

## Разработка базы данных по свойствам гуминовых кислот торфов

<sup>1</sup>Завацкая Е. С., <sup>1</sup>Соколова И. В., <sup>1</sup>Горчаков Л. В., <sup>2</sup>Гостищева М.В.

<sup>1</sup>Томский государственный университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36,  
[sokolova@phys.tsu.ru](mailto:sokolova@phys.tsu.ru)

<sup>2</sup>Томский государственный педагогический университет, 634041, г. Томск, пр.  
Комсомольский, 75, [mariagos@yandex.ru](mailto:mariagos@yandex.ru)

*Торф, как полезное ископаемое, относящееся к каустобиолитам, характеризуется в своем составе широким разнообразием гуминовых кислот. Наибольшими запасами торфа располагает Западная Сибирь, и в том числе Томская область обладает уникальными торфяными запасами. Гуминовые кислоты (ГК), являясь важнейшей составной частью торфов разного состава, оказывают неодинаковое влияние на природные экосистемы биосферы. Уделяется большое внимание изучению состава и структурных параметров ГК различными методами (ЭПР, ЯМР и др.), но многочисленные разрозненные данные совершенно не систематизированы. Создание базы данных (БД) свойств и структуры ГК каустобиолитов разного генезиса позволит проводить многофакторный анализ, моделирование и прогнозирование состава вновь разрабатываемых препаратов на основе ГК. Проект направлен на создание условий для решения фундаментальной проблемы – исследованию роли ГК в биосфере и прогнозированию получения на их основе новых препаратов для использования в медицине и ветеринарии. Создание БД свойств, структуры и функций ГК позволит обеспечить необходимую информационную поддержку на протяжении всего периода фундаментальных исследований, а также решение оптимизационных задач по выбору параметров свойств ГК.*

### Введение

Томская область в качестве основного сырьевого ресурса имеет богатые залежи торфов. Торф может служить источником сырья для различных отраслей народного хозяйства (сельское хозяйство, биотехнологии, медицина, химическая промышленность, пищевая промышленность). В настоящее время он используется плохо, в основном в виде топлива как источник тепла. Трудности в использовании торфов и сырья получаемого из них связаны с плохой классификацией торфов и их свойств. Гуминовые кислоты (ГК)- это сложные смеси устойчивых к биодеструкции высокомолекулярных темноокрашенных органических соединений природного происхождения, образующихся при разложении растительных и животных остатков под действием микроорганизмов и абиотических факторов среды являются важнейшей составной частью торфов разного состава [1]. Гуминовые вещества (ГВ) представляют собой макрокомпоненту органического вещества почвенных и водных экосистем, а также твердых горючих ископаемых. Их содержание в почвах и водах составляет 60-80% от общего органического вещества, в торфах и углях оно колеблется от 20 до 90 %. Общепринятая классификация ГВ основана на различии в растворимости в кислотах и щелочах. Согласно этой классификации ГВ подразделяют на три составляющие: гумин – не извлекаемый остаток, нерастворимый ни в щелочах, ни в кислотах; гуминовые кислоты (ГК) - фракция ГВ, растворимая в щелочах и нерастворимая в кислотах; фульвокислоты (ФК) - фракция ГВ, растворимая и в щелочах, и в кислотах. В качестве обобщающего названия, обозначающего как гуминовые, так и фульвокислоты, применяют термин "гумусовые кислоты". Гумусовые кислоты являются наиболее подвижной и реакционно способной компонентой ГВ, активно участвующей в химических процессах, протекающих в экосистемах [2].

### Функции гуминовых кислот в биосфере

ГВ в биосфере выполняют ряд разнообразных функций: аккумулятивная функция - характерна особенно для ГК и гумина. Сущность этой функции заключается в накоплении в форме ГВ важнейших элементов питания живых организмов; транспортная функция -

способность ГВ образовывать устойчивые, но растворимые и способные к геохимической миграции соединения; регуляторная функция - способность ГВ принимать участие в регулировании практически всех важнейших почвенных свойств; протекторная функция - ГВ в почве защищают или сохраняют почвенную биоту, растительный покров в случае возникновения различного рода неблагоприятных экстремальных ситуаций; физиологическая функция - ГК являются носителями незаменимых аминокислот, некоторых витаминов, антибиотиков.

В силу сложности строения, уникально широк спектр взаимодействий, в которые могут вступать ГВ и, в особенности, их наиболее реакционноспособная часть - гумусовые кислоты. Наличие таких групп как карбоксильная, гидроксильная, карбонильная в сочетании с присутствием ароматических структур обеспечивает способность гумусовых кислот вступать в ионные и донорно-акцепторные взаимодействия, образовывать водородные связи, активно участвовать в сорбционных процессах. Так, гумусовые кислоты хорошо связывают воду, способны к ионному обмену, образуют комплексы с металлами и аддукты с различными классами органических соединений [3].

Обладая указанными свойствами, гумусовые кислоты выполняют целый набор важных биосферных функций. К их числу относятся структурирование почвы, накопление питательных элементов и микроэлементов в доступной для растений форме, регулирование геохимических потоков металлов в водных и почвенных экосистемах. К концу двадцатого века, одной из основных проблем которого является химическое загрязнение окружающей среды, добавилась еще и протекторная функция. Под протекторным действием гумусовых кислот подразумевают их способность связывать в прочные комплексы, как ионы металлов, так и органические экотоксиканты в загрязненных водных и почвенных средах. Экологические последствия такого связывания - изменение форм существования экотоксикантов и их миграционной способности уменьшение биодоступности и токсичности. Последнее обстоятельство весьма важно и связано с тем, что максимальной активностью обладает свободная форма токсиканта. Связанное вещество свою токсичность теряет. На этом основании гумусовые кислоты можно рассматривать как природные детоксиканты [4].

