

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ РАДИОФИЗИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
Кафедра системного анализа и компьютерного моделирования

Машницкий Вадим Вадимович

**Разработка программного приложения для комплексного анализа
больших данных флуоресцентной спектроскопии**

Аннотация к дипломной работе

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук,
доцент Н.Н. Яцков

Допущен к защите

« ___ » _____ 2022 г.

Зав. кафедрой системного анализа и
компьютерного моделирования канд. физ.-мат.
наук, доцент В.В. Скакун

Минск, 2022

РЕФЕРАТ

Цель данного исследования – разработка программных средств для интеллектуального анализа больших экспериментальных данных флуоресцентной спектроскопии, представленных кривыми затухания флуоресценции. Разработанные программные средства должны позволять оценивать время затухания флуоресценции с высокой точностью.

Задачи:

1. Изучение методов анализа больших данных флуоресцентной спектроскопии, имитационного моделирования,
2. интеллектуального анализа данных
3. программных средств и сред разработки для реализации вычислительных алгоритмов и создания на их основе пригодного к использованию конечным пользователем ПО;
4. Разработка и реализация алгоритмов анализа больших экспериментальных данных флуоресцентной спектроскопии;
5. Проведение вычислительного эксперимента и анализ полученных результатов, оценка качества разработанных программных средств;
6. Разработка удобного и доступного графического интерфейса для практического использования разработанных алгоритмов.

Работа включает три главы. В первой изложены основы флуоресцентной спектроскопии и больших данных, методов имитационного моделирования для генерации экспериментальных данных, методов интеллектуального анализа больших данных для построения моделей, существующих технологий для программной реализации методов моделирования и анализа.

Вторая глава посвящена реализации наиболее оптимальных алгоритмов при помощи выбранных технологий.

В третьей главе представлены результаты применения разработанных программных средств, оценка быстродействия и качества их работы, анализ полученных результатов вычислительного эксперимента.

На основании проведенных исследований сделаны выводы и определено направление проведения дальнейших исследований.

В приложениях приведен программный код разработанных алгоритмов на языке R.

РЭФЕРАТ

Мэта дадзенага даследавання - распрацоўка праграмных сродкаў для інтэлектуальнага аналізу вялікіх эксперыментальных дадзеных флуарэсцэнтнай спектраскапіі, прадстаўленых крывымі згасання флуарэсцэнцыі. Распрацаваныя праграмныя сродкі павінны дазваляць ацэньваць час згасання флуарэсцэнцыі з высокай дакладнасцю.

Задачы:

1. Вывучэнне метадаў аналізу вялікіх дадзеных флуарэсцэнтнай спектраскапіі, імітацыйнага мадэлявання,
2. інтэлектуальнага аналізу дадзеных
3. праграмных сродкаў і асяроддзяў распрацоўкі для рэалізацыі вылічальных алгарытмаў і стварэння на іх аснове прыдатнага да выкарыстання канчатковым карыстальнікам ПЗ;
4. Распрацоўка і рэалізацыя алгарытмаў аналізу вялікіх эксперыментальных дадзеных флуарэсцэнтнай спектраскапіі;
5. Правядзенне вылічальнага эксперыменту і аналіз атрыманых вынікаў, ацэнка якасці распрацаваных праграмных сродкаў;
6. Распрацоўка зручнага і даступнага графічнага інтэрфейсу для практычнага выкарыстання распрацаваных алгарытмаў.

Праца ўключае тры раздзелы. У першай выкладзены асновы флуарэсцэнтнай спектраскапіі і вялікіх дадзеных, метадаў імітацыйнага мадэлявання для генерацыі эксперыментальных дадзеных, метадаў інтэлектуальнага аналізу вялікіх дадзеных для пабудовы мадэляў, якія існуюць тэхналогій для праграмнай рэалізацыі метадаў мадэлявання і аналізу. Другі раздзел прысвечана рэалізацыі найболей аптымальных алгарытмаў пры дапамозе абраных тэхналогій. У трэцім раздзеле прадстаўлены вынікі прымянення распрацаваных праграмных сродкаў, ацэнка хуткадзейнасці і якасці іх працы, аналіз атрыманых вынікаў вылічальнага эксперыменту. На падставе праведзеных даследаванняў зроблены высновы і вызначаны напрамак правядзення далейшых даследаванняў. У дадатках прыведзены праграмны код распрацаваных алгарытмаў на мове R.

ABSTRACT

The purpose of this study is to develop software tools for the intellectual analysis of large experimental data of fluorescence spectroscopy, represented by fluorescence decay curves. The developed software tools should make it possible to estimate the fluorescence decay time with high accuracy.

Tasks:

1. Studying big data analysis methods of fluorescence spectroscopy, simulation modeling,
2. data mining
3. software tools and development environments for the implementation of computational algorithms and the creation on their basis of software suitable for use by the end user;
4. Development and implementation of algorithms for the analysis of large experimental data of fluorescence spectroscopy;
5. Conducting a computational experiment and analyzing the results, assessing the quality of the developed software;
6. Development of a convenient and accessible graphical interface for the practical use of the developed algorithms.

The work includes three chapters. The first one outlines the basics of fluorescence spectroscopy and big data, simulation methods for generating experimental data, big data mining methods for building models, existing technologies for software implementation of modeling and analysis methods. The second chapter is devoted to the implementation of the most optimal algorithms using the selected technologies. The third chapter presents the results of using the developed software tools, assessing the speed and quality of their work, and analyzing the results of a computational experiment. On the basis of the conducted studies, conclusions were drawn and the direction of further research was determined. The appendices contain the program code of the developed algorithms in the R language.