

Bioinformatique Structurale : Outils et méthodes pour comprendre le repliement des séquences biologiques

Jérôme Waldispühl

Département de Biologie, Boston College, USA
Laboratoire d'Informatique, École polytechnique, France
LIAFA, Université de Paris 7, France

Email : Jerome.Waldispuhl@polytechnique.edu

Web : <http://www.lix.polytechnique.fr/Labo/Jerome.Waldispuhl/>

Objet : Résumé du séminaire au LRI du 10 mai 2005

Résumé : Avec l'intensification du flux de données expérimentales (séquences et structures), se précise le besoin d'analyse et de formalisation de ce savoir. L'introduction de nouvelles théories permettant d'organiser nos connaissances, et le développement d'algorithmes capables de traiter l'information enfouies dans ces données, devient donc un enjeu majeur de l'ère post-génomique.

Nous illustrerons au cours de cet exposé ces deux aspects de la bio-informatique structurale. Nous montrerons d'abord, comment le repliement des protéines transmembranaires a pu être modélisé à l'aide de formalismes grammaticaux, et déboucher naturellement sur le premier algorithme de prédiction de structure utilisant, efficacement et en toute généralité, les effets des interactions à longue distance.

Ensuite, nous nous intéresserons en seconde partie de cette présentation, au développement de nouveaux algorithmes et techniques applicables au modèle thermodynamique de repliement sans pseudo-noeud des ARN (modèle de Turner). Dans ce cadre, nous focaliserons plus particulièrement notre attention sur l'effet des mutations ponctuelles dans la séquence, et l'utilisation de la fonction de partition de Boltzmann.