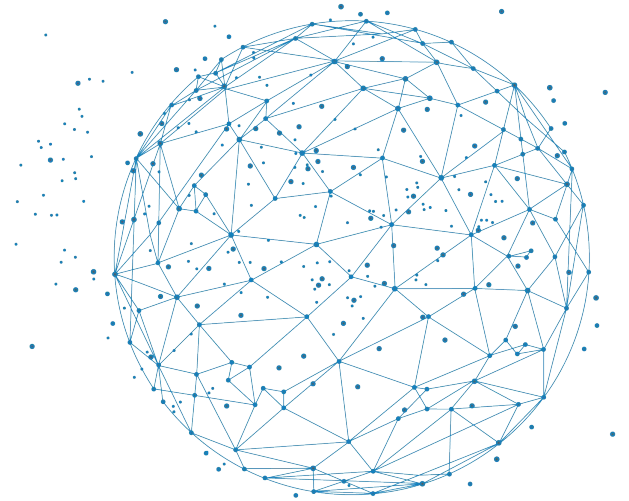


AlphaFold et au delà

Modélisation de la structure 3D des protéines
avec des outils d'IA
AlphaFold & beyond: 3D Protein Structure
Modeling with AI Tools

Introduction



IFB – une fédération d'équipes et de plateformes

Missions

- Services
- Vision stratégique
- Représentation internationale (ELIXIR...)

36 plateformes et équipes associées

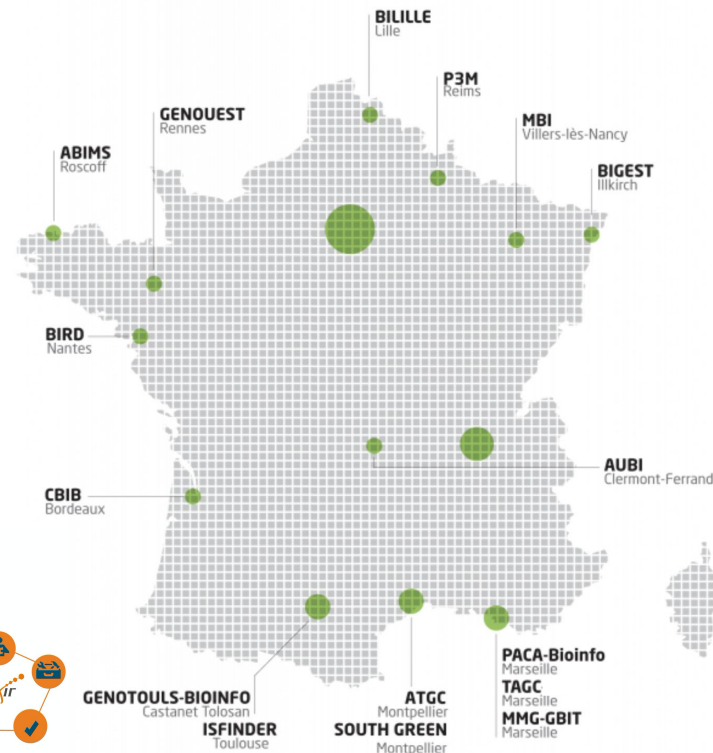
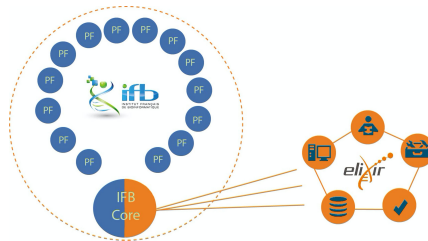
- En lien avec de nombreux instituts et universités

De nombreux services

- Calcul
- Stockage
- Formations
- Accompagnement de projets

IFB-core (UMS 3601)

~400 experts
(~200 ETPs)



RÉGION PARISIENNE

EBIO
Orsay
INSTITUT CURIE
Paris
IGR
Villejuif
MICROSCOPE
Evry
MIGALE
Jouy-en-josas

CBBI

Paris
RPBS
Paris
URGI
Versailles
ORPHANET
Paris
ICONICS
Paris
IFB CORE
Evry

RÉGION LYONNAISE

INCA-SLC
Lyon
PRABI-HCL
Lyon
PRABI-AMSB
Villeurbanne
PRABI-Lyon-Grenoble
Villeurbanne
PRABI-Lyon-Gerland
Lyon



Exemples de services, ressources, projets et actions de IFB

Une infrastructure numérique de calcul et stockage
(NNCR) avec des environnements reproductibles (>600
logiciels installés)



