

СТРУКТУРНАЯ СХЕМА ПОСТРОЕНИЯ ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ ВО ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. В. Дигрис

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
E-mail: digris@bsu.by*

Предложена структурная схема построения программных комплексов для анализа данных флуоресцентной спектроскопии, позволяющая разрабатывать специализированное программное обеспечение с динамически подключаемой и легко наращиваемой библиотекой моделей и методов анализа данных, а также встроенными средствами для управления исходными данными и результатами их обработки. Данная схема позволяет создавать стандартизированный по внешнему виду компактный пользовательский интерфейс, позволяющий в удобной форме управлять настройкой вычислительных экспериментов по обработке данных, непосредственно выполнять анализ и контролировать качество полученных результатов.

Ключевые слова: *флуоресцентная спектроскопия, глобальный анализ данных, метод максимального правдоподобия, программное обеспечение.*

Введение. Экспериментальные методы флуоресцентной спектроскопии активно используются в современной науке для исследования молекулярных систем [1]. Для анализа данных, получаемых этими методами, требуется применение ряда вычислительных алгоритмов [2,3], реализованных в специализированном программном обеспечении (ПО). Простота и удобство использования такого ПО на практике при анализе данных, полученных различными экспериментальными методами, во многом определяется универсальностью внешнего вида и удобством его пользовательского интерфейса. Важным фактором, позволяющим наращивать вычислительный потенциал ПО, является возможность расширения библиотеки моделей и методов анализа данных при минимальных затратах на обновление программного обеспечения. Указанные выше требования делают актуальной задачу построения базовой структурной схемы ПО для анализа данных во флуоресцентной спектроскопии, позволяющей создавать удобные в использовании, легко модернизируемые программные комплексы, обладающие всеми необходимыми алгоритмами для выполнения обработки данных и оценки качества полученных результатов.

Структурная схема программного обеспечения. Базовая структурная схема программного обеспечения для анализа данных во флуоресцентной спектроскопии приведена на рисунке 1. Как видно из данной схемы каждый разрабатываемый пакет программ состоит из главного приложения для анализа данных, включающего вычислительную и интерфейсную части, двух баз данных, хранящих исходные данные, а также результаты их анализа. Для детальной работы с информацией из баз данных

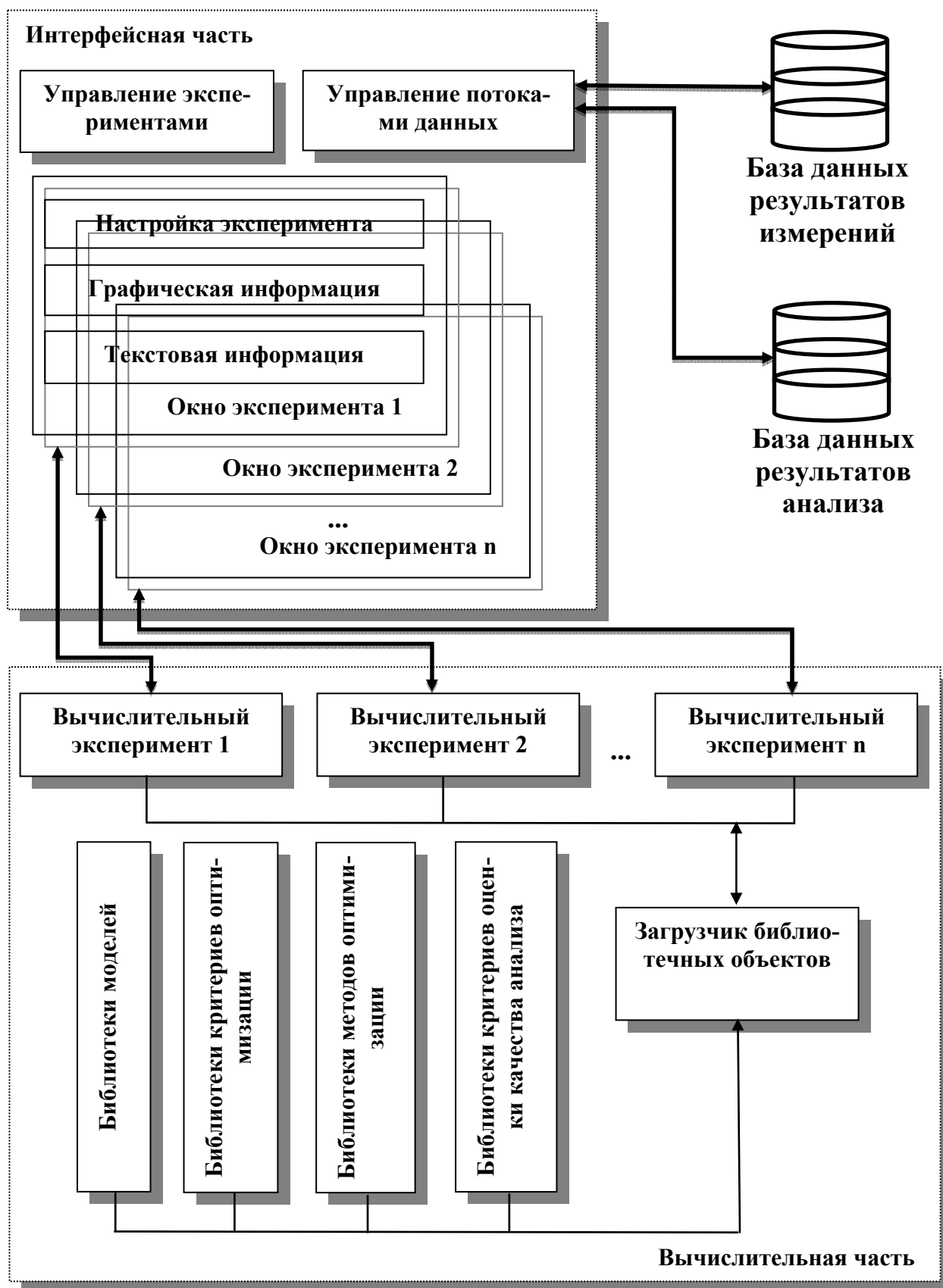


Рис. 1. Базовая структурная схема ПО для анализа данных измерений во флуоресцентной спектроскопии

