

АРХИТЕКТУРА ВЕБ-ИНТЕРФЕЙСА БАЗЫ ДАННЫХ ИНТЕРМЕДИАТОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Фирсов Д.А., Хренова М.Г.¹

МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Ленинские Горы, 1
¹ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2

Для реализации доступа к базе данных (БД) интермедиатов химических реакций в активных центрах белков нами был создан веб-интерфейс (доступен по адресу <https://lcc.chem.msu.ru/eim/>). Архитектура предложенного решения и схема его интеграции с внешними сервисами приведены на следующей схеме.

Модули презентационного слоя отвечают за внешний вид веб-страниц, демонстрируемых пользователю, и интегрируют в них информацию, полученную из других модулей. Для реализации мультиязычности все языкозависимые функции, в частности, сообщения пользователю, вынесены в отдельные языковые библиотеки (в настоящее время интерфейс реализован на английском и русском языках). Аутентификация пользователя проводится при помощи сервиса аутентификации Google по протоколу OAuth 2.0. Это позволяет не хранить на стороне нашего веб-сервера учётные данные пользователей, а пользователь имеет возможность воспользоваться уже существующей учётной записью. Для отображения структур интермедиатов в интерактивном режиме используется библиотека JSmol, при этом, сами структуры хранятся в распределённом файловом хранилище и при необходимости загружаются из него по протоколу HTTP. Вся необходимая информация для доступа к конкретной БД (в нашем случае, использована БД PostgreSQL) также вынесена в отдельный модуль, что позволяет при необходимости работать с разными и/или распределёнными БД. Кроме того, информация о публикациях, которая хранится в БД в форме DOI (дискретных идентификаторов объектов, ГОСТ Р ИСО 26324-2015), для удобного отображения преобразуется резолвером DOI, получающем информацию от сервера DOI в формате JSON.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-13006).