Chem. Listy *107*, 136–145 (2013) Referát

TERMOCHEMICKÉ VLASTNOSTI SUBSTANCIÍ FORMOU WEBOVEJ SLUŽBY

PAVEL HOROVČÁK a JÁN TERPÁK

Ústav riadenia a informatizácie výrobných procesov, Fakulta baníctva, ekológie, riadenia a geotechnológií, Technická univerzita v Košiciach, Boženy Němcovej 3, 042 00 Košice
Pavel.Horovcak@tuke.sk

Došlo 3.10.11, prijaté 5.1.12.

Kľúčové slová: Termochemické vlastnosti, webová služba, servisne orientovaná architektúra, PHP, MATLAB

Obsah

1. Úvod
2. Prehľad súčasného stavu
3. Servisne orientovaná architektúra
4. Návrh webovej služby
5. Zdroje webovej služby
6. Funkcie webovej služby
7. Volanie webovej služby
8. Výstup a chybové stavy webovej služby
9. Prezentácia a využitie webovej služby
10. Záver

1. Úvod

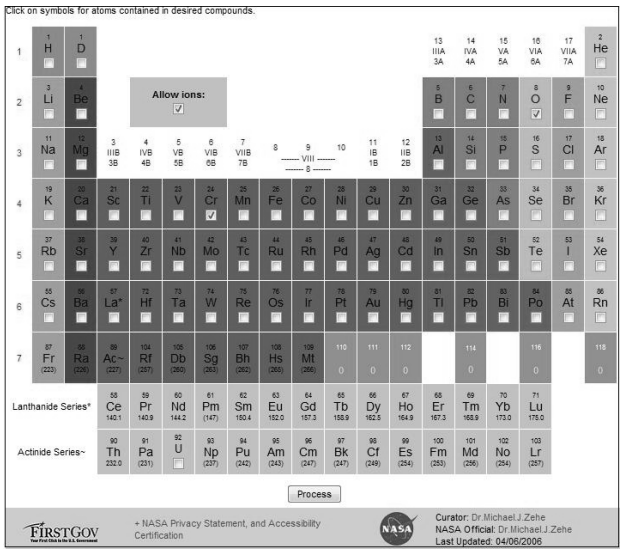
V súčasnosti existuje značné množstvo webových služieb (WS). Medzi najznámejších sprostredkovateľov webových služieb patrí spoločnosť seekda GmbH[1], ktorá sa špecializuje na vývoj a marketing WS orientovaných produktov. Pomocou svojho portálu umožňuje vyhľadávať, poskytovať a využívať jednotlivé webové služby. Poskytuje viac ako 28 000 webových služieb rôzneho zamerania (od vyše 7700 poskytovateľov), avšak z oblasti termochemických dát neposkytuje žiadnu webovú službu. Takýto stav konštatujú aj iné publikované analýzy[2]. Niekoľko málo webových služieb (4) z oblasti termodynamických výpočtov, ale na báze staršej technológie axis[3] a v značne obmedzenom rozsahu substancií poskytuje portál CTserver[4]. Predkladaný článok predstavuje príspevok v oblasti poskytovania termochemických dát pomocou webovej služby a možnosti jej využitia v rôznych oblastiach.

2. Prehľad súčasného stavu

Existuje viacero zdrojov termochemických dát. V prvom rade sú to knižné publikácie[5], kde sú dáta uvedené v podobe tabuľkových hodnôt jednotlivých vlastností (mólová tepelná kapacita, entalpia, entropia, a pod.) v závislosti na teplote. Nevýhodou takto publikovaných dát je, že hodnoty sú dané len pre niektoré teploty, t.j. je potrebná interpolácia pre výpočet hodnôt vo vnútri teplotného intervalu, a taktiež v prípade automatizovaných výpočtov v podobe funkcií je použitie dát vo forme tabuliek neefektívne a náročné. Vhodnejšie sú termochemické vlastnosti vyjadrené v podobe funkcií závislých na teplote. V takomto prípade je potrebné poznať koeficienty daných funkcií. Publikované sú rôzne tvary funkcií[6–8] a konkrétne hodnoty koeficientov pre jednotlivé substancie, resp. fázy. Vzhľadom na množstvo substancií a tvar závislostí sa javí ako najvhodnejší zdroj[6] známy ako NASA polynómy (NASA polynomials).

Práca[6] dokumentuje knižnicu termodynamických dát, ktorú využíva program CEA – NASA Glenn computer program CEA (Chemical Equilibrium with Applications). Knižnica, ktorá obsahuje dáta pre viac ako 2000 pevných, kvapalných a plynných fáz pre teploty od 200 po 20 000 K je tiež dostupná pre iné programy. Dáta sú vyjadrené vo forme metódou najmenších štvorcov získaných koeficientov pre sedemčlenný vzťah pre výpočet $C^o_p(T)/R$ a s integračnou konštantou pre $H^o(T)/RT$ a $S^o(T)/R$. NASA Glenn computer program PAC (Properties and Coefficients) bol použitý na výpočet termodynamických funkcií a určenie ich koeficientov. Vstupné hodnoty pre PAC boli čerpané z mnohých zdrojov. Práca obsahuje kompletný výpis databázy spolu s prehľadom termodynamických vlastností pre 0 a 298,15 K.

Ďalším zdrojom termochemických dát sú rôzne elektronické zdroje počnúc jednoduchými desktopovými aplikáciami (napr.[9]) až po sieťovo dostupné aplikácie[10–13]. Medzi sieťovo dostupné zdroje patrí napríklad ThermoBuild[12], ktorý predstavuje interaktívny nástroj založený na využití NASA Glenn termochemickej databázy. Nástroj umožňuje zvoliť prvok/prvky (s využitím Mendelejevovej tabuľky prvkov – obr. 1) a získať tabuľky termodynamických vlastností zlúčenín obsahujúcich zvolené prvky pre používateľom definovaný rozsah a delenie intervalu teplôt a tiež podmnožiny termodynamických dát s informáciami o koeficientoch, ktoré môžu byť použité v CEA či iných programoch[12]. Podobný elektronický zdroj je aj NIST – JANAF Thermochemical Tables[13], kde zadaním vzorca, názvu alebo CAS parametra[14] a tiež pomocou Mendelejevovej tabuľky prvkov je možné získať v tabuľkovej podobe dáta o termodynamických vlastnostiach, ktoré je možné uložiť do súboru v textovej podobe. Tento zdroj poskytuje aj koeficienty pre výpočet mólovej tepelnej kapacity, entalpie a entropie v závislosti na teplote. Inými sieťovými zdrojmi sú napríklad [4,15–21].Výhodou sieťovo dostupných zdrojov je rýchle získanie požadovaných dát, ich nevýhodou je problematické zakomponova-



Obr. 1. **Vstupný formulár aplikácie ThermoBuild**

nie do samostatných výpočtov, resp. simulačných modelov realizovaných v podobe rôznych aplikácií.

