

MASTER «*In Silico* Drug Design»
1ère année

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2017/2018

A envoyer à Mr Pr Taboureau
olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr



Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Dr. Bruno Villoutreix

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : MTi, INSERM

UMR-S973, Université Paris Diderot

Adresse précise du Laboratoire : 35 rue Hélène Brion, 75205 Paris Cedex

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Pr. Anne-Claude Camproux et Pr. Olivier Taboureau

E-mail : anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr ; olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du stage : Dr. Leslie REGAD

Numéro de Téléphone : 01 57 27 82 72

Numéro de Télécopie

E-mail : leslie.regad@univ-paris-diderot.fr

Titre du stage : Amélioration du programme SA-conf dédié à l'étude de la variabilité structurale des cibles protéiques

Description du sujet (quelques lignes):

Au sein du laboratoire, nous avons développé un logiciel nommé SA-conf (Regad et al., PloS One, 2017) pour étudier la variabilité structurale d'une cible protéique donnée. Ce logiciel compare les structures locales d'un ensemble de structures de la cible à étudier.

Le projet de stage vise à apporter de nouvelles fonctionnalités à ce programme. La première amélioration du programme portera sur l'amélioration du score permettant de quantifier la variabilité structurale de chaque position de la cible. Actuellement, ce score est basé sur l'entropie de Shannon. Il prend en compte

le nombre de structures locales observées en une position dans les différentes structures du jeu de données, mais ne prend pas en compte la variabilité entre les structures locales observées. La deuxième amélioration qui sera réalisée est le développement d'une méthode permettant de classer les structures de la cible thérapeutique. La troisième amélioration visera à développer une méthode permettant d'identifier les mouvements coopératifs au sein du jeu de structures étudiés.

Pour mettre en place ces améliorations, le stagiaire devra (1) développer les méthodes méthodologiques, et (2) les implémenter dans le programme.

Compétences demandées : Le candidat devra avoir des connaissances en programmation python et R, et avoir des connaissances en bioinformatique structurale