

Realisierung eines XML-Workflows von der Datenhaltung bis zur Visualisierung

Projekt zur Demonstration des Zusammenwirkens von Web-Technologien

von Dr. rer. nat. Thomas Meinike / Studiengang Kommunikation und Technische Dokumentation (KTD)
Geusaer Straße, 06217 Merseburg, Tel.: 03461/463055, E-Mail: thomas.meinike@et.fh-merseburg.de

Projektziel:

Die Extensible Markup Language (XML) ist eine der Kerntechnologien des Informationszeitalters. XML ermöglicht die strukturierte Erfassung beliebiger Daten. Ihre Verarbeitung mit IT-Systemen erfordert grundlegende Kenntnisse der überwiegend vom W3C etablierten Spezifikationen, Basiswissen im Bereich Web-Programmierung und Erfahrungen mit Client-Server-Anwendungen.

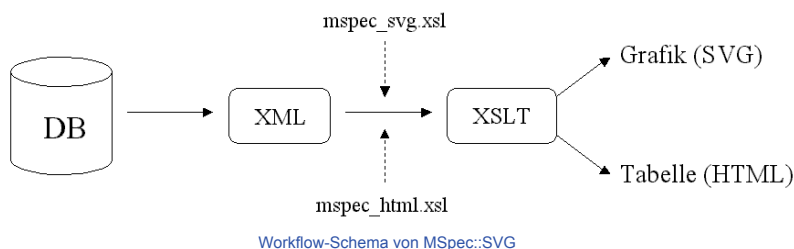
Zur Veranschaulichung von prinzipiellen Abläufen bei der Verarbeitung von XML-Daten wurde vom Autor die Anwendung **MSpec::SVG** konzipiert und realisiert [1].

Überblick:

In der chemischen Analytik werden u. a. so genannte Massenspektren zur Identifizierung von Substanzen eingesetzt. Umfangreiches Datenmaterial mit den Referenzspektren reiner Stoffe liegen in Form von tabellarisierten Datensätzen vor. Mit Unterstützung von Frau Dr. Wohlfarth vom Fachbereich Chemie- und Umweltingenieurwesen wurde eine MySQL-Datenbank mit mehr als 50.000 Datensätzen gefüllt. Diese Datensätze enthalten die Massenzahlen und prozentualen Intensitäten der bei einer Analyse durch Ionisation entstehenden Bruchstücke.

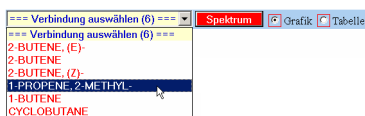
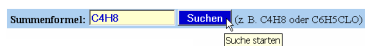
Über eine Suchmaske können im Web-Browser komfortabel Anfragen an die Datenbank gestellt werden. Zu einer Summenformel wie C₄H₈ werden zunächst alle passenden Verbindungsamen in einer Auswahlliste angezeigt. Nach der Auswahl einer konkreten Verbindung wird der zugehörige Datensatz ermittelt und in eine temporäre XML-Struktur überführt.

Praktische Umsetzung:

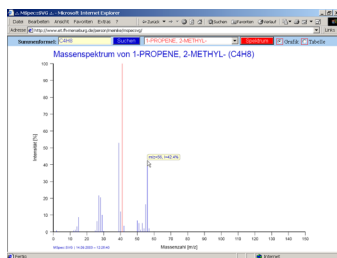


Ein XSLT-Prozessor (Sablotron) wandelt die Daten wahlweise in ebenfalls XML-basierte Vektorgrafiken (Scalable Vector Graphics, SVG) oder eine (X)HTML-Tabelle um. Dazu wurden XSL-Stylesheets entwickelt.

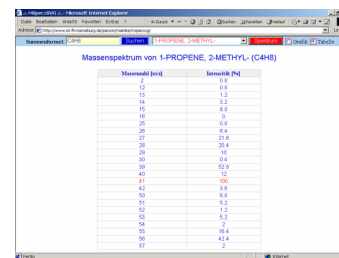
Als Applikationssprache kommt PHP auf einem Apache-Webserver unter Linux zum Einsatz. Die Darstellung wird zusätzlich durch Cascading Stylesheets (CSS) und JavaScript-Routinen beeinflusst.



Suchmaske für die Abfrage chemischer Verbindungen



Ausgabe eines Massenspektrums als Grafik (SVG)



Massenzahl (amu)	Intensität (%)
2	0,0
12	0,0
14	1,2
16	2,2
18	0,0
20	0,0
22	0,0
24	0,0
26	0,0
28	20,0
30	10,0
32	0,0
34	0,0
36	0,0
38	0,0
40	0,0
42	100,0
44	0,0
46	0,0
48	0,0
50	0,0
52	1,2
54	2,2
56	0,0
58	0,0
60	0,0
62	0,0

Ausgabe der Spektrumdaten als (X)HTML-Tabelle

Fazit:

Im Lehrbetrieb hat sich die Arbeit an diesem Projekt bereits ausgezahlt. Studierende der Technischen Dokumentation werden zur tieferen Beschäftigung mit Web-Technologien angeregt und angehende Chemieingenieure können die Anwendung im Rahmen von Praktika zur chemischen Analytik ebenfalls nutzen. Eine auf zwei suchbare Summenformeln eingeschränkte Version ist online verfügbar [2].

Referenzen:

[1] T. Meinike: Technologie-Mix, XML & Web Services Magazin 2.02, S. 68-72.

[2] MSpec::SVG online: <http://www.et.fh-merseburg.de/person/meinike/mspecsvg/>