3. Servisne orientovaná architektúra

Servisne orientovaná architektúra (SOA) je jedným z najfrekventovanejších pojmov súčasnosti (vyše 76 miliónov výskytov). Podľa základnej definície súčasná SOA predstavuje architektúru, ktorá podporuje servisnú orientáciu pri použití webových služieb[22]. Presná a podrobná definícia hovorí, že „súčasná SOA predstavuje otvorenú, rozšíriteľnú, federačnú a komponovateľnú architektúru, ktorá podporuje servisnú orientáciu a skladá sa zo služieb, ktoré sú autonómne, splňujúce špecifické požiadavky na kvalitu služby QoS (Quality of Service), podporujú rozmanitosť predajcov, spoluprácu, zistiteľnosť a sú implementované ako webové služby“[22]. Praktická definícia určuje, že SOA je forma technologickej architektúry, ktorá ľpie na princípoch servisnej orientácie. Pokiaľ je realizovaná prostredníctvom technologickej platformy webových služieb, SOA vytvára potenciál pre podporu a vylepšenie týchto princípov pomocou riadiaceho procesu a automatizácie domén[22].

Servisne orientovaná architektúra je v podstate kolekciou služieb. Tieto služby navzájom komunikujú. Komunikácia môže zahrňovať buď jednoduchý prenos údajov alebo zahrňuje dve alebo viacej služieb, ktoré koordinujú určitú aktivitu. Sú pritom potrebné určité prostriedky vzájomného prepojenia služieb[23].

SOA je základná štruktúra na podporu komunikácie medzi službami. SOA definuje, ako dve počítačové jednotky, ako sú programy, komunikujú takým spôsobom, aby jeden subjekt mohol vykonať jednotku práce v prospech iného subjektu. Interakcie služieb sú definované pomocou popisného jazyka. Každá interakcia je samostatná (kompletná) a voľne viazaná, takže každá interakcia je nezávislá od akejkoľvek inej interakcie[24].

SOA je založená na komponentoch, ktoré navzájom bezproblémovo spolupracujú[25].

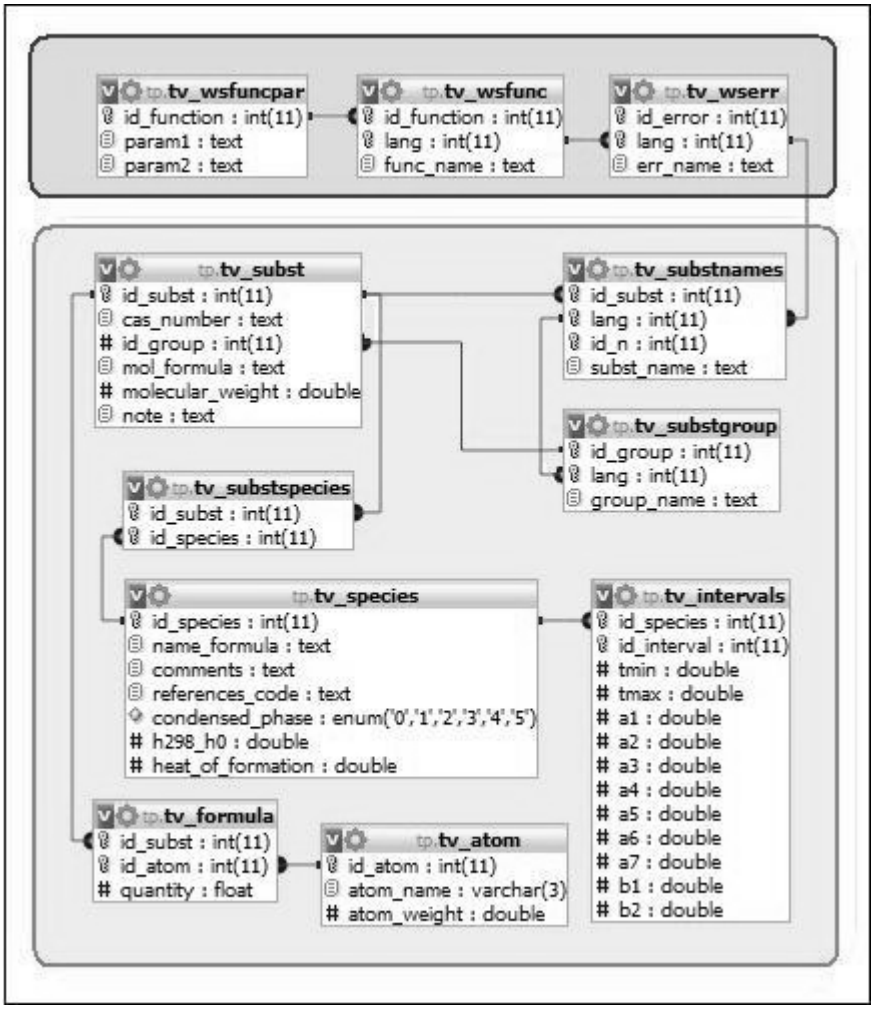
SOA vytvára architektonický model, ktorý si kladie za cieľ zvýšenie efektivity, pružnosti a produktivity spoločnosti definovaním služieb ako primárneho prostriedku, prostredníctvom ktorého je logika riešenia prezentovaná na podporu realizácie strategických cieľov súvisiacich so servisne orientovaným výpočtom[26].

Aplikácia servisnej orientácie (orientácie na služby) významným spôsobom vedie na logiku riešenia, ktorá môže byť klasifikovaná ako „servisne orientovaná“ a s položkami označovanými ako „služby“. Na pochopenie, čo to presne znamená, je potrebné pochopenie strategických cieľov servisne orientovaných výpočtov[27] v kombinácii s princípmi servisne orientovaného designu[28]:

- štandardizovaná spolupráca služby,
- voľná väzba služby,
- abstrakcia služby,
- znovupoužitelnosť služby,
- autonómnosť služby,
- bezstavovosť služby,
- objaviteľnosť služby,
- usporiadateľnosť služby.

