

Supernatural Database

Alunos: Daniel & Keven

RA: 22201673 & 22207090

Professor: Wadre

Curso: Ciência de Dados

O que é o SuperNatural 3.0?

Supernatural 3.0 é um banco de dados de produtos naturais disponível gratuitamente para todos os usuários, sem qualquer login ou registro. A versão atualizada contém 790.096 estruturas diferentes, incluindo isômeros e 449.058 compostos naturais únicos, juntamente com suas informações estruturais e físico-químicas. Além disso, informações sobre caminhos, mecanismos de ações, toxicidade, informações de fornecedores, se disponível, previsão de espaço químico semelhante a drogas para várias doenças como antivirais, antibacterianas, antimaláricas, anticancerígenas e células-alvo específicas, como o sistema nervoso central(SNC), também são fornecidas para os compostos naturais. A versão atualizada do banco de dados também fornece um conjunto valioso de compostos naturais nos quais se espera encontrar potenciais compostos altamente doces. O possível perfil de sabor dos compostos naturais foi previsto usando modelos publicados do virtualtaste .O banco de dados **SuperNatural** , foi publicado pela primeira vez em 2006 e a segunda atualização (SuperNatural II) foi publicada em 2015 sua mais recente atualização (SuperNatural 3.0) foi publicada oficialmente dia 18 de dezembro do ano de 2022.(porém aqui no Brasil aparentemente ele só atualizou dia 25 de dezembro)

Link do artigo; <https://doi.org/10.1093/nar/gkac1008>

base técnica do banco de dados e do site

Os dados são armazenados em um banco de dados relacional MySQL, que está hospedado no sistema de TI da Charité. Para o tratamento das informações químicas no banco de dados, 'em um servidor LAMP (Linux/Apache/MySQL/PHP) baseado em laboratório, com PHP servindo como linguagem de back-end. A conexão com o banco de dados é estabelecida por meio da interface MySQL e entrega de dados front-end por meio de uma mistura de Html de respostas de envio e solicitações AJAX. As funcionalidades do site são implementadas utilizando Javascript e, por extensão, seu plugin [jQuery](#) . Além disso, o CSS_Framework [Bootstrap 4](#) é usado. As tabelas do site foram criadas com o plugin jQuery [DataTables](#) e a [extensão de classificação absoluta](#) . Para a interface química, foi utilizada a biblioteca JavaScript [ChemDoodle Web components](#) . O uso de um navegador compatível com JavaScript é essencial, e o servidor foi testado na versão mais recente do Google Chrome e Mozilla Firefox.

Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(HDonors) com linha de tendência.

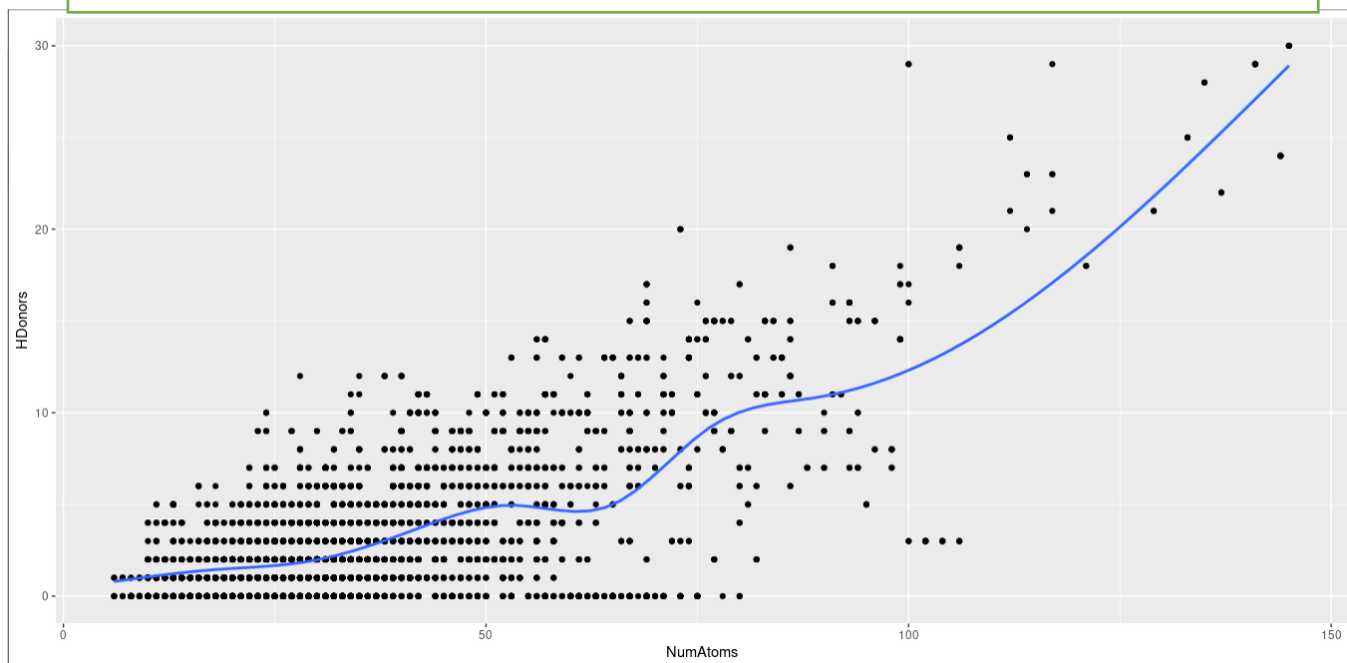


Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(tpsa) com linha de tendência.

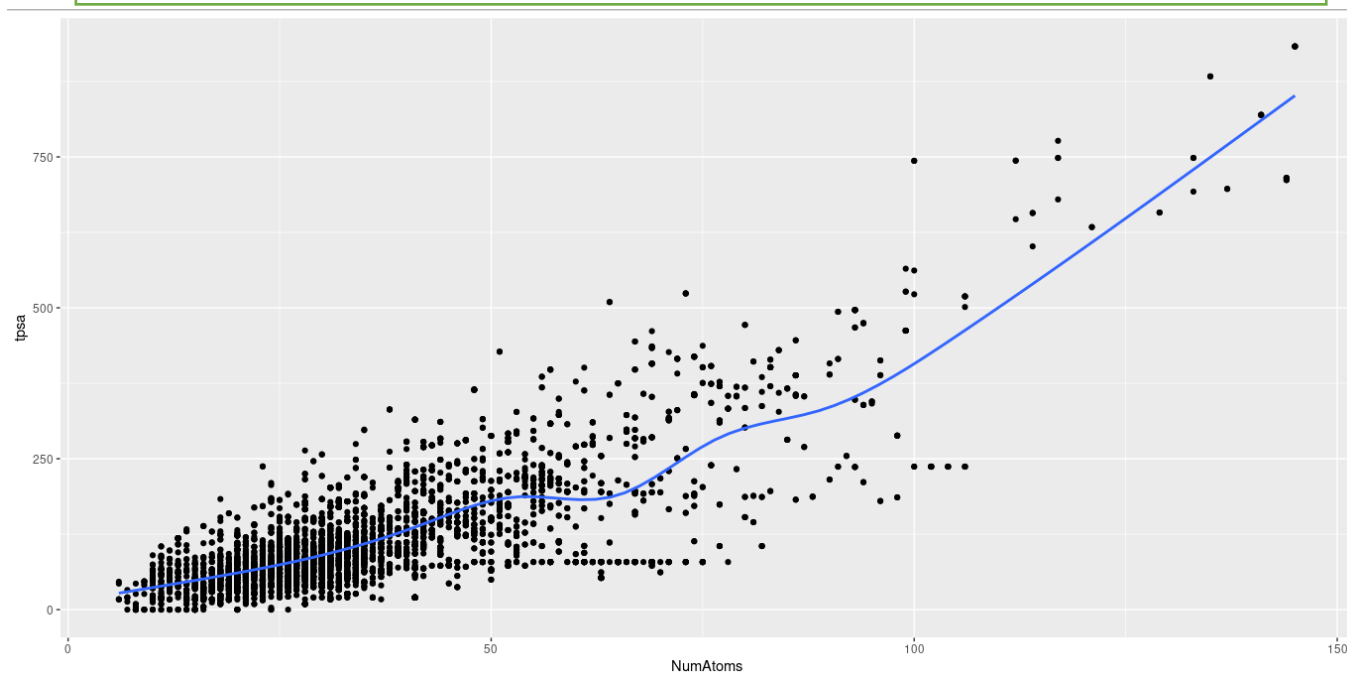


Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(MolWt) com linha de tendência.

