс как в виде единичных записей, так и пакетов записей (до нескольких сот) с входным контролем данных, что позволяет проводить постоянную актуализацию информационного фонда. Также реализована возможность редактирования записей в on-line режиме, их удаления, замены служебных файлов записей, архивации и восстановления базы данных через web-интерфейс.

Кратко об основных возможностях ИБС WWW-MINCRYST.

В ИБС реализована эффективная система поиска фаз по отдельным наборам или комплексу параметров: название минерала (полное или частичное, по спецификации, алфавитные списки), химический или элементный состав в различных комбинациях (присутствие/отсутствие элементов и их комбинации), кристаллоструктурные характеристики (симметрия, пространственные группы, параметры элементарной ячейки, межплоскостные расстояния $d(hkl)$), что в сочетании с химическим (элементным) составом дает возможность прямого интерактивного качественного рентгенофазового анализа. В систему поиска добавлен

поиск по классификационным параметрам нескольких кристаллохимических и структурных классификаций (Годовиков, Чириотти, Бокий). Система поиска по этим параметрам обеспечивает поиск (и группировку) минералов по указанным низшим и промежуточным таксонам классификаций. По ряду параметров поиска ИВС WWW-MINCRYST до сих пор не имеет аналогов среди минералого-кристаллографических баз данных.

По результатам поиска пользователь получает ссылку на список фаз, отвечающих поисковым критериям с указанием ID записи, названия фазы, формулы и пространственной группы с возможностью последующего перехода по гиперссылке. В случае единичного успешного ответа пользователь сразу автоматически переводится на найденный объект.

В «карте» найденного объекта представлены основные данные (как хранимые в БД, так и динамически рассчитываемые при формировании «карты») – название, формула, параметры ячейки, различные кристаллографические данные (кол-во рефлексов, рентгеновские плотности, коэффициенты поглощения); CPDS карта – 20 максимальных рефлексов, их *hkl* позиции и интенсивности; базовые атомные позиции и их заселенности; полная информационно-расчетная карта (рентгеновские плотности, все рефлексы и т.п.); рассчитанные энергии решетки; принадлежность к различным классификационным схемам; источники данных (ссылки на публикации, поправки и т.п.); автоматически формируемые ссылки на внешние ресурсы.

Для всех записей через апплет WWW-Crystpic (Java-3D с использованием библиотек OpenGL) доступны динамически создаваемые интерактивные изображения моделей кристаллических структур в шарах-сферах и в полиэдрических проекциях (до 138 позиций и до 1500(!) атомов на структуру) в соответствии с основными канонами минералогии и кристаллографии. Программа позволяет делать всевозможные манипуляции с моделью структуры, включая масштабирование, непрерывное и/или автоматическое дискретное вращение вокруг "экранных" осей X,Y,Z, ориентацию по кристаллографическим осям, *hkl*-фрагментацию структуры (на *hkl*-ориентированные фрагменты толщиной *d(hkl)*), наращивание элементарных ячеек вдоль любых выбранных направлений для формирования "сверхструктур" и мотивов, а также прямой "ручной" и автоматизированный для малых полиэдров (тетраэдров и октаэдров) расчет любых межатомных расстояний и углов в структуре. Программа изображает любые полиэдры, включая "дефектные" с необычно малыми ("плохими") межатомными расстояниями. Более детальное описание всех возможностей апплета приведено здесь - <http://mincryst.iem.ac.ru/rus/crystpic.php>. В настоящее время существуют проблемы с работой с внешними библиотеками OpenGL (на которых реализован апплет) и параноидальными настройками безопасности новых версий Java, которые решаются вмешательством пользователя. Однако, из-за этого сейчас проводится перенос апплета на новые программные платформы типа встроенных средств HTML5.