Сложность строения и многообразие функций ГК обуславливают применение всех доступных методов для изучения их структуры, в том числе наиболее информативного – спектроскопии ЯМР, а так же титрометрического и деструктивного анализов, спектроскопии ПМР, ИК- спектроскопии, ЭПР -спектроскопии, молекулярно-массового распределения.

#### Разработка базы данных по свойствам гуминовых кислот

Накоплено большое количество данных по ГК, которые требуют систематизации, поэтому возникла необходимость в создании баз данных. Современный мир информационных технологий трудно представить себе без использования баз данных [5]. Базы данных (БД) по свойствам веществ и материалов существуют во всех промышленно развитых странах [6-8]. Практически все такие системы в той или иной степени связаны с функциями долговременного хранения и обработки информации. Фактически информация становится фактором, определяющим эффективность любой сферы деятельности. Увеличились информационные потоки и повысились требования к скорости обработки данных, и теперь уже большинство операций не может быть выполнено вручную, они требуют применения наиболее перспективных компьютерных технологий.

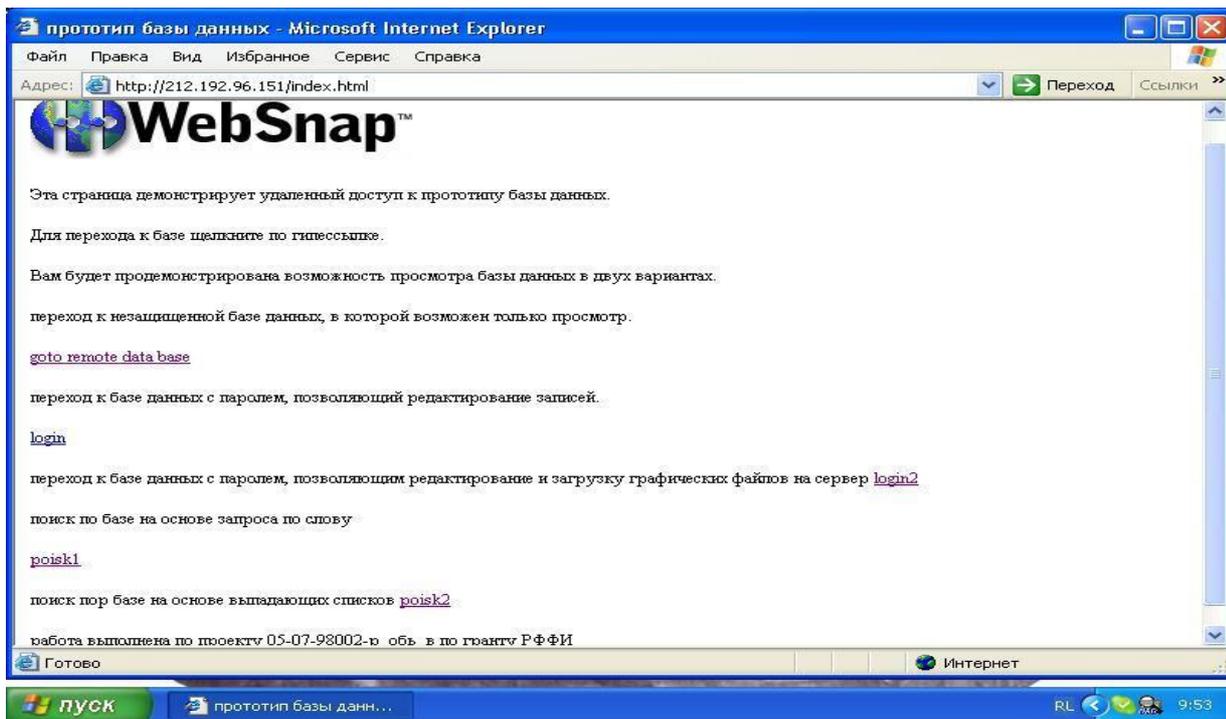
Для создания базы данных использована клиент-серверная архитектура. Доступ к базе данных реализован через браузер с любого компьютера, подключенного в сеть Интернет. База данных создана с помощью объектно-ориентированного языка программирования Delphi 7 [9]. В основу базы заложена популярная система управления базами данных «Paradox». Пользовательский интерфейс реализован с помощью Web snar технологии [10]. Для создания серверных приложений использован CGI- интерфейс. В качестве операционной системы использована оболочка Windows XP, в качестве сервера - персональный сервер IIS 5.0. Это

позволит устанавливать базу на любом из компьютеров в сети и эксплуатировать ее без привлечения системных администраторов. База данных доступна через браузер IE в двух режимах - для просмотра и для редактирования. Для разделения этих режимов использована парольная аутентификация пользователя и авторизация по правам доступа. Последняя позволяет скрыть от пользователя, не имеющего соответствующих прав доступа, закладки для редактирования базы данных. Поэтому такой пользователь даже и не будет знать о такой возможности [11].

В течение этого года проводилась работа по модернизации страницы доступа к базе данных. Модернизация состояла в организации двух вариантов запросов к базе данных.