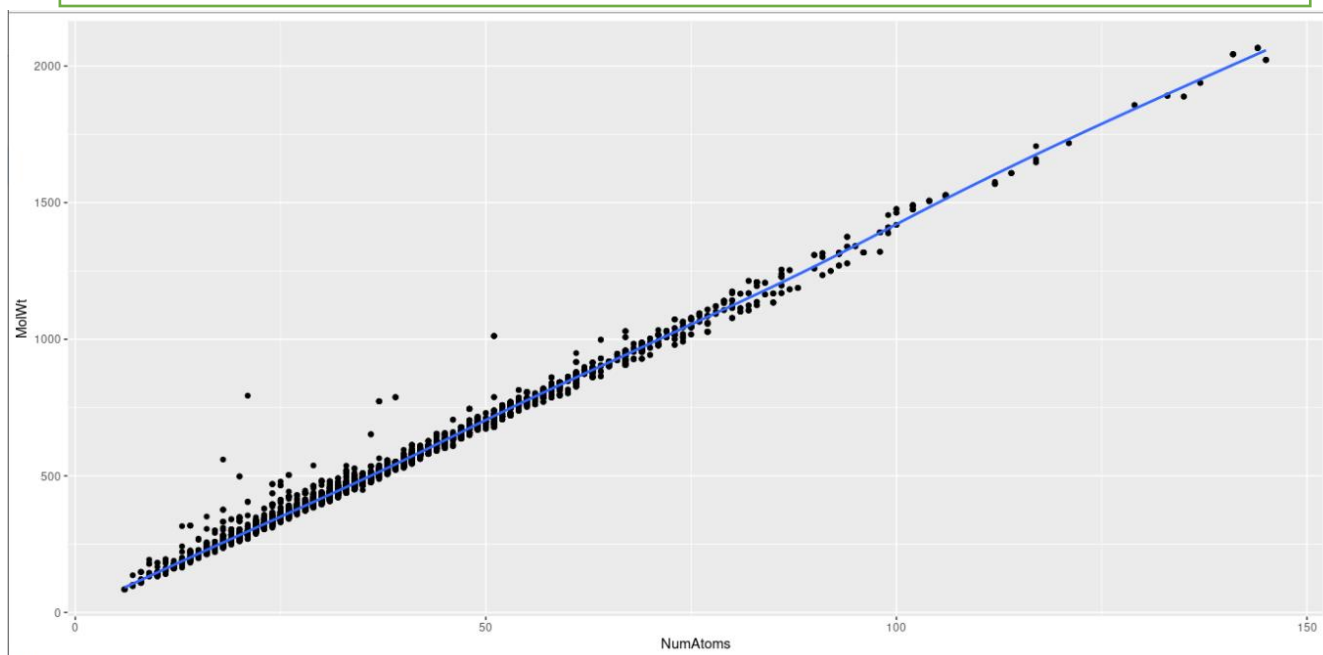


Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(MolLogp) com linha de tendência.

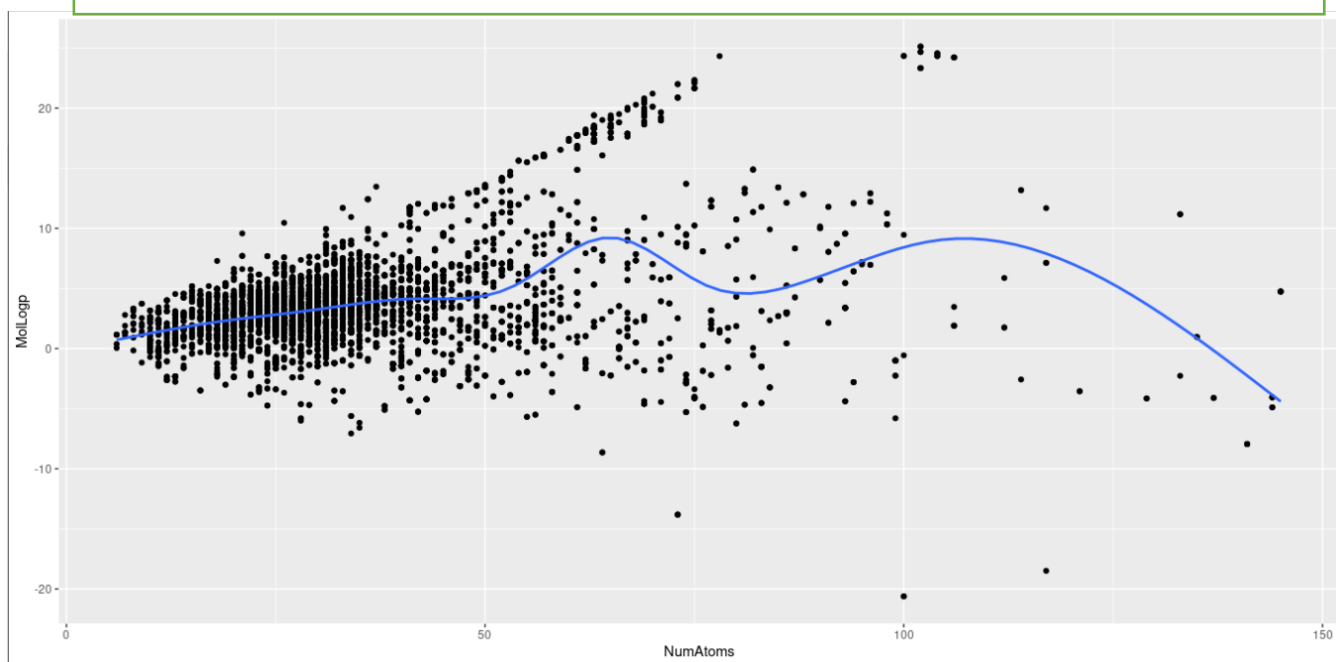


Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(RindCount) com linha de tendência.

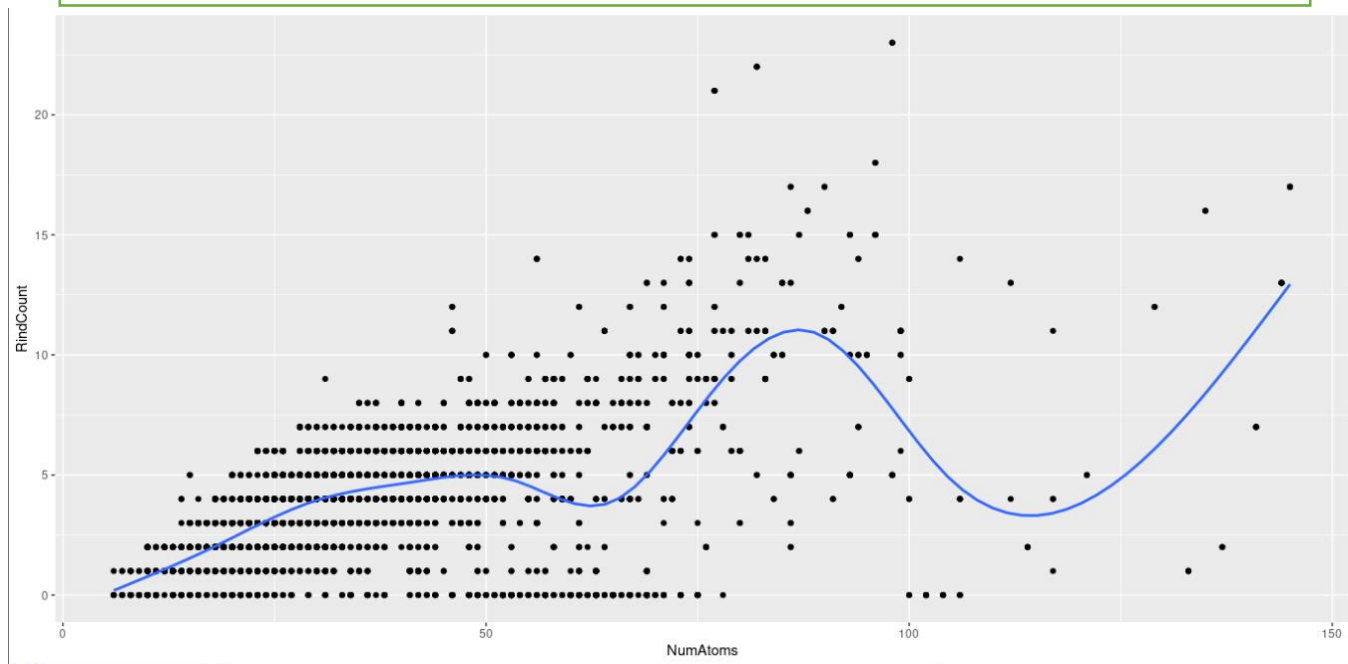


Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(RotableBonds) com linha de tendência.

