



Model of Deepmatcher Production Report

Team : AI Drug Development Operation Team

Project Manager : JiYoon Shin

Project Developer : JeongSoo Na

Date : 2023.04.06

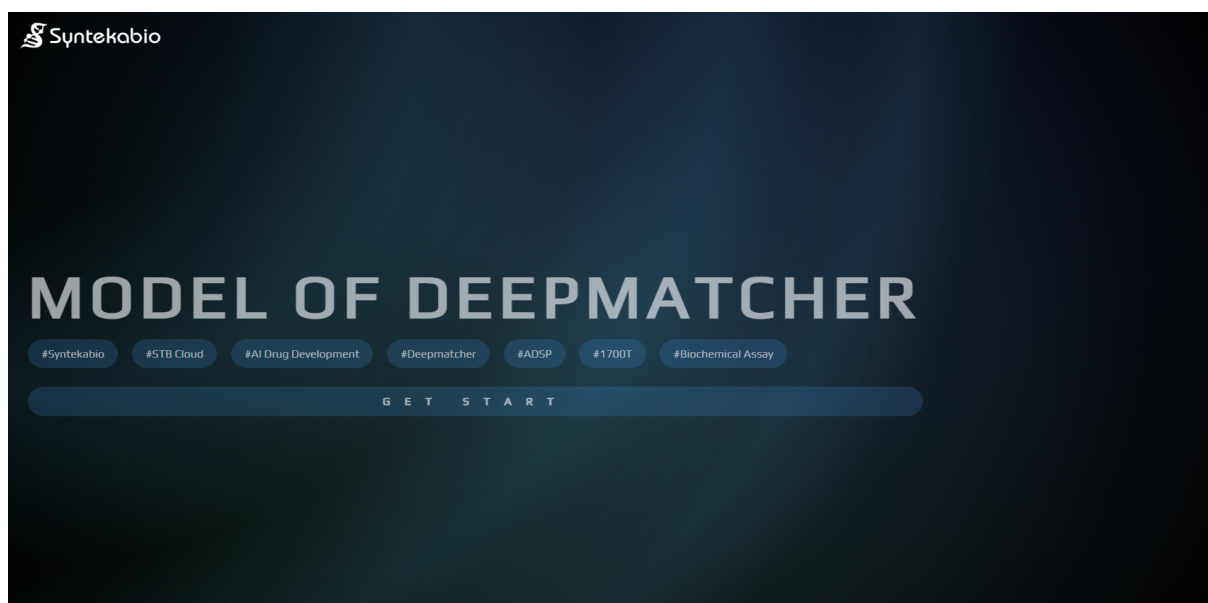
Estimated required date : 2023.02.01 ~ 2023.04.06

OBJECT

1. 확보한 1700T 모델 타겟 유무 확인을 위한 Web Page 구현
 2. Deepmatcher 사용 전 관심 타겟의 상세 정보 및 구조 파일, 실험 데이터 확인
 3. 다양한 옵션들로 카테고리 분류, 검색 기능을 통한 유연한 데이터 조회
 4. 내부 유저 사용을 위한 통합된 사내 타겟 DB 구축
-

Overview

- Main Page
 - Main Banner 및 link 이동을 위한 Navigator



- Database Page
 - 검색 기능
 - Database table 표기
 - 옵션 설정으로 필터링 기능

The screenshot shows the Syntekabio database interface. At the top, there is a search bar with the placeholder text "Please Enter Uniprot ID" and a "search" button. Below the search bar, there is a sidebar with "OPTION" and "Family" sections. The "Family" section includes checkboxes for "Kinase", "Peptidase", and "Others". The "Function Mode" section includes checkboxes for "Agonist", "Antagonist", and "Others". The main area displays a table with the following columns: ID, Uniprot ID, Protein Name, Type, Model PDB, LIG, STB Class, and ModelActionMode. The table contains 17 rows of data. At the bottom, there is a disclaimer: "For Web after 1700T model validation project This web was created to effectively use 1700T model data. Made for in-house use. It is a demo version before database construction, so sufficient correction and feedback are required. If necessary, we can request the co-work from the AI center team after completing the demo version."

