

BNF201 - BIOINFORMATIQUE STRUCTURALE, DRUG DESIGN

CNAM Paris – Matthieu Montes



Objectif : Former des biologistes/bio-informaticiens connaissant les outils du drug design et de la modélisation moléculaire afin d'être capable de participer ou d'orienter efficacement des recherches à visée pharmaceutique (fabrication de médicaments).

I - Rappels sur les relations structure/fonction des protéines

II - Représentation 3D des protéines

III - Mécanique moléculaire. Visualisation des structures de protéines et prédition de leur structure secondaire et de leur structure 3D.

IV - Petites molécules et chimiothèques

V - Descripteurs moléculaires ADME-Tox

VI - Ligand-based drug design, structure-based drug design

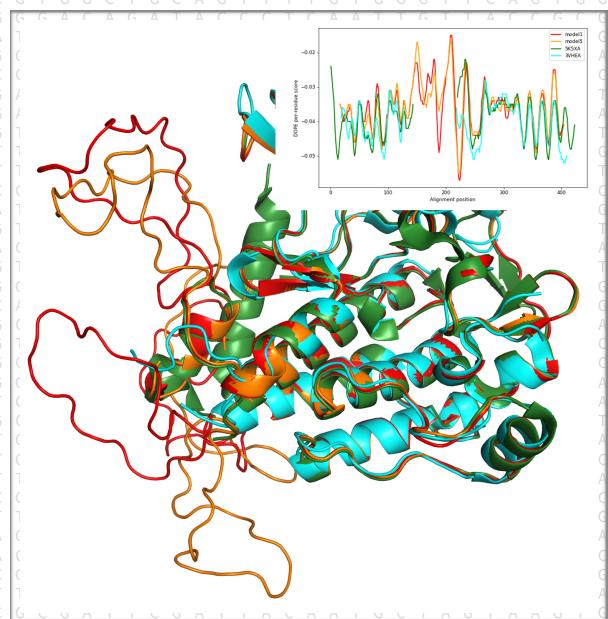
VII - Analyse et exploitation des résultats de criblage *in silico*

Module BNF201 (niveau master)

Conservatoire national des arts et métiers de Paris

Inscriptions : <https://inscriptions.cnam.fr/>

Contact : matthieu.montes@cnam.fr



Analyse d'articles scientifiques récents

align2d.py

```

from modeller import *
log.verbose()

env = environ()
env.libs.topology.read('${LIB}/top_heav.lib')

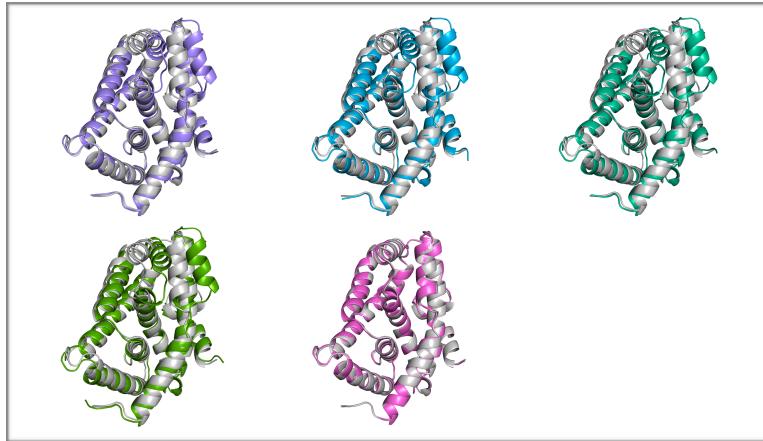
# Read target sequence:
aln = alignment(env)
aln.append(file='PDGFR_beta.ali', align_codes='PDGFR_beta')

# Extract sequence(s) to align from pdb files:
mdl = model(env, file='XXXX', model_segment=('FIRST:A', 'LAST:A'))
aln.append(model(mdl, align_codes='XXXX', atom_files='XXXX.pdb'))
mdl = model(env, file='YYYY', model_segment=('FIRST:A', 'LAST:A'))
aln.append(model(mdl, align_codes='YYYY', atom_files='YYYY.pdb'))

# Structure sensitive variable gap penalty sequence-sequence alignment:
aln.align(rr_file='${LIB}/blosum62.sim.mat', # Substitution matrix used
          max_gap_length=30,
          gap_function=True,
          feature_weights=(1., 0., 0., 0., 0., 0., 0.),
          gap_penalties_1d=(-10, -10),
          similarity_flag=True) # Ensuring that the dynamic programming
                                # matrix is not scaled to a difference matrix

aln.write(file='align2d.ali', alignment_format='PIR')

```



Un enseignement didactique fondé sur la pédagogie et l'interaction

15 séances de cours, 15 séances de TP 18 h 15-20 h 15

