

XXI^e congrès GGMM

Nice, 3-5 avril 2019

Conférences plénières

Nicolas Férey (LIMSI, Paris) : *Simulation interactive, réalité virtuelle et augmentée, interface tangible : usages et perspectives pour la biologie moléculaire*

Isabelle Callebaut (IMPMP, Paris) : *Utilisation de signatures structurales pour explorer le « dark proteome »*

Adèle Laurent (CEISAM, Nantes) : *Modélisation d'interaction protéine-protéine à l'aide d'approches de simulations multi-échelles*

Matthieu Chavent (IPBS, Toulouse) : *Comprendre l'action des lipides de Mycobacterium Tuberculosis sur la membrane des macrophages grâce à la modélisation moléculaire*

Olivier Taboureau (MTI, Paris) : *Big data : Les nouveaux défis de la chémoinformatique*

Sessions thématiques

Visualisation, Graphisme & nouvelles technologies

Simulations & expériences

Développements méthodologiques

Protéines membranaires

Chémoinformatique, Drug Design



Plus d'informations sur :
<https://ggmm2019.sciencesconf.org/>



SCHRÖDINGER



GdR BiM



Depuis 80 ans, nos connaissances
bâtissent de nouveaux mondes



UNIVERSITÉ
CÔTE D'AZUR

Programme

Mercredi 3 avril

13:00 - 14:30	Accueil	
14:30 - 15:00	Mot de bienvenue	
Conférence Plénière - Session 1 : Visualisation, Graphisme et nouvelles technologies		
15:00 - 15:40	Nicolas Férey	<i>Simulation interactive, réalité virtuelle et augmentée, interface tangible... : usages et perspectives pour la biologie moléculaire</i>
15:40 - 16:00	Flash Poster – Session 1	
16:00 - 16:30	Pause-café	
Communications Orales – Session 1		
16:30 - 16:45	Stéphanie Baud	<i>Improved modelling of ECM proteins and structures</i>
16:45 - 17:00	Benjamin Boyer	<i>Udock: a free interactive protein docking system</i>
17:00 - 17:15	Guillaume Postic	<i>MS2MODELS: probing protein interaction networks by MS-based proteomics and structural data integration</i>
17:15 - 17:30	Antoine Moniot	<i>NAfragDB: a multi-purpose structural database of nucleic-acid? protein complexes for advanced users</i>
17:30 - 17:45	Dragos Horvath	<i>Rescoring of Docking Poses under Occam's Razor? Are there Simpler Solutions?</i>
17:45 - 18:00	Flash Poster – Session 2	
18:00 - 19:00	Session Poster	
Conférence plénière - Session 2 : Simulations et expériences		
19:00 - 19:40	Isabelle Callebaut	<i>Utilisation de signatures structurales pour explorer le « dark proteome »</i>
19:40 - 21:30	Dîner	

