



PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNiques PER A LA CONTRACTACIÓ D'UNA PRESTACIÓ DE SERVEIS PER AL DESENVOLUPAMENT D'UNA APLICACIÓ INFORMÀTICA.

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica de la Universitat de Barcelona

EXPEDIENT: 2024/136.

1. OBJECTE

L'objectiu de la present contractació és obtenir una versió avançada de DECLAB, una eina de lliure disposició desenvolupada en un projecte previ, que permeti als laboratoris involucrats en les determinacions radioactives la deconvolució d'espectres de centelleig líquid obtinguts a partir de diferents equips per a l'anàlisi simultània de diferents emissors alfa i beta en diferents escenaris radiològics.

La nova versió de l'aplicació permetrà reduir la complexitat de les etapes de separació radioquímica, amb la qual cosa s'estalviarà temps, dedicació de recursos humans i reactius químics, i es reduiran els residus generats pels laboratoris, cosa que comporta un clar benefici ambiental. Finalment, també es comprovarà la seva validesa per a l'anàlisi de mostres provinents de diferents escenaris.

2. JUSTIFICACIÓ DE LA CONTRACTACIÓ

L'ús de la deconvolució d'espectres de centelleig líquid per a la quantificació d'emissors alfa i beta específics ha mostrat ser de gran utilitat, tant per als espectres obtinguts de procediments no selectius com per a aquells obtinguts amb mètodes selectius. Aquesta deconvolució sol realitzar-se mitjançant prototips de programes i algorismes propis que són molt difícils d'utilitzar per usuaris no implicats en la seva creació o amb pocs coneixements de programació. Per això, en un conveni anterior finançat pel Consejo de Seguridad Nuclear (2019-2021), i amb la participació d'una empresa experta en el desenvolupament d'aplicacions, es va programar DECLAB. DECLAB permet la deconvolució d'espectres de centelleig líquid a usuaris experts en el camp de les mesures de radioactivitat, però no habituats a la deconvolució. L'aplicació va demostrar la seva capacitat per a la deconvolució d'espectres de centelleig líquid obtinguts en mostres d'aigua, per satisfer els requeriments del Reial Decret 3/2023, però DECLAB té potencial per ser usada en l'anàlisi d'espectres provinents de mostres obtingudes en altres escenaris d'interès radiològic.

La versió actual de DECLAB només està disponible en espanyol i permet únicament l'anàlisi d'espectres obtinguts amb l'equip Quantulus 1220 de la marca PerkinElmer. L'objectiu del projecte per al qual es realitza la present contractació és fer l'aplicació més versàtil i accessible i així ampliar el nombre d'usuaris que se'n puguin beneficiar. Es planteja ampliar l'abast de DECLAB en aspectes com el conjunt de radionúclids estudiats, les relacions de concentració d'activitat entre anàlisis i interferents, la millora en el càlcul d'incerteses i límits de detecció, la consideració de condicions d'extinció variables o la incorporació d'altres equips de mesura. D'altra banda, per tal que aquest no sigui tan sols un estudi teòric del potencial de la deconvolució d'espectres de centelleig líquid, les millores introduïdes es provaran en casos específics derivats de situacions reals. Finalment es planteja que l'eina estigui també disponible en anglès.

Aquestes ampliacions comporten reptes investigadors importants i requereixen la participació d'experts en programació d'aplicacions que permetin traslladar tot el desenvolupament tècnic a un entorn senzill per ser utilitzat per futurs usuaris de laboratoris dedicats a l'anàlisi de radioactivitat en mostres d'interès ambiental.

3. DESCRIPCIÓ DE LES PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES

L'arquitectura del programari del projecte de deconvolució d'espectres de centelleig líquid s'ha de basar en una estructura client-servidor. L'arquitectura del sistema ha de seguir un model de capes amb responsabilitats clarament definides que faciliti el manteniment i l'escalabilitat del sistema.

La capa de presentació s'encarregarà de la interacció amb l'usuari. Cal que utilitzi Django Templates per a la generació de pàgines web dinàmiques i Bootstrap per garantir un disseny responsiu i modern. Les funcions principals d'aquesta capa han d'incloure:

- Formularis d'entrada de dades: interfícies perquè els usuaris carreguin i gestionin els espectres i altres dades necessàries per als calibratges i anàlisis.
- Visualització de dades: gràfiques i taules generades amb Matplotlib per mostrar els resultats de les anàlisis i calibratges de manera intuïtiva i comprensible.
- Gestió d'usuaris: interfícies per a l'administració d'usuaris, rols i permisos dins de l'aplicació.