Un site communautaire d'entre-aide

👉 community.france-bioinformatique.fr

Un guichet d'orientation

👉 www.france-bioinformatique.fr/guichet-conseil-orientation/

Des ressources et en Science Ouverte



Des projets d'appui à la recherche



PROGRAMME
DE RECHERCHE
AGROÉCOLOGIE
ET NUMÉRIQUE

Des actions de formation



www.france-bioinformatique.fr/formation



- Des formations régionales, nationales et internationales

- Un catalogue national des formations

👉 <https://www.ifb-elixir.fr/formations/>

- Des actions nationales

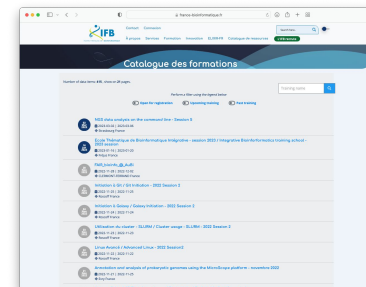
- GT, bonnes pratiques de formation
- mutualisation de matériel pédagogique (supports, workflows, jeux de données). ex : LMS moodle
- un GT e-formation

👉 SandBox@IFB <https://sandboxbio.france-bioinformatique.fr/>

- Des nouvelles formations nationales

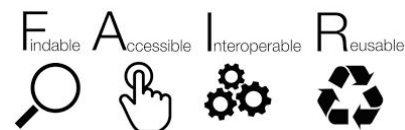
- Thématiques émergentes, besoins partagés
- Pour les bioinfos et les biologistes
- Ex : ETBII, principes FAIR en bioinformatique et pour la gestion des données, IA en Sciences de la vie

	2019	2020	2021
Training events	138	127	176
International		7	16
Europe/Elixir		3	3
National		53	76
Regional		60	19
University training		35	18
Professional training		91	207
Average satisfaction rate		86%	79%
Learners	2169	2326	4458
Trainers	NA	272	379

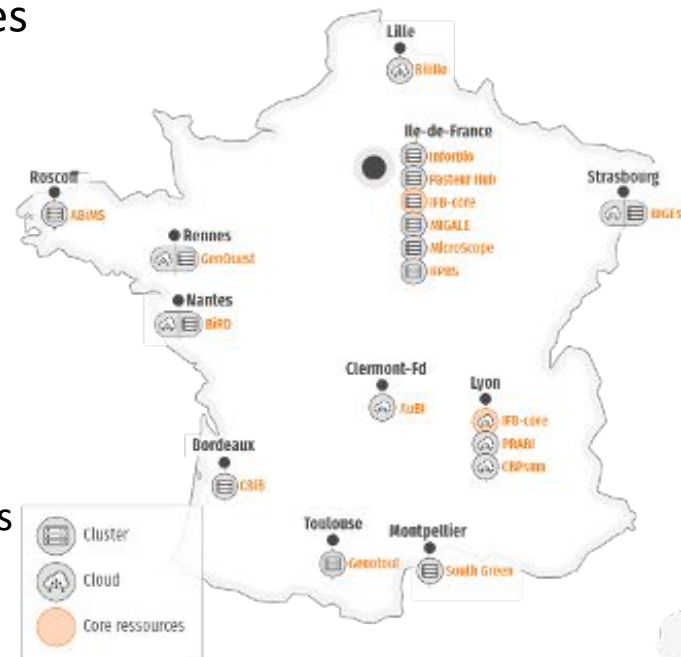


👉 Moodle@IFB :

moodle.france-bioinformatique.fr/ ex :



- Une Infrastructure Numérique Distribuée
 - Des technologies complémentaires : 14 clusters, 8 clouds
- Gestion par un réseau collaboratif d'équipes techniques
 - Par les ingénieurs des plateformes régionales et IFB-core
 - Partage des connaissances et des développements
 - Collaboration avec les centres de calcul nationaux et régionaux
- Stockage des données
 - Pour les besoins des projets
 - Pas de certification pour les données sensibles (HDS...)
 - Développements en cours pour des environnements virtuels de bulles sécurisées (PIA3 MUDIS4LS, PEPR Cloud4SAMS)