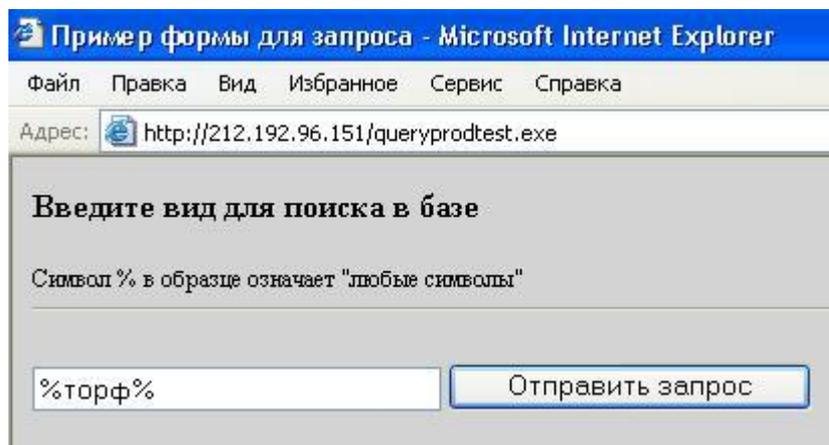
Запросы позволяют не перемещать по сети все содержимое базы, а выполнить на сервере выборку из базы и результаты выборки отправить пользователю. Основная трудность состояла в переходе от компонент Table к компонентам Query. В литературе по базам данных все примеры в основном даются по Table, а относительно работы с Query констатируется, что с ними работают аналогично. Однако реальные эксперименты с компонентами показали, что есть существенные отличия. Основное отличие состоит в том, что работа компонент Query оказалась зависящей от типа сервера. Тестовые образцы программ безукоризненно работали под операционной системой Windows 98 и сервером PWS, но отказывались работать под операционной системой Windows XP и сервером IIS 5.1. При попытке обращения через IE с запросом к базе фиксировалась ошибка 500 и отказ в доступе. Попытки выяснить причины в различных форумах и путем изучения доступной литературы не давали результата. Продолжительное изучение вопроса путем поиска в сети Интернет позволило локализовать причину - повышенные меры безопасности в новых операционных системах. Строгие меры безопасности препятствуют работе запросов к базе данных. Получается некий парадокс- всю базу позволительно перекачивать и просматривать по Интернет, а вот выполнение выборки запрещено. В общем, все свелось к тщательному прописыванию прав доступа в трех системах - сервере IIS, NTFS-системе и браузере IE. Для выполнения некоторых программ пришлось предоставить полные права пользователям IUSR\_, IWAM\_ на диск C:. Кроме этого пришлось переместить базы в те каталоги, которые оказались доступными для IIS. В целом вид стартовой страницы доступа к базе данных представлен на рисунке. Переход на выполнение конкретного типа операций с базой данных совершается по гиперссылке. На настоящее время не удалось реализовать общее управление заданиями на основании технологии Web Snap, поэтому представлен гибрид из двух технологий-WebSnap и WebBroker. Проблема объединения этих двух технологий состоит в том, что попытка обработки действий внутри страниц, не удается то ли из-за принципиальной невозможности этого, то ли из-за отсутствия толкового примера, как это сделать. В принципе можно обойти это путем использования общего меню, пример которого дан в примере BrokDemo и запрос к базе на основе выпадающих полей [12]. Запрос к базе по одному слову реализован на основе примера Queryprodtest[13].

Рис. 1. Основная страница БД.



При выборе ссылки `poisk1` вызывается сценарий поиска по базе запроса по одному слову из типа торфа. Вид страницы показан на рисунке 2.

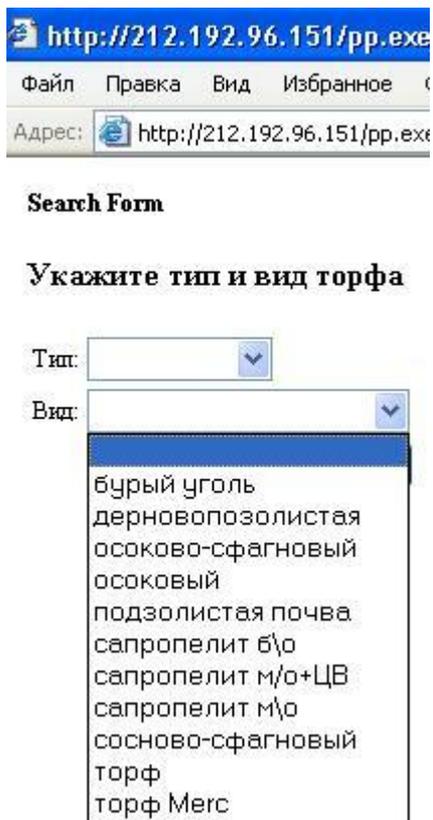
Рис. 2. Пример выдачи формы для запроса.



Результат запроса представляется в виде таблицы с необходимыми для анализа полями.

При выборе ссылки `poisk2` вызывается сценарий поиска по базе на основе двух слов из полей тип и вид, причем возможные слова представляются путем двух выпадающих списков. Вид страницы запроса представлен на рисунке 3.

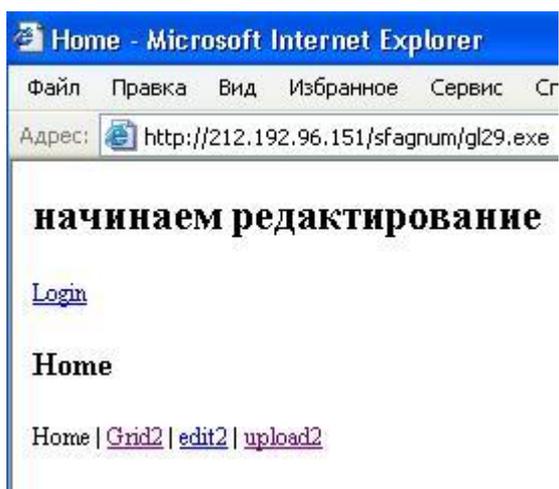
Рис. 3. Экранная форма вида запроса страницы.