La capa d'aplicació ha de contenir la lògica de negoci i és on es processaran les dades. Aquesta capa ha d'estar implementada principalment a Django i Python, i les seves responsabilitats han d'incloure:

- Processament de fitxers: lectura i processament dels fitxers d'espectres carregats pels usuaris. Les dades extretes d'aquests fitxers s'estructuren i s'emmagatzemen a la base de dades.
- Càlculs i anàlisi: realització de càlculs complexos per als calibratges i anàlisi de les dades estructurades.
- Gestió de calibratges i anàlisi: funcionalitats CRUD (Crear, Llegir, Actualitzar, Eliminar) per a calibratges i anàlisis, permetent als usuaris gestionar les seves dades de manera eficient.

Tecnologies a emprar

1. Backend

- Python: 3.8
- Django: 3.2
- MySQL Client: 1.4.6

2. Frontend

- Matplotlib 3.4.1
- Bootstrap

Desplegaments del programari

Cal que el desplegament de l'aplicació es dugui a terme utilitzant Docker i Docker Compose. Aquest desplegament es realitzarà als servidors de la Universitat de Barcelona (UB).

L'aplicació s'ha de desplegar en dos entorns diferents als servidors de la UB:

1. Entorn de Preproducció (PRE): aquest entorn s'utilitza principalment per a proves i validació de noves funcionalitats abans del desplegament en producció.
2. Entorn de Producció (PRO): aquest és l'entorn operatiu principal on l'aplicació està disponible per a tots els usuaris finals.
3. El desplegament de l'aplicació es gestionarà mitjançant Docker Compose, que orquestra tres contenidors Docker fonamentals:
4. Contenedor de Base de Dades (MySQL): aquest contenedor acull la base de dades MySQL que emmagatzema totes les dades estructurades i processades per l'aplicació.
5. Contenedor d'aplicació Python (Django): conté el codi de l'aplicació desenvolupat a Django, gestionant tota la lògica de negoci, processament de dades i maneig de sol·licituds de l'usuari.
6. Contenedor de servidor web (Nginx): Nginx s'utilitza com un servidor intermediari invers, manejant totes les sol·licituds HTTP i distribuint-les al contenedor de l'aplicació Python. A més, Nginx s'encarrega de servir fitxers estàtics i mitjana, optimitzant el rendiment i la seguretat del sistema.

Abast dels nous desenvolupaments

Per millorar l'experiència de l'usuari, caldrà realitzar diversos canvis estètics a la interfície d'usuari. Aquests canvis inclouran l'actualització de l'esquema de colors, redisseny d'icones i botons, i ajustaments a la disposició d'elements a la interfície per a una navegació més intuïtiva. La intenció és fer que l'aplicació sigui més agradable visualment i fàcil d'usar.

A més, s'hi vol afegir la capacitat de visualitzar múltiples espectres superposats en una sola gràfica. Aquesta funcionalitat permetrà als usuaris comparar diferents mostres de manera més eficient i facilitarà l'anàlisi i la interpretació de dades. També es vol implementarà l'opció de visualitzar mostres blanc, cosa que ajudarà els usuaris a tenir un context més complet de les anàlisis.

L'eina es vol traduir a l'anglès per atendre un públic més ampli i facilitar-ne l'ús en contextos internacionals. A més, es volen introduir modificacions menors com l'ordre invers a la data de creació de calibratges i anàlisis, la qual cosa permetrà als usuaris accedir més ràpidament als seus treballs més recents. Es pretén afegir icones d'informació per proporcionar text flotant explicatiu, cosa que millorarà la comprensió i l'ús de l'aplicació. També es volen incloure enllaços a tutorials i videotutorials proporcionats pel client, oferint recursos educatius addicionals per als usuaris.

Es pretén modificar els càlculs de límit de detecció i incertesa per als tres mètodes existents en la versió actual de DECLAB. Això inclourà la incorporació de tres noves variables que els usuaris podran ingressar mitjançant formularis en crear una anàlisi. Aquest canvi ha de permetre una anàlisi més precisa i detallada sense necessitat de modificar el model de dades actual.

La nova versió de DECLAB ha de permetre carregar espectres, patrons, blancs i mostres en un nou format de dades. Aquest ajustament implicarà que els calibratges, a més de ser específics per a un mètode determinat, també seran específics per a un equip en particular. Aquests canvis s'han d'implementar sense modificar el model de dades actual garantint la compatibilitat amb la infraestructura existent.

Finalment, es vol ampliar el model de dades per poder realitzar calibratges i anàlisis amb més volum d'informació. Això és necessari per emmagatzemar dades obtingudes d'equips de mesura més moderns, permetent fer calibratges més precisos. Caldrà ajustar la lògica del sistema per distingir les dades obtingudes de dos models diferents d'equips, i es realitzaran càlculs de calibratge i anàlisi de manera diferenciada depenent del model de l'equip, encara que tots dos tipus de dades pertanyin a la mateixa tipologia.

Barcelona,

Dra. Anna Rigol Parera

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica