

# Cycle "Bioinformatique par la pratique" 2018

## Module 19 : Modélisation *in silico* de structures 3D de protéines. Prédiction de fixation de ligands et analyse. Prédiction de mutations.

### Objectifs pédagogiques

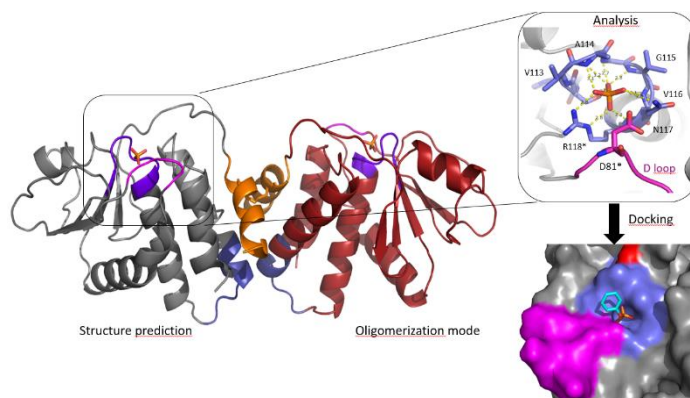
- Connaître les bases et les outils bio-informatiques de la modélisation moléculaire : modélisation par homologie, arrimage (docking) de ligands, mutations *in silico*.
- S'appropriier ces outils avec une demi-journée dédiée à la modélisation de vos systèmes d'études : protéines, interactions protéines/ADN etc.

### Programme

- **Visualiser** : Connaître les bases de la visualisation des protéines en 3D avec PyMOL.
- **Comprendre** : Analyse des structures 3D de protéines (RX ou RMN). Recherche d'homologues avec HHpred, I-Tasser, etc... Modélisation par homologie avec Modeller, Phyre2. Principes et applications.
- **Prédire** : Docking de ligands avec Autodock. Prédiction des mutations *in silico*. Principes et applications.

✓ *L'accent sera mis sur les points forts et les limites des différents outils et la pratique avec de nombreux "hand-on tutorials"*

✓ *Plus une session dédiée : «bring your own protein».*



### Dates & Horaires

26 et 27 mars 2018  
9H30 ~ 17h30

### Durée

2 jours

### Intervenant

Gwenaëlle André-Leroux  
Véronique Martin

### Tarifs

225 euros HT (INRA)  
250 euros HT (hors INRA)

### Modalités pédagogiques

Théorie : 20% - Pratique : 80% - 10 stagiaires par session - Chaque stagiaire disposera d'un poste informatique dédié avec les logiciels installés.

### Modalités de paiement

Uniquement par bon de commande

### Conditions d'annulation

En l'absence d'annulation par mail avant le **12 mars 2018**, le paiement sera dû.

### Contacts

veronique.martin@inra.fr Tél. : 01 34 65 29 74  
formation.migale@inra.fr  
<http://migale.jouy.inra.fr/?q=fr/formations>