

## « Molecular and Supramolecular modeling Methods / Applications / Projects »

**MODMOL 2006: Timetable**

Mon. December 11	Tue. December 12	Wed. December 13	Thu. December 14
<b>Reception of participants starting from 11h30</b>	<b>8h30</b> <u>Theoretical aspects</u> Extension to the modeling of large molecular assemblies: « mesoscopic modeling » (B.Rousseau, UMR CNRS 8000)	<b>8h30</b> <u>Practical aspects</u> An example in our department: molecular modeling of lipid transfer proteins from wheat (F.Lamotte, UMR INRA 1096)	<b>8h30</b> <u>Practical aspects</u> Applications of quantitative structure/activity relationships (QSPR/QSAR) (N. Jourdan, ex. Pfizer, UK)
	<b>9h30</b> <u>Practical aspects</u> Modeling of the assembly of caseins (S.Euston, Heriot-Watt University, Scotland)	<b>9h30</b> <u>Round table</u> - Needs related to modeling: approaches, questions, constraints (F.Guyomarch, UMR INRA 1253 ) - Debate (to be specified)	<b>9h30</b> <u>Practical aspects</u> Applications of QSPR/QSAR methods P. Urbaniak (Pro.chemist.online.fr)
	<b>10h30 - Break</b>	<b>10h30 - Break</b>	<b>10h30 - Break</b>
	<b>11h00</b> <u>Practical aspects</u> Modeling of elastin (M.Dauchez, Univ. Reims/UMR CNRS 5506)	<b>11h00</b> <u>Theoretical aspects</u> Properties (transport, mechanical) calculated by molecular modeling (D.Brown, Univ. Savoie/UMR CNRS 5041)	<b>11h00</b> Discussions –Evaluation and prospects
<b>12h30 - Lunch</b>	<b>12h00 - Lunch</b>	<b>12h30 - Lunch</b>	<b>12h00 - Lunch</b>
<b>14h00</b> <u>Theoretical aspects</u> Molecular modeling: principles and extensions to coarse-grain models (H.Meyer, Institut Charles Sadron, UPR CNRS 22, Strasbourg)	<b>14h00</b> <u>Theoretical aspects/Practical aspects</u> Molecular modeling and integration of biophysics data (RMN) (B. Gilquin, CEA LSP) TO BE CONFIRMED	<b>14h00</b> <u>Workshops</u> Three research projects (3 groups) to propose a methodology of definition and assembly of projects in relation with molecular modeling 1) Low/non-structured proteins 2) Interactions between proteins and polyphenols 3) Modeling of mass transport in dense membranes	
<b>15h30</b> <u>Theoretical aspects</u> Principles of modeling by homology of proteins (M.Dauchez, Univ. Reims/ UMR CNRS 5506)	<b>15h00</b> <u>Practical aspects</u> Molecular modeling of interaction ligand-receptor (J. Golebiowski, Univ. Sophia/UMR CNRS 6001)		
<b>17h00 - Break</b>	<b>16h00 - Break</b>	<b>16h00 - Break</b>	
<b>17h30</b> <u>Practical aspects</u> Modeling of polysaccharides (K.Mazeau, CERMAV, UPR CNRS 5301)	<b>16h30</b> General discussions to identify collectively the expectations, common tools, arising questions... (in plenary room or group – to be defined)	<b>16h30</b> <u>Restitution of workshops</u>	
<b>18h30</b> General discussion	<b>18h00</b> End of day	<b>18h00</b> End of day	
<b>19h30 – 20h30 - Dinner</b>			

« Modélisation moléculaire et supramoléculaire Méthodes / Applications / Projets »

**MODMOL 2006 : Emploi du temps**

Lundi 11 décembre	Mardi 12 décembre	Mercredi 13 décembre	Jeudi 14 décembre	
<b>Accueil des participants à partir de 11h30</b>	<b>8h30</b> <u>Apports théoriques</u> Extension à la modélisation d'édifices de grande taille : « modélisation mésoscopique » (B.Rousseau, UMR CNRS 8000)	<b>8h30</b> <u>Témoignages</u> Une expérience à CEPIA : Protéines de transfert de lipides (F. de Lamotte, UMR INRA 1096)	<b>8h30</b> <u>Témoignages</u> Présentation et applications des méthodes relations structures – propriétés/activités (N. Jourdan, ex. Pfizer)	
	<b>9h30</b> <u>Témoignages</u> Modélisation de l'assemblage des caséines (S. Euston, Heriot-Watt University, Scotland)	<b>9h30</b> <u>Table ronde</u> - Un besoin en modélisation : démarche, questions, contraintes (F.Guyomarch, UMR INRA 1253 ) - Débat (à préciser)	<b>9h30</b> <u>Témoignages</u> Applications relations structures - propriétés P. Urbaniak (Pro.chemist.online.fr)	
	<b>10h30 - Pause</b>	<b>10h30 - Pause</b>	<b>10h30 - Pause</b>	
	<b>11h00</b> <u>Témoignages</u> Modélisation de l'élastine (M.Dauchez, Univ. Reims/UMR CNRS 5506)	<b>11h00</b> <u>Apports théoriques</u> Propriétés (de transport, mécaniques) calculées par modélisation moléculaire (D.Brown, Univ. Savoie/UMR CNRS 5041)	<b>11h00</b> Discussions – Bilan et perspectives	
<b>12h30 - Déjeuner</b>	<b>12h00 - Déjeuner</b>	<b>12h30 - Déjeuner</b>	<b>12h00 - Déjeuner</b>	
<b>14h00</b> <u>Apports théoriques</u> Modélisation moléculaire : principes et extensions aux modèles « gros grains » (H. Meyer, Institut Charles Sadron, UPR CNRS 22, Strasbourg)	<b>14h00</b> <u>Apports théoriques/Témoignages</u> Modélisation moléculaire et intégration de données biophysiques –RMN- (B. Gilquin, CEA LSP) A CONFIRMER	<b>14h00</b> <u>Ateliers</u> Trois projets de recherche (3 groupes) construire une méthodologie de définition et de montage de projet en lien avec la modélisation moléculaire  1) Protéines peu structurées 2) Interactions protéines-polyphénols 3) Modélisation des transferts dans les membranes denses		
<b>15h30</b> <u>Apports théoriques</u> Principes de la modélisation par homologie des protéines (M. Dauchez, Univ. Reims/UMR CNRS 5506)	<b>15h00</b> <u>Témoignages</u> Modélisation moléculaire d'interaction ligand-récepteur (J. Golebiowski, Univ. Sophia/UMR CNRS 6001)			
<b>17h00 - Pause</b>	<b>16h00 - Pause</b>	<b>16h00 - Pause</b>		
<b>17h30</b> <u>Témoignages</u> Modélisation des polysaccharides (K.Mazeau, CERMAV, UPR CNRS 5301)	<b>16h30</b> Discussions générale identifier collectivement les possibilités de partage d'outils communs, les attentes, les questions... (en salle plénière ou en groupe – à définir)	<b>16h30</b> <u>Restitution des ateliers</u>		
<b>18h30</b> Discussion générale	<b>18h00</b> Fin de journée	<b>18h00</b> Fin de journée		
<b>19h00 – 20h30 - Diner</b>				