

# ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

С. Ю. Хоменко, А.В. Дигрис

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

В статье представлено веб-приложение, предназначенное для удаленного анализа данных флуоресцентной спектроскопии. Приложение построено на основе архитектуры клиент-сервер с применением стека современных технологий: платформы Java и фреймворка ReactJS. Обмен данными между клиентской и серверной частями приложения выполняется с использованием разработанного REST API. Созданное веб-приложение позволяет широкому кругу пользователей выполнять анализ данных, измеренных методами однофотонного счета и флуоресцентной флукуационной спектроскопии, получать оценки параметров, характеризующих исследуемых образцов, а также контролировать качество полученных результатов.

**Ключевые слова:** флуоресцентная спектроскопия; анализ данных; метод максимального правдоподобия; веб-приложение.

**Введение.** Экспериментальные методы флуоресцентной спектроскопии неизменно играют весомую роль при изучении сложных молекулярных систем [1]. Для получения информации об исследуемой системе на основе данных, измеряемых этими методами, требуется разработка специального программного обеспечения (ПО). Помимо реализации набора математических алгоритмов, предназначенных для проведения анализа [2, 3], современные требования к разработке такого ПО включают необходимость обеспечить обработку данных, полученных различными экспериментальными методами, а также сделать разработанное ПО удобным для использования и доступным широкому кругу исследователей. Как следствие, клиент-серверное ПО для обработки данных флуоресцентной спектроскопии, реализованное в виде веб-приложения, становится все более актуальным, поскольку оно является максимально доступным за счет использования сети Интернет, позволяет использовать облачные ресурсы, распределять вычислительную нагрузку между сервером и клиентом, что улучшает производительность и эффективность работы.

Целью данной работы является разработка веб-приложения с пользовательским интерфейсом, предоставляющего возможность быстрого и удобного анализа данных флуоресцентных экспериментов. Наиболее подходящим вариантом такого интерфейса является веб-интерфейс, позволяющий пользователю выполнять анализ посредством веб-браузера с устройств, использующих различные аппаратно-программные платформы без установки дополнительного программного обеспечения.

**Веб-приложение.** Структурная схема созданного веб-приложения приведена на рис. 1.

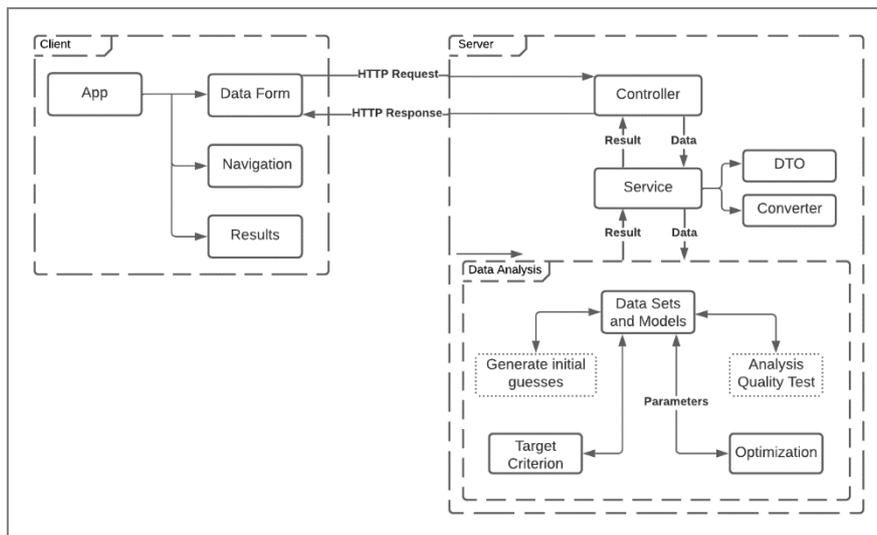


Рис. 1. Структурная схема веб-приложения для анализа данных флуоресцентной спектроскопии

Веб-приложение состоит из серверной и клиентской частей. Серверная часть реализована на базе платформы Java с использованием модулей фреймворка Spring [4] и представляет собой RESTful Spring Boot веб-службу. Клиентская часть реализована на языке JavaScript и состоит из компонент, написанных с использованием фреймворка ReactJS [5].

Для структурной организации приложения была выбрана трёхуровневая архитектура, в рамках которой приложение разделяется на слой представления, слой бизнес-логики и слой доступа к данным.

Слой представления отвечает за отображение данных пользователю, получение введенной им информации, и передачу ее в слой бизнес-логики для обработки. Слой представления построен с использованием архитектурного шаблона Model-View-Controller (MVC), который добавляет в структуру приложения три компонента, каждый из которых выполняет отдельную функцию. Model представлена в виде Data Transfer Object (DTO), которые определяют формат данных, передаваемых между компонентами веб-приложения. View является отдельным клиентским приложением, взаимодействующим с веб-службой через HTTP запросы в соответствии с разработанным REST API. Controller представлен классами, которые обрабатывают запросы и передают данные из них в бизнес-логику приложения.

Слой бизнес-логики отвечает за обработку запросов от представления, упаковку и распаковку DTO, валидацию и принятие решений касательно результатов работы с данными. Взаимодействие слоя представления с этим слоем происходит через контроллеры.

