УДК 004.896

Т.В. Нерода

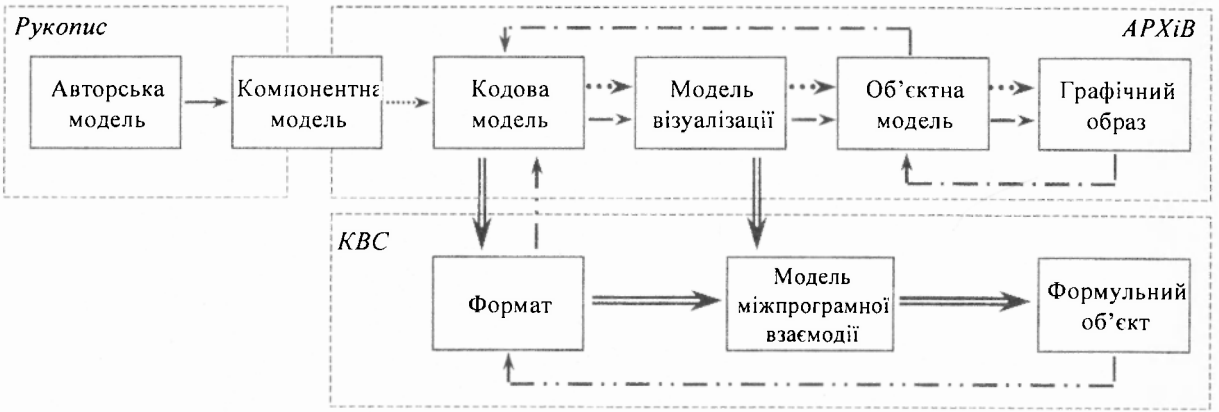
ЕТАПИ ПРОЕКТУВАННЯ АВТОМАТИЗОВАНОГО РЕДАКТОРА ХІМІЧНИХ ВИРАЗІВ

Комп'ютерний набір надав нові можливості в складанні текстів і позиціюванні об'єктів видання. Організація автоматизованого робочого місця складача, зокрема структурування програмних засобів комп'ютерно-видавничих систем (КВС), не може підлягати застарілим ергономічним вимогам і інструкціям. Тому постає потреба у формулюванні нових чи удосконаленні наявних принципів побудови діалогових елементів керування і виконавчих модулів КІВК. У зв'язку з недостатнім обсягом досліджень у цій галузі проектування таких підсистем відповідно до призначення вузькоспеціалізованого продукту є питанням, що потребує ретельного вивчення.

Наразі не існує відомих методів об'єктивного оцінювання якості програмних середовищ [1, 6], зокрема складових КВС. Відсутня також єдина думка про структурну організацію їхніх процедурних модулів і логіко-естетичне оформлення інтерфейсу користувача. Такий стан речей призводить до оцінювання середовища за собівартістю програмного продукту чи кількістю дій, виконаних для досягнення певної мети, що у більшості випадків принципово неприпустимо. Отже, актуальною є проблема проведення власних фундаментальних досліджень і систематизації структурних складників комп'ютерно-інтегрованих видавничих комплексів різного призначення та спрямування оперативного створення якісної конкурентоздатної друкованої продукції.

Визначення моделей хімічного виразу

Завдання створення вузькоспеціалізованого програмного пакета КВС полягає передусім в обумовленні інформаційної моделі процесу перетворення рукописного зображення досліджуваного об'єкта в органічну складову друкованої продукції. Зокрема, для конкретизації певних ознак, характеристик тощо хімічної формули, розроблення методів їх отримання й дослідження, організації структур даних для збереження і трансформації інформаційних співвідношень між складовими такого процесу було побудовано орієнтований граф основних етапів моделювання вихідного зображення хімічного виразу, навантажений по вершинах і дугах (див. рисунок).