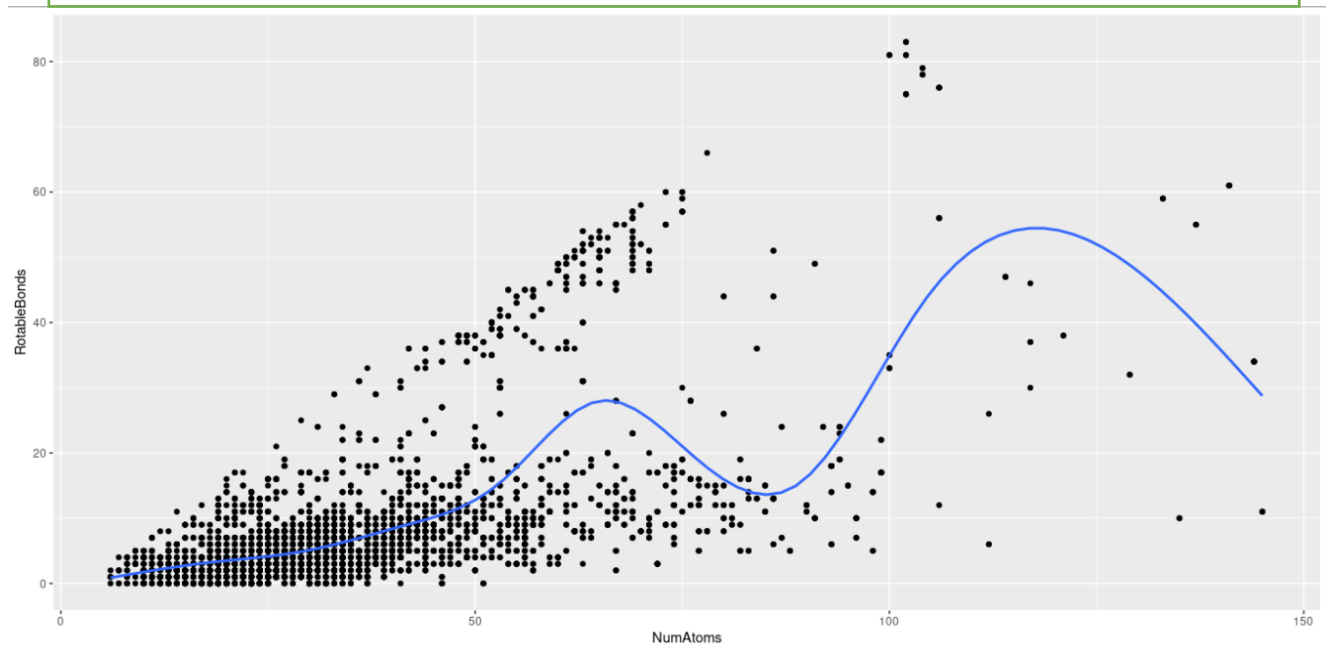
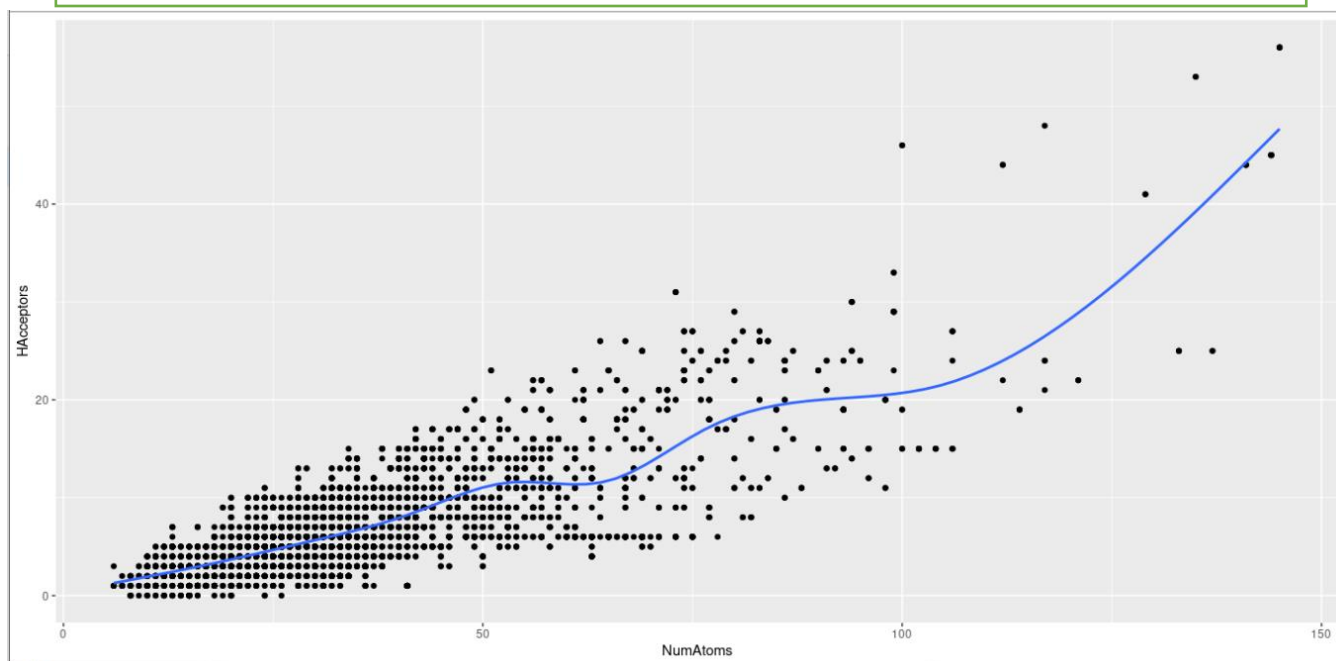
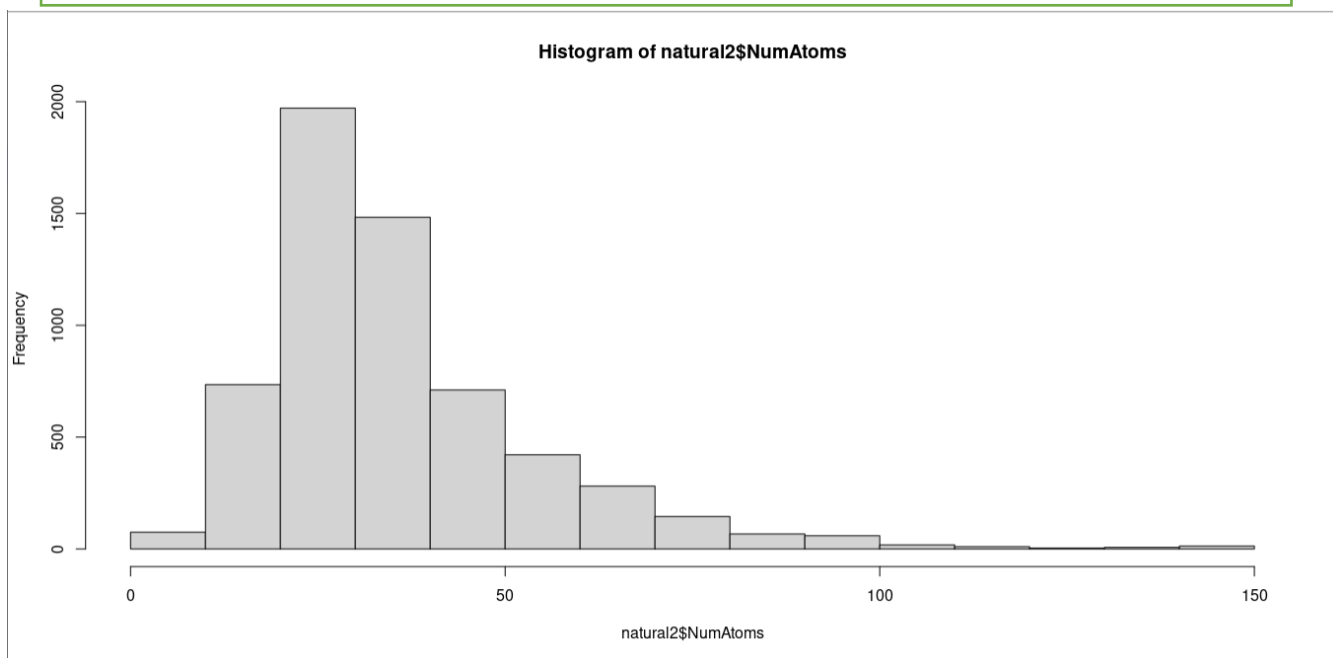