Слой доступа к данным представлен блоком их анализа, который отвечает за генерацию данных, которые впоследствии получит пользователь. Анализ данных представляет собой итерационную процедуру, основанную на методе максимального правдоподобия [2]. Текущая версия приложения позволяет обрабатывать кривые затухания флуоресценции, полученные методом однофотонного счета, с использованием много-экспоненциальной модели, либо автокорреляционную функцию потока фотонов, измеренного методом флуоресцентной флукуационной спектроскопии, с использованием модели свободной трехмерной диффузии [3].

Клиентская часть веб-приложения состоит из четырех основных компонент (смотри рис. 1), написанных с использованием фреймворка ReactJS. Компонент App является главным, определяет общую структуру веб-интерфейса и обеспечивает отрисовку компонентов Navigation, DataForm и Results, а также передачу данных между ними. Компонент Navigation содержит кнопки для выбора типа анализируемых данных в зависимости от метода измерений, которым они были получены. В соответствии с выбранным типом данных компонент DataForm предоставляет формы, используя которые пользователь может загрузить исходные данные для анализа в виде текстовых файлов, задать настройки модели, выбранной для анализа и, при необходимости, указать начальные приближения оцениваемых параметров. После нажатия на кнопку «Отправить», внесенная пользователем информация упаковывается в объект и с помощью http-клиента axios отправляется на серверную часть, где происходит ее обработка. Полученные в результате анализа результаты отправляются в компонент Results. Данный компонент выводит на экран графики экспериментальной и теоретической кривых, позволяющие оценить качество анализа визуально. Дополнительно отображаются полученные в результате анализа оценки параметров модели и значение критерия хи-квадрат.

Использование многослойной структуры с четко определенным функционалом отдельных слоев и набора компонент, решающих отдельные подзадачи в клиентской части, делает созданное веб-приложение гибким и доступным для дальнейшего расширения. Обмен данными между клиентской и серверной частями в стандартном формате JSON посредством http запросов обеспечивает возможность независимой разработки этих частей веб-приложения. Применение стека технологий Java и JavaScript позволяет развернуть веб-приложение на основных современных серверных платформах, в том числе под управлением ОС Linux.

Пример внешнего вида созданного веб-интерфейса, отображающего данные, полученные в результате анализа, приведен на рис. 2.

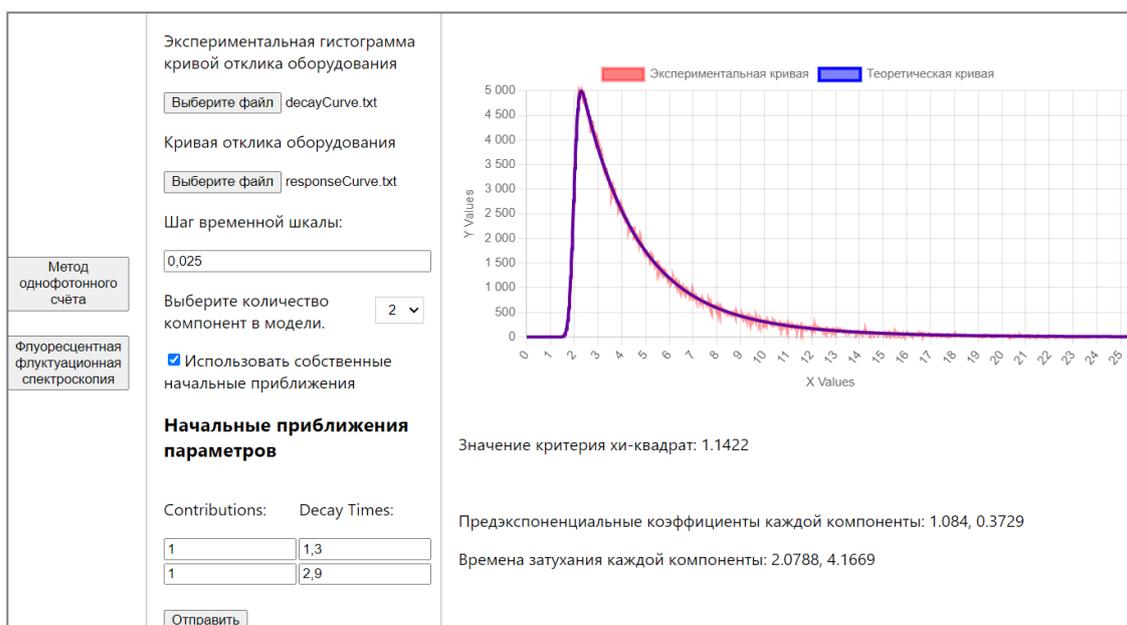


Рис. 2. Внешний вид интерфейса веб-приложения

**Выводы.** Созданное веб-приложение является широкодоступным инструментом для анализа данных, полученных различными экспериментальными методами флуоресцентной спектроскопии. Пользовательский интерфейс разработанного веб-приложения позволяет проводить анализ данных флуоресцентных экспериментов и получать в удобном виде информацию о качестве проведенного анализа. Разработанная структура веб-приложения позволяет наращивать его функционал добавлением новых моделей, средств оценки качества анализа и возможности анализировать данные, полученные другими экспериментальными методами флуоресцентной спектроскопии.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. *Lakowicz J. R.* Principles of Fluorescence Spectroscopy // Springer; 3rd ed., 2006. P. 954.
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. *Raman R. CSP, Dewailly L.* Building RESTful Web Services with Spring // Packt Publishing; 2nd ed., 2018. P. 228.
5. *Salcescu C.* Functional React // Independently published; 2nd ed., 2020. P. 158.