

Tím 20 - FOTOTOX

Zápisnica zo stretnutia č. 12

Téma stretnutia: Úvod do problematiky

Dátum a čas stretnutia: 9:00 17.2.2022

Riešené problémy

Alvadesc SW

- Možnosť získania SW, ktorý má okrem desktopovej verzie spravené aj rozsiahle API pre python
- Poskytuje podobnú funkcionality ako RDkit, ktorý používame súčasne, ale je schopný sprostredkovať výrazne väčšie množstvo informácií o molekulách
- Potrebujeme zistiť viac informácií o licencií. Je pravdepodobne viazaná priamo na zariadenie.

VM

- Dizajn webovej aplikácie a jej hlavná funkcionality sú pripravené na nasadenie. Potrebujeme získať HW prostriedky.
- Podľa dostupných prostriedkov budeme musieť určiť postup nasadzovania.

Bezpečnosť

- Časť funkcionality našej web aplikácie, ktorú chceme sprístupňovať iba používateľom z akademických inštitúcií sme sa rozhodli ošetriť implementovaním databázy verejných rozsahov IP, voči ktorej budeme overovať prichádzajúce requesty.

Dáta

- Zostavili sme zoznam niekoľko desiatok potencionalne NPT látok, ktoré sme odoslali na overenie.

Nové úlohy

- Spracovať vzorový output SW Alvadesc, dostať ho do použiteľného tvaru a zistiť potencionálny benefit práce s nástrojom.
- Zčať s implementovaním nového dizajnu webovej aplikácie.
- Príprava na nasadenie aplikácie.
- Prerobiť backend do Postgresu, pripraviť rozhranie pre overovanie IP adries.
- Spraviť prototyp nástroja na vykreslovanie molekúl.