- Coord. : Christophe Blanchet et Philippe Hupé
 - Partenaires : IFB-core, Institut Curie, IDRIS, CBPsmn, MétaGénoPolis...
 - 2 recrutements : Romuald Marin et Quentin Duvert
- Objectifs
 - Faciliter l'accès et l'usage des ressources HPC/AI/BigMem disponibles dans les centres de calcul nationaux (CNRS IDRIS).
 - Mettre en œuvre les environnements de recherches adaptés, et les ressources bioinformatiques utiles (outils et données).
 - Prototyper et évaluer les performances sur des centres de calcul intermédiaires (CBPsmn).
 - Former les scientifiques et les développeurs de logiciels bioinformatiques.
- Réalisations
 - Développement de use cases bioinformatiques, par exemple :
 - AFmassive/MassiveFold (collaboration UGSF/IFB/IDRIS), déployé sur Jean Zay et le cluster IFB-core
 - Evaluation de modèles LLM généralistes et spécialisés pour la génomique
 - Développement et déploiement de workflows pour des environnements HPC
 - Rédaction de guides à destination des biologistes et bioinformaticiens
 - Liste des ressources HPC/AI académiques, bonnes pratiques d'usage des GPUs...
 - Organisation de hackathons : IDRIS (jan. 2024), CBPsmn (nov. 2024)
 - **Formation « AlphaFold et au delà » (déc. 2025)**



EQUIPEX+ ANR-21-ESRE-0048



Mercredi 10 décembre 2025

14:00-14:30 Introduction, présentation des intervenants et formateurs

14:30-15:00 Présentation de l'Infrastructure Jean Zay

15:00-15:45 AlphaFold : principe et fonctionnalités

15h45-16h00 pause

16:00-16:30 Première utilisation de Jean Zay

16:30-17:00 Présentation de MassiveFold

Jeudi 11 décembre 2025

9:00-9:15 Warm up

9:15-11:15 Application de MassiveFold à une protéine monomère inconnue

11:15-11:30 pause

11:30-12:00 Visualisation des résultats avec ChimeraX

12:00-13:00 Application de MassiveFold à un complexe protéique (1/2)

13:00-14:15 Déjeuner (plateau repas sur place)

Visite en sous-groupes de Jean ZAY

14:15-15:15 Application de MassiveFold à un complexe protéique (2/2)

15:15-15:30 pause

15:30-17:30 Use case Criblage d'interactions protéiques

Vendredi 12 décembre 2025

9:00-9:15 Warm up

9:15-10:45 Use case Echantillonnage massif

10h45-11h00 pause

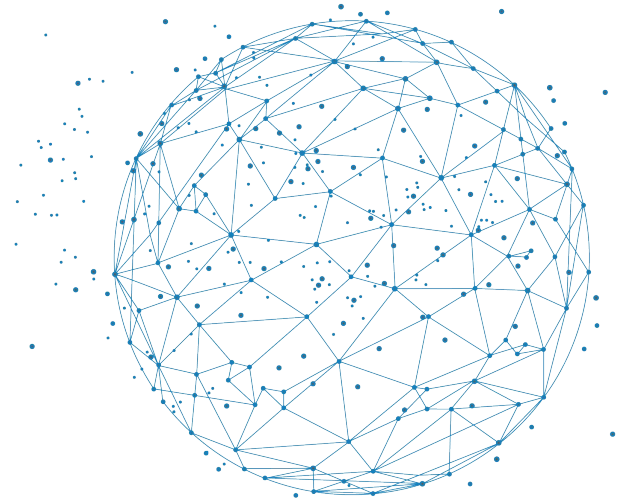
11h00-11h45 Échanges avec l'équipe pédagogique : réponses aux questions des apprenants et limites actuelles des outils

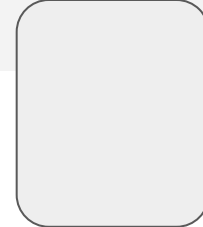
11h45-12h00 Conclusion et questionnaire final

Toutes les infos ici :

 <https://moodle.france-bioinformatique.fr/course/view.php?id=43>

Présentation de l'équipe pédagogique AlphaFold et au delà





■ ORCID :

■ Page Web :

■ Institut :



■ Équipes / GT :



■ Ville :



■ Compétences



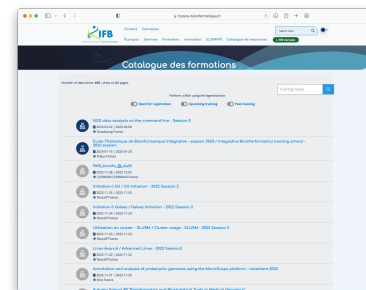
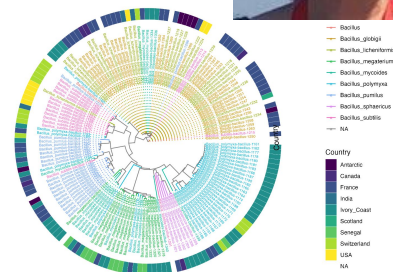
■ Interventions dans formation AlphaFold