В данном случае показан выбор только одного из двух типов полей. В принципе данный подход может быть обобщен на любое число полей и их логические связи.

Отдельно представлена возможность для работы администратора с базой данных. Поскольку база позволяет работать с графическими данными не только в режиме просмотра их, но и в режимах редактирования и загрузки, данный режим позволяет выполнять эти операции пользователю, имеющему права администратора базы. Вид страницы, позволяющей выполнение таких операций, представлен на рисунке 4.

Рис. 4. Вид страницы для редактирования.

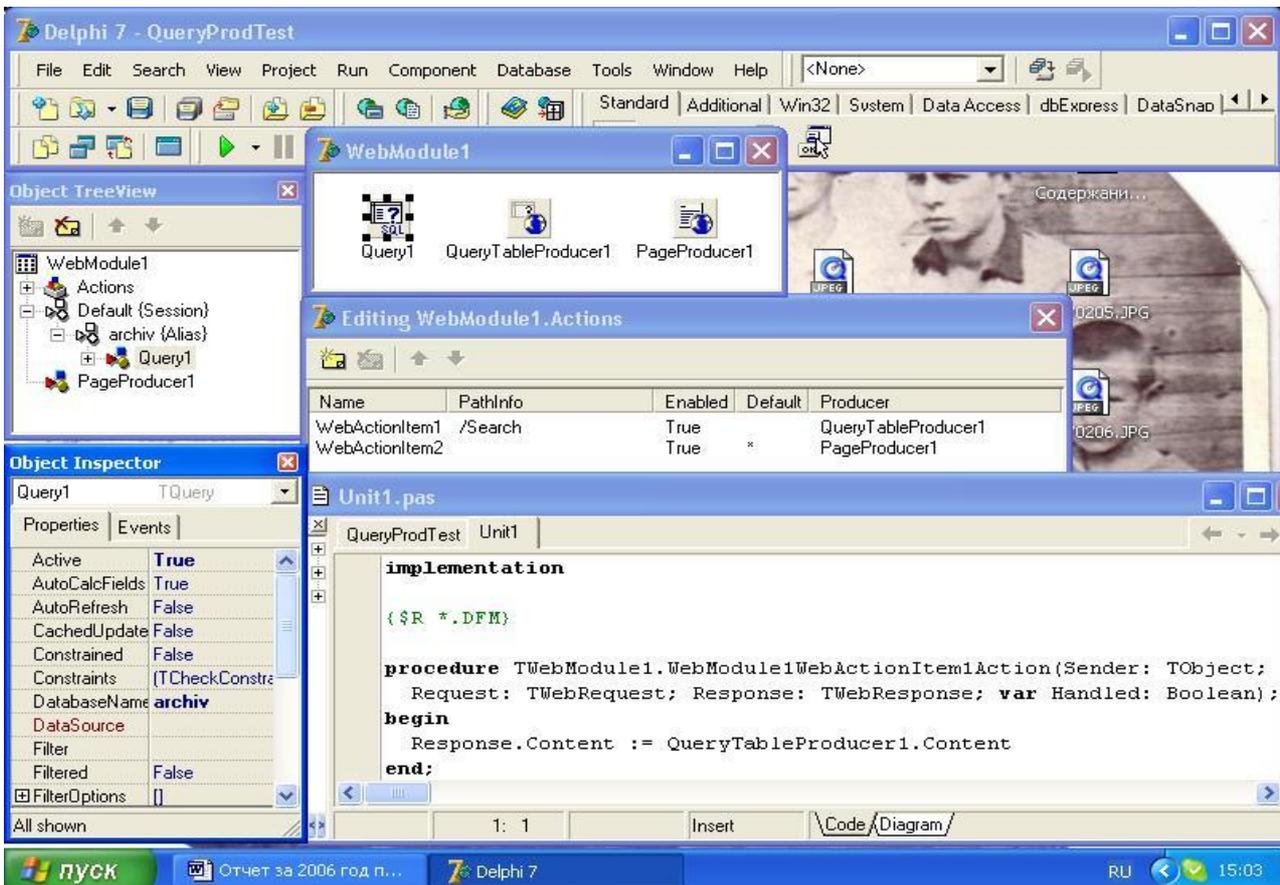


Ссылка Grid2 позволяет просмотреть содержимое базы пользователю, ссылка edit2 позволяет редактирование графических полей базы для пользователей имеющих права администратора, ссылка upload2 позволяет загружать на сервер новые данные по графическим полям. Таким образом, функционирование страницы обеспечивается работой нескольких отдельных программ, реализующих различные сценарии на сервере.

Структура программ, реализующих доступ к базе данных на основании запросов.

Программа, реализующая запрос по ключевому слову, основана на использовании WebModule, с компонентами PageProducer, QueryTableProducer, Query. Общий вид программы показан на рисунке 5.

Рис. 5. Общий вид программы WebModule.



В свойстве HTMLDoc для PageProducer сформирована форма запроса в виде, показанном на рисунке 6. В свойстве SQL компонента Query сформирован SQL-запрос к базе, представленный на рисунке 6. Для обработки действий сформированы два действия, которые представлены на рисунке. Особенностью данного запроса к базе является то, что он реализует параметрический запрос, т.е. в качестве параметра указываются изменяемые параметры. Параметры запроса изменяются клиентом с помощью формы, в которой предусмотрены интерфейсные элементы для ввода этих параметров.