Jeudi 4 avril

Conférence plénière - Session 3 : Développements méthodologiques		
8:45 - 9:25	Adèle Laurent	<i>Modélisation d'interactions macromoléculaires à l'aide d'approches de simulations multi-échelles.</i>
9:25 - 9:45	<i>Flash Poster – Session 3</i>	
Communications Orales – Session 2		
9:45 - 10:00	Tâp Ha-Duong	<i>Structural characterization of the intrinsically disordered N-WAPS domain V and its conformational selection by actin</i>
10:00 - 10:15	Sophie Sacquin-Mora	<i>Coarse-grain simulations on NMR conformational ensembles highlight non catalytic functional residues in proteins</i>
10:15 - 10:30	Martin Lepsik	<i>At the Limit of Additive Molecular Dynamics: Quantum Effects in Calcium-dependent Lectin/Carbohydrate Complex</i>
10:30 - 10:45	Jean Charles Carvaillo	<i>Structuration du domaine C-terminal de la protéine Core du virus de l'hépatite B</i>
10:45 - 11:00	Yoann Laurin	<i>Enhancing biosurfactant activities of surfactin, a cyclic bacterial lipopeptide: a structural study.</i>
11:00 - 11:30	<i>Pause-café</i>	
11:30 - 11:45	<i>Flash Poster – Session 4</i>	
Communications Orales – Session 3		
11:45 - 12:00	Samia Aci-sèche	<i>In silico prediction of residence time for protein kinase inhibitors</i>
12:00 - 12:15	Yasaman Karami	<i>"Infostery", a method to describe proteins mutational landscape.</i>
12:15 - 12:30	Jelena Vucinic	<i>Pushing the computational frontiers of Multistate Protein Design</i>
12:30 - 12:45	Thomas Mangin	<i>Extraction of Eu³⁺ with BTP toward Ionic Liquids: A Molecular Dynamics study</i>
12:45 - 13:00	Maria Kadukova	<i>Predicting protein-ligand interactions with Convex-PL potential</i>
13:00 - 14:30	<i>Déjeuner</i>	
Conférence plénière - Session 4 : Protéines membranaires		
14:30 - 15:10	Matthieu Chavent	<i>Comprendre l'action des lipides de Mycobacterium Tuberculosis sur la membrane des macrophages grâce à la modélisation moléculaire</i>
15:10 - 15:30	<i>Flash Poster – Session 5</i>	
Communications Orales – Session 4		
15:30 - 15:45	Romain Gautier	<i>Etude de la déformation et de la fission de membranes contenant des phospholipides avec différentes chaînes aliphatiques.</i>
15:45 - 16:00	Florent Di Meo	<i>Unravelling features of drug-membrane crossing events by MD simulations</i>
16:00 - 16:15	Tatiana Galochkina	<i>Molecular dynamics studies predict the alternative mechanism of glucose transfer by GluT1</i>
16:15 - 16:30	Maxime Louet	<i>Coarse-grained simulations to predict the dynamical interactions of GPCRs with their partners</i>
16:30 - 16:45	Xiaojing Cong	<i>Mechanism of GPCR activation triggered by ligands, mutations and protonation</i>
16:45 - 19:00	<i>Session Poster + Pause-café</i>	
19:00 - 20:00	<i>Réorganisation des salles</i>	
20:00 -	<i>Dîner de Gala</i>	

Vendredi 5 avril

Conférence plénière - Session 5 : Chémoinformatique, Drug Design		
8:50 - 9:30	Olivier Taboureau	<i>Big data : Les nouveaux défis de la chémoinformatique</i>
Communications Orales – Session 5		
9:30 - 9:45	David Rinaldo	<i>Accélérer la Découverte de Composés Actifs grâce à l'Utilisation de Techniques de Modélisation Avancées et d'Apprentissage Profond</i>
9:45 - 10:00	Cédric Bouysset	<i>Modèle numérique des relations structure-saveur</i>
10:00 - 10:15	Mélanie Schneider	<i>Improving ligand screening by exploiting structure ensembles and machine learning</i>
10:15 - 10:30	Abdenmour Braka	<i>Combiphore (Target-based and Ligand-based) approach to design novel allosteric CD73 inhibitors as cancer chemotherapeutic agents and their biological evaluation</i>
10:30 - 10:45	Camille Denis	<i>Structure-Based Drug Design of Dual Mcl-1/Bcl-xL Inhibitors</i>
10:45 - 11:15	<i>Pause-café</i>	
Prix GGMM		
11:15 - 11:45	Emmanuelle Bignon	<i>Structure and reactivity of complex DNA lesions: clustered abasic sites as a case study</i>
11:45 - 12:00	<i>Prix Poster</i>	
12:00 - 12:30	<i>Assemblée Générale GGMM</i>	
12:30 - 14:00	<i>Déjeuner – Fin des journées</i>	

PROGRAMME

	Mercredi 3 Avril	Jeudi 4 Avril	Vendredi 5 Avril	
8:45		Plénière 3	Plénière 5	
9:00		Flash Poster 3	Session 5	
10:00		Session 2		
11:00		Pause café	Pause café	
		Flash Poster 4	Prix GGMM	
12:00		Session 3	Prix Poster Assemblée Générale GGMM	
13:00		Accueil	Déjeuner	Déjeuner + Départ
14:00				
15:00		Bienvenue	Plénière 4	LEGENDE
		Plénière 1	Flash Poster 5	Plénières
16:00	Flash Poster 1	Session 4	Posters	
	Pause café		Sessions orales	
17:00	Session 1	Session Poster + Pause café	Repas	
	Flash Poster 2			
18:00	Session Poster			
19:00	Plénière 2	<i>Réorganisation des salles</i>		
20:00	Dîner	Dîner de Gala		
21:00				