A DUPLIQUER et REMPLIR



- **ORCID** : <https://orcid.org/0000-0001-5102-0632>
- **Page Web** : <https://cv.hal.science/helene-chiapello>
- **Institut** :
 - ❑ INRAE, unité MaIAGE, département MICA
 - ❑ Institut Français de Bioinformatique
- **Équipes / GT** :
 - ❑ Equipe INRAE StatInfOmics
 - ❑ GT IFB Formation, e-formation
- **Ville** :
 - ❑ Jouy-en-Josas
- **Compétences**
 - ❑ Génomique et bioinformatique microbienne
 - ❑ Phylogénie et phylogénomique
 - ❑ Formation
 - ❑ Science ouverte, principes FAIR, gestion de données
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - ❑ Organisation



Science Ouverte et
principes FAIR





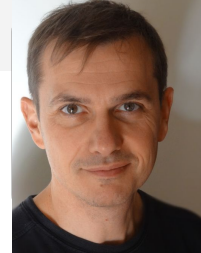
- ORCID : [0000-0001-8504-232X](https://orcid.org/0000-0001-8504-232X)
- Page Web : <https://bioi2.i2bc.paris-saclay.fr>
- Institut :
 - ❑ Institut de biologie cellulaire intégrative (I2BC)
- Équipes / GT :
 - ❑ BIOI2 (plateforme de bioinformatique)
- Ville :
 - ❑ Gif-sur-Yvette
- Compétences
 - ❑ Bash, Python, R, Snakemake, Slurm
 - ❑ Git, Apptainer
 - ❑ Bio struct, AlphaFold, AlphaScan/AlphaPulldown...
- Interventions dans formation AlphaFold
 - ❑ Helper/formateur ChimeraX + Use case “Criblage d’interactions protéiques”





- **ORCID :**
- **Page Web :**
- **Institut :**
 - ❑ Institut Français de Bioinformatique
 - ❑ Prabi AMSB
- **Équipes / GT :**
 - ❑ IFB-core
- **Ville :**
 - ❑ Lyon
- **Compétences**
 - ❑ Bash, Python, Javascript
 - ❑ Docker, GPU, IA
 - ❑ Développement
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - ❑ Helper





■ **ORCID** : <https://orcid.org/0000-0001-5294-2858>

■ **Page Web** : <https://bioi2.i2bc.paris-saclay.fr/>

■ **Institut** :

□ CEA, CNRS, Univ. Paris-Saclay, unité I2BC

■ **Équipes / GT** :

□ Equipe AMIG I2BC

□ Plateforme BIOI2, I2BC

■ **Ville** :

□ Gif-sur-Yvette

■ **Compétences**

□ Bioinformatique structurale

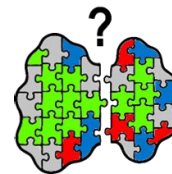
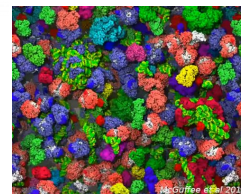
□ Réseaux d'interaction

□ Evolution moléculaire

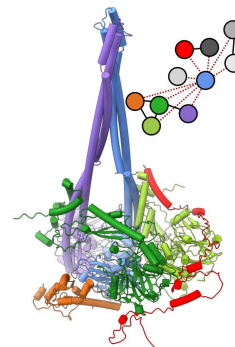
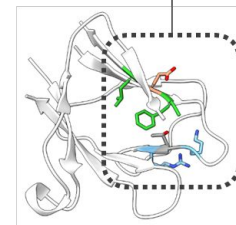
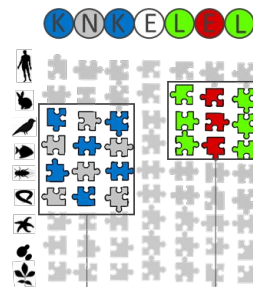
□ Design moléculaire

■ **Interventions dans formation AlphaFold**

□ Helper/formateur ChimeraX + Use case
“Criblage d'interactions protéiques”