Рис. 6. Форма запроса.

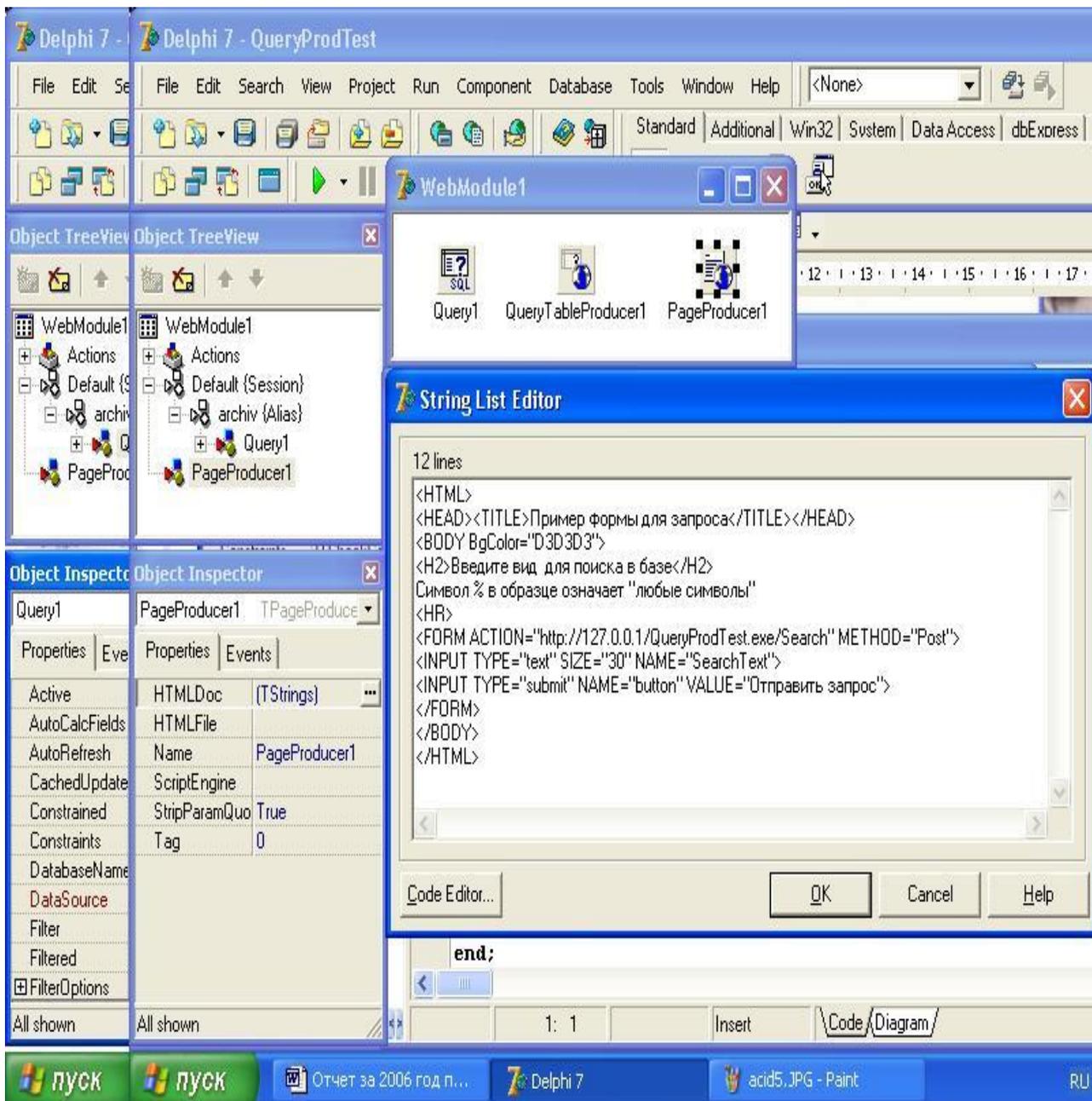
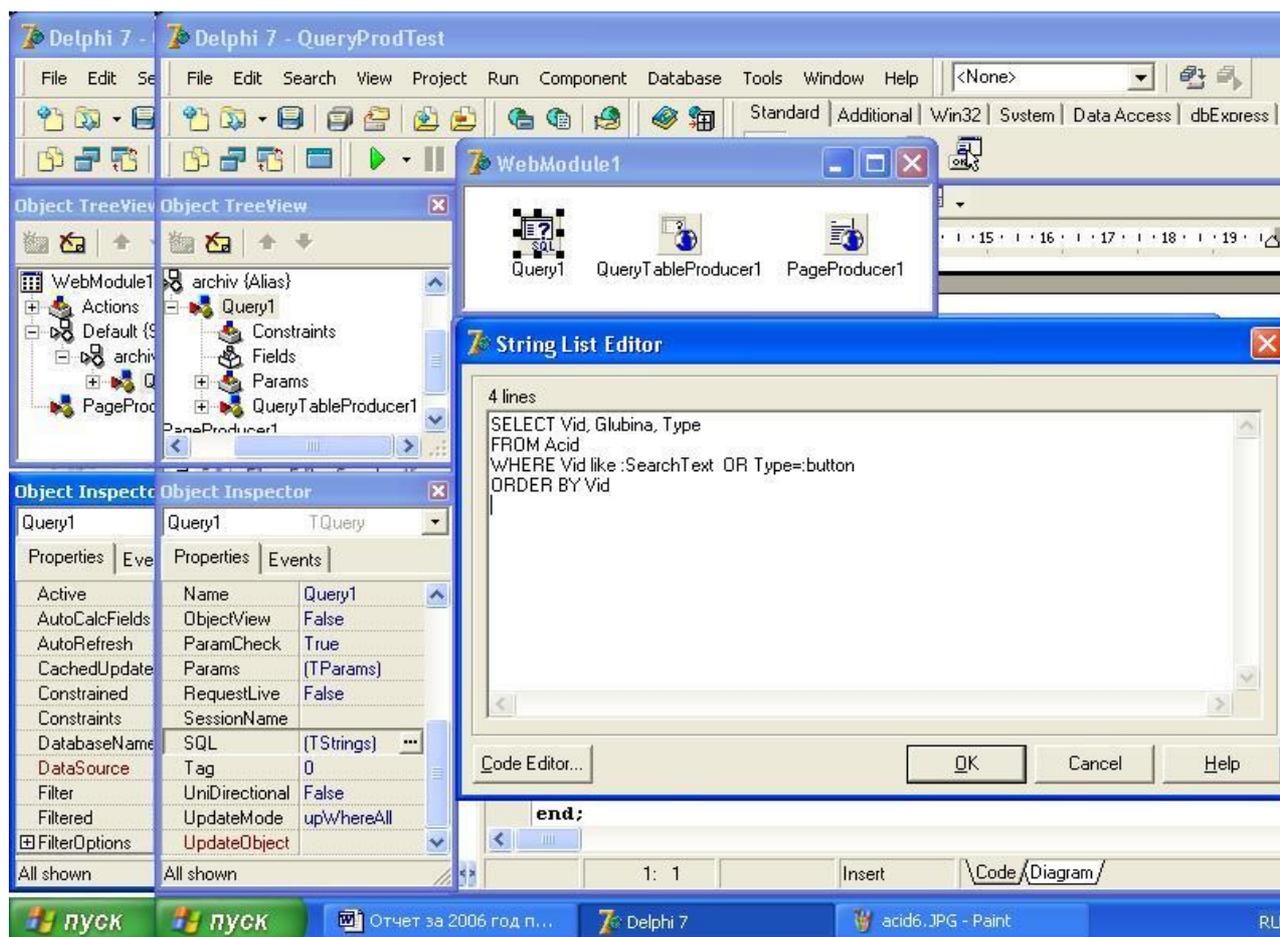


