

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

Ярмолюка Максима Сергеевича

**РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ АНАЛИЗА ДАННЫХ
СКАНИРУЮЩЕЙ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПО
МЕТОДУ N&V**

Аннотация (реферат) дипломной работы

Научный руководитель
кандидат физико-математических
наук, доцент
Скакун Виктор Васильевич

Допущена к защите

«___» _____ 2024 г.

Зав. кафедрой системного анализа и компьютерного моделирования кандидат
физико-математических наук, доцент Н.Н. Яцков

Минск, 2024

РЕФЕРАТ

В дипломной работе 42 страницы, 16 иллюстраций, 1 таблица, 26 источников, 2 приложения

Ключевые слова: флуоресцентная спектроскопия, анализ данных, биннинг

метод флуоресцентной спектроскопии N&B, визуализация данных, реализация интерфейса, обработка изображений

В дипломной работе поставлена задача разработки программного средства анализа данных сканирующей флуоресцентной спектроскопии по методу N&B для решения задач биоинформатики, в частности для исследования агрегации белковых молекул.

Задача решалась при помощи языка программирования Python. В работе рассмотрены теоретические основы флуоресцентной спектроскопии и метода N&B, устройство приборов и виды данных, получаемых с помощью флуоресцентной спектроскопии. Проведен анализ работы алгоритма по методу N&B, выполнена его реализация предобработки данных, метода N&B, фильтрации выбросов. Получены изображения тепловых карт N и b , на основе которых проведен анализ исследуемого материала, дополнительно построены гистограммы распределений средних значений N и b .

В результате реализовано программное средство для использования алгоритма по методу N&B. На основании полученных результатов сделаны подтверждающие выводы о составе и структуре исследуемого раствора.

РЭФЕРАТ

У дыпломнай працы 42 старонак, 16 ілюстрацыі, 1 табліца, 26 крыніц, 2 дадатака

Ключавыя словы: флуарэсцэнтная спектраскапія, аналіз дадзеных, бінінг метада флуарэсцэнтнай спектраскапіі N&B, візуалізацыя дадзеных, рэалізацыя інтэрфейсу, апрацоўка малюнкаў

У дыпломнай рабоце пастаўлена задача распрацоўкі праграмавага сродку аналізу даных сканавальнай флуарэсцэнтнай спектраскапіі па метадазе N&B для вырашэння задач біяінфарматыкі, у прыватнасці для даследавання агламерацыя бялковых малекул.

Задача вырашалася з дапамогай мовы праграмавання Python. У працы разгледжаны тэарэтычныя асновы флуарэсцэнтнай спектраскапіі і метада N&B, прылада прыбораў і віды дадзеных, якія атрымліваюцца з дапамогай флуарэсцэнтнай спектраскапіі. Праведзены аналіз працы алгарытму па метадазе N&B, выканана яго рэалізацыя перадапрацоўкі дадзеных, метада N&B, фільтраванні выкідаў. Атрыманы выявы цеплавых карт N і b , на аснове якіх праведзены аналіз доследнага матэрыялу, дадаткова пабудаваны гістаграмы размеркаванняў сярэдніх значэнняў N і b .

У выніку рэалізаваны праграмы сродак для выкарыстання алгарытму па метадазе N&B. На падставе атрыманых вынікаў зроблены якія пацвярджаюць высновы аб складзе і структуры доследнага раствора.

ABSTRACT

The thesis contains 46 pages, 16 illustrations, 1 table, 26 sources, 2 applications

Keywords: fluorescence spectroscopy, data analysis, binning N&B fluorescence spectroscopy method, data visualization, interface implementation, image processing

The thesis set the task of developing a software tool for analyzing fluorescence spectroscopy data using the N&B method to solve bioinformatics problems, in particular for studying the agglomeration of protein molecules.

The problem was solved using the Python programming language. The paper discusses the theoretical foundations of fluorescence spectroscopy and the N&B method, the design of instruments and the types of data obtained using fluorescence spectroscopy. The operation of the algorithm using the N&B method was analyzed, its implementation of data preprocessing, the N&B method, and outlier filtering was carried out. Images of heat maps of N and b were obtained, on the basis of which an analysis of the material under study was carried out, and histograms of the distributions of average values of N and b were additionally constructed.

As a result, a software tool for using the algorithm using the N&B method has been implemented. Based on the results obtained, confirmatory conclusions were made about the composition and structure of the solution under study.