

Cycle "Bioinformatique par la pratique" 2025

Module 19 - 4 et 5 juin 2025

Modélisation *in silico* de structures 3D de protéines. Prédiction de mutations, de fixation de ligands

Théorie 20 % - Pratique 80 % - 10 stagiaires par session¹ - 1 poste informatique par stagiaire

Contacts

☎ 01.34.65.29.74 (Veronique Martin)

✉ formation.migale@inrae.fr

Objectifs pédagogiques

À l'issue de la formation, les stagiaires connaîtront les principales fonctionnalités du logiciel PyMOL. Ils seront capables de les appliquer pour visualiser leur système biologique d'intérêt, et d'effectuer des commandes basiques d'identification de poches catalytiques, de profilage de surface électrostatique, et de mutations *in silico* d'acides aminés.

Aussi, ils connaîtront les bases et les outils de bioinformatique structurale et seront autonomes pour modéliser leurs protéines par prédiction AlphaFold3 et reconstruire leur éventuel assemblage biologique. Ceux qui le souhaitent pourront être formés à Autodock4 pour rechercher les meilleures poses de fixation de leur(s) ligand(s) en interaction avec leur protéine d'intérêt.

Bonus : Ils s'approprieront ces outils avec une demi-journée dédiée à la modélisation de leur système d'étude : protéines, interactions protéines/ADN, modélisation des mutants, arrimage de ligands, etc.

1. -Nous nous réservons le droit d'annuler ce module si le nombre de participants est inférieur à 5-

Programme

Visualiser :

- Maîtriser les bases de la visualisation des protéines en 3D avec PyMOL.

Comprendre :

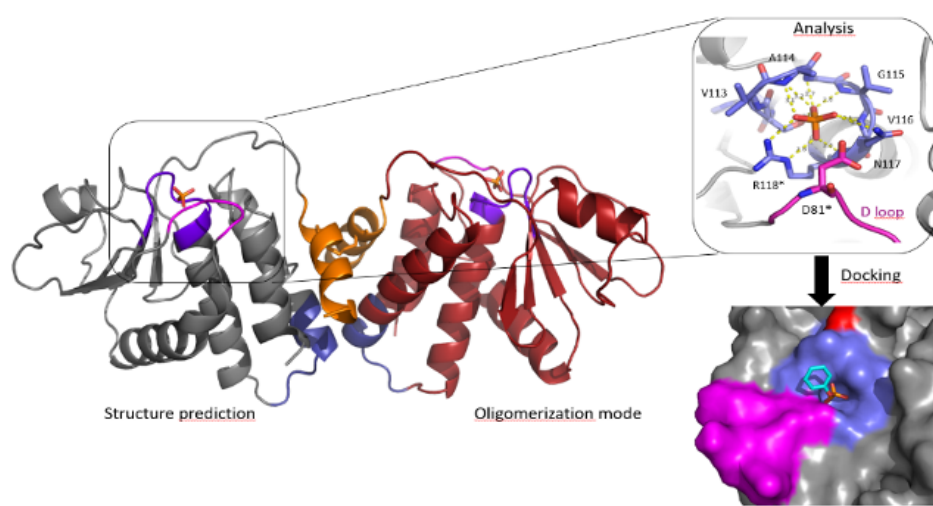
- Analyser des structures 3D de protéines.
- Identifier des homologues avec Foldseek.
- Modéliser par prédiction sa protéine d'intérêt avec Alphafold3.

Prédire :

- Savoir calculer des meilleures poses de ligands avec Autodock4.
- Prédire et modéliser les mutations *in silico*.

- Points forts et limites des différents outils - "Hand-on tutorials"

- Plus une session dédiée : "bring your own protein"



Informations pratiques

Dates et horaires	Jours	Tarifs
4 et 5 juin 2025	2 jour(s)	300 € (INRAE)
9h00-17h30		340 € (Académique)
		1100 € (Non académique)

Modalités de paiement

Uniquement par bon de commande

Conditions d'annulation

En l'absence d'annulation par mail avant le
20 mai 2025
le paiement sera dû

Intervenants

Gwenaëlle André / Sylvain Marthey