4. Návrh webovej služby

Pri návrhu prvotnej verzie webovej služby uvažujeme len niekoľko vybraných vlastností (ako je napr. molekulová hmotnosť, zlučovacie teplo a koeficienty pre výpočet mólovej tepelnej kapacity, entalpie a entropie). Tieto vlastnosti substancií, ich fáz a parametre ich výpočtu zohľadňuje dátový model databázovej základne webovej služby. Tabuľka *tv_subst* s primárnym identifikátorom substancie *Ids* obsahuje jej chemický vzorec, ďalší v chemickej praxi zaužívaný identifikátor CAS[29], molekulovú hmotnosť a skupinu *Ig*. Pre možnosť triedenia substancií do menších skupín je každá substancia zaradená do príslušnej skupiny (napr. prvky, oxidy, atď. – identifikátor *Ig*). Zoznam skupín obsahuje tabuľka *tv_substgroup*. Substancia je tvorená skupinou jednej alebo viacerých fáz (species). Tabuľka *tv_substspecies* obsahuje zoznam fáz jednotlivých substancií. Tabuľka *tv_substnames* obsahuje jeden alebo viac názvov substancie v príslušnom jazyku. Tabuľka *tv_species* obsahuje vybrané informácie o danej látke (vzorec, komentár, zdroj dát, fáza, molekulová hmotnosť, zlučovacie teplo), tabuľka *tv_interval* udáva informácie o látke členené na príslušný počet intervalov teplôt (koeficienty pre výpočet mólovej tepelnej kapacity, entalpie, entropie na danom intervale teplôt <tmin; tmax>). Tabuľka *tv_atom* špecifikuje názov a atómovú váhu jednotlivých chemických prvkov a tabuľka *tv_formula* obsahuje kvantifikáciu prvkov v danej látke – zlúčenine. Tabuľky *tv_substgroup* a *tv_substnames* obsahujú názvy skupín a substancií



Obr. 2. **Dátový model webovej služby**

v dvoch jazykoch. Každá substancia môže mať ľubovoľný počet názvov – synoným, minimálne však jeden. Prvý názov substancie je dominantný a vystupuje v jednotlivých funkciách služby. Počet názvov v rôznych jazykoch nemusí byť rovnaký. Tabuľky *tv_wsfunc* a *tv_wsfuncpar* sú nositeľmi názvov funkcií webovej služby v rôznych jazykoch a príslušných parametrov jednotlivých funkcií webovej služby. Tabuľka *tv_wserr* obsahuje význam jednotlivých kódov chybových stavov webovej služby v rôznych jazykoch. Kompletný tvar dátového modelu služby a vzájomné väzby jednotlivých tabuliek ilustruje obr. 2.

Webová služba je realizovaná vo vývojovom prostredí PHP5 (vyžadovaná verzia PHP je 5 a vyššie) a ako databázový systém využíva MySQL tiež vo verzii 5 (nie je však podmienkou). Pre aktuálnu verziu webovej služby (s názvom triedy `TermPropService`, názov metódy `getTermProp` s 3 parametrami, špecifikované v súbore *TermPropService.wsdl*) boli navrhnuté čiastkové funkcie, ktoré poskytujú informácie o samotnej službe, názvy a identifikáciu všetkých látok, rozsah intervalu teplôt, molekulovú hmotnosť a zlučovacie teplo pre danú látku, hodnoty mólovej tepelnej kapacity, entalpie, entropie, hodnoty koeficientov pre výpočet uvedených vlastností látky pre zadanú hodnotu teploty, všetky intervaly teplôt a hodnoty koeficientov pre danú látku, súhrn všetkých hodnôt danej látky, zoznam chybových kódov webovej služby a význam konkrétneho chybového kódu.

5. Zdroje webovej služby

Množina údajov o substancii v databázovej základni webovej služby primárne vychádza zo zdrojov NASA, ktoré sú doplnené údajmi parametra CAS a jedným, prípadne viacerými názvami v dvoch jazykoch. Množina údajov je teda zostavená v princípe z troch zdrojov – zdroj NASA, zdroj CAS a manuálny zdroj.

Zdroj NASA. Z podrobnej analýzy vyplýva, že tvar závislostí (mólovej tepelnej kapacity, entalpie, entropie) na teplote podľa NASA (NASA Polynomials) zahŕňa aj iné

publikované tvary závislostí[5–7,30–36], a preto sa javí ako univerzálny tvar.

Pri výpočtoch základných termochemických vlastností je potrebné poznať ich závislosť od teploty. V prípade mólovej tepelnej kapacity je závislosť od teploty definovaná nasledujúcim vzťahom

$$\frac{c_p^{\circ}(T)}{R} = \sum_{i=1}^{r} a_i T^{q_i} \qquad (1)$$

kde $r=7$ a hodnoty q_i sú exponenty (–2, –1, 0, 1, 2, 3, 4). Tento vzťah reprezentuje nový formát NASA používaný od roku 1994. Entalpiu a entropiu získame integráciou definičnej rovnice (*1*)

$$\frac{H_T^{\circ}}{RT} = \frac{b_1}{T} + \frac{\int c_p^{\circ}(T)\,\mathrm{d}T}{RT} \qquad (2)$$

$$\frac{S_T^{\circ}}{R} = b_2 + \int \left[\frac{c_p^{\circ}(T)}{RT}\right] \mathrm{d}T \qquad (3)$$

kde b_1 a b_2 sú získané integračné konštanty.

V literatúre[33–35] sa uvádza zjednodušený zápis závislosti mólovej tepelnej kapacity od teploty v tvare

$$\frac{c_p^{\circ}(T)}{R} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \qquad (4)$$

kde a_1, a_2, ... a_7 sú konštanty získané na základe experimentálnych meraní mólových tepelných kapacít pri konštantnom tlaku. Entalpia a entropia v zjednodušenom tvare je daná zápisom

$$\frac{H_T^{\circ}}{RT} = -a_1 T^{-2} + \frac{a_2 \ln T}{T} + a_3 + \frac{a_4 T}{2} + \frac{a_5 T^2}{3} + \frac{a_6 T^3}{4} + \frac{a_7 T^4}{5} + \frac{b_1}{T} \qquad (5)$$

$$\frac{S_T^{\circ}}{R} = -\frac{a_1 T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + \frac{a_5 T^2}{2} + \frac{a_6 T^3}{3} + \frac{a_7 T^4}{4} + b_2 \qquad (6)$$

Hore uvedené funkcie (*4*), (*5*) a (*6*) je možné veľmi jednoducho použiť pri praktických výpočtoch. Tieto údaje sú vhodnými algoritmami prenášané do prípravnej databázy[37].

