

Caver Analyst XML projekt

Jan Štourač, Henrich Lauko, Jiří Novotný, Karel Kubíček

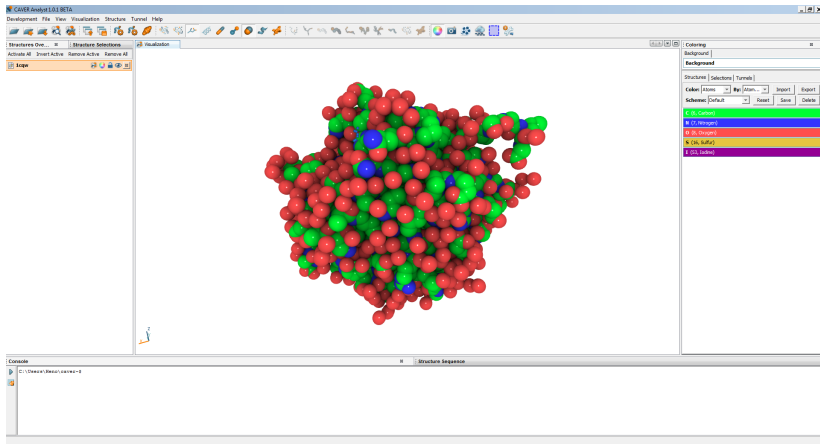
2014

Caver Analyst



- ▶ bioinformatický nástroj určený pro analýzu tunelů v proteinech
- ▶ široké využití v komunitě biochemiků a proteinových inženýrů
- ▶ grafická nadstavba výpočetního jádra Caver (Chovancová et al. 2012)
- ▶ vlastní vizualizační jádro

Caver Application



- ▶ uživatelská barevná schémata
 - ▶ efektivní ukládání schémat do XML souboru
 - ▶ podpora importu a exportu
 - ▶ přívětivé uživatelské rozhraní
- ▶ úprava XML s globálním nastavením aplikace

Organizace projektu

- ▶ Rozdělení úloh:
 - ▶ Backend - Jan Štourač
 - ▶ GUI - Henrich Lauko
 - ▶ XML struktura a XSD - Karel Kubíček
 - ▶ Globální nastavení - Jiří Novotný
- ▶ Využití interního svn repozitáře pro zdrojový kód
- ▶ Wiki na github.com
 - ▶ Zakomponováno do interní dokumentace
- ▶ kód dokumentován pomocí JavaDoc

- ▶ 21. 3. - setkání o možnostech práce na projektu Caver a rozdělení úloh
- ▶ 22.3. - 20.4. - zorientování se v Caveru a práce na vývoji
- ▶ 21.4. - 4.5. - testování a drobné úpravy
- ▶ 5.4. - 22.5. - rozpracovaná verze dokumentace
- ▶ 22.5. - finalizace a prezentace projektu

- ▶ návrh a implementace API pro práci s barevnými schématy
 - ▶ globální manažer schémat pro celou aplikaci
- ▶ oddělení systémových a uživatelských schémat
- ▶ notifikace o GUI při změnách

XML color schéma

- ▶ návrh reprezentace barevných schémat v XML
- ▶ rozdělení default a user schémat
- ▶ ukládání schémat pomocí rozdílů
- ▶ kontrolní XSD schéma
- ▶ synchronizace schémat přes projektovou stránku

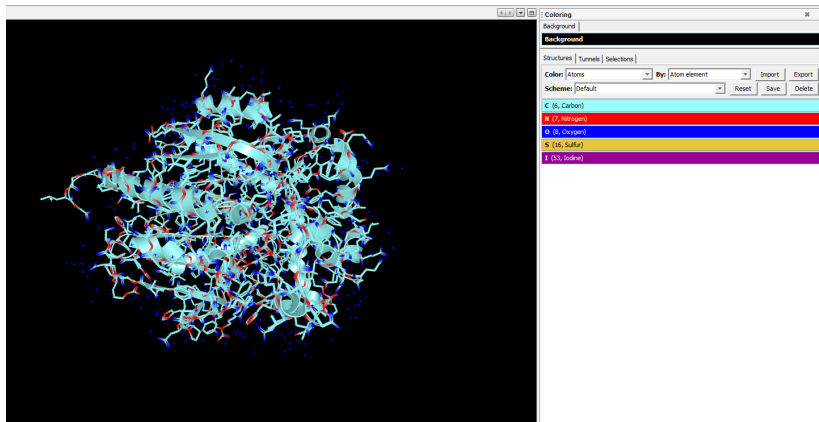
XML color schéma

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<!--
  Document : colorSchemes.xml
  Description: Native color schemes.
-->
<root xsi:noNamespaceSchemaLocation="company.xsd">
  <scheme type="Atoms" strategy="Atom element" name="Default">
    <color id="1" R="0.900" G="0.900" B="0.900"/>
    <color id="2" R="0.851" G="1.000" B="1.000"/>
  </scheme>
  <scheme type="Residues" strategy="Residue type" name="Default" >
  </scheme>
  <scheme type="Chains" strategy="Chain identifier" name="Default" >
  </scheme>
  <scheme type="Secondary structures"
    strategy="Secondary structure type" name="CMY">
  </scheme>
</root>
```

Color schémy GUI

- ▶ návrh panelů pro práci so schémami
 - ▶ možnosti spravování schémat
 - ▶ panely pro import/export uživatelských schémat
- ▶ rozdělení panelů do default a user profilů
- ▶ vyřešen problém synchronizace všech panelů pracujících s barevnými schématy
- ▶ možnost rozšiřování o další barevné strategie

Color schémý GUI



Global settings

- ▶ nastavení uloženo v settings.xml v user home složce
- ▶ bugfix - nechtěné přepisování parametrů v nastavení při inicializaci programu
- ▶ bugfix - znaková sada settings.xml
- ▶ manuální editace souboru s nastavením => tvorba jeho XSD pro validaci
- ▶ restrukturalizace settings.xml pro podporu XSD validace

XML settings

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<!--
    Document : settings.xml
    Description: Global settings of Caver Analyst
-->
<configuration>
  <entry key="CAVER_LOCALE">
    <locale>en_US</locale>
  </entry>
  <entry key="INTERPOLATE_DYNAMICS_TUNNELS">
    <boolean>>false</boolean>
  </entry>
  <entry key="CAVER_COLORS_DIR">
    <string>C:\Users\Tracko\caver\colors</string>
  </entry>
</configuration>
```

Zhodnocení projektu

- ▶ vylepšená podpora barevných schémat
- ▶ možnost importu a exportu uživatelsky definovaných schémat
- ▶ zpřístupnění XSD souboru pro manuální validaci
- ▶ nové přívětivé uživatelské rozhraní
- ▶ snadná rozšiřitelnost aplikace o další barvitelné prvky
 - ▶ jednoduše využitelné veřejné API
 - ▶ notifikace jednotlivých komponent
- ▶ vylepšená správa globálního nastavení aplikace