

# NuQleosim

Laetitia Bourgeade  
Hadrien Mary  
Florence Maurier  
Jean-Paul Navailles

Universités Bordeaux 1 & 2

Février 2011

# Introduction

## Le nucléole

- Localisation nucléaire
- Encore mal connu
- Responsable de certaines pathologies
- Peu d'outils pour l'étude *in silico*

## NuQleoSim

- Interface graphique pour l'étude du nucléole
- Base de donnée : moléculaire et expérimentale
- Modélisation de l'activité nucléolaire
- Gestion des résultats

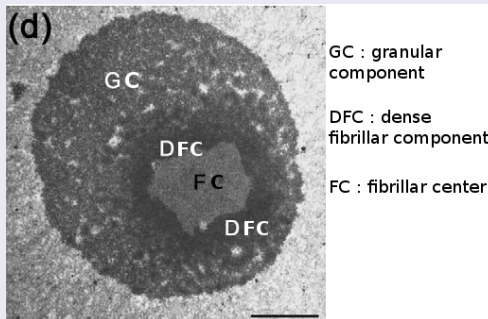
# Plan

- 1 Analyse
  - Structure et fonction
  - Les besoins
- 2 Conception
  - Base de données
  - Modélisation du nucléole
  - Prototypage de l'interface
- 3 Réalisation
  - Technologies utilisées
  - Diagramme de classe
  - Implémentation de la modélisation
  - Réalisation de l'interface

# Rappel du plan

- 1 Analyse
  - Structure et fonction
  - Les besoins
- 2 Conception
  - Base de données
  - Modélisation du nucléole
  - Prototypage de l'interface
- 3 Réalisation
  - Technologies utilisées
  - Diagramme de classe
  - Implémentation de la modélisation
  - Réalisation de l'interface

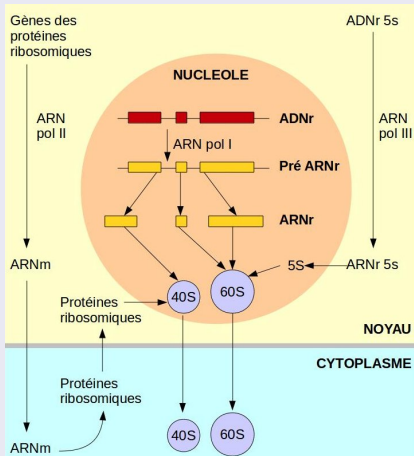
# Structure



Ivan Raska, Peter J Shaw, and Dusan Cmarko. *Structure and function of the nucleolus in the spotlight*. Curr Opin Cell Biol, Jun 2006.

# Fonction

## Biogénèse des ribosomes



# Stockage de données

- Deux types de données : moléculaire et expérimentale
- Création, consultation, modification et suppression
- Interopérabilité avec différents formats biologiques

# Modélisation de l'activité nucléolaire

- Interface de paramétrage de la simulation
- Communication avec la base de données
- Visualisation 3D en temps réel
- Génération de résultats



# Rappel du plan

## 1 Analyse

- Structure et fonction
- Les besoins

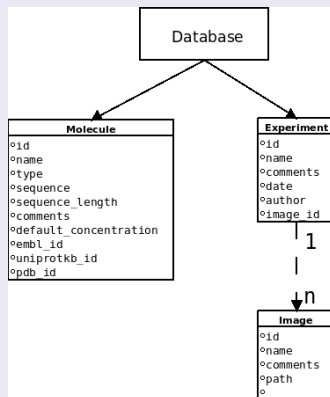
## 2 Conception

- Base de données
- Modélisation du nucléole
- Prototypage de l'interface

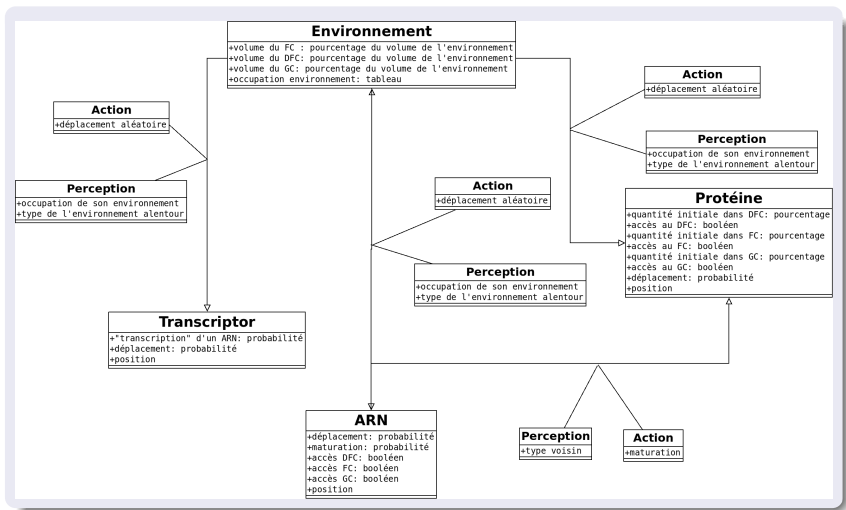
## 3 Réalisation

- Technologies utilisées
- Diagramme de classe
- Implémentation de la modélisation
- Réalisation de l'interface