Zdroj CAS. V súčasnej štruktúre údajov sú to CAS registry number (jednoznačný numerický identifikátor chemickej zlúčeniny, teda substancie) a jeden alebo viac názvov substancií v jazyku anglickom a slovenskom. K dispozícii sú viaceré voľne dostupné zdroje, napríklad[38–42]. Pre tieto údaje sú navrhnuté a realizované vhodné algoritmy pre ich prenos do prípravnej databázy.

Manuálny zdroj. Predstavuje spôsob doplnenia údajov, ktoré nie je možné získať automatizovaným spracovaním zo zdrojov NASA a CAS, opravy (z rôznych dôvodov) chybných údajov substancie alebo korekcie niektorých dát substancie. Realizácia manuálneho zdroja je vo forme formulára. Formulár je dostupný pre administrátora databázovej infraštruktúry webovej služby.

6. Funkcie webovej služby

Jednotlivé funkcie webovej služby poskytujú informácie o samotnej službe, názvy a identifikáciu všetkých substancií, resp. fáz, rozsah intervalu teplôt, molekulovú hmotnosť, zlučovacie teplo, hodnoty mólovej tepelnej kapacity, entalpie, entropie, hodnoty koeficientov pre vý-

Funkcia WS	Režim	Param1	Param2
Info o WS	1	lang-1(sk)/2(en)	x
Ids, Id a vzorce fáz (Ig)	2	Ig	x
Interval teplôt fázy	3	Id	x
Molekulová hmotnosť fázy	4	Id	x
Zlučovacie teplo fázy	5	Id	x
Mólová tepelná kapacita fázy Cp	6	Id	T
Entalpia fázy H	7	Id	T
Entropia fázy S	8	Id	T
Spolu Cp,H,S fázy	9	Id	T
Koeficienty a(1-7), b(1-2) fázy	10	Id	T
Všetky intervaly teplôt fázy	11	Id	x
Všetky koeficienty a(1-7), b(1-2) fázy	12	Id	x
Všetko spolu o fáze	13	Id	x
Význam chyby pri volaní WS	14	lang	err
Zoznam chýb pri volaní WS	15	lang	x
Vzorec, 1.názov, Ids a CAS substancie (Ig)	16	Ig	lang
Vzorec, 1.názov, Ids a CAS substancie (Fl)	17	Fl	lang
Vzorec, 1.názov, Ids a CAS substancie (CAS)	18	CAS	lang
Molekulová hmotnosť substancie	19	Ids	x
Ids, Id a vzorce fáz (Ids)	20	Ids	x
Entalpia a entropia premeny pri zmene fázy substancie	21	Ids	x
Všetko spolu o substancii	22	Ids	x
Gibbsova energia fázy G	23	Id	T
Ids, Id a vzorce fáz (Formula)	24	x	Formula

Obr. 3. **Funkcie webovej služby**

počet uvedených vlastností pre zadanú hodnotu teploty, všetky intervaly teplôt a hodnoty koeficientov, súhrn všetkých hodnôt danej substancie, zoznam chybových kódov webovej služby a význam konkrétneho chybového kódu. Súhrn uvedených funkcií a ich parametrov ilustruje obr. 3. Parameter *Rezim* určuje príslušnú metódu (funkciu) webovej služby. Parameter *Param1* určuje najčastejšie špecifikáciu danej substancie (*Ids*) alebo jej fázy (*Id*), môže tiež udávať skupinu substancií (*Ig*), CAS, prvé písmeno názvu alebo jazyk názvu substancie. Parameter *Param2* udáva zvyčajne hodnotu teploty (*T*) (v K), resp. číslo chyby (*err*) alebo požadovaný jazyk výstupu. U funkcií, kde nie je potrebná hodnota niektorého parametra (na obrázku indikované symbolom *x*) sa zadáva na príslušnej pozícii ľubovoľná hodnota (napr. 0).

7. Volanie webovej služby

Komunikačná (spojovacia) časť webovej služby je realizovaná na serveri omega.tuke.sk vo forme WSDL referenčného súboru služby (*TermPropService.wsdl*), ktorý špecifikuje všetky atribúty vytvorenej webovej služby potrebné pre jej volanie na strane klienta. Súčasne sa tam nachádza aj URL (Unified Resource Locator) danej webovej služby, ktorý je neskôr využitý pre vytvorenie priameho pripojenia klientskej aplikácie k webovej službe. Webová služba poskytuje klientovi jednu metódu getTermProp (string Rezim, string Param1, string Param2), návratovou hodnotou ktorej je štandardná XML štruktúra v tvare podľa hodnoty parametra *Rezim* alebo chybová štruktúra, ktorá indikuje číslo chyby a vracia zadané vstupné parametre volania služby. Tvorbu klientskej aplikácie s využitím webovej služby podporujú všetky aktuálne vývojové prostredia. Predovšetkým sú to internetové vývojové prostredia (PHP, ASP, Java, Ajax), ale rovnako aj desktopové vývojové prostredia (napr. MATLAB). V ďalšej časti uvedieme príklady volania služby v prostredí PHP a v MATLABe.

V PHP je realizácia klientskej aplikácie založená na vytvorení inštancie objektu, ktorý reprezentuje klientsku časť webovej služby. Druhým krokom je volanie potrebnej funkcie webovej služby s príslušnými hodnotami vstupných parametrov funkcie. Následne je potrebné zobraziť výstupné hodnoty webovej služby. Vytvorenie inštancie objektu má tvar

```
$urlwsdl="http://omega.tuke.sk/wsdl/TermPropService.wsdl";
$service = new SoapClient ($urlwsdl);
```

kde *$urlwsdl* udáva umiestnenie WSDL súboru webovej služby (jej URL) a *$SluzbaTemp* predstavuje inštanciu objektu pre komunikáciu s danou webovou službou. Pretože webová služba vracia ako výstupnú hodnotu XML štruktúru, najjednoduchším spôsobom jej prezentácie je priamy výpis tejto štruktúry, ktorý môže mať tvar

```
$reg = '6'; $id = '19'; $t = '300';
print $service ->getTermProp($reg,$id,$t);
```

pričom *$rez* je režim práce funkcie, *$id* je identifikácia zadanej látky a *$t* je teplota.

