

Informe app SmallMol.

Hem desenvolupat l'app amb la finalitat de poder tractar amb més facilitat les grans quantitats de dades que trobem a les bases de dades, que volem que es puguin veure d'una forma fàcil i que es pugui interactuar amb aquestes dades. En aquestes dades que s'introdueixen no hi pot haver lletres només s'accepten números sinó dona error, per això hem editat el CSV amb les dades que ens heu passat.

Per iniciar el funcionament, primer s'ha de seleccionar la base de dades amb la que es vol treballar, quan es pugi el fitxer correctament, es mostrarà la taula amb les dades d'aquesta i es podran seleccionar les columnes que es necessitin. Ho hem fet d'aquesta manera, ja que així és molt més fàcil poder veure les dades a la taula amb poques columnes que amb moltes.

Per poder visualitzar les dades hem fet una pestanya anomenada gràfics, on hi ha dues pestanyes una amb el gràfic k-means on es veu el gràfic i els paràmetres desitjats i la segona amb el gràfic de barres de rule of 5. S'han de seleccionar dues variables que es clusteritzen i, a més, es poden triar quants números de clústers es volen.

Per desenvolupar tota l'app hem utilitzat Shiny. Shiny és un paquet que facilita la construcció d'aplicacions web interactives directament des de R & Python. Nosaltres hem fet servir R per usar Shiny.

Finalment, ens hauria agradat que el k-means funcionés amb totes les possibilitats entre les variables i un altre afegit de l'app que pogués seleccionar una molècula i a sota es mostra quants targets té associats i la seva bioactivitat. També es mostra un enllaç de la molècula a la base de dades de ChEMBL i finalment també la seva imatge 2D.

Però ens hem trobat amb una manca de temps que ens ha impedit acabar de descobrir totes les capacitats d'aquesta tecnologia que era nova per nosaltres. Per això volem proposar una segona fase per l'app, així tindrem més temps per poder acabar d'entendre aquesta tecnologia i poder fer l'app com la volíem fer des d'un principi.