**🧪 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).
  + Cliquez sur **Compute threshold** pour calculer un seuil automatique (facultatif).
  + Vous pouvez également entrer un **seuil manuel** (Intensity value) et une valeur d’**epsilon (eps)** pour le clustering DBSCAN.
  + Cliquez sur **📊 Generate Plot** pour générer les contours du spectre.
  + Cliquez ensuite sur **🔴 Find Peaks** pour détecter les centroïdes 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 🗑️**.

**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.

**5. 🧪 Analyse par lot (batch)**

L’analyse par lot permet d’appliquer les boîtes englobantes à tous les spectres chargés et d’exporter les intensités associées :

* Chargez plusieurs spectres (via un dossier contenant plusieurs sous-dossiers Bruker).
* Générez d’abord les bounding boxes sur un spectre de référence.
* Cliquez sur **📤 Export batch intensity**.
* Les résultats seront exportés dans un dossier centroid\_exports/.

**6. 🖼️ 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** |
| --- | --- | --- | --- |