Vzhľad prezentácie výsledkov na obrazovke je vhodné zabezpečiť pomocou CSS súboru, v ktorom je pre každý konkrétny element výstupnej XML štruktúry webovej služby predpísaný príslušný spôsob zobrazenia (napríklad vhodnou farebnosťou jednotlivých položiek). Položky XML štruktúry, ktoré je potrebné z akýchkoľvek dôvodov nezobrazovať, je možné označiť voľbou display: none. Jednoduchosť vytvorenia klientskej aplikácie ilustruje ukážka výpočtu mólovej tepelnej kapacity (režim 6) pre CO_2 (Id=11) pre zadanú teplotu (300 K). Skript má tvar

```
<!doctype html public "-//W3C//DTD HTML 4.01 Transitional//EN"
 "http://www.w3.org/TR/REC-html401/loose.dtd">
<html><head>
 <meta http-equiv="Content-Type" content="text/html; charset=utf-8" />
 <link href="termpropchl.css" rel="stylesheet" type="text/css"/>
 <title>Príklad klienta webovej služby</title></head>
<body>
<?php
 $urlwsdl="http://omega.tuke.sk/wsdl/TermPropService.wsdl";
 $service = new SoapClient ($urlwsdl);
 $reg=6; $t = '300'; $id=11;
 print "<h4>Výpočet mólovej tepelnej kapacity CO2 pri teplote 300 K</
h4>";
 print htmlentities($service ->getTermProp($reg,$id,$t))."<br><br>";
 print "error reg  Id   T [K]
   Cp [J/(K.mol)]<br><br>";
 print $service ->getTermProp($reg,$id,$t);
?>

</body>
</html>
```

a je dostupný aj na http://omega.tuke.sk/tp/klienttermpropservice_chem_listy.php. Výstup tejto jednoduchej ukážky je znázornený na obr. 4. Riadok PHP časti, ktorý obsahuje funkciu htmlentities(...), slúži iba na zobrazenie XML štruktúry (pre tento článok), ktorá je odpoveďou webovej služby na zadanú požiadavku a teda nie je potrebné ho v skripte uvádzať. Na vizualizáciu výsledku tohto príkladu je zostavený CSS súbor podľa obr. 5. Pre tvorbu klienta v prostredí PHP je potrebná verzia 5 a vyššie. V aktuálnych distribúciách Linuxu je táto verzia už obsiahnutá.

V MATLABe je realizácia klientskej aplikácie založená v prvom kroku na vytvorení inštancie objektu obdobne ako je to v prípade PHP.

```
url = 'http://omega.tuke.sk/wsdl/TermPropService.wsdl';
createClassFromWsdl(url);
service = SluzbaTermProp;
```

Druhým krokom je volanie potrebnej funkcie webovej služby s príslušnými hodnotami vstupných parametrov funkcie

Výpočet mólovej tepelnej kapacity CO2 pri teplote 300 K


```
<?xml version="1.0" encoding="utf-8"?> <response><data><err_state>0</err_state>
<regime>6</regime><idspecies>11</idspecies><temp>300</temp>
<cp>37.219939358647</cp></data></response>
```


error	reg	Id	T [K]	Cp [J/(K.mol)]
0	6	11	300	37.219939358647

Obr. 4. **Výsledok príkladu klienta webovej služby - PHP**

```
$reg = '6'; $id = '11'; $t = '300';
result = getTermProp(service,reg,id,t);
```

Pretože webová služba vracia ako výstupnú hodnotu XML štruktúru, jej priamy výpis je jednoduchým spôsobom jej prezentácie v tvare disp(result);

Pre ďalšie použitie číselných hodnôt je potrebné štruktúru XML uloženú v premennej *result* ako pole znakov previesť na číselné hodnoty. V súvislosti s tým je potrebné do štruktúry vložiť počiatočnú a koncovú značku container. Následne previesť pole znakov do štruktúry v premennej *xmlR* pomocou funkcie xml_parse a nakoniec previesť príslušnú položku na číslo podľa nasledujúceho kódu

```
result=strcat('<container>',getTermProp(service,reg,id,t),'</
container>');
xmlR = xml_parse(result);
A = {xmlR(1,1).response.data.heat_of_formation};
X = str2double(A);
```

Pre tvorbu klienta je potrebný MATLAB od verzie 7.0.1. V prípade práce s XML štruktúrou je potrebná voľne dostupná knižnica funkcií „xml toolbox“.

Postup vytvorenia klientskej aplikácie ilustruje ukážka výpočtu mólovej tepelnej kapacity (režim 6) pre CO_2 (Id=11) pre zadanú teplotu (300 K). Skript má tvar

```
 RE = '6';   % Molar heat capacity of phase
 P1 = '11';  % Id of phase: CO2
 P2 = '300'; % Temperature
% Create a class for the web service
 URL = 'http://omega.tuke.sk/wsdl/TermPropService.wsdl';
 createClassFromWsdl(URL);
% Instantiate the object
 SERVICE = TermPropService;
 disp(['Výpočet mólovej tepelnej kapacity CO2 pri teplote 300 K']);
 RESULT = getTermProp(SERVICE,RE,P1,P2)
 RESULT = strcat('<container>',RESULT,'</container>');
% Parse XML to Matlab structure using "XML toolbox" for Matlab
% http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/4278-xml-
toolbox
 XMLR = xml_parse(RESULT);
% Data display
 err = {XMLR.response.data.err_state};
 reg = {XMLR.response.data.regime};
 ids = {XMLR.response.data.idspecies};
 tem = {XMLR.response.data.temp};
 Cp  = {XMLR.response.data.cp};

 disp(['   error  reg    Id     T [K]    Cp [J/(mol.K)]']);
 disp([err reg ids tem Cp]);
```

```
body {
  font-family: Arial, Helvetica, sans-serif;
  font-size: small;
  background-color: #fffccc;
}
regime {
  color: rgb(204,51,51);
  background-color: #fffccc;
  padding: 5px;
  border: #000099 1px solid;
/*  display: none; */
}
idspecies {
  background-color: #99ccff;
  padding: 5px;
  border: #000099 1px solid;
}
temp {
  background-color: rgb(255,204,102);
  padding: 5px;
  border: #000099 1px solid;
}
c {
  background-color: #00e040;
  padding: 5px 10px 5px 10px;
  border: #000099 1px solid;
} err_state {
/*  visibility: hidden; */
/*  display: none; */
  background-color: rgb(255,0,1);
  padding: 5px 10px 5px 10px;
  border: #000099 1px solid;
}
```

Obr. 5. **Príklad CSS súboru**

Výstup tejto ukážky znázorňuje obr. 6. Ďalšia ukážka je komplexnejšia, pomocou webovej služby získa výpočtové koeficienty a_1 až a_7 a b_1, b_2 a s využitím uvedených koeficientov vypočíta priebeh mólovej tepelnej kapacity pre CO_2 v rozsahu teplôt 200 až 1000 K. Nakoniec je vypočítaný priebeh znázornený vo forme grafu podľa obr. 7. Úplný zdrojový kód tejto druhej ukážky je dostupný na

