

# Bilan de l'atelier « Alphafold et bio-informatique pour la prédiction de structure de protéine » du réseau Phages.fr

*Organisé les 29 et 30 Novembre 2023  
à l'Institut de Biologie Structurale de Grenoble,  
en satellite du colloque Phages.fr in Lyon,  
par François Lecointe et Cécile Breyton*

## PROGRAMME

### Mercredi 29 Novembre 2023

Tour de table et présentation de chaque participant et de ses attentes.

16h : Structure prediction: a phage feedback from CAS14 and CASP15. **Cécile Breyton**

16h45: AlphaFold for structural prediction of protein-protein and protein-nucleic acid interactions. **Jessica Andreani**

17h45 : Beyond AlphaFold2: Tools for functional annotation, interatomic and phylogeny. **Pierre Legrand**

18h45 : Exploring bacteriophage structures using AlphaFold. **Adeline Goulet**

19h30-21h30 : Wine & Cheese

### Jeudi 30 Novembre 2023

Discussion autour des cibles et problématiques envoyées par les participants : prédiction de fonction à partir d'une séquence, interaction protéines-ADN, analyse de structure pour l'insertion d'une étiquette et/ou protéine fluorescente, identification d'interaction d'une protéine parmi un choix de 3-6 partenaires protéiques. Discussion sur les limites des différents logiciels et conseils pour optimiser la confiance des résultats. Présentation rapide des outils de visualisation (PyMol et ChimeraX).

## BILAN SCIENTIFIQUE

Nombre de participants : 16 personnes membres de la liste de diffusion phages.fr, 4 intervenants, 3 désistements.

### Ce que l'atelier a apporté aux participants :

- Un historique de AF2 et des CASPs.
- Une compréhension des principes du logiciel/apprentissage et des outputs.
- Une meilleure compréhension de comment évaluer et optimiser la pertinence et la confiance des prédictions, pour des monomères et des multimères.

- Du recul pour interpréter et analyser les données.
- Découverte de nouveaux outils (FoldSeek, AlphaPullDown, AlphaFill...)
- Identifier les spécialistes phagistes français dans le domaine en vue d'éventuelles collaborations pour des questions plus poussées en terme de structure/fonction.

#### **Ce qui a été apprécié :**

- le traitement « en direct » d'un exemple pour voir le déroulé,
- la clarté et la complémentarité des présentations théoriques,
- les échanges d'expérience, les réponses aux questions de tout niveau,
- la taille du groupe qui a permis des échanges libres, fluides et conviviaux,
- une durée optimale,
- le traitement de cas proposés par les participants, les discussions,
- le moment de convivialité le soir autour d'un buffet sur place et d'être logé sur place, permettant de prolonger les discussions et de nouer des contacts dans la communauté sur ces sujets structure/fonction.

#### **Ce qui aurait pu être abordé :**

- Troubleshooting de pbs communs,
- des commandes en ligne,
- hands on sur les outils de visualisation,
- avoir des exercices à faire pour pratiquer ?

Mais de l'avis de ceux qui ont proposé les premiers points, les réponses ont été facilement trouvées sur la toile, et pour les outils de visualisation, des formations institutionnelles sont dispos, et on était limités par le temps...

#### **Conclusions**

Les participants sont repartis en ayant, chacun à son niveau, augmenté ses connaissances sur l'outil AlphaFold, les applications et les limites.

#### **BILAN FINANCIER**

##### **Total Dépenses : 813 €**

Wine & Cheese : 561 €, pause café/fruits = 90 € (22 personnes), logement organisateur et intervenants : 162 €

J'avais prévu le trajet des intervenants qui ne venaient pas à Lyon, mais je n'ai pas eu de retour (Pierre a fait passer ça par Soleil, merci Pierre !).

##### **Crédits : Budget GDR**