

# Cycle "Bioinformatique par la pratique" 2024

Module 19 - 27 et 28 mai 2024

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

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

### Contacts

---

📞 01.34.65.29.74 (Veronique Martin)

✉ formation.migale@inrae.fr

### Objectifs pédagogiques

---

A 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 d'acides aminés.

Aussi, ils connaîtront les bases et les outils de bioinformatique structurale et seront autonomes pour effectuer des modèles de protéines par prédiction (AlphaFold2), calculer les meilleures poses de fixation de leur(s) ligand(s) (Autodock4) et reconstruire l'éventuel assemblage biologique.

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

### Programme

---

Visualiser :

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

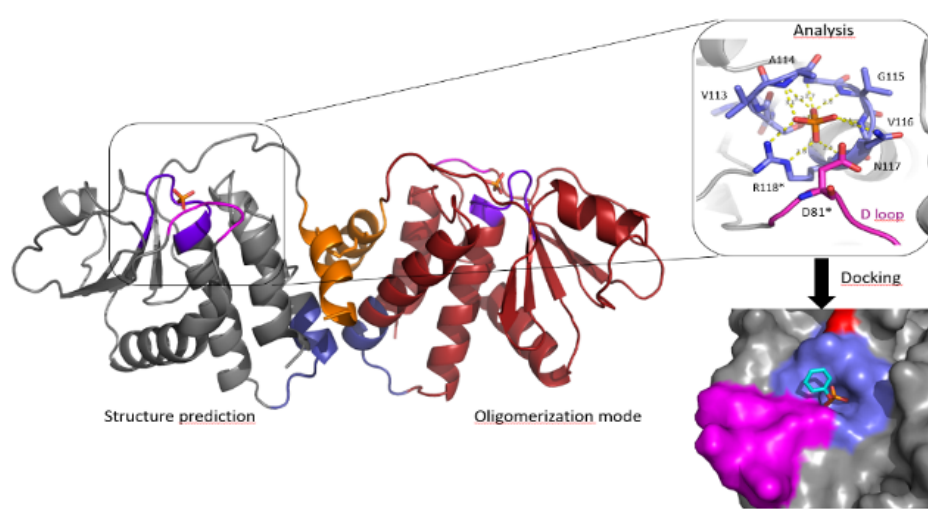
Comprendre :

- Analyser des structures 3D de protéines (RX ou RMN).
- Identifier des homologues avec HHpred.
- Modéliser par prédiction sa protéine d'intérêt avec AlphaFold2.

Prédire :

- Savoir calculer des meilleures poses de ligands avec Autodock.
- 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	Durée	Tarifs (Hors Taxe)
27 et 28 mai 2024 9h00-17h30	2 jour(s)	300 € (INRAE) 340 € (Académique) 1100 € (Non académique)

Modalités de paiement	Conditions d'annulation
Uniquement par bon de commande	En l'absence d'annulation par mail avant le <b>12 May 2024</b> , le paiement sera dû

Lieu	Plan et Moyen d'accès
Centre INRAE Jouy-en-Josas Unité MalAGE Bât. 233	<a href="https://migale.inrae.fr/how-to-come">https://migale.inrae.fr/how-to-come</a>

## Intervenants

Gwenaëlle André / Sylvain Marthey