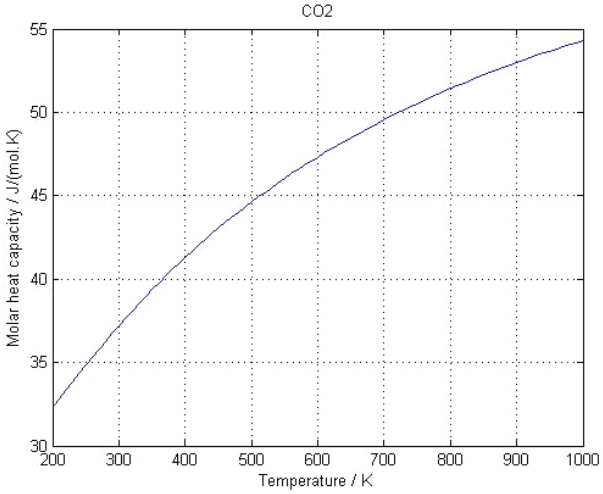
```
Command Window
Výpočet mólovej tepelnej kapacity CO2 pri teplote 300 K
RESULT =

<?xml version="1.0" encoding="utf-8"?>
<response><data><err state>0</err state>
<regime>6</regime><idspecies>11</idspecies>
<temp>300</temp><cp>37.219939358647</cp></data></response>


    error  reg     Id      T [K]     Cp [J/(mol.K)]
    '0'    '6'    '11'    '300'    '37.219939358647'

>> |
```

Obr. 6. **Výsledok príkladu klienta webovej služby - MATLAB**



Obr. 7. **Priebeh mólovej tepelnej kapacity - MATLAB**

Kód chyby	Význam chyby
0	Pripojenie na MySQL server zlyhalo
2	Neexistujúci režim WS
3	Neexistujúca identifikácia substancie (Ids)
4	Neexistujúca identifikácia fázy (Id)
5	Neexistujúca identifikácia skupiny (Ig)
6	Neexistujúca identifikácia jazyka (lang)
7	Neexistujúca identifikácia chyby (err)
8	Teplota mimo prípustný interval
9	MySQL_query zlyhalo - chyba v SQL príkaze (;!)
10	Neexistujúca identifikácia chyby (err) a jazyka (lang)
11	Neexistujúca identifikácia skupiny (Ig) a jazyka (lang)
12	Neexistujúci prvý znak (Fl) 1. názvu substancie
13	Neexistujúca identifikácia substancie (CAS)

Obr. 8. **Zoznam chybových stavov webovej služby**

adrese http://omega.tuke.sk/tp/matlab_plot.jpg. Využitie koeficientov v podobe priebehu funkcie je ilustračné a koeficienty je možné využiť aj pre ďalšie výpočty v prostredí MATLAB.

8. Výstup a chybové stavy webovej služby

Výstupom webovej služby je štandardná XML štruktúra v tvare podľa hodnoty parametra *Rezim* alebo chybová štruktúra, ktorá indikuje číslo chyby a vracia zadané vstupné parametre volania služby. Každá štruktúra je ohraničená formátom

<?xml version="1.0"?><response><data><err_state>E</err_state><xxx></data></response>

pričom hodnota E=0 znamená štandardnú štruktúru, ktorá obsahuje jednu alebo viacej viet v závislosti na hodnote parametra *Rezim*. Hodnota E=1 znamená chybovú štruktúru s bližšou špecifikáciou chyby – opis všetkých troch vstupných parametrov volania služby a kód chyby, ku ktorej došlo. Pre hodnoty $rez = '6'; $id = '8'; $t = '500'; má časť výstupnej štruktúry <xxx> tvar

<regime>6</regime><idspecies>8</idspecies><temp>500</temp><c>63.528200797674</c>

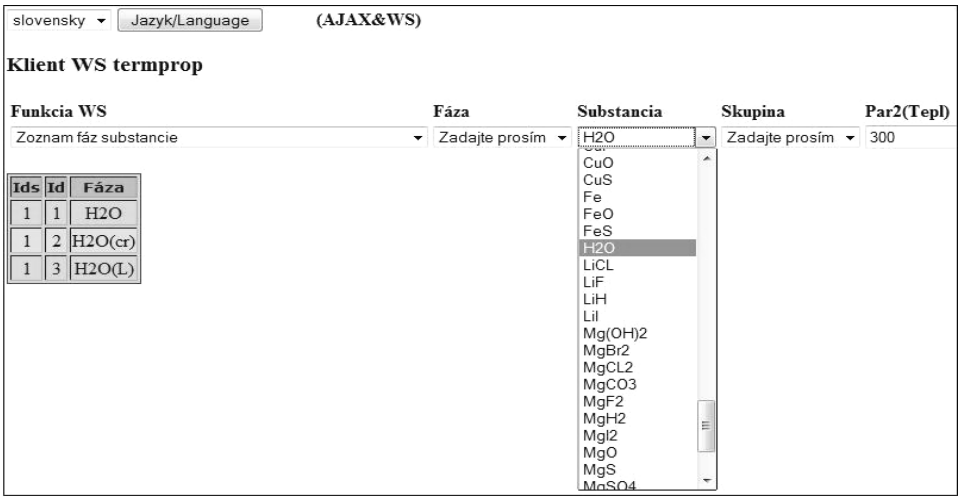
Ukážky príkladov výstupných XML štruktúr jednotlivých režimov webovej služby aj chybovej štruktúry sú uvedené v tabuľke, ktorá je umiestnená na webe (http://omega.tuke.sk/tp/Formaty_XML_struktur_ws.pdf)

Chybové stavy sú výsledkom kontroly vstupných parametrov WS alebo realizácie jednotlivých režimov WS. Centralizovaný spôsob kontroly vstupných parametrov webovej služby si vyžiadal vhodné riešenie ošetrenia chybových stavov na strane servera služby a ich odosielanie na stranu klienta. Signalizácia chybového stavu klientovi je realizovaná tzv. chybovou XML štruktúrou (na rozdiel od normálnej návratovej štruktúry s výsledkami služby). Zoznam realizovaných a ošetrovaných chybových stavov (spolu je ich 13) ilustruje obr. 8. Prevažná časť týchto chybových stavov (kódy 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 11) vzniká priamo na úrovni kontroly vstupných parametrov služby. Ostatné chybové stavy (kódy 0, 8, 12, 13) vznikajú počas riešenia jednotlivých režimov služby nad jej databázovou infraštruktúrou.