Рис.7. Структура программы запроса с выпадающими полями.



Одной из проблем использования статических HTML-форм является невозможность указания, по каким ключевым словам вести поиск. Для устранения этой сложности вместо элемента управления «строка редактирования» можно использовать элемент «поле со списком». Для создания такой страницы используется WebModule с 4 компонентами и тремя действиями, представленными на рисунке. HTML код для данной страницы будет генерироваться действием /form, которое подключается к компоненту PageProducer. PageProducer содержит HTML-текст, встроенный в два специальных тега, представленный на рисунке. Эти теги имеют те же имена, что и разыскиваемые поля таблиц. Когда PageProducer столкнется с одним из этих тегов, он добавит HTML-тег <option> для каждого неповторяющегося значения соответствующего поля. Обработчик события OnTag представлен на рисунке 8.

Рис. 8. Обработчик события OnTag.

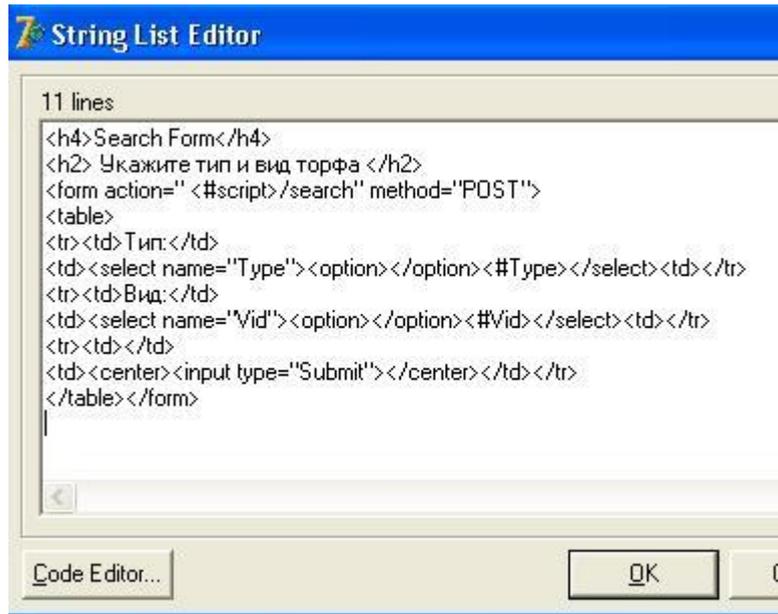
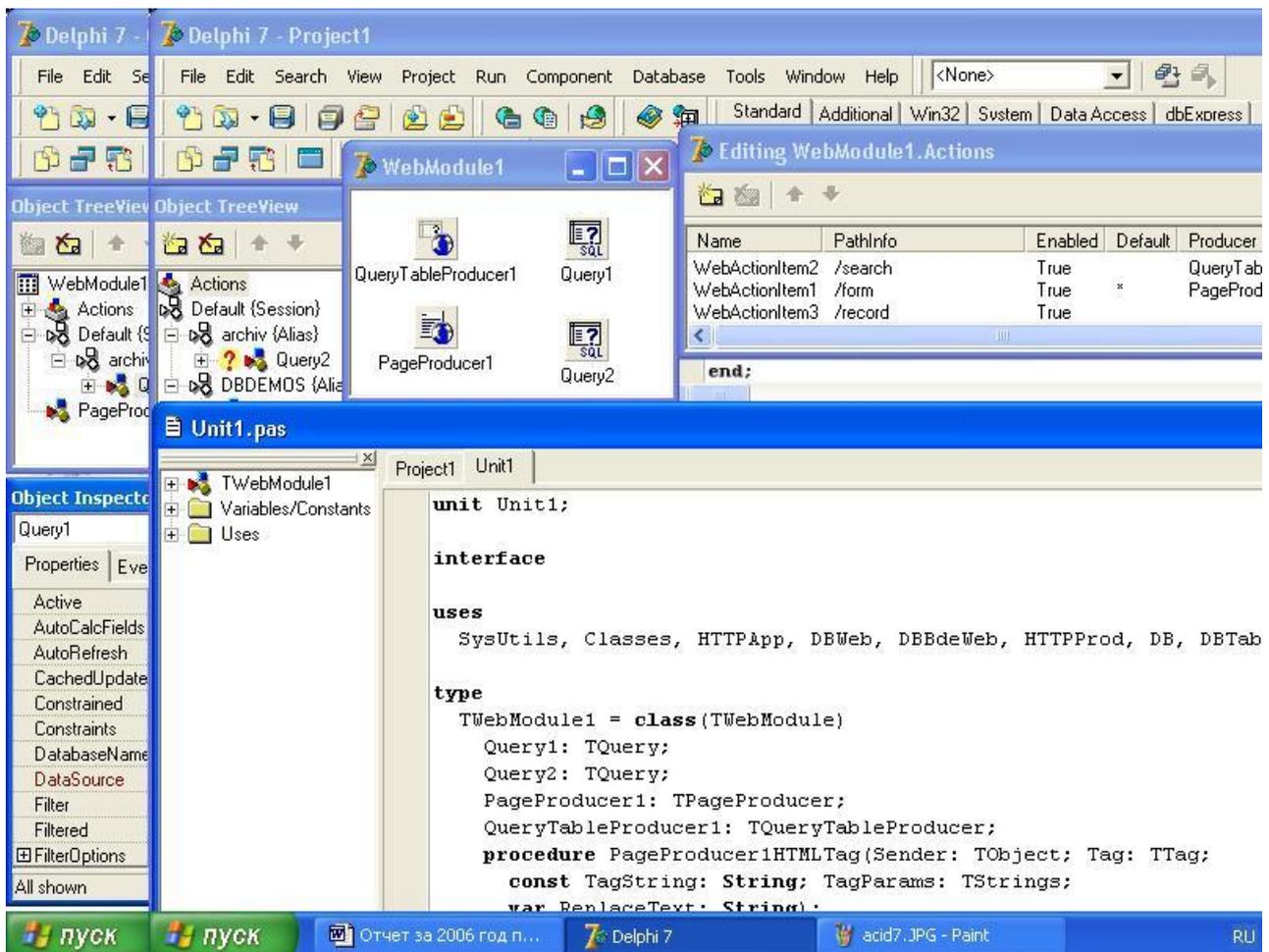


Рис.9. Компонент QueryTableProducer.



Этот метод использует второй компонент Query, подключенный к компоненту QueryTableProducer. Подробности определенной записи таблицы данных рассматриваются с

помощью настройки вывода первого столбца, генерируемого компонентом QueryTableProducer.

Рис. 10. Варианты записи в таблицу.

```
Project1 Unit1