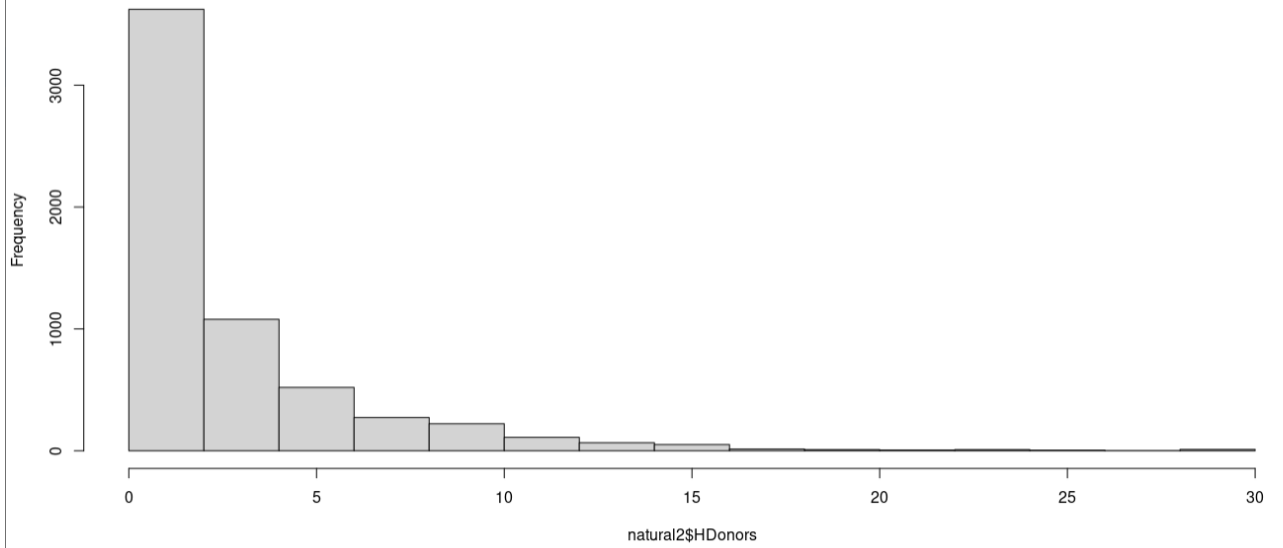
Gráfico de dispersão com X(NumAtoms) e Y(HAcceptors) com linha de tendência.



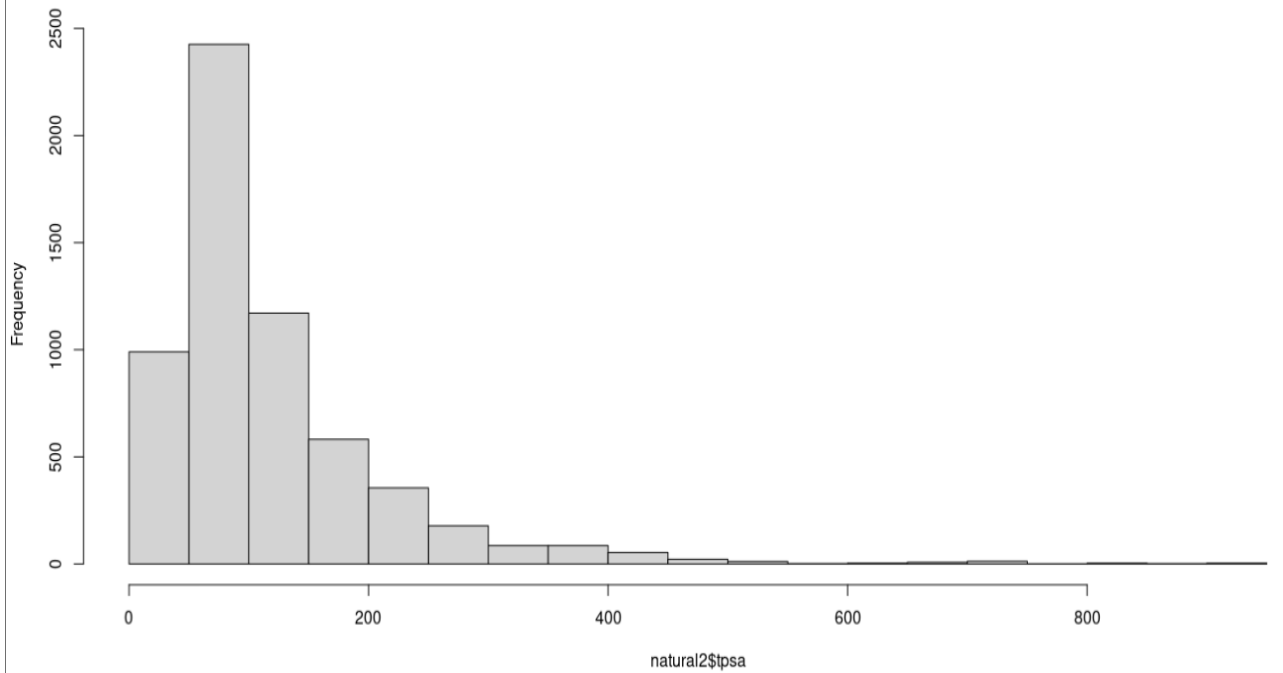
Histograma da frequência (NumAtoms).



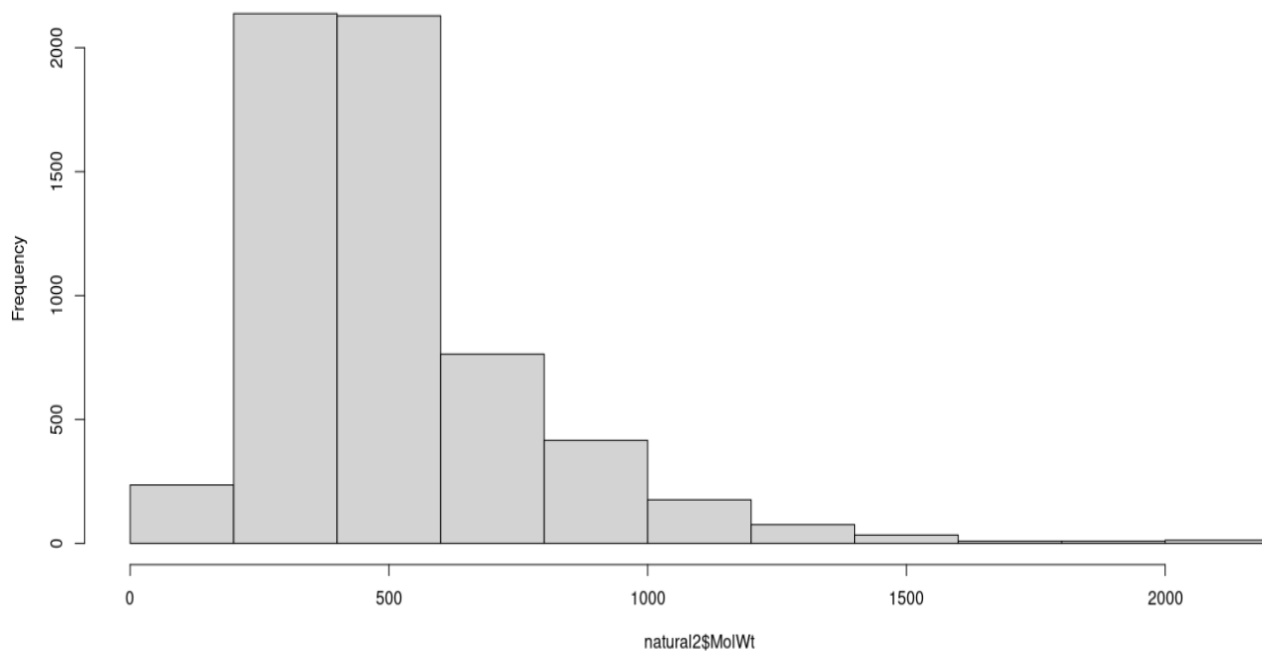
Histograma da frequência (HDonors).



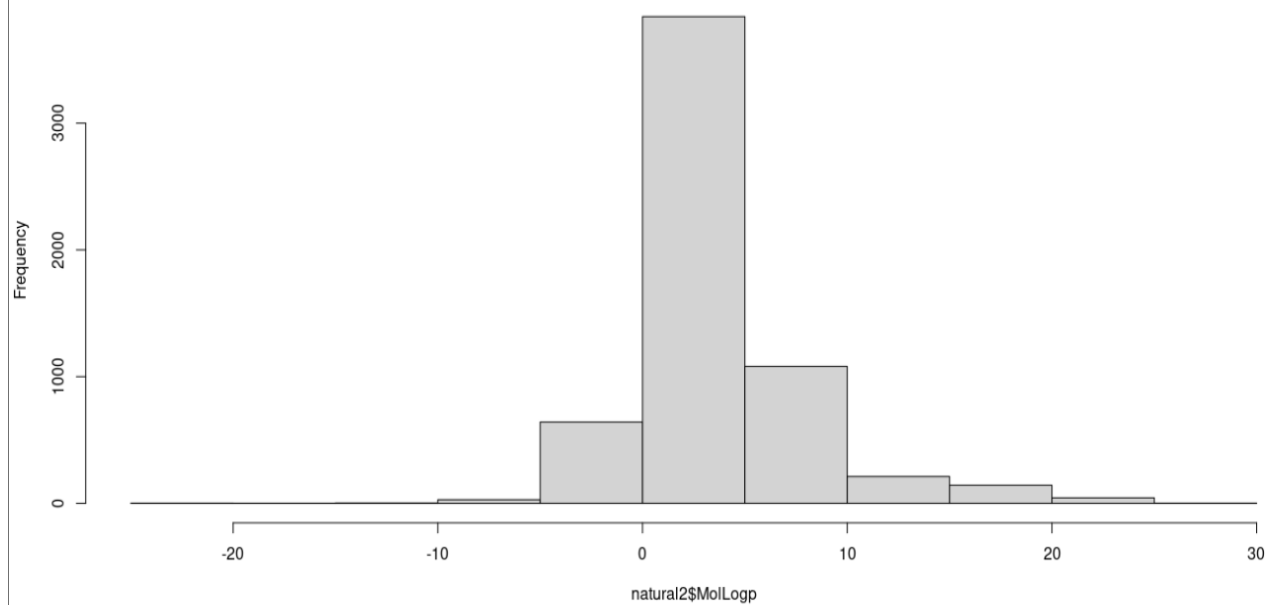
Histograma da frequência (tpsa).



