



Session IX, Thursday, June 21

L24

Jana2020: the first kid's steps of follower of program Jana2006

JANA2020: PRVNÍ DĚTSKÉ KRŮČKY NÁSTUPCE PROGRAMU JANA2006

M. Dušek, V. Petříček

*Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká Republika
dusek@fzu.cz*

Strukturální analýza z difrakčních dat, tradiční metoda určování atomární struktury, se během své historie rozrostla do řady podoborů, z nichž některé využívají dávno známé rutinní postupy, zatímco jiné – například elektronová difrakce – jsou předmětem intenzivního výzkumu. Program Jana2006 byl vyvíjen posledních 12 let s ambicí pokrýt všechny obory krystalografie, které vycházejí z definice krystalu jako objektu se zanedbatelným efektem povrchu, s výjimkou krystalografie proteinů. Rozvoj programu Jana2006 byl nezbytně extenzivní, protože vývoj nových oborů lze přesně plánovat snad pouze v nereálném světě vědecké politiky. V současné době program nabyl takového rozsahu, že se ukázalo nezbytné jej nově uspořádat a jeho součásti lépe logicky propojit. Velkým povzbuzením pro uskutečnění tohoto dlouho odkládaného úkolu bylo pro nás udělení letos zahájeného grantu GA ČR, který poprvé od 90. let podpořil dříve zavrhanou aktivitu, totiž programování krystalografických výpočtů.

Jedním z hlavních problémů, které budou v prezentaci diskutovány, je určitý rozpor mezi očekáváním uživatelů tzv. chemické krystalografie a uživatelů pokročilých metod. První by rádi viděli program, který ukáže strukturu bez zbytečných otravných detailů, ale zároveň tak, aby pedantický program PLATON nevystavil žádný tzv. alert A či B. To není možné bez různých programových triků,

jako je například změna váhy nesouhlasících reflexí, které do nového programu zavádět nechceme, ale zároveň bychom těmto uživatelům rádi vyšli maximálním způsobem vstříc. Druhý typ uživatelů chce naopak kontrolovat každý krok výpočtu a získat detailní výsledky, a je ochoten řešit jeden krystalografický problém třeba rok. Tito uživatelé reprezentují vědecký pokrok v krystalografii a bez nich by vývoj programu nebyl možný, takže i jim, ačkoli jsou ve srovnání s chemickou krystalografií minoritní, je třeba všemožně vycházet vstříc.

Program Jana2020 zavádí nový grafický interface, který má tuto kvadraturu kruhu do jisté míry řešit. Na druhé straně připouštíme, že vyřešit lze jen částečně a výsledkem bude nějaký kompromis. V prezentaci shrneme hlavní cíle, kterých bychom rádi do roku 2020 dosáhli, očekávanou strukturu programu a technické prostředky, které plánujeme použít. Na příkladech ukážeme, jakým způsobem bychom chtěli usnadnit běžné krystalografické úlohy, a zároveň jak se z počátku rutinní úloha může zkomplikovat a vyžádat si nasazení procedur, o jejichž potřebě uživatel nemusel mít na počátku své práce tušení. Možnost přejít plynule od jednoduchých nástrojů k pokročilým je ostatně hlavní přínos programu Jana2006/2020 pro řešení běžných struktur.

L25

Review of programs for inverse X-ray microscopy

PŘEHLED PROGRAMU PRO METODY INVERZNÍ RTG. MIKROSKOPIE

Z. Matěj

*MAX IV, Univerzita v Lundu, Švédsko
zdenek.matej@maxiv.lu.se*