



DEPARTEMENT CEPIA  
CARACTERISATION ET ELABORATION DES  
PRODUITS ISSUS DE L'AGRICULTURE

FORMATION PERMANENTE  
FormaSciences

## Lieu

Hôtel Club Le Risoux – 39220 Bois d'Amont

## Dates

Du lundi 11 décembre (14h) – accueil à 11h30 – au jeudi 14 décembre (13h00) 2006

## Coûts des frais d'inscription des participants

Personnels INRA (y compris doctorants et post-doctorants) : frais pédagogiques et d'hébergement pris en charge par la formation permanente INRA et le département commanditaire ; les frais de transport sont à la charge des unités.

Autres : (Nous faire parvenir un bon de commande) participation aux frais de séjour et pédagogiques : 150€ Personnels UMR non INRA ; 200 € Personnels universités et autres EPST ; 600 € Secteur Privé.

## Comité d'organisation

Fanny Guyomarch ([fanny.guyomarch@rennes.inra.fr](mailto:fanny.guyomarch@rennes.inra.fr)), Anne Tromelin ([anne.tromelin@dijon.inra.fr](mailto:anne.tromelin@dijon.inra.fr)), Cécile Tournu-Sammartino ([tournu@nantes.inra.fr](mailto:tournu@nantes.inra.fr)), Olivier Vitrac ([olivier.vitrac@reims.inra.fr](mailto:olivier.vitrac@reims.inra.fr))

## Modalités d'inscription

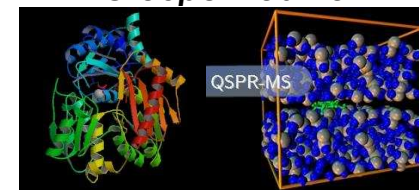
Remplir la fiche d'inscription incluant une brève présentation de vos programmes de recherche, de vos attentes et préoccupations vis-à-vis de la thématique de l'école.

Le formulaire d'inscription est à renvoyer par mël à :

**nathalie.frelat@paris.inra.fr**

Tel: 01 42 75 90 33 - Fax: 01 42 75 94 31

## Groupe ModMol



ECOLE-CHERCHEURS

« **Modélisation moléculaire et supramoléculaire**  
**Méthodes / Applications / Projets** »

**11 – 14 DECEMBRE 2006**

**HAUT-JURA (39)**

## Contexte et enjeux

La modélisation moléculaire et supramoléculaire regroupe un ensemble d'outils et de méthodes pour comprendre et explorer l'assemblage et les interactions entre les constituants de la matière. Dans le département Caractérisation et Elaboration des Produits Issus de l'Agriculture (CEPIA), ces méthodes sont essentiellement utilisées pour comprendre les interactions entre les principaux constituants de la matière vivante (protéines, polysaccharides, lipides...) dans leur environnement d'origine (ex. cellule) ou dans leurs conditions de mise en œuvre (réacteur, matériau, aliment...). A des fins technologiques ou cognitives, d'autres applications sont également abordées : perception sensorielle des aliments (flaveur, astringence), techniques séparatives, sécurité alimentaire...

Cette approche spécifique de la modélisation aux niveaux moléculaire et supra-moléculaire présente donc des potentialités riches et variées en ce qui concerne les échelles d'études et les finalités poursuivies. Nécessitant une construction interdisciplinaire des problématiques de recherche, le département Cepia a mis en place en 2004 le groupe transversal ModMol. Dans le cadre de son animation, celui-ci a déjà organisé en 2004 et 2005 deux actions qui ont permis la construction d'une communauté scientifique rapprochant des disciplines complémentaires (biologie, chimie, physique). Tout en continuant à participer au développement de cette communauté, il s'agit ici plus particulièrement de favoriser les partenariats avec les spécialistes de la modélisation moléculaire / supra-moléculaire et de permettre aux porteurs de projet de recherche d'affiner leur problématique et ainsi faciliter la réponse aux appels d'offre européen ou ANR.

## Objectifs de l'école-chercheurs

Les objectifs de cette école-chercheurs sont de permettre aux participants :

- d'acquérir les connaissances de base nécessaires pour faciliter le dialogue entre les spécialistes de la modélisation moléculaire et ses utilisateurs ;
- de partager des outils communs et des méthodes pour mieux appréhender la démarche et identifier les besoins techniques et pratiques liés ;
- d'identifier des personnes ressources et faciliter l'émergence de futures collaborations ; élaborer collectivement une cartographie des disciplines et des compétences existantes, dans le domaine de la qualité des aliments, au sein du département CEPIA et de l'INRA ;
- d'échanger autour de projets en cours de construction pour identifier collectivement les questions scientifiques auxquelles la modélisation moléculaire peut répondre.