9. Prezentácia a využitie webovej služby

Pre účely prezentácie webovej služby je zostavená webová aplikácia s využitím Ajax technológie, ktorá umožňuje voľbu režimu a určenie dvoch vstupných parametrov pre volanie webovej služby (v zmysle funkcií služby na obr. 3). Aplikácia je umiestnená na adrese http://omega.tuke.sk/tp/klienttermprop.php. V súčasnosti je v rámci databázovej infraštruktúry služby k dispozícii 106 substancií a 274 ich fáz, pričom priebežne prebiehajú práce na ich doplňovaní. Ukážka formulára webovej aplikácie spolu s výsledkom je na obr. 9.

Zostavená webová služba poskytuje široké možnosti využitia v zmysle uvedených čiastkových funkcií. Služba môže poskytovať priebežne potrebné výsledky výpočtov, inokedy je vhodnejšie prostredníctvom služby získať potrebné výpočtové koeficienty do (typicky desktopovej) aplikácie a samotné výpočty potom riešiť v danej aplikácii. Služba môže byť využitá priamo ako súčasť klientskej aplikácie v rôznych sieťových aj desktopových prostrediach (napr. PHP, Ajax, ASP, MATLAB, Java, Perl, Octave), tiež ale môže byť využívaná ako súčasť inej webovej služby. Služba v závislosti na zadanom režime poskytuje výstup v rozsahu jedného reťazca (alebo čísla) až po komplexnú štruktúru viacerých viet (podľa http://omega.tuke.sk/tp/Formaty_XML_struktur_ws.pdf). Pre ilustráciu spomenieme niektoré možné oblasti využitia – modelovanie procesov, kde sa vyskytuje ohrev, chladnutie,



Obr. 9. **Formulár webovej aplikácie**

fázová premena, chemická reakcia, a ostatné výpočty, v ktorých sú potrebné termochemické vlastnosti substancií.

10. Záver

Webová služba poskytuje jednotný zdroj termochemických vlastností a výpočtov pre potreby matematického modelovania procesov, kde sú potrebné termochemické vlastnosti substancií. Za významný prínos riešenia je možné označiť skutočnosť, že využívanie webovej služby, či už v režime online alebo offline, odstraňuje rozdielnosť termochemických údajov pochádzajúcich z rôznych zdrojov a prameňov, čo môže viesť pri výpočtoch k nežiaducim diferenciám. Ďalšou výhodou navrhnutého riešenia je centrálna administrácia jednotlivých údajov na jednom webovom serveri a komponentový charakter služby, čo umožní jej priame zakomponovanie do výslednej klientskej aplikácie v oblasti termochemických výpočtov, ktoré sa využívajú pri modelovaní a simuláciách ako aj riadení procesov. Nezanedbateľným prínosom je tiež využívanie tejto webovej služby pre pedagogické účely tak v priamej výučbe, ako aj v samostatnej práci a tiež v záverečných prácach.

Táto práca vznikla s podporou grantov VEGA č. 1/0746/11, 1/2578/12, 1/0729/12 a bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0482-11.

Použité skratky

Ajax	Asynchronous JavaScript and XML
ASP	Active Server Pages
CAS	Chemical Abstracts Service
CEA	Chemical Equilibrium with Applications
CSS	Cascading Style Sheet
JANAF	Joint-Army-Navy-Air Force
NASA	National Aeronautics and Space Administration
NIST	National Institute of Standards and Technology
PAC	Properties and Coefficients
PHP	PHP: Hypertext Preprocessor
QoS	Quality of Service
SOA	Service Oriented Architecture
URL	Unified Resource Locator
WS	Web Service
WSDL	Web Services Description Language
XML	eXtended Markup Language

LITERATÚRA

1. seekda! *Web Services Search Engine @seekda.com.* [online] Innsbruck; Austria, 2009. cited [19.9.2011]. available from <http://webservices.seekda.com/>.
2. Bhattacharjee S.: *An Object Oriented Approach to Computational Thermodynamics. MME Symposium Series.* [online] 2. October 2008. [cited 9.9.2009]. available from <http://www.mme.wsu.edu/symposia/symposia_08-09/bhattacharjee.pdf>.
3. Horovčák P., Dorčák Ľ.: Creating Web Services with Axis. *Proceedings of 5th International Carpathian Control Conference.* 2004, Zv. I, str. 409-414.
4. Ghiorso M. S., Kress V. C.: *CTserver Web Services.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://ctserver.ofm-research.org/webservices.html>.
5. Barin I.: *Thermochemical Data of Pure Substances.* str. 1356. VCH, Weinheim 1993.
6. McBride B. J., Zehe M. J., Gordon S.: *NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species. NASA TP–2002-211556.* [online] 2002. cited [10.6.2011]. available from <http://www.archive.org/details/nasa_techdoc_20020085330>.