Інформаційна модель процесу опрацювання зображення хімічного виразу

Множиною вузлових вершин цього графа є імітаційні моделі опрацьовуваного об'єкта, з'єднані між собою зв'язками, що ілюструють напрям та особливості динаміки перетворення поліграфічної (не хімічної !) інформації. Так, уведення в КВС рукописного зображення хімічного виразу передбачає передусім подання його у вигляді компонентної моделі – сукупності найпростіших елементів складання, обумовлених у [4]. Власне, ці елементи запропоновано прийняти як шаблони інструментарію автоматизованого редактора для забезпечення простого способу координації дій складача.

Для збереження визначених в авторській моделі шрифтових і геометрично-позиційних особливостей вихідного зображення виразу ініційовані складачем шаблонні компоненти перетворюються на код. Кодова модель забезпечує подання виразу у вигляді множини символів, придатної для машинної інтерпретації. Крім того, можливість алгоритмічного аналізу такої знакової системи дозволяє синтезувати на її основі блок процедурного опису зображення, названий моделлю візуалізації. За допомогою процедур і команд GDI модель візуалізації відтворює склад, будову сполуки, розташування атомів, тобто компонентну модель, у вигляді сукупності графічних елементів керування, кожен з яких є логічною структурною одиницею вихідного зображення хімічного виразу.

Для організації таких графічних елементів у середовище автоматизованого редактора потрібно ввести об'єктну модель: об'єкт залежно від функціонального призначення підлягатиме під певний клас, а класи становитимуть ієрархію. Таким чином, графічний об'єкт керування сам визначатиме виконувані над ним дії, зокрема, відображення на екрані дисплея КВС, що дає можливість побудувати наступну модель рукописного варіанту формули – графічний образ. Шляхом декомпозиції графічного образу об'єктна модель забезпечує його редагування, ініціюючи процедуру модифікації кодової моделі.

Для дослідження зображення хімічного виразу поза середовищем програмного пакета автоматизованого редактора кодову модель слід перетворити в окрему логічно організовану структуру компонентів – формат прикладної програми. Долучена до процедурного опису цих компонентів нотація формату становитиме деяку модель взаємодії автоматизованого редактора хімічних виразів з підсистемою верстання. Такий стан речей дозволяє відтворити вихідне зображення в публікації КВС у вигляді формульного об'єкта.

Методи моделювання зображення хімічного виразу

Процес синтезу та дослідження запропонованих імітаційних моделей зображення хімічного виразу вимагає створення адекватних методів моделювання з попереднім висуненням до них фахових вимог і передумов. Так, методи побудови та модифікації зображення вихідної структури повинні забезпечити формування графічного образу сполуки відповідно до компонентної моделі з суворим дотриманням вітчизняних нормативних основ коректного поліграфічного відтворення друкованої продукції [5, 6]. Ці норми було сформульовано на основі традицій національного книгодрукування, деяких положень з естетики оформлення набору, гігієни

читання і підтримання високої працездатності читача. Тому процес синтезу моделі візуалізації, яка через об'єктну модель керуватиме генеруванням графічного образу, слід реалізувати на методах позиціювання шаблонних фрагментів, що ґрунтуватиметься на створенні математичних моделей відповідних об'єктів. Тут необхідно також передбачити розроблення методів організації сервісних поліграфічно-орієнтованих процедур – масштабування, повороту та дзеркалення – з урахуванням особливостей співвідношень графічних і текстових компонентів виразу.

