

Cycle "Bioinformatique par la pratique" 2023

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

Module 19 Modélisation *in silico* de structures 3D de protéines. Prédiction de mutations, de fixation de ligands (30 et 31 mai 2023)

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 effectuer les commandes basiques d'analyse de repliement 3D, 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 apprendront à construire des modèles de protéines en utilisant AlphaFold ou Modeller, reconstruire l'éventuel assemblage biologique et calculer les meilleures poses de fixation de ligands avec AutoDock4.

Bonus : Ils s'approprient ces outils de modélisation avec une demi-journée dédiée à leur système d'étude : protéines, assemblage de protéines, arrimage de ligands, 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.

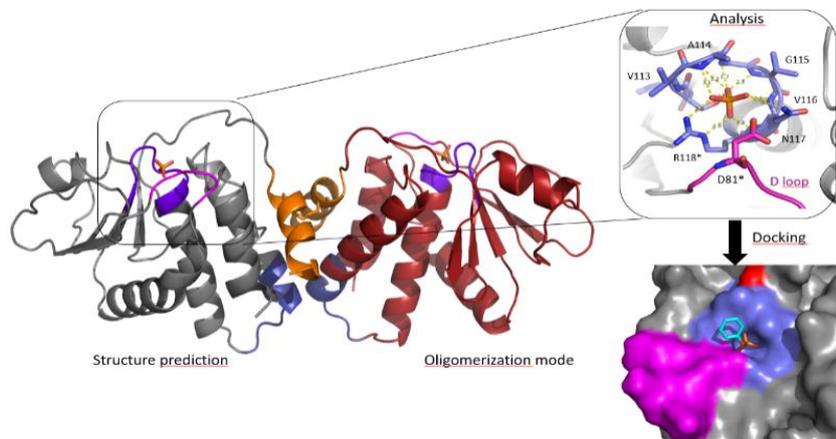
- Modéliser par homologie sa protéine d'intérêt avec AlphaFold ou Modeller.

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»



Dates & Horaires	Durée	Intervenants	Tarifs (Hors Taxe)
30 et 31 mai 2023 9H00 ~ 17H30	2 jours	Gwenaëlle André Sylvain Marthey	300 euros (INRAE) 340 euros (Académique) 1100 euros (Non académique)
Modalités de paiement	Conditions d'annulation	Contacts	
Uniquement par bon de commande	En l'absence d'annulation par mail avant le 18 mai 2023 , le paiement sera dû	veronique.martin@inrae.fr 01 34 65 29 74 formation.migale@inrae.fr	