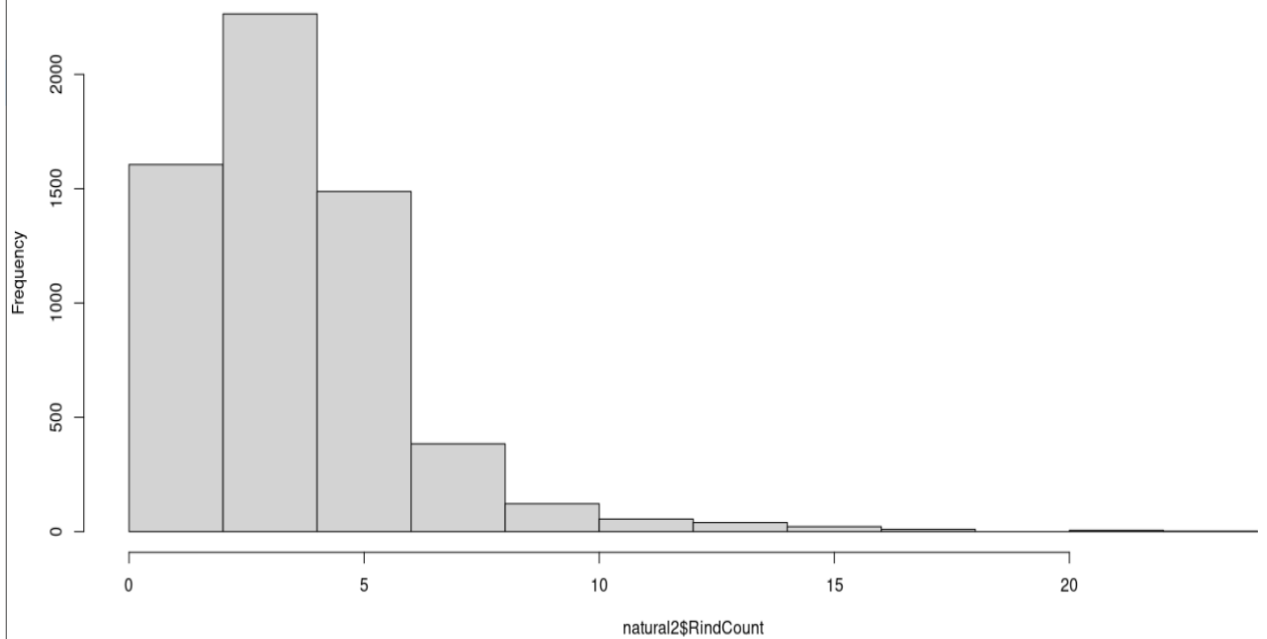
Histograma da frequência (MolWt).



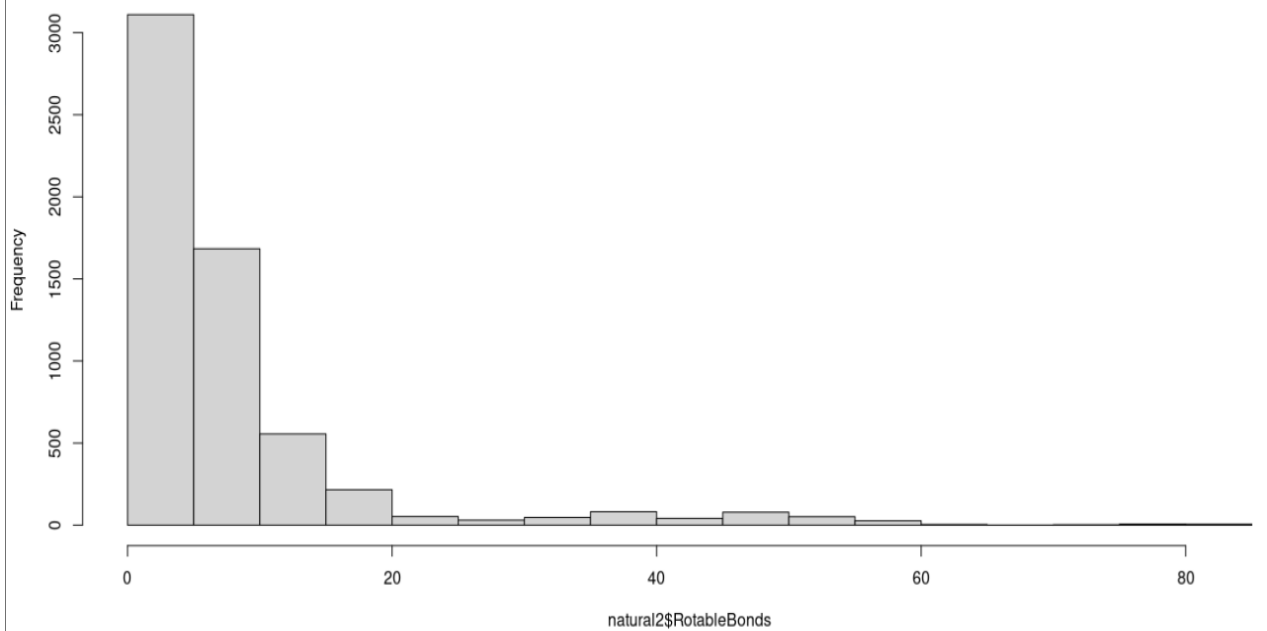
Histograma da frequência (MolLogp).



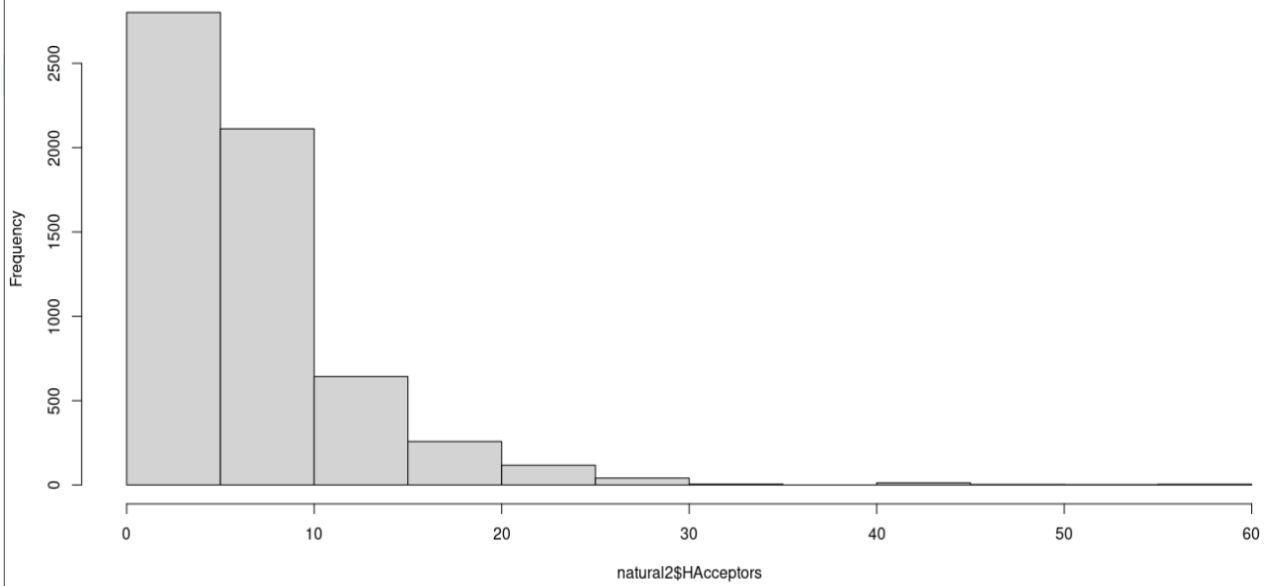
Histograma da frequência (RingCount).



