

# 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 à 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 implementations 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](http://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.