Модуль в виде апплета WWW-Mixipol предназначен для графического представления полных *расчетных* спектральных профилей поликристалл-рентгенограмм с возможностями манипулирования спектрами для разных источников излучения и разных типов спектральных шкал. Также модуль способен формировать рентгенограммы смесей фаз (до 6 фаз одновременно) при возможности варьирования относительными содержаниями компонентов смеси. Примеры модели кристаллической структуры цеолита (более 600 атомов) и расчетных спектров смеси 6 фаз приведены на рис.1

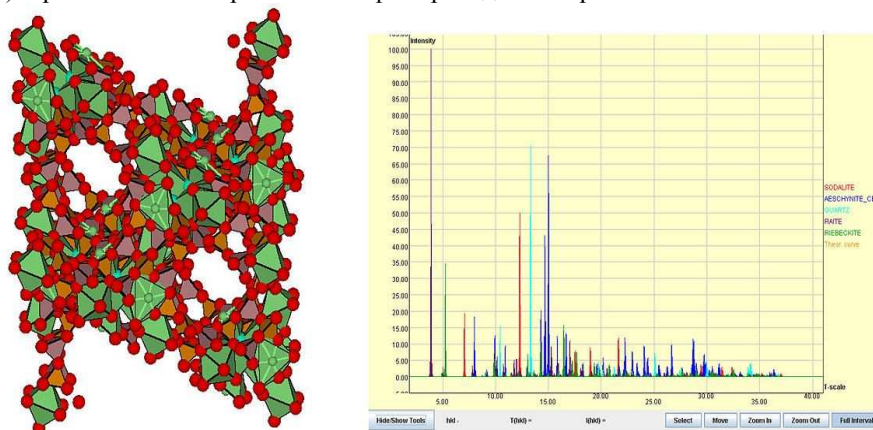


Рис.1. Интерактивная модель кристаллической структуры и пример комбинации расчетных спектральных профилей поликристалл-рентгенограмм (смесь 6 фаз)

Как для структур, так и для спектров минералов предусмотрены и упрощенные варианты представления в виде так же интерактивных традиционных шаровых структур и линейчатых спектров.

Разработанный и интегрированный (пока частично) в WWW-MINCRYST расчетный модуль WWW-Храурol в связке с модулями WWW-Crystpic и WWW-Mixipol позволяет квалифицированному пользователю извлекать и *модифицировать* "на лету" структуры из информационного фонда (не затрагивая его непосредственно), а затем рассчитывать новые варианты и получать графические изображения моделей кристаллических структур и квазиреальных полных профилей расчетных поликристалл-рентгенограмм, тем самым решая задачи по модификации реальных структур.

Одними из первых среди научных интернет-ориентированных баз данных для ИВС WWW-MINCRYST была разработана система динамически формируемых перекрестных веб-ссылок для связи объектов с записями для конкретных минералов в ведущих минералогических базах данных в Интернете. Система генерации динамических гиперссылок на внешние информационные ресурсы (на минералогические базы данных и поисковые системы) позволяет "прозрачно" для пользователя подключать большие внешние массивы данных, используя метод "генеральных" запросов. При этом пользователь сразу получает доступ к информации по интересующему его объекту, минуя стадии поиска или просмотра всей внешней базы. Кроме того, данный механизм реализует обратную связь, позволяя таким же образом ссылаться этим базам уже на наши информационные объекты, что резко повышает востребованность ИВС внешними пользователями.

Наличие в ИВС WWW-MINCRYST данных по 8800 кристаллическим структурам, встроенного расчетного комплекса и развитых средств визуализации позволили помимо возможностей, ориентированных на поиск и предоставление информации, использовать ИВС в разработке нетрадиционных научных подходов к интерпретации и представлению некоторых кристаллических структур. Например, WWW Xraypol позволил выявить в традиционных структурах возможность гибкого использования полиэдров и почти автоматически формировать различные варианты структурных моделей минералов. Как выяснилось благодаря гибкому использованию полиэдров, позволяющему формировать различные варианты структурных моделей минералов, для части минералов можно не строго привязываться к традиционному катионно-анионному изображению, а формировать структуры на основе любых атомов, входящих в ее состав. Используется принцип: в ряде случаев кристаллическое пространство можно организовать в смешанном шаровом и полиэдрическом изображении на основе *любых* (а не общепринятых) атомов в структуре. Метод особенно эффективен для сложных "неправильных" бескислородных структур (фосфиды, сложные сульфиды и др.).