procedure TWebModule1.PageProducer1HTMLTag(Sender: TObject; Tag: TTag;
  const TagString: String; TagParams: TStrings; var ReplaceText: String);
begin
if TagString = 'script' then
  ReplaceText := Request.InternalScriptName
  else
  begin
  ReplaceText:='';
  Query2.SQL.Clear;
  Query2.SQL.Add('select distinct ' + TagString + ' from acid');
  try
  Query2.Open;
  try
  Query2.First;
  while not Query2.Eof do
  begin
  ReplaceText:=ReplaceText+
  '<option>' + Query2.Fields[0].AsString + '</option>'#13;
  Query2.Next;
  end;
  finally
  Query2.Close;
  end;
  except
  ReplaceText:='{wrong field: ' + TagString + '}';
  end;
  end;
  end;
end;
```

```
procedure TWebModule1.QueryTableProducer1FormatCell(Sender: TObject;
  CellRow, CellColumn: Integer; var BgColor: THTMLBgColor;
  var Align: THTMLAlign; var VAlign: THTMLVAlign; var CustomAttrs,
  CellData: String);
begin
if (CellColumn=0) and (CellRow<>0) then
  CellData:='<a href="" + Request.InternalScriptName+ '/record?Oblast='+
  CellData + '">' + CellData + '</a>'#13;
  if CellData='' then
  CellData:=' &nbsp;';
  end;
```

Действием для этой ссылки является /record и передача определенного элемента осуществляется без имени параметра. Программный код, используемый для генерации HTML-таблиц на основе записей, не использует компонент-продюсер. Вместо этого он выводит данные каждого поля в пользовательскую таблицу с помощью следующего действия.