создаются отдельные приложения, которые могут обмениваться данными с главным приложением программного комплекса. Это повышает удобство работы с большими объемами информации (например, информация, найденная средствами приложений, работающих с базами данных может быть оперативно загружена в приложение для проведения анализа).

Создание главного приложения, основано на следующих принципах:

1. вычислительная (математические алгоритмы) и интерфейсная части программного кода должны быть реализованы отдельно;
2. программный код математических алгоритмов должен иметь стандартный интерфейс по отношению к остальным частям программы.

Вычислительная часть состоит из набора вычислительных экспериментов, предназначенных для организации процесса анализа данных, управления отдельными алгоритмами, принимающими в нем участие, и упорядочении их работы. Состояние и содержимое каждого вычислительного эксперимента отображается в связанном с ним окне интерфейса главного приложения. Возможность создания и использования одновременно нескольких вычислительных экспериментов позволяет пользователю сравнивать результаты анализа связанных друг с другом наборов экспериментальной информации, а также упростить сопоставление результатов анализа с использованием различных наборов алгоритмов.

Программный код используемых математических алгоритмов размещается в отдельных динамически подключаемых библиотеках (например, .dll в среде MS Windows). Все используемые алгоритмы разделены на четыре группы: модели, критерии оптимизации, методы оптимизации и критерии оценки качества анализа, что соответствует ранее опубликованной схеме анализа данных [4]. При программной реализации каждый алгоритм представлен отдельным классом, унаследованным от базового абстрактного класса соответствующей группы, который представляет общий функционал данной группы алгоритмов, необходимый для их использования при выполнении анализа данных. Наследование классов алгоритмов от соответствующего базового абстрактного класса позволяет стандартизировать процедуру их загрузки из динамически подключаемых библиотек и универсальным образом использовать их в рамках вычислительного эксперимента. Непосредственное создание программных объектов, представляющих отдельные алгоритмы, выполняется в рамках специальных экспортируемых функций динамически подключаемых библиотек. Вызов этих функций выполняется отдельной частью основного приложения, которая представлена на рисунке 1 как загрузчик библиотечных объектов. Использование такого загрузчика позволяет другим частям программного кода основного приложения избавиться от технических особенностей работы с библиотеками. Использование единого ба-

зового класса в рамках каждой группы математических алгоритмов, наряду с их размещением в динамически подключаемых библиотеках, делает основное приложение программного комплекса гибким, а также обеспечивает его быстрое дополнение новыми моделями и методами анализа данных без изменения ранее созданного программного кода.

Основой интерфейсной части главного приложения программного комплекса (смотри рисунок 1) является интегрированная оболочка экспериментов, реализованная в виде главного окна приложения, внутри которого располагаются подчиненные окна, связанные с отдельными вычислительными экспериментами. Окна вычислительных экспериментов позволяют управлять обрабатываемыми данными, выбирать и настаивать модели и методы для их анализа, запускать и контролировать процесс обработки данных, а также просматривать результаты и оценивать их качество. Кроме того, данные окна содержат интерфейсные средства для связывания параметров при выполнении глобального анализа данных, быстрого управления настройками большого числа оцениваемых параметров и экспорта информации, относящейся к вычислительному эксперименту.

Выводы. Предложенная в статье базовая структурная схема для построения программных комплексов анализа данных флуоресцентной спектроскопии позволяет создавать относительно простое в использовании и сопровождении ПО с максимально стандартизированным внешним видом интерфейсной части вне зависимости от вида обрабатываемой информации, и легко наращиваемой библиотекой моделей и методов анализа данных. Данная схема была использована при создании ряда активно применяемых в настоящее время на практике программных продуктов [4].

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Lakowicz J. R. Principles of Fluorescence Spectroscopy // Springer; 3rd ed., 2006. 954 p.
2. Digris A. V., Novikov E. G., Skakun V. V., Apanasovich V. V. Global Analysis of Time-Resolved Fluorescence Data // In book Fluorescence Spectroscopy and Microscopy: Methods and Protocols: Methods in Molecular Biology, Springer Protocols, Yves Engelborghs and Antonie J.W.G. Visser (eds.). Springer Science+Business Media, LLC. 2014. V. 1076. P. 257-277.
3. Skakun V. V., Digris A. V., Apanasovich V. V. Global Analysis of Autocorrelation Functions and Photon Counting Distributions in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy // In book Fluorescence Spectroscopy and Microscopy: Methods and Protocols: Methods in Molecular Biology, Springer Protocols, Yves Engelborghs and Antonie J.W.G. Visser (eds.). Springer Science+Business Media, LLC. 2014. V. 1076. P. 719-741.
4. Yatskou M. M., Digris A. V., Novikov E. G., et al. Integrated data analysis in time-resolved fluorescence and fluorescence correlation spectroscopy // Recent Research Developments in Physical Chemistry. 2004. V. 7, Part I. P. 165–183.