Відтак слід забезпечити збереження характеристик моделі вихідного зображення, для чого до складу інформаційного забезпечення пакета прикладних програм автоматизованого редактора вводиться система кодування опису структури графічного образу. Відомо декілька класифікацій систем кодування хімічних сполук, сформульованих за певними критеріями. Так, з точки зору проблем міжгалузевої координації системи кодування діляться на галузеві, структурні, предметні масштабні та видові. Інша класифікація, запропонована Х'юбером (Huber), групує записи за їх зовнішнім структурним описом, виділяючи фрагментарні, шифрові та топологічні коди. Добре відома хімікам-органікам так звана фактографічна класифікація, використовувана для покажчиків формул і реакцій у хімічних реферативних журналах та різноманітних каталогах хімічних структур типу довідника органічних сполук Бельштейна, довідника фізичних властивостей Ландольта – Бельштейна тощо. Таким чином, конкретна спеціалізація відповідної системи кодування висуває до неї свої вимоги. Для уточнення класу задач, які вирішуватимуться при моделюванні зображення сполуки, на цьому етапі проектування автоматизованого редактора слід сформулювати певні критерії до методів кодування поліграфічно-орієнтованої хімічної інформації [3]. Далі з огляду на ці критерії виконується вибір наявної чи аргументоване створення нової системи кодування хімічних виразів для комп'ютерно-видавничих систем.

Наступним етапом дослідження зображення є запис його кодової моделі у вигляді формату, прийнятного для використання у програмах КІВК даної операційної системи. Метод моделювання нотації формату повинен оперувати характеристиками інформаційних об'єктів автоматизованого редактора хімічних виразів та забезпечити ряд функцій виявлення помилок коду, запобігання зависанню виконавчого модуля тощо.

Для розташування моделі вихідного зображення хімічного виразу в оригінал-макеті та його наступного редагування засобами програми-сервера слід передбачити метод зв'язування створеної моделі візуалізації із середовищем хімічного редактора шляхом долучення до неї потоку даних індивідуальної структури, об'єднання відповідних моделей у формульний об'єкт і коректне занурення у програму верстання КВС.

Принцип проектування хімічного редактора

При реалізації обумовлених методів моделювання зображень хімічного виразу, коли виникає потреба у створенні великої програмної системи чи складанні процедури для вирішення окремої проміжної задачі, постає питання про обґрунтований вибір найдоцільнішого інструментального засобу.

Розроблювании додаток повинен опрацьовувати графічні та текстові формати даних, володіти розвинутою структурою взаємодії з програмами набору й верстання комп'ютерно-видавничих систем, бути компактним і сумісним із розповсюдженими програмними пакетами. Формування зображень хімічних формул здійснюється здебільшого із застосуванням об'єктів на основі регулярних структур. Об'єкти такого типу мають цілком визначену форму, їх можна однозначно задати на основі найпростіших геометричних понять – лінія, коло, еліпс, – які характеризуються певними наборами параметрів. Для того щоб їх копіювати, переміщувати, масштабувати чи змінювати колір, досить присвоїти відповідним параметрам нові значення. Даний тип зображень відноситься до так званої векторної чи координативної графіки, оскільки кожний елементарний об'єкт задається координатами опорних (реперних) точок і деякими доповняльними параметрами.

При розробленні автоматизованого редактора хімічних виразів виникає проблема і вибору оптимальних засобів компонування зображення формули в середовищі прикладної програми, які забезпечать максимальну зручність, якість і узгодженість процесу набору формульного об'єкта та його інтегрування в оригінал-макет: послідовність і порядок появи інформації на екрані, послідовність запитів, інтуїтивно зрозумілі елементи керування сприяють зручності та комфортності роботи з прикладною програмою. При розробленні редактора формул особливу увагу слід приділити ергономічним особливостям організації діалогового режиму взаємодії користувача з ЕОМ. Діалоговий режим розглядається як механізм обміну інформацією, що охоплює всі процеси системи "складач – редактор", пов'язані з виконанням певних завдань.

На даний час стандартом програмного середовища стала Архітектура середовища для розроблення додатків (System application Architecture, SAA), запропонована фірмою IBM у 1988 році. Вона призначена для стандартизації всіх аспектів розробки програм, включаючи користувацький інтерфейс, мови та інструментарій програмування, стиль кодування, графіку, вікна, використання баз даних і протоколів телекомунікацій. Частина цієї архітектури, відповідальна за взаємодію програми з користувачем, називається Єдиним доступом користувача (CUA, Common User Access) і визначає правила побудови інтерфейсу.

