

La modélisation structurale intégrative à l'ère des mégadonnées et de l'intelligence artificielle

Integrative structural modeling in the era of big data and artificial intelligence

La bioinformatique structurale développe des algorithmes pour répondre aux défis de prédiction intensive de structures 3D de macromolécules biologiques et de leur annotation fonctionnelle, en exploitant les données de génomique et biophysique, en combinaison avec la biologie des systèmes et le design, pour des applications en biotechnologie ou en thérapeutique.

Ainsi, ce mini symposium propose de se focaliser sur la modélisation structurale intégrative et d'aborder ses nouveaux défis, dans un paysage redéfini par les récents développements en biophysique expérimentale d'une part (la révolution cryo-EM) et en apprentissage profond d'autre part (comme démontré par les performances extraordinaires de DeepMind dévoilées en décembre 2020). Ces bouleversements annoncent une accélération des développements en bioinformatique structurale telles que la modélisation structurale en utilisant les données de cryo-EM ou des données expérimentales variées fournissant des contraintes spatiales, le développement de méthodes d'apprentissage automatique pour la prédiction structurale et la conception de protéines.

The field of structural bioinformatics aims at developing algorithms to tackle the current challenges in 3D structure prediction of biological macromolecules and their functional annotation by exploiting data from genomics and biophysics in combination with systems biology and design, to be applied in biotechnology and therapeutics. This mini-symposium thus proposes to focus on integrative structural modeling and to address the new challenges, in a redefined landscape owing to the recent developments in experimental biophysics on one hand (the resolution revolution in cryo-EM) and in deep-learning on the other hand (as demonstrated by the extraordinary performances of DeepMind unveiled in December 2020). These rapid changes are a sign of acceleration in structural bioinformatics developments such as structural modeling using cryo-EM or other experimental data providing spatial restraints, progress in machine learning for structural prediction and protein design.

Programme

15h30-15h40 **Introduction:**

"Current challenges in 3D modeling of proteins and complexes"

15h40-16h10 **Riccardo Pellarin** (CNRS-Institut Pasteur, Paris)

"Bayesian modeling in integrative structural biology"

16h10-16h40 **Ezgi Karaca** (Izmir Biomedicine and Genome Center, Turquie)

"Dynamic Integrative Modeling of Molecular Machines"

16h40-17h00 Pause

17h-17h30 **Sergei Grudinin** (INRIA, Grenoble)

"Entering the post-protein structure prediction era"

17h30-18h **Slavica Jonic** (CNRS-Sorbonne Université, Paris)

"Cryo-EM studies of continuous conformational variability of biomolecules *in vitro* and *in situ* based on image analysis, simulation and deep learning"

Organized by Jessica Andreani, Gwenaëlle André-Leroux, Benjamin Bardiaux, Stéphanie Baud, Isaure Chauvot de Beauchêne, Elodie Laine and Juliette Martin.

Sponsored by the GGMM (Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire) <https://ggmmfr.wordpress.com/>