Востребованность WWW-MINCRYST хорошо подтверждается статистикой обращений (4,1 млн. успешных единичных запросов за 2013 год, более 52 Гб скачанной информации, около 35000 уникальных сайтов-клиентов), а также большим количеством отзывов, описаний и внешних ссылок на WWW-MINCRYST (см. раздел "Ссылки" на сайте).

О перспективах развития WWW-MINCRYST следует сказать отдельно. В связи с очень быстрым развитием web-технологий и (соответственно) браузеров, возникла необходимость кардинальной переработки нынешнего клиентского интерфейса, уже не отвечающего как новым технологиям (и зачастую не полностью совместимого с новым ПО), так и требованиям пользователей. Она будет включать изменение способа представления записи путем сведения разобщенных сейчас полей (основные данные, CPDS карта, атомные позиции, структура, спектры, ссылки и др.) в единое информационное пространство, формируемое на базе динамического HTML (с использованием технологий JSON, DHTML, HTML5, оверлейных структур). Предусматривается как переделка и рекомпиляция Java апплетов (в связи с устареванием и неполной совместимостью кода с последними реализациями Java VM), так и их замена на модули, использующие мультимедийные технологии стандартов HTML5 или Adobe Flash (с использованием оригинального авторского расчетного кода). Также будут изменены в сторону повышения дружелюбности и простоты дизайн и элементы управления предоставляемой пользователю информации. Предусмотрено пополнение базы данных дополнительной сугубо минералогической информацией (фото минералов, рисунки кристаллографических форм, дополнительные минералогические данные и др.). Несмотря на то, что по ряду параметров поиска WWW-MINCRYST до сих пор не имеет аналогов, будет расширен круг потенциальных поисковых запросов (прежде всего в области поисков по составу и кристаллографическим данным).

Разработанная и развиваемая на протяжении 17 лет ИВС WWW-MINCRYST является общедоступным, дружелюбным пользователю интерфейсом к большому объему кристаллоструктурной и кристаллохимической информации с развитыми средствами поиска, представления и обработки и может служить мощным инструментарием для всех исследователей в минералогии, кристаллографии, физике твердого тела, материаловедении и прочих смежных областях науки.

Проведение работ по ИВС WWW-MINCRYST в течение 1997-2013 годов было поддержано 5-ю грантами РФФИ (в том числе в настоящее время - грантом РФФИ № 12-07-00742-а, рук. Варламов Д.А.).

ЛИТЕРАТУРА:

1. А.В. Чичагов, Д.А. Варламов, Е.В. Ершов, Т.Н. Докина, Н.А. Дрожжина, О.Л. Самохвалова Кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов (WWW-MINCRYST) // Записки РМО, 2007, т.136, № 3, с.135-141
2. Д.А. Варламов, Т.Н. Докина, Н.А. Дрожжина, О.Л. Самохвалова WWW-MINCRYST: Интернет-ориентированная информационно-вычислительная система по кристаллографии и кристаллохимии минералов // Вестник ЮУрГУ, Сер. «Вычислительная математика и информатика», 2013, т.2, вып.1, с.26-32
3. А.В. Чичагов, Д.А. Варламов WWW-MINCRYST-2007 - Интернет-ориентированная база данных по кристаллографии/кристаллохимии минералов и их аналогов // «Научный сервис в сети Интернет: технологии параллельного программирования. 15 лет РФФИ», Труды Всероссийской научной конференции, М., изд-во МГУ, 2007, с.390-392