

Projet DOCK

Compte-Rendu de la réunion du 8 décembre 2006

OBJET : Présentation du prototype de l'interface de l'application et mise au point de l'étape de validation

Lieu : Grenoble, CEA

Rapporteur : Cyrielle Boutroue

Participants : Cyrielle Boutroue (LIFL), Dragos Horvath (IBL), Sylvaine Roy (CEA)

ORDRE DU JOUR

- Présenter le prototype de l'interface de l'application
- Discuter sur les étapes de docking nécessaires à une meilleure compréhension d'un utilisateur
- Appréhender la validation

PRÉSENTATION DU PROTOTYPE DE L'INTERFACE DE L'APPLICATION

- Visualisation du processus d'identification et de gestion du compte
- Représentation du docking sous forme de rubriques
- Présentation des résultats avec l'outil de Chemaxon

DISCUSSION SUR LES ÉTAPES DE DOCKING NÉCESSAIRES À UNE MEILLEURE COMPRÉHENSION D'UN UTILISATEUR

- Définition du public visé : chimiste ou biologiste avec connaissance sur le docking
- Séparation du processus du docking en quatre composantes
 - Enregistrement du ligand (avec des molécules 2D ou 3D)
 - Enregistrement du site actif (fichier de protéine et fichier des atomes fixes)
 - Docking moléculaire
 - Statistiques
- Proposition de création d'un cahier des charges et de spécifications fonctionnelles

APPRÉHENSION DE LA VALIDATION

- Explication des processus et calculs menés sur les molécules
- Comparaison avec le projet WISDOM II