

Tím 20 - FOTOTOX

Retrospektíva šprintu č. 10

Začiatok šprintu: 17.3.2022

Koniec šprintu: 24.3.2022

Sumarizácia šprintu

Ústrednou témou tohto šprintu bolo napísanie článku pre IIT.SRC, vzhľadom na blížiaci sa marcový deadline. Väčšinu obsahu článku sa podarilo napísať už v tomto šprinte: v článku sa opísal problém fototoxicity látok, spôsoby testovania látok, dôležité chemické deskriptory, opísal sa proces modelovania ako aj pipeline pre machine learning.

Kľúčovým momentom v tomto šprinte bolo nájdenie článku so SOTA riešením predpovedania fototoxicity pomocou strojového učenia, v ktorom sme tiež našli ďalšie množstvo nových látok. Pomocou nášho modelu a s využitím RDKit deskriptorov dokázal náš model mať o 2% lepšiu senzitivitu a 5% lepšiu špecifickosť ako spomínané SOTA riešenie.

Okrem iných vecí sme tiež riešili jednotkové testy ako aj časť stránky, na ktorej môže oprávnený používateľ odsúhlasiť ešte neoverené odovzdané dáta o fototoxicite nových látok. Okrem toho sme sa venovali možnému spôsobu augmentácie dát.

Burnup graf

Date - 17 March 2022 - 24 March 2022



Export úloh

Issue Type	Key	Summary	Assignee	Reporter	Status	Resolution	Created	Resolved
Task	PP-153	Data augmentation script	Tibor Sloboda	Matej Halinkovič	Done	Done	03/03/2022 10:53	24/03/2022 10:15
Task	PP-154	Create page for submitted data validation	Patrik	Matej Halinkovič	Done	Done	03/03/2022 10:53	24/03/2022 10:21
Task	PP-166	Django unit tests	Kateřina Muřková	Matej Halinkovič	Done	Done	16/03/2022 13:37	24/03/2022 10:16
Task	PP-167	Sprint retro 9	Jakub Knánik	Matej Halinkovič	Done	Done	16/03/2022 13:38	24/03/2022 10:15
Task	PP-168	Meeting report 5	Kateřina Muřková	Matej Halinkovič	Done	Done	16/03/2022 13:38	24/03/2022 10:29
Task	PP-169	IIT.SRC paper draft	Matej Halinkovič	Matej Halinkovič	Done	Done	19/03/2022 11:36	24/03/2022 10:22

Čo sme spravili dobre?

- Napísanie podstatnej časti článku pre konferenciu IIT.SRC.
- Nájdenie článku so SOTA riešením - lepšie výsledky nášho modelu.

Čo nám robilo problémy?

- Augmentácia dát - problém hľadania dvojice bodov s najkratšou vzdialenosťou.

Návrhy na zlepšenie

- Dopísať článok na IIT.SRC, pridať kapitolu k nasadeniu modelu.
- Zjednotiť jazyk na stránke (resp. spraviť lokalizáciu).