7. Komorová Ľ., Imriš I.: *Termodynamika v hutníctve.* Str. 296. Alfa, Bratislava 1992.
8. Chase M. W., a iní: *JANAF Thermochemical Tables, 1974 Supplement.* [online] Midland, Michigan 48640 : Thermal Research, The Dow Chemical Company, 1974. cited [19.9.2011]. available from <http://www.nist.gov/data/PDFfiles/jpcrd50.pdf>.
9. Hlubuček V., FYDEX – fyzikální data látek do EXCELu. *Chemagazin.* 2011, Zv. XXI, 3, s. 32 - 33. available from chemagazin_2010/file/CHEMAGAZIN_XXI_3_cl12.pdf>.
10. Bhattacharjee, S. *The Expert System for Thermodynamics.* [online] 2011. available from <http://www.ulb.ac.be/sma/testcenter/, http://www.thermofluids.net/>.
11. *TEST, The Expert System for Thermodynamics.* [online] San Diego State University, 2003. cited [19.9.2011]. available from <http://thermo.sdsu.edu/testhome/booksite/paperByBhattacharjee.pdf>.
12. Zehe M. J.: *Chemical Equilibrium with Applications.* [online] s.l. : NASA Glenn research center, 2006. cited [10.6.2011]. available from <http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/ceaThermoBuild.htm>.
13. NIST. *NIST-JANAF Thermochemical Tables.* [online] 2000. cited [19.9.2011]. available from <http://kinetics.nist.gov/janaf/>.
14. The Physical and Theoretical Chemistry Laboratory Oxford University. *Chemical and Other Safety Information.* [online] cited [5.2.2010]. available from <http://msds.chem.ox.ac.uk/>.
15. Roine A.: *HSC – Chemistry 7.* [online] s.l. : Outotec Research Oy. [cited 19.9.2011]. available from <http://www.hsc-chemistry.com/>.
16. Dinsdale A. T.: *SGTE – Scientific Group Data Europe.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://www.sgte.org/>.
17. Bale C. W.: *FactSage – CRCT – ThermFact Inc. and GTT Technologies.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://www.factsage.com/>.
18. Davies R. H., a iní: *The NPL Software tool for the calculation of phase equilibria and thermodynamic properties.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://www.npl.co.uk/upload/pdf/mtdata_calphad_paper.pdf>.
19. Ghiorso M. S., Kress V. C.: *CTserver Home Page.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://ctserver.ofm-research.org/index.html>.
20. Ghiorso M. S., Sack R. O.: *MELTS Home Page.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://melts.ofm-research.org/>.
21. Ghiorso M. S., Hirschmann M. M.: *LEPR - Library of Experimental Phase Relations.* [online] cited [19.9.2011]. available from <http://lepr.ofm-research.org/YUI/index.php>.
22. Erl T.: *Servisně orientovaná architektura SOA, kompletní průvodce.* Computer Press, Brno 2009.
23. Barry D. K.: *Service-oriented architecture (SOA) definition.* [online] s.l. : Barry & Associates, Inc., 2011. cited [10.6.2011]. available from <http://www.service-architecture.com/web-services/articles/service-oriented_architecture_soa_definition.html>.
24. SearchSOA.com. *Definition service-oriented architecture (SOA).* [online] 2003. cited [10.6.2011]. available from <http://searchsoa.techtarget.com/definition/service-oriented-architecture>.
25. TechTerms.com The Tech Terms Computer Dictionary. *SOA.* [online] 2011. cited [10.6.2011]. available from <http://www.techterms.com/definition/soa>.
26. Erl T.: *What is SOA? An Introduction to the Service-Oriented Computing.* [online] 2011. cited [10.6.2011]. available from <http://www.whatissoa.com/>.
27. *What is SOA? An Introduction to the Service-Oriented Computing. Goals and Benefits of Service-Oriented Computing.* [online] 2011a. cited [10.6.2011]. available from <http://www.whatissoa.com/p16.php>.
28. *Principles of Service-Orientation.* [online] 2006. cited [10.6.2011]. available from <http://searchsoa.techtarget.com/tip/The-principles-of-service-orientation-part-6-of-6-Principle-interrelationships-and-service-layers>.
29. CAS A division of the American Chemical Society. *CAS REGISTRYSM and CAS Registry Numbers.* [online] [cited 5.2.2010]. available from <http://www.cas.org/expertise/cascontent/registry/regsys.html>.
30. Liley P. E.: *2000 Solved Problems in Mechanical Engineering Thermodynamics.* McGraw-Hill, New York 1989.
31. Molnár F., et al.: *Príručka pre výpočty z chemickej termodynamiky.* Alfa, Bratislava 1977.
32. Surový J.: *Chemickoinžinierska termodynamika.* Bratislava, 1991.
33. McBride B. J., Gordon S., Reno M. A.: *Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species.* 1993. NASA TM–4513.
34. *Thermodynamic Data for Fifty Reference Elements.* 2001. NASA TP–3287-REV1.
35. Brizuela E. A.: Computing Mixture Temperature from Enthalpy Using NASA Polynomials. *IFRF Combustion Journal.* Communication No 200001, October 2000.
36. Burcat A.: *Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion.* s.l. : Technion-Israel Institute of Technology, 2001. TAE 867.
37. Sabo M.: *Bakalárska práca*. str. 44. Technická univerzita v Košiciach 2010.
38. American Chemical Society. *CAS REGISTRYSM and CAS Registry Numbers.* [online] 2010. cited [6.9.2010]. available from <http://www.cas.org/expertise/cascontent/registry/regsys.html>.
39. NIST. *National Institute of Standards and Technology.* [online] 2009. cited [3.9.2010]. available from <http://www.nist.gov/>.

40. *NIST WebBook Chemistry.* [online] 2008. cited [3.9.2010]. available from <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.
41. Nicklaus M. C.: *CADD Group Chemoinformatics Tools and User Services.* [online] s.l. : e Computer-Aided Drug Design (CADD) Group of the Chemical Biology Laboratory (CBL), 16. 08 2010. cited [3.9.2010]. available from <http://cactvs.cit.nih.gov/>.
42. Cartwright H. M.: *Chemical and Other Safety Information from the Physical Chemistry Laboratory, Oxford University.* [online] 2010. cited [6.9.2010]. available from <http://msds.chem.ox.ac.uk/#MSDS>.

P. Horovčák and J. Terpák *(Institute of Control and Informatization of Production Processe, Faculty of Mining, Ecology, Process Control and Geotechnology, Technical University, Košice, Slovakia):* **Thermochemical Properties of Substances on Web**

Providing and utilization of web information on thermochemical data is described. Currently available thermochemical data such as heat of formation and coefficients for molar heat capacity, enthalpy and entropy calculation are analyzed. Their sources are NASA polynomials, Chemical Abstracts and literature data. The web service has a number of particular functions, which can be used in various client environments. It is available at http://omega.tuke.sk/wsdl/TermPropService.wsdl. For presentation web applications were created that enable the regime selection and specification of input parameters for the web service (http://omega.tuke.sk/tp/klienttermprop.php). Some other possibilities of the web service utilization are mentioned.

NanoOstrava Meeting 2013

VŠB – Technical University of Ostrava, Czech Republic
17*th* – 20*th* June, 2013

3rd international conference NOM2013 will take place traditionally in VŠB-TUO campus organized by CNT VŠB-TUO and UGN AS CR. The meeting opens discussion between scientists, students and representatives from companies with interest in nanomaterials and nanotechnology. Invited lectures will be preseted by dr. J. Madejová, dr. B. Dragnea, dr. X. Xie and other.

Important Dates:

submission	15th May, 2013
early-bird payment	30th April, 2013
last date for registration	20th May, 2013
conference paper submission	20th June, 2013

Conference Topics:
1. Tools for preparation and characterization of nanomaterials
2. Nanomaterials and their properties
3. Nanotechnology for environment
4. Advances in nanomaterial technologies
5. Nanomaterials of clay minerals and zeolites
6. Education in Nanotechnology
7. Nanobusiness and commercialization of nanomaterials

Contact:
Karla Čech Barabaszová, VŠB-Technical University of Ostrava, Nanotechnology Centre, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic, karla.barabaszova@vsb.cz, +420 597 321 572

http://www.nanoostrava.cz