

# ANR-05-CIGC-008 : Projet DOCK

Compte-Rendu de la réunion du 13 Septembre 2007

**OBJET : Revue des différentes avancées du projet Docking**

Lieu : Lille, Inria  
futurs

Version 1 du 13/09/2007

**Rapporteur : Even Gaël**

**Participants : Nouredine Melab, Alexandru Tantar, Dragos Horvath, Laetitia Jourdan, Jean-Charles Boisson, Gaël Even**

## Ordre du jour

- Faire le point sur les avancées réalisées durant la période estivale

## Rapport de l'ANR sur le projet Docking :

- La cohérence globale au niveau du CVS de la gforge est à améliorer
- Bon résultats au niveau de la prédiction de structure mais en attente de résultats probant pour le docking
- Besoin de plus d'implication du CEA dans le projet

## Présentation par Dragos Horvath de la nouvelle version fonctionnelle de l'échantillonnage global versus échantillonnage local.

Objectifs : déploiement de cette version sur GRID 5000. Besoin d'analyse d'outils existant par Alexandru Tantar qui devraient faciliter le déploiement.

## Présentation des avancées de Jean-Charles depuis la réunion de Dinan.

Sur les trois critères pour l'algorithme multi-objectifs :

- L'utilisation de l'énergie standard est fonctionnelle
- L'utilisation du calcul de surface marche grâce à l'intégration du code SASA dans la librairie adéquate
- Les travaux de Alexandru avec le troisième critère devaient permettre une intégration rapide dans l'algorithme

De plus, l'ensemble du code a été épuré par Jean-Charles, qui a créé une librairie et de la documentation pour le code dans le CVS de la gforge.

## Objectifs :

- Validation du calcul de surfaces (2ème objectifs) avec SASA
- Besoin de données Ligand/Protéine déjà échantillonnées pour tester l'algorithme de docking.

- Passage du modèle bi-objectifs au modèle tri-objectifs

**Interface graphique, présentation brève des avancées concernant l'aspect graphique :**

- Installation d'un environnement de développement sur le duster Docking (avec SVN)
- Installation d'une version stable sur le cluster (en cours) : bugs dûs au changement d'architecture (32 bits -> 64 bits )
- Intégration de module de gestion des utilisateurs dans des groupes et arbres de projets.

Objectifs à moyen termes: intégrer les algorithmes d'échantillonnages des protéines et de docking.

Prochain point : début octobre