## Public

Cette école, initiée par le département CEPIA, est ouverte à toute personne intéressée par l'approche « modélisation moléculaire » (chercheurs, ingénieurs, enseignants-chercheurs, doctorants et post-doctorants).

## Programme prévisionnel

### 1. Introduction à la modélisation moléculaire / supra-moléculaire et apports théoriques → acquérir les connaissances de base et partager des concepts et un vocabulaire commun

- Introduction à la mécanique moléculaire tout atome (*à préciser*) ;
- Modélisation par regroupement d'atomes : modélisation « gros grains » (*à préciser*) ;
- Extension à la modélisation d'édifices de grande taille : modélisation mésoscopique (*à préciser*)
- Dynamique et recherche de conformation d'objets moléculaires (*à préciser*)
- Principes de la modélisation par homologie des protéines (*à préciser*)

### 2. La modélisation moléculaire / supra-moléculaire en pratique → comprendre la démarche et identifier les spécificités et les besoins techniques

Cette séquence s'appuie sur des témoignages de chercheurs « biologistes » et « modélisateurs » avec une représentation croisée des attentes, contraintes, questions liées à la modélisation moléculaire.

- \* Modélisation des polysaccharides (*à préciser*)
  - \* Applications pratiques de la modélisation mésoscopique (*à préciser*)
  - \* Modélisation de l'assemblage des caséines (*à préciser*)
  - \* Modélisation de l'élastine (*à préciser*)
  - \* Intégration des données biophysiques dans la démarche de modélisation (*à préciser*)
  - \* Un besoin en modélisation : démarche, questions, contraintes (*F.Guyomarch*)
- Table ronde : réflexion autour des attentes des biologistes et de modélisateurs (pourquoi modéliser ? quelle hypothèse et quelle approche ? comment intégrer des données biophysiques dans la démarche de modélisation ?, etc.)

### 3. Séquences interactives

Atelier 1 : A partir des différentes interventions (théoriques et techniques), identifier collectivement les possibilités de partage d'outils communs (base de données, méthodes, etc.) et les besoins de formation en vue de la mise en place des ateliers pratiques en 2007.

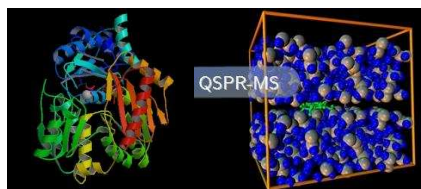
Atelier 2 : Sur la base de trois projets (projet Astringence - projet Protéines peu structurées – projet Membrane osmose inverse), construire une méthodologie de définition et de montage de projet en lien avec la modélisation moléculaire : identification des questions de recherche, des périmètres d'étude, propositions/suggestions de collaborations.

### 4. Synthèse et perspectives

Cette séquence finale dressera le bilan de l'école et envisagera les suites à donner.

**Département**  
**Caractérisation et élaboration des produits issus de l'agriculture**

**Groupe ModMol**



ECOLE CHERCHEURS  
**MODELISATION MOLECULAIRE & SUPRAMOLECULAIRE**  
*METHODES / APPLICATIONS / PROJETS*

**11 – 14 DECEMBRE 2006**  
**HAUT-JURA (39)**

## Fiche de pré-inscription<sup>1</sup>

A retourner **avant le 2 octobre 2006** par courrier électronique à :

**nathalie.frelat@paris.inra.fr**

Tél. : +33.(0)1.42.75.90.33 – Fax : +33.(0)1.42.75.94.31

Nom : .....  
Prénom : .....

Organisme : .....  
Fonction : .....  
Département : .....  
Unité : .....

Adresse professionnelle : .....  
.....

Tel. : .....  
Fax : .....  
Email : .....

☛ **T.S.V.P.**

<sup>1</sup> Le nombre de places étant limité, l'organisation se laisse la possibilité de sélectionner les participants en fonction des renseignements portés sur la fiche d'inscription.

**Présentez en quelques lignes vos thèmes ou perspectives de recherche en lien avec la modélisation moléculaire.**

-  
-  
-  
-  
-

**Quelles sont vos préoccupations, attentes, questions, attentes vis à vis de l'Ecole ? (ex. formation, méthodes, échanges, collaborations ...)**

-  
-  
-  
-  
-

**Sur quel(s) thème(s) ou quelle(s) problématique(s) –questions de recherche ou méthodologiques - voudriez-vous travailler plus particulièrement lors des ateliers ?**

-  
-  
-  
-  
-  
-

**Souhaitez-vous échanger sur votre projet de recherche à construire ou en cours ? Si oui, précisez la thématique et les objets de débat que vous souhaiteriez aborder lors de l'école.**

-  
-  
-  
-  
-  
-

**Autres suggestions**

-  
-  
-  
-  
-  
-