Рис. 11. Вариант выдачи записей.

```

Unit1.pas
Project1 Unit1
procedure TWebModule1.WebModule1WebActionItem3Action(Sender: TObject;
  Request: TWebRequest; Response: TWebResponse; var Handled: Boolean);
var i: integer;
begin
  if Request.QueryFields.Count=0 then
    Response.Content:='Record not found'
  else
    begin
      Query2.SQL.Clear;
      Query2.SQL.Add('select Punkt,Region,Type,Vid,Glubina,R,A,Botspsnav from acid ' +
        'where Punkt="' + Request.QueryFields.Values['Oblast'] + '"');
      Query2.Open;
      Response.Content:=
        '<html><head><title>Punkt record</title></head><body>'#13 +
        '<h1>Punkt record: ' +Request.QueryFields[0] + '</h1>'#13 +
        '<table border>'#13;
      for i:=1 to Query2.FieldCount-1 do
        Response.Content:=Response.Content +
        '<tr><td>' +Query2.Fields[i].FieldName + '</td>'#13'<td>' +
        Query2.Fields[i].AsString + '</td></tr>'#13;
      Response.Content := Response.Content +
        '</table><hr>'#13 +
        '// pointer to the query form
        '<a HREF="' + Request.InternalScriptName + '/form">' +
        ' Next Query </a>'#13 +
        '</BODY></HTML>'#13;
    end;
end;
  
```

### Заключение

Разработка БД свойств, структуры и функций ГК позволяет обеспечить необходимую информационную поддержку на протяжении всего периода фундаментальных исследований, а также решение оптимизационных задач по выбору параметров свойств ГК. Выбран тип базы данных, построен прототип структуры записи в базе данных, реализован локальный доступ к прототипной базе с помощью Web App Debug, реализованы авторизация и аутентификация пользователей, ранжирован вид предоставляемых пользователю страниц в зависимости от прав пользователя. Реализован с помощью WebBroker и WebSnap – технологий доступ к графическим и табличным полям базы данных. Проведена разработка структуры классификационных признаков. Произведено заполнение базы данных свойствами отдельных образцов гуминовых кислот, полученных из различных типов торфов. Настроен сервер IIS для работы с базой данных типа Paradox в многопользовательском режиме. Проводится работа по модернизации страницы доступа к базе данных. Модернизация состоит в организации двух вариантов запросов к базе данных. Запросы позволяют не перемещать по сети все содержимое базы, а выполнить на сервере выборку из базы и результаты выборки отправить пользователю.

Работа поддержана грантами РФФИ № 05-07-98002-р\_объ\_в и РФФИ № 06-08-01380-а

## Литература

1. Орлов Д.С. Органическое вещество почв России // Почвоведение. – 1998. – № 9. – С. 1049 – 1057
2. Орлов Д.С. Гумусовые кислоты почв. М.: Изд-во МГУ 1990.- 324 с.
3. Кухаренко Т.А. // Гуминовые вещества в биосфере. 1993. с. 27-35.
4. Комиссаров И.Д., Логинов Л.Ф.// Гуминовые вещества в биосфере. 1993. с. 36-45.
5. Киселева Н.Н. Компьютерное конструирование неорганических соединений: использование баз данных и методов искусственного интеллекта. – М.: Наука, 2005. – 289 с.
6. Vogt J., Mez-Starck B., Vogt N., Hutter W. MOGADOC – a database for gasphase molecular spectroscopy and structure // J. Mol. Struct. 1999. Vol. 485/486, N 1. P. 249-254.
7. Фролов А.В., Фролов Г.В. Базы данных в Интернете: Практическое руководство по созданию Web-приложений с базами данных. М.: Русская редакция, 2000. 416 с.
8. Helter S.R. NIST/EPA/MSDC mass spectral database, PC version 3.0 // J. Chem. Inf. and Comput. Sci. 1991. Vol. 31, N 2. P. 352-354.
9. Delphi 7. Учебный курс / С. И. Бобровский. СПб.: Питер, 2004. 736 с.
10. А.Я. Архангельский. Программирование в Delphi 7.М.: ООО «Бином-Пресс», 2003 г.1152 с.: ил.
11. Горчаков Л. В., Инишева Л. И., Соколова И. В. Современные информационные технологии работы с научными базами данных//Открытое и дистанционное образование. - 2005. - № 1(17). – С. 31 - 33
12. Кэнт А. Delphi7 для профессионалов. СПб.: Питер,2005. 956 с.
13. Фаронов В. В. Профессиональная работа в Delphi 6. СПб.:Питер, 2002. 605.: ил.
14. Завацкая Е.С., Горчаков Л.В., Инишева Л.И., Соколова И.В., Гостищева М.В. Базы данных по гуминовым кислотам торфов в клиент-серверной технологии. Экспериментальная информация в почвоведении: теория и пути стандартизации. Труды Всероссийской конференции, 20-22 декабря, Москва, МГУ, факультет почвоведения, 2005. С. 115-116.
15. Завацкая Е.С., Гостищева М.В., Горчаков Л.В. Создание базы данных по физико-химическим свойствам гуминовых кислот. Болота и биосфера: Сборник материалов Четвертой Научной Школы. Томск: Изд-во ЦНТИ. 2005. С. 193-195.

### **The development of the peat's humic acids properties data base for basic research**

Zavatskaya E.S., Gorchakov L.V., Sokolova I.V., Gostishcheva M. V.

*Peat as the natural resources concerning to matter of organogenic genesis, is characterized in the structure by a wide variety humic acids. The greatest stocks of peat Western Siberia has, and including the Tomsk region possesses unique peat stocks. Humic acids (HA), being the major component of peats of different structure, render unequal influence on natural ecosystems of biospheres. Scientists pay the big attention to studying of structure and structural parameters HA by various methods (ESR, a nuclear magnetic resonance, etc.), but the numerous isolated data are not systematized absolutely. Creation of a DB of properties, structures and functions HA allows to provide necessary information support during all period of basic researches, and also the decision optimization problems at the choice of parameters of properties HA.*