Даний стандарт уже було покладенио в основу інтерфейсу комп'ютерних хімічно-орієнтованих систем, наприклад, проекту ACD/Labs, програмного комплексу ChemOffice. При написанні програми автоматизованого редактора хімічних виразів слід зважати і на основні тенденції в побудові інтерфейсу користувача.

Відповідно до застосовуваних принципів комп'ютерного складання структур відомі програми набору хімічних формул можна класифікувати як програми з використанням *псевдографіки, метамови (логічного програмування)* та *блокового діалогу* [2].

Відсутність засобів безпосередньої взаємодії та наочного діалогу з користувачем унеможливлює застосування редакторів з *логічним програмуванням* як компонентів комп'ютерно-видавничих систем. Головним недоліком

редакторів складних видів тексту із застосуванням принципу *псевдографіки* є відсутність доступу до створених ними об'єктів з інших систем, що робить неможливим інтегрування зображення хімічного виразу в оригінал-макет комп'ютерно-видавничого комплексу. Дослідження роботи складачів свідчать, що максимально просто й ефективно організувати діалог оператора з ЕОМ можна, лише врахувавши психологічні особливості сприйняття структурної формули людиною.

З огляду на зазначені чинники при розробленні автоматизованого редактора хімічних виразів для введення і редагування зображення формули вирішено обрати *блоковий* принцип набору, при якому має місце діалог з користувачем у звичній і зручній формі, без використання директивної мови. При цьому час очікування відповіді від ЕОМ значно менший за час реакції користувача на зображення. Так що набір виконується у природному темпі мислення людини, і при цьому не вимагається попередня підготовка. Системи такого роду створюють для користувача певний психологічний комфорт (затишок), надавши можливість мислити у найзручнішій і звичній для нього формі, не формулюючи думки на фіксованій мові.

Таким чином, для створення прикладної програми компонування зображень хімічних структур у комп'ютерно-видавничих системах за запропонованою інформаційною моделлю доцільним є застосування блокового принципу складання елементів виразу в інтерактивному режимі з підтриманням технології WYSIWYG. За рахунок ієрархічно-класового подання об'єктів та операцій над ними така система менше підлягатиме впливу помилок користувача, однозначно інтерпретуючи виконані дії. Процедурна візуалізація фрагментів зображення виразу, вказаних у блоковому діалозі, реалізує гнучкість побудови графічного образу формули з дотриманням технологічних вимог правильного поліграфічного відтворення. Автоматичне створення кодового запису сприятиме збереженню геометрично-позиційних характеристик вихідного зображення та загалом створить передумови для коректного інтегрування формульного об'єкта у документ комп'ютерно-видавничого комплексу.

Наведені методи моделювання зображень хімічних виразів і дослідження, проведені з обумовленими моделями, є основою для проектування програмного комплексу набору і верстання інформаційних об'єктів видання III–IV рівня складності, що значно зменшить час підготовки публікації і забезпечить створення якісної конкурентоздатної друкованої продукції.

1. Жежнич П.І. Критерії ефективності інформаційних систем // Вісник НУ "Львівська політехніка": Інформаційні системи та мережі. Л., 2002. № 464. С. 84–95. 2. Нерода Т. Аналіз засобів і принципів організації середовища автоматизованого редактора хімічних виразів // Вісник ВПІ. Вінниця, 2003. № 6. С. 346–349. 3. Нерода Т. Аналіз та класифікація систем кодування хімічних формул // Наукові записки УАД. Л., 2002. №5. С. 107–110. 4. Нерода Т. Інструментальні засоби редактора хімічних виразів // Доп. другої наук.-техн. конф. студ. і асп. "Друкарство молоде". К., 2002. С. 14–17. 5. Партико З.В. Загальне редагування: нормативні основи. Л., 2001. 6. Сеньківський В.М., Андріїв І.В. Систематизація та використання засобів автоматизованого опрацювання текстової інформації // Кваліпогія книги: Зб. наук. праць. Л., 2000. Вип. 3. С. 28–32.