

# Tím 20 - FOTOTOX

## Zápisnica zo stretnutia č. 13

**Téma stretnutia:** Webapp

**Dátum a čas stretnutia:** 9:00 24.2.2022

### Riešené problémy

---

#### Webapp

- Problém so súčasným nasadením webstránky tímu a webovej aplikácie na rovnakej VM.
- Diskusia o použití kombinácie Django frameworku pre webovú aplikáciu a aj pre statickú webstránku tímu.

#### Kreslenie molekúl (Marvin JS a alternatívy)

- Implementovanie kreslítka molekúl cez Marvin JS - potrebná licencia. Existuje FreeWeb licencia, ktorú je možné použiť na 2 roky, pričom stránka musí byť voľne prístupná (no login) a nekomerčná. Pre použitie Marvin JS je teda potrebné kontaktovať ChemAxon ohľadom licencie.
- Alternatívou môže byť softvér pod MIT licenciou <https://github.com/reymond-group/smilesDrawer>. Oproti Marvin JS však je možné len zobrazit' molekulu - nie je možné ju priamo kreslit'.

#### Deskriptory (Alvadesc)

- Diskusia o dôležitosti nových deskriptorov napr. SsOH.
- Informácie o získaní Alvadesc SW možno o týždeň
- 

#### Modely

- Podarilo sa nám natrénovat' MLP, ktoré malo lepšie výsledky ako náš doteraz najlepší RandomForest. Jeho výsledky sa nám však nepodarilo overit' pri cross validácii a v budúcich šprintoch budeme musiet' ďalej investigovat' aplikovateľnosť NN pre našu problematiku.

## Nové úlohy

---

- Priorita je deploy webappky. Treba konzultovať web hosting s Jurajom Petríkom. Jednou z možností je kombinácia Django (statická stránka) a Django (webapp).
- Pretrénovanie modelu.
- Validácia vstupov v Django.
- Preverenie spôsobov autentifikácie používateľa: IP rozsahy, token cez email, ...