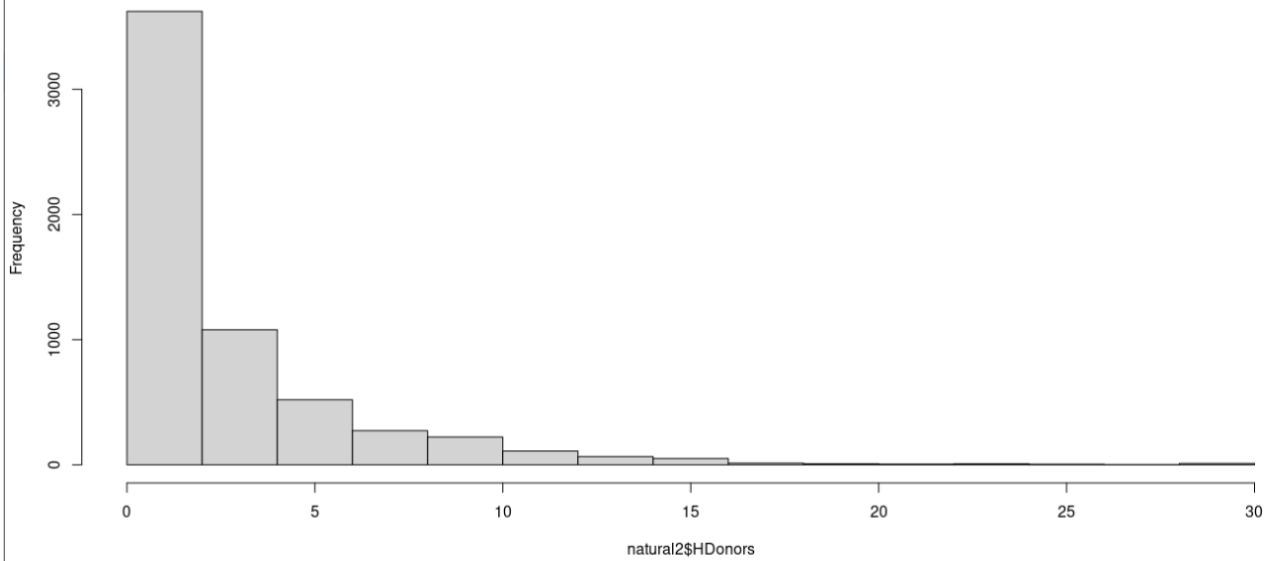
Histograma da frequência (RotableBonds).



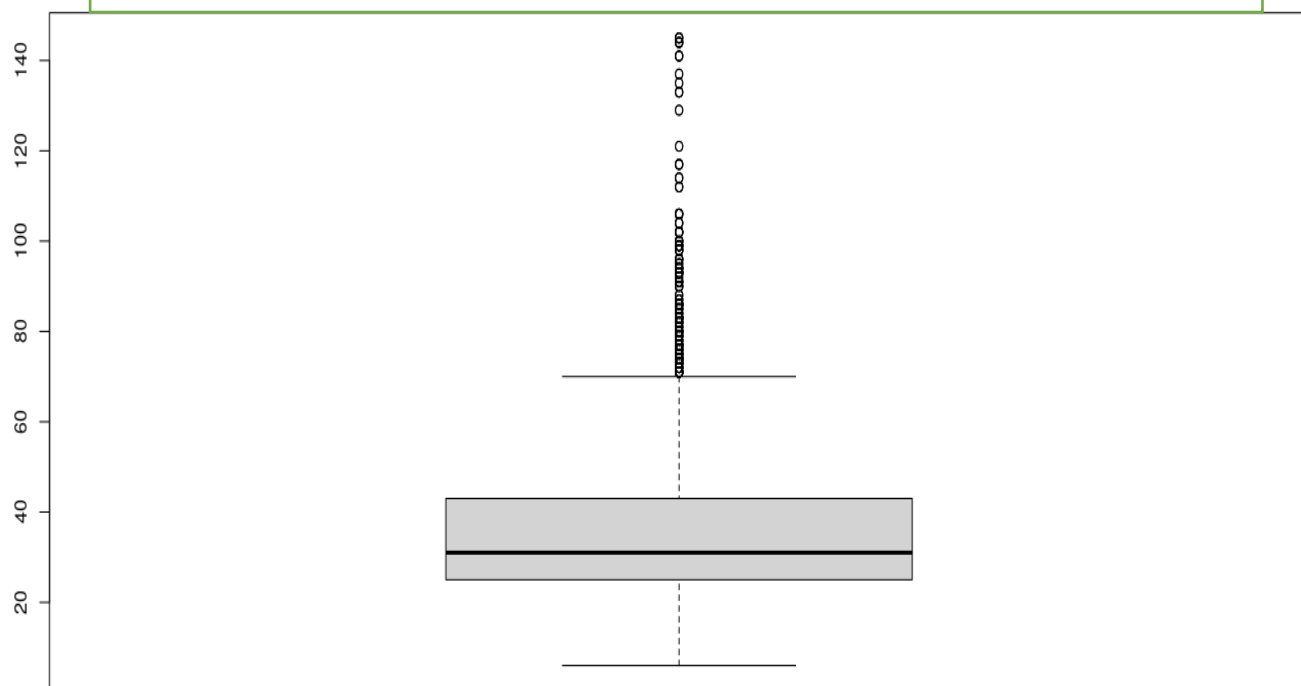
Histograma da frequência (HAcceptors).



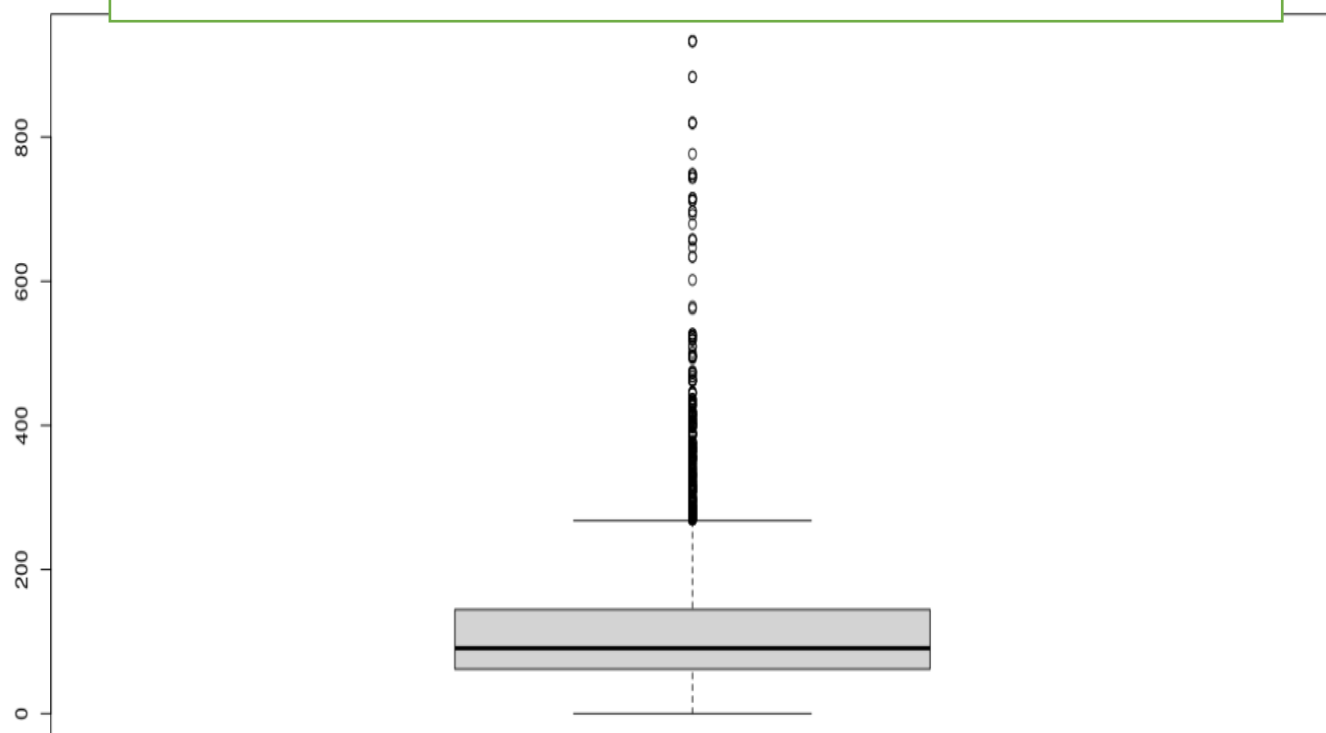
Histograma da frequência (HDonors).