# Organisation de la base de donnée

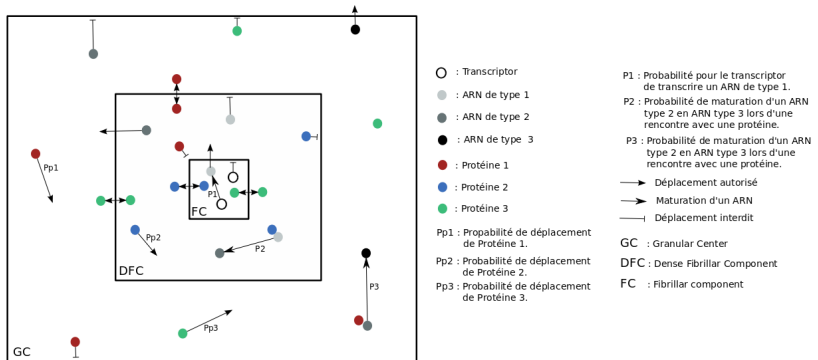


# Longueur et poids des protéines

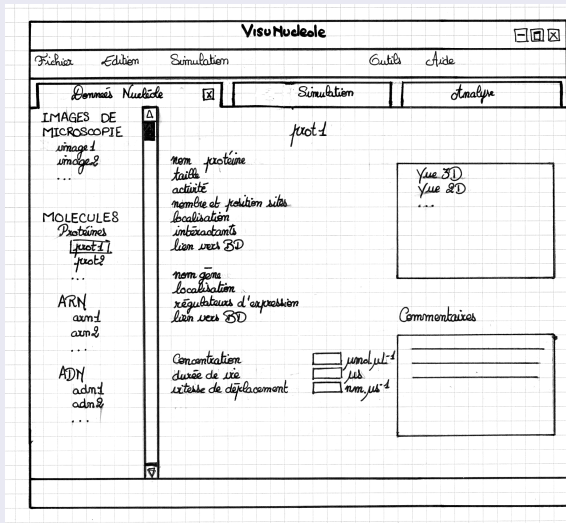


## Modélisation du nucléole

# Organisation de la base de donnée



## Prototypage de l'interface



# Rappel du plan

## 1 Analyse

- Structure et fonction
- Les besoins

## 2 Conception

- Base de données
- Modélisation du nucléole
- Prototypage de l'interface

## 3 Réalisation

- Technologies utilisées
- Diagramme de classe
- Implémentation de la modélisation
- Réalisation de l'interface

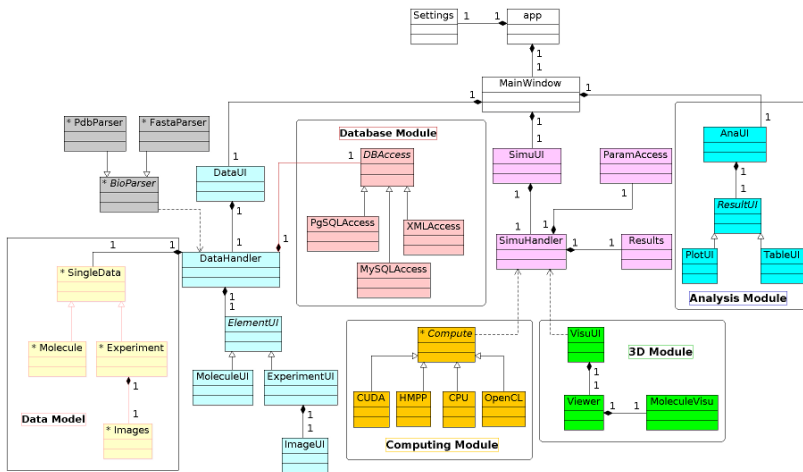
## Qt / C++

- Performance de calculs
- Qt en tant que framework :
  - Multiplateforme
  - Rapidité de développement

## XML comme SGBD

- 
- Temps de calculs important

## Diagramme de classe





# Améliorations possibles

- Calcul parallèle
- Calcul des densités des clusters finaux
- Algorithme k-médonoïde
- Approche plus hiérarchique avec DIANA et AGNES

## Réalisation de l'interface

## Interface avec la base de donnée

NuQleoSim

Files Preferences Help

Nucleolus database Simulation Results

### Molecules

id ^	Name
8	RRM_1 domain of NCL pr_
7	Human Fibrillarin
6	CEPHAIBOL A
11	INSULIN

+ Add molecule

### Experiments

id ^	Name
2	exp 2
1	exp 1

+ Add experiment

### General Information

Id: 11

Name:

