

Tím 20 - FOTOTOX

Zápisnica zo stretnutia č. 5

Dátum a čas stretnutia: 2.11. 13:00

Riešené problémy

- Zúčastnili sme sa hosťovanej prednášky Ing. Dr. rer. nat. Heleny Kandárovovej.
- Dozvedeli sme sa, akým spôsobom vzniká toxická odpoveď v látkach - po zasvietení UV alebo viditeľným svetlom. UV-C nás nezaujíma, UV-B a UV-A áno, až po 800nm. Najviac nás zaujímajú látky dosahujúce peak v uvedenej oblasti.
- Dozvedeli sme sa o častých fototox. látkach. Látka musí viesť dostatočne absorbovať - deskriptor log p. Treba tiež zohľadňovať rozpustenie na koži.
- Dozvedeli sme sa o testovacích metódach - 3T3, kožný model. Zistili sme, ako sa počíta fototox. látky - IC50, PIF, MPE.
- Diskusia o tom, ako možno predpovedať fototox. Možný postup by mohol pozostávať z analýzy spektra a zisťovania, či látka, na základe svojej štruktúry vie generovať voľné radikály.
- Diskusia o dostupných databázach a extrahovaní látok z článkov.

Hotové úlohy

- Spravili sme covariance filter na použité deskriptory.
- Rozšírenie vypočítaných deskriptorov
- Optimalizácia architektúry pre spracovanie dát
- Pretrénovanie modelu s novými deskriptormi
- Navrhnutie, vytvorenie a aplikovanie novej metodológie pre Jiru.
- Extrahovanie dát z novodostupných článkov.
- Dokončenie a podanie prihlášky na TP Cup.
- Príprava otázok na ďalšie stretnutie a pre hosťa.

Nové úlohy

- Získať názvy látok z článkov od Spielmana.
- Vytiahnuť nefototox. látky z japonskej databázy.
- Príprava na tvorbu dokumentu pre míľnik 1.
- Spraviť code review pre data pipeline
- Vytvoriť masky pre rôzne nastavenia filtrovania deskriptorov
- Navrhnuť architektúru web aplikácie
- Pokúsiť sa odpojiť závislosť od externých databáz
- Preskúmať využiteľnosť sysrev pre analýzu článkov