ID	Uniprot ID	Protein Name	Type	Model PDB	LIG	STB Class	ModelActionMode
1	O15229	KMO	wild	5x8A	FAD	oxidoreductases	Inhibitor
2	O60341	LSD1	wild	2xagA	M84	oxidoreductases	Inhibitor
3	O60341	LSD1	wild	5iguA	6W1	oxidoreductases	Inhibitor
4	O75364	KDM4A	wild	5F2aD	5TZ	methylase	Inhibitor
5	O75364	KDM4A	wild	5F3D	5UJ	methylase	Inhibitor
6	O94953	KDM4B	wild	4x4A	P02	methylase	Binding
7	O95271	TNKS1	wild	49dD	1DY	Transferase	Inhibitor
8	O95271	TNKS1	wild	4u4A	T40	Transferase	Inhibitor
9	P09958	FURIN	wild	6y22A	ON8	Peptidase	Inhibitor
10	P09958	FURIN	wild	6y27A	2UE	Peptidase	Inhibitor
11	P17752	TPH1	wild	3HbA	ML4	oxidoreductases	Inhibitor
12	P17752	TPH1	wild	5f6aB	6H5	oxidoreductases	Inhibitor
13	P26358	DNMT1	wild	3ptaA	SAH	methylase	Inhibitor
14	P26358	DNMT1	wild	3swaA	SFG	methylase	Inhibitor
15	P31153	METK2	wild	4kvcC	POP	Synthase	Inhibitor
16	P31153	METK2	wild	6fcbA	PPK	Synthase	Inhibitor
17	O15113	PTPRB	wild	3u99A	RTF	phosphatase	none

- Database popup
 - 상세내용
 - RCSB, Uniprot, PDB down 기능

The screenshot shows the Syntekabio database interface with a "Model Information" popup window open. The popup window displays the following information: Uniprot ID (O60341), Protein Name (LSD1), ModelPDB (5iguA), LIG (6W1), STB Class (oxidoreductases), Model Action Mode (Inhibitor), and Cluster (cl1). The background shows the same search bar and table as the previous screenshot. At the bottom, there is a disclaimer: "For Web after 1700T model validation project This web was created to effectively use 1700T model data. Made for in-house use. It is a demo version before database construction, so sufficient correction and feedback are required. If necessary, we can request the co-work from the AI center team after completing the demo version."

Process

1. Project 기획 > 개발일정 설정 > 기능 명세서 작성
2. Web page 구현을 위한 HTML, CSS, Javascript 사용
3. Database : 데이터 양이 많지 않아 사용에 용이한 WebSQL 사용
4. Database Connection : raw data(csv) 읽은 뒤 Database 생성 및 transaction / executeSql 사용 관리
5. Publishing : Main Page 생성을 통한 기능 확장 및 UI 개선
6. DB Table : HTML table 활용 DB에서 append
7. DB search : Uniprot ID로 검색 기능

8. DB option : Column 및 조회 된 데이터 필터링
 9. DB popup : 상세 내용 및 링크, 다운로드 파일 구현
 10. Final Inspection : demo version 피드백으로 개선사항 및 최종 raw data 반영
 - ADSP팀, 신지윤 박사님, 허정은 주임님
-

Improvements

- 검색 기능 개선 (Uniprot ID 이 외 다양한 검색 요구)
 - 옵션 추가 (다양한 옵션 추가로 편의성 제공)
 - 실험가부 및 Assay data 추가
 - 단백질 구조 viewer 페이지 및 기능 추가
 - 그 외 진행 중 Optional 기능 추가
-

Usage Tech

- HTML
 - CSS
 - Javascript
 - WebSQL
 - Installation : VS Code
-

Summary

1700T model validation 프로젝트 완료 시점 Web page에서 쉽게 model 구조 확인 및 실험가부 확인이 가능할 수 있도록 database 구축 및 web page 구현.

완료 시 STB-Cloud의 DMC-HIT Process 진행 이전 model 확인 및 실험가부에 따른 진행 여부 결정에 도움이 될 것으로 보임.

1700T model 확인을 위한 optional page로도 사용 가능하나 추후 database 관리 및 새로운 model 확인 시 update 도 가능한 page로 발전 가능.