**🧪 Guide Utilisateur – Application Shiny : 2D NMR Spectra Analysis**

**🔍 Objectif**

Cette application permet de charger, visualiser, traiter et exporter des spectres RMN 2D issus de données **Bruker**. Elle offre une interface interactive pour :

* Visualiser les spectres,
* Détecter automatiquement les pics,
* Ajouter/supprimer manuellement des pics ou des zones d’intégration,
* Et exporter les résultats pour analyse.

**🧭 Navigation dans l'application**

L’application est divisée en deux onglets principaux :

1. **README** – Introduction et présentation de l’outil.
2. **Visualization** – Visualisation interactive et analyse des spectres.

**1. 📂 Chargement des données**

**Étapes :**

* Accédez à l’onglet **Visualization**.
* Dans le panneau **📂 Load** :
  + Cliquez sur **Select Main Directory** pour sélectionner un dossier contenant un ou plusieurs dossiers de spectres Bruker 2D.
  + Cliquez sur **🔁 Reset interface** si nécessaire pour réinitialiser l’interface.

**2. 📈 Visualisation des spectres**

**Paramétrage :**

* Onglet **📈 Plot** :
  + Sélectionnez un **type de spectre** : TOCSY, COSY, HSQC ou UFCOSY.
  + Choisissez la **méthode de seuil** (par pourcentage du max ou bruit × facteur).
  + L’onglet déroulant «**Threshold parameter »** permet le calcul automatique d’une valeur seuil de bruit, cliquez sur **Compute threshold** pour calculer ce seuil automatique (facultatif).
  + Vous pouvez également entrer un **seuil manuel** (Intensity value)
  + Cliquez sur **📊 Generate Plot** pour générer les contours du spectre.
  + Si vous souhaitez réaliser une sélection des pics automatique, vous pouvez utiliser deux méthodes présente dans l’onglet déroulant **« Peak Picking »** : une méthode basée sur du clustering pour lequel une valeur d’**epsilon (eps)** doit être saisie pour le clustering DBSCAN et une méthode dite « sans clustering » est utilisable via la case « no clustering » à cocher.
  + Cliquez ensuite sur **🔴 Find Peaks** pour détecter les pics et générer des boîtes englobantes (bounding boxes).

**3. 🔧 Modification manuelle des centroïdes et boîtes**

**Onglet 🔴 Peaks and Bounding Boxes :**

* Cliquez sur **Add/Remove a peak** pour afficher les options :
  + ➕ Ajouter un **pic manuel** : renseignez les coordonnées ppm (F2 et F1), puis cliquez sur **Add peak 🔵**.
  + ❌ Supprimer un **pic sélectionné** : sélectionnez un pic dans le tableau puis cliquez sur **Delete selected peak 🗑️**.
  + ➕ Ajouter une **boîte englobante** : entrez xmin, xmax, ymin, ymax et cliquez sur **Add box 🟦**.
  + ❌ Supprimer une **boîte** : sélectionnez-la dans le tableau et cliquez sur **Delete selected box 🗑️**.
* Une option d’affichage de coordonnées via clic est utilisable pour obtenir des coordonnées exactes que l’on souhaite ensuite utiliser pour la création d’un pics ou d’une boîte en particulier.

**4. 💾 Import / Export des résultats**

**Onglet 🔁 Import/Export :**

* **📤 Export peaks** : exporte les centroïdes détectés au format CSV dans le dossier principal sélectionné.
* **📥 Import peaks** : charge un fichier CSV contenant des centroïdes (F2\_ppm, F1\_ppm, stain\_id, stain\_intensity).
* **Export bounding boxes** : télécharge un fichier CSV contenant toutes les boîtes englobantes.
* **Export Projected Peaks**: permet d’appliquer les pics sélectionnés du spectre affichés et les projette sur les autres spectres du batch afin d’obtenir les différentes valeurs d’intensité.

**5. 🖼️ Visualisation interactive**

* Le graphe s'affiche à droite de l’interface (via Plotly).
* Les **pics** sont représentés en **points colorés** (gradient selon intensité).
* Les **zones** (bounding boxes) sont affichées en **rectangles rouges pointillés**.

**🛠️ Conseils techniques**

* Les fichiers Bruker doivent être structurés : /<spectrum\_folder>/pdata/1/ contenant ser ou fid.
* Lors du traitement, l’interface affiche des messages de progression ou d’erreur.
* Utilisez Reset interface pour repartir de zéro si nécessaire.

**📁 Structure des fichiers exportés**

**Fichier exported\_centroids.csv :**

| **stain\_id** | **F2\_ppm** | **F1\_ppm** | **stain\_intensity** |
| --- | --- | --- | --- |