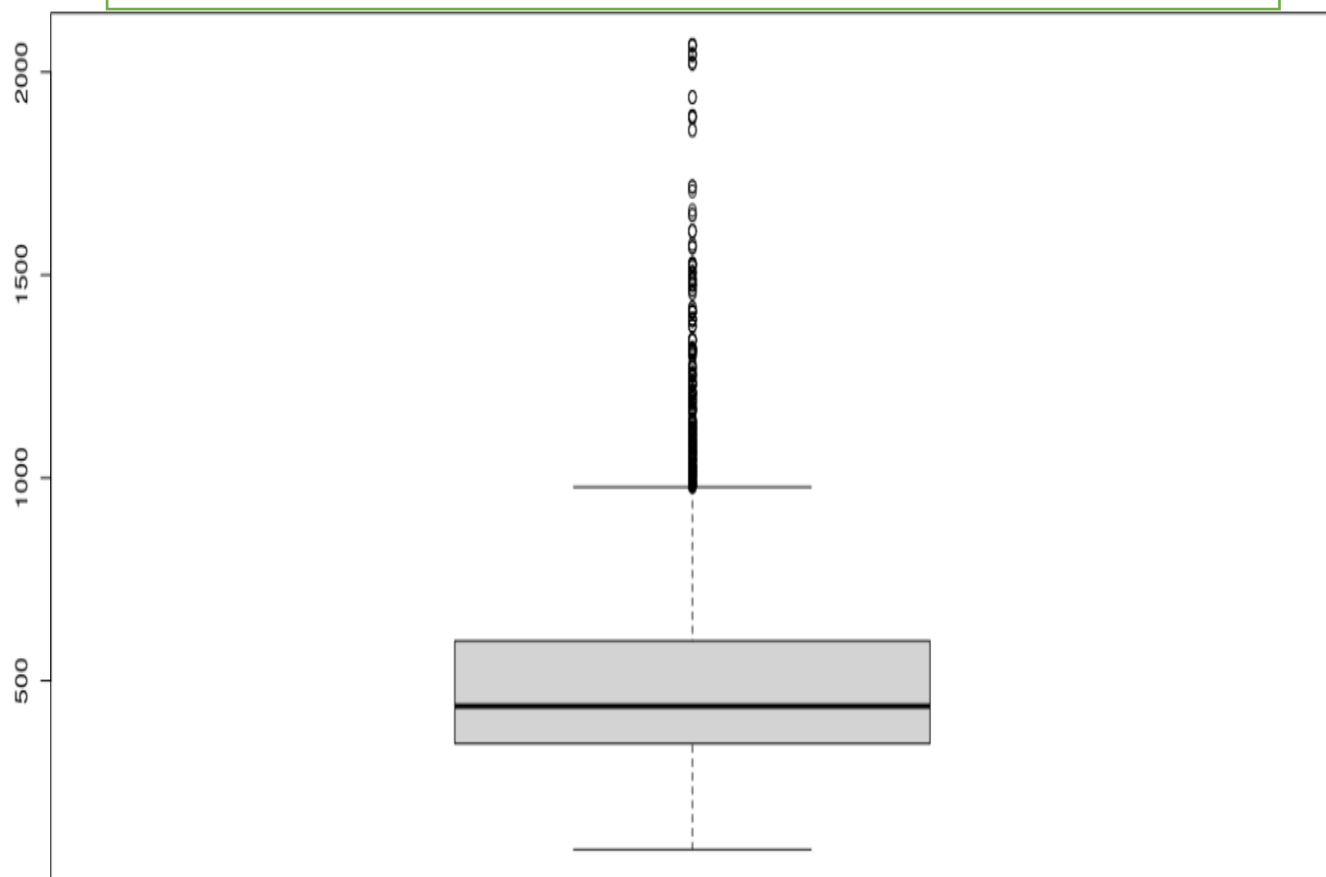
Boxplot do (NumAtoms)



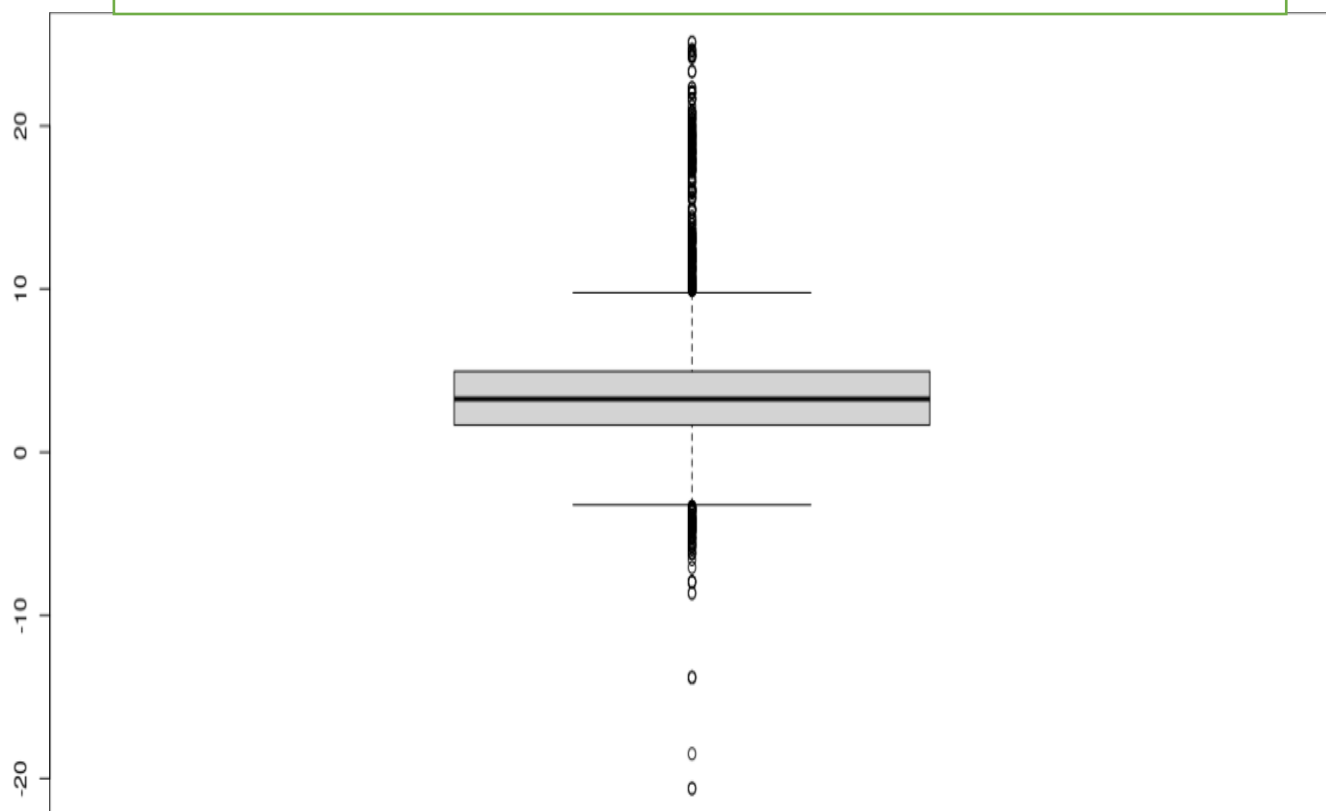
Boxplot do (tpsa)