Type:

Length:

Default concentration:

### Sequence

```
GIVEQCCTSIICSLYQLENYCNFVNQHLGSH
LVEALYLCGERGFFYTPKAGIVEQCCTSIIC
SLYQLENYCNFVNQHLGSHLVEALYLCGE
RGFFYTPKA
```

### Web database links

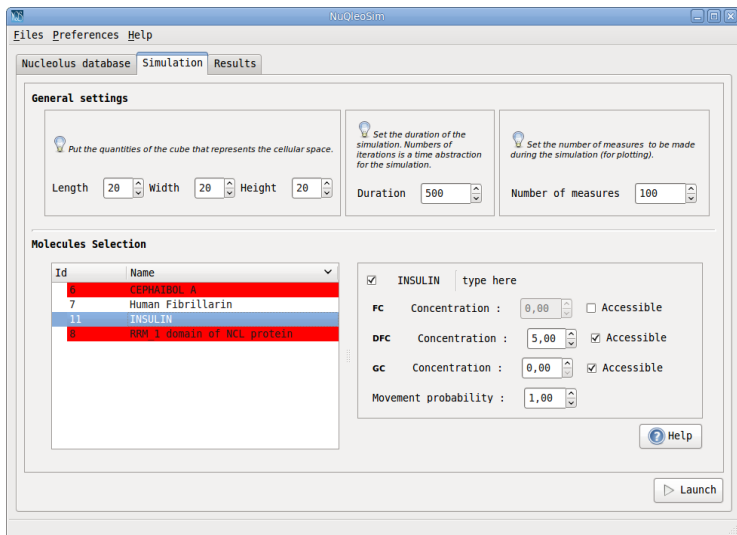
ID	Web Access	Download
<input type="text" value="1ZNI"/>	PDB	
<input type="text"/>	UniProtKB	
<input type="text"/>	EMBL	

### Comments

<http://www.news-medical.net/health/Insulin-Diseases-%28French%29.aspx>

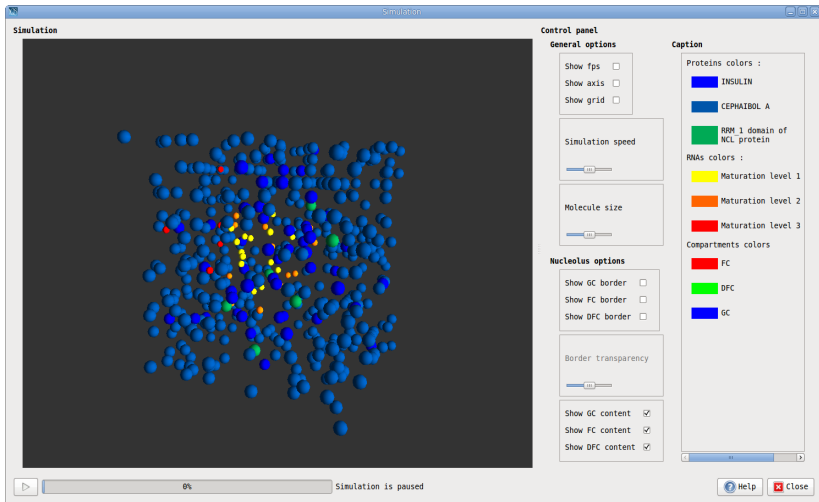
- Remove molecule from database

# Paramétrage d'une simulation



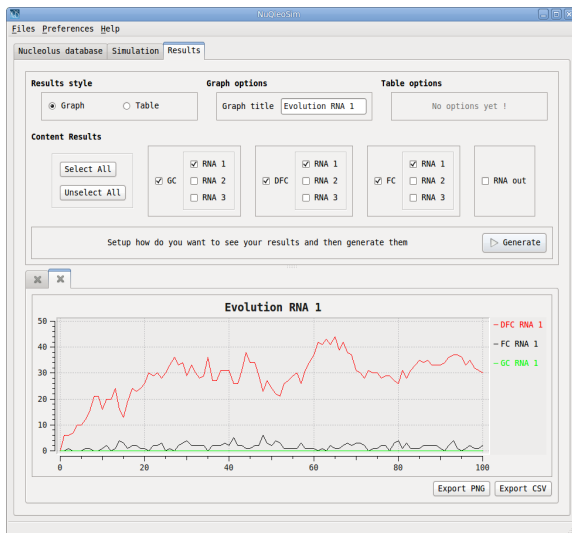
## Réalisation de l'interface

## Visualisation de la modélisation



## Réalisation de l'interface

# Exemple de génération de résultats



# Conclusion

- Construction et exploitation d'un entrepôt de données
- Traitement d'un grand nombre de données
- Etablissement de critères en fonction d'une problématique biologique
- Outil de visualisation

Merci de votre attention