Application BASTRI
Fiches Equipes

ABS (SR0184DR)

Algorithmes et Biologie Structurale
GEOMETRICA (SR0182KR) ▯ ABS

Statut: Décision signée

Responsable : Frédéric Cazals

Mots-clés de "A - Thèmes de recherche en Sciences du numérique - 2023" : A2.5. Génie logiciel , A3.3.2. Fouille de données , A3.4.1. Apprentissage supervisé , A3.4.2. Apprentissage non supervisé , A6.1.4. Modélisation multiéchelle , A6.2.4. Méthodes statistiques , A6.2.8. Géométrie numérique et maillages , A8.1. Mathématiques discrètes, combinatoire , A8.3. Géométrie, Topologie , A8.7. Théorie des graphes , A9.2. Apprentissage

Mots-clés de "B - Autres sciences et domaines d'application - 2023" : B1.1.1. Biologie structurale , B1.1.5. Immunologie , B1.1.7. Biologie computationnelle

Domaine : Santé, biologie et planète numériques
Thème : Biologie numérique

Période : 01/07/2008 -> 31/12/2027
Dates d'évaluation : 08/10/2009 , 17/10/2013 , 11/10/2017 , 15/05/2022

Etablissement(s) de rattachement : <sans>
Laboratoire(s) partenaire(s) : <sans UMR>

CRI : Centre Inria d'Université Côte d'Azur
Localisation : Centre Inria d'Université Côte d'Azur
Code structure Inria : 041101-1

Numéro RNSR : 200818987H
N° de structure Inria: SR0184DR

Présentation

La bioinformatique structurale est le domaine scientifique développant des méthodes algorithmiques pour comprendre et prédire la structure et la fonction des biomolécules.

Une question centrale dans ce contexte, qui fait l'objet de travaux à la fois expérimentaux et relevant de la modélisation, est l'étude des mouvements moléculaires et de la dynamique des protéines.

La dynamique joue en effet un rôle clef pour prédire les structures accessibles a une séquence, pour comprendre les fonctions d'une protéine dont la structure statique est connue, et enfin pour élucider la structure de machines moléculaires constituées de dizaines voire centaines de sous-unités. Hélas, les mouvements moléculaires balayant respectivement $\sim$ 15 and $\sim$ 4 ordres de grandeurs dans le temps et l'espace, ces questions sont particulièrement ardues.

En combinant des concepts et idées venant de la géométrie algorithmique, de l'optimisation, de l'apprentissage machine, des algorithmes probabilistes et probabilités numériques, l'objectif central d'ABS est de contribuer à l'émergence d'une nouvelle génération d'algorithmes capables de générer des prédictions fiables de la dynamique des protéines.

Des implementations éprouvées et optimisées des algorithmes seront intégrées à notre librairie, la Structural Bioinformatics Library, qui est le seul environnement logiciel dans ce domaine offrant la modularité requise pour réaliser une intégration efficace d'algorithmes complémentaires issus des domaines sus-cités.

En collaboration avec des collègues biologistes et bio-physiciens, ces implémentations seront utilisées pour étudier des systèmes d'importance critique en biologie et médecine.

Axes de recherche

- Prédiction de la dynamique des protéines

Contact

- **Responsable :** Frédéric Cazals
- **Tél :** 04.92.38.71.88
- **Secrétariat Tél :** 04.92.38.50.56

En savoir plus

- Site sur inria.fr
- Derniers Rapports d'Activité : 2015 , 2016 , 2017 , 2018 , 2019 , 2020 , 2021 , 2022 , 2023

Documents sur la structure

- Intranet
- Privés

Décisions

- 6387 (17/11/2008) : création
- 7386 (05/07/2010) : prolongation
- 8407 (19/01/2012) : prolongation
- 8896 (24/09/2012) : prolongation
- 10210 (20/10/2014) : prolongation
- 13243 (10/12/2018) : prolongation
- 14600 (16/12/2020) : fermeture
- 14898 (24/06/2021) : fermeture
- 14920 (05/07/2021) : création
- 15193 (14/09/2022) : prolongation
- 16554 (31/10/2023) : prolongation

Localisation

- **Adresse postale :** Centre Inria d'Université Côte d'Azur 2004 Route des Lucioles - BP 93 06902 Sophia Antipolis cedex France
- **Coordonnées GPS :** 43.616, 7.068

- Fondements algorithmiques: modèles discrets et continus
- La Structural Bioinformatics Library
- Applications en biologie structurale

Relations industrielles et internationales

- C. Robert, IBPC / CNRS, Paris
- D. Wales, Cambridge University.