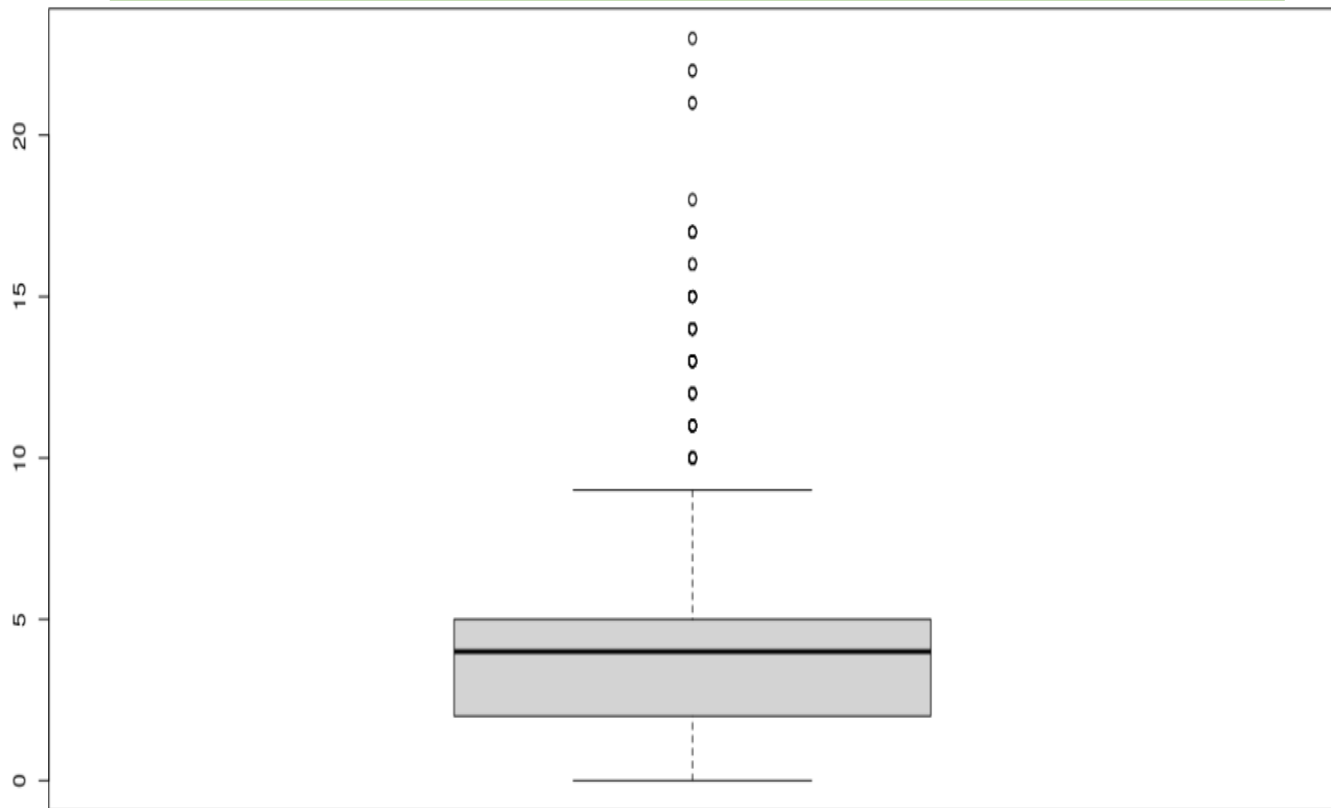
Boxplot do (MolWt)



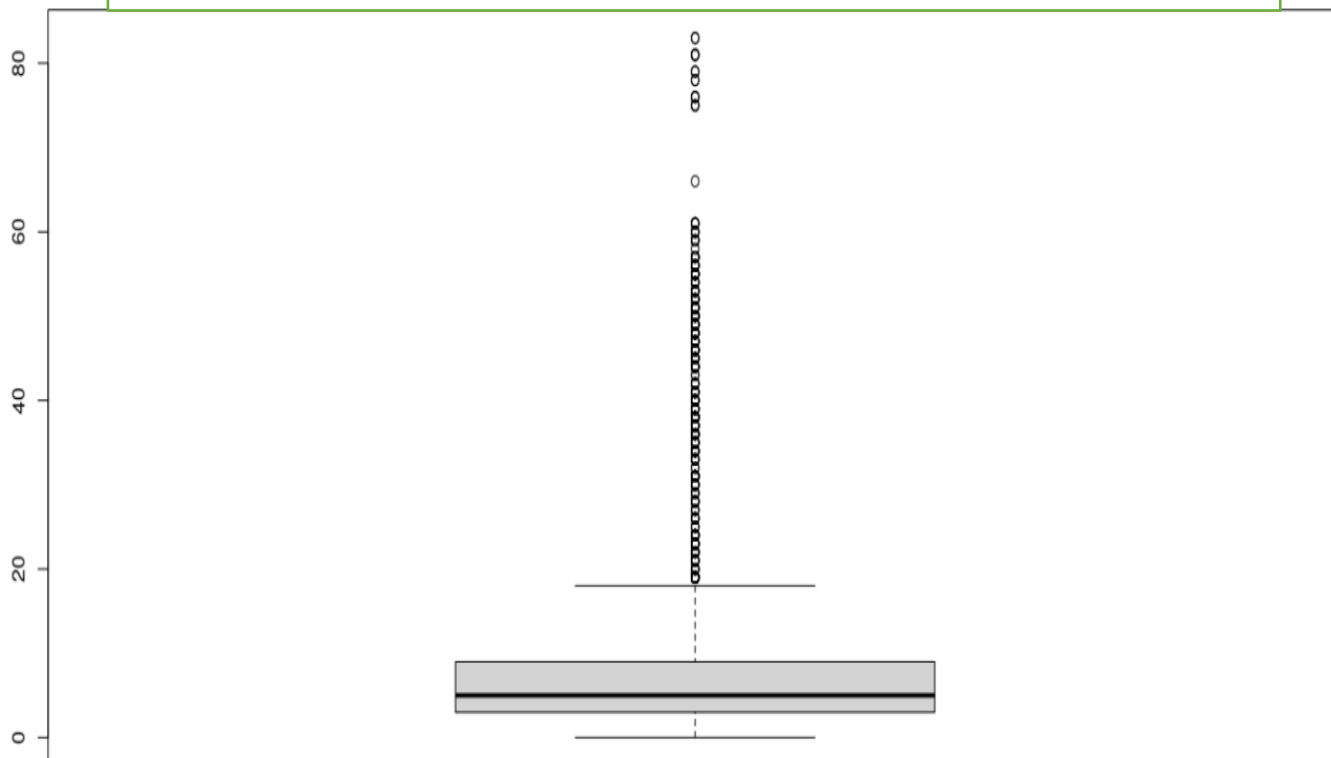
Boxplot do (MolLogp)



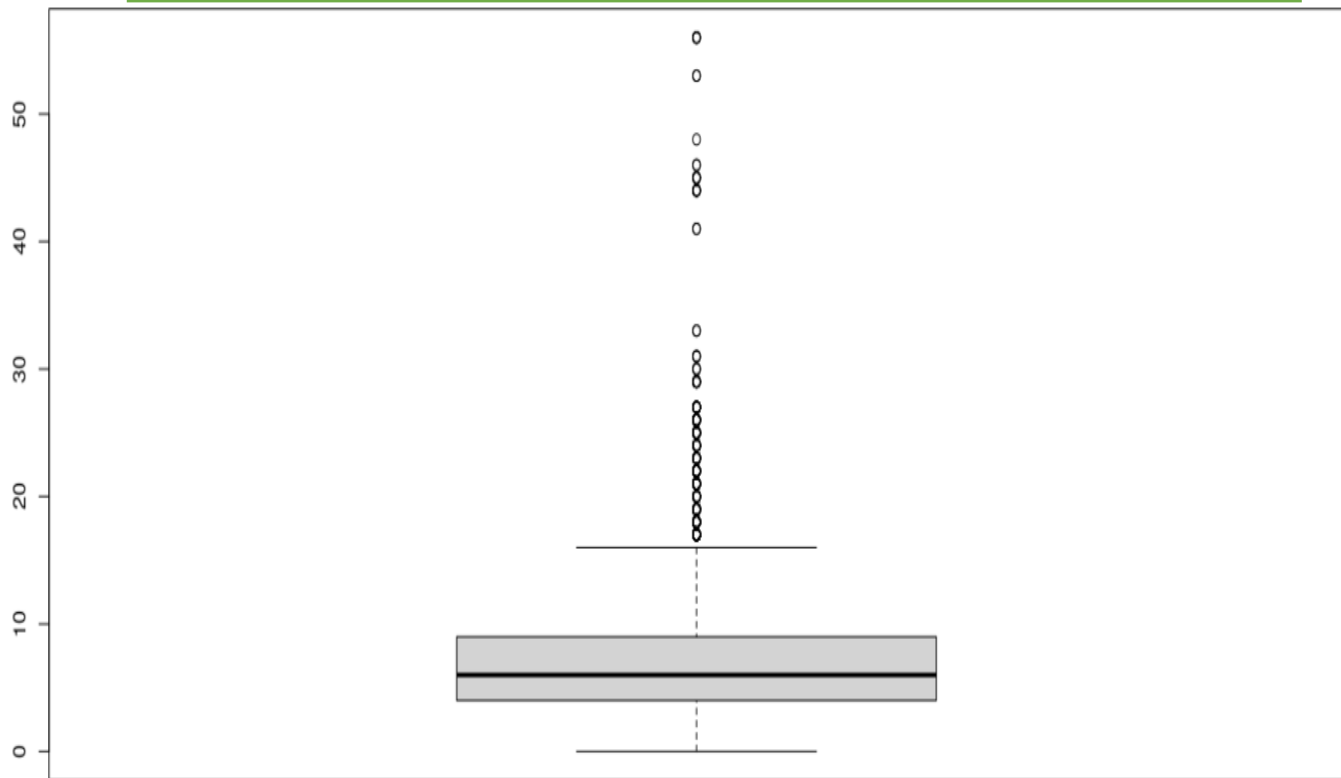
Boxplot do (RingCount)



Boxplot do (RotableBonds)



Boxplot do (HAcceptors)



Boxplot do (HDonors)