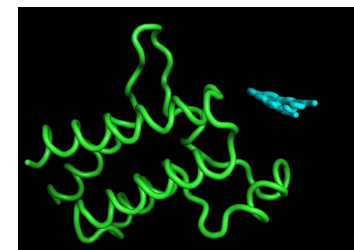


université
PARIS-SACLAY



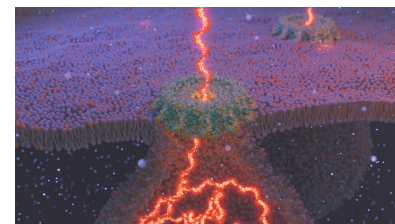
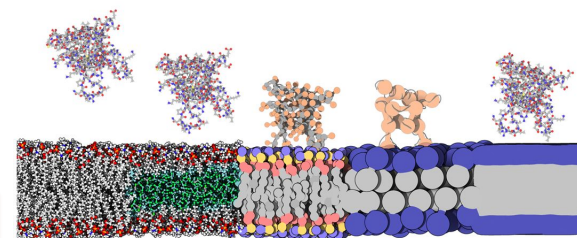
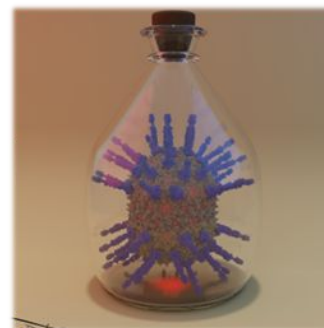


- ORCID : [0000-0003-0118-0229](https://orcid.org/0000-0003-0118-0229)
- Page Web : <https://bioi2.i2bc.paris-saclay.fr>
- Institut :
 - ❑ Institut de biologie cellulaire intégrative (I2BC)
- Équipes / GT :
 - ❑ BIOI2 (plateforme de bioinformatique)
- Ville :
 - ❑ Gif-sur-Yvette
- Compétences
 - ❑ Bash, Python, Snakemake, Slurm
 - ❑ Git, apptainer
 - ❑ Bio structurale prédictive et générative: AlphaFold, RFDiffusion, ProteinMPNN
- Interventions dans formation AlphaFold
 - ❑ Helper/formateur ChimeraX + Use case “Criblage d’interactions protéiques”





- **ORCID** : 0000-0002-6490-4602
- **Page Web** : tubiana.github.io
- **Institut** :
 - Institut de biologie cellulaire intégrative (I2BC)
- **Équipes / GT** :
 - IMAPP
- **Ville** :
 - Gif-sur-Yvette
- **Compétences**
 - Python, bash
 - Modélisation Moléculaire AlphaFold & co, Boltz
 - Simulation de dynamique moléculaire
 - Protéines virales
 - Screening / Docking.
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - Helper / Formateur visualisation & ChimeraX.





■ **ORCID :** <https://orcid.org/0009-0008-5253-473X>

■ **Institut :**

❑ INRAE, unité MaIAGE

■ **Équipes / GT :**

❑ Equipe INRAE StatInfOmics

■ **Ville :**

❑ Jouy-en-Josas

■ **Compétences**

❑ Conception développement workflows d'analyse

❑ Conception et développement d'application web et d'outils de visualisation

❑ Génomique / Protéomique / Bioinfo Structurale

❑ Python / Perl / Bash / Awk / Javascript / sge / slurm / Snakemake / Conda / Module / ...

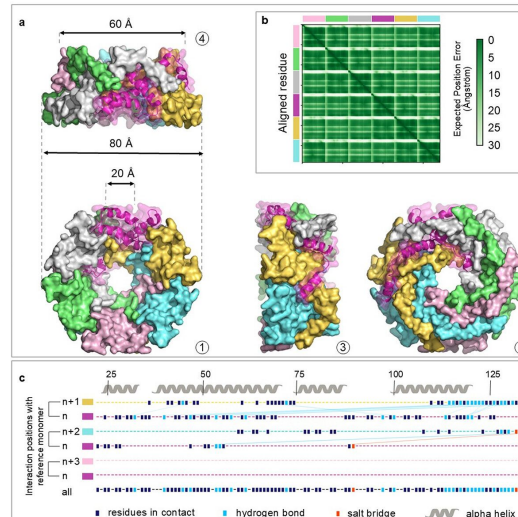
❑ Alphafold / Pymol / Pisa / FoldSeek

❑ Formation

■ **Interventions dans formation AlphaFold**

❑ Helper

Predicted hexameric structure of MAM- Δ LP





Vilela Rodrigues, et al. (2025). *Gut Microbes*

WHOPPER Web application for Hands-On identification of Proteins co-occurrence among Phyla, focused on user ERgonomics



Marthey et al (2025). *BioRxiv*

 Migale Bioinformatics Facility
We provide several services for scientists to deal with life sciences data



Cycle "Bioinformatique par la pratique" 2026
Module 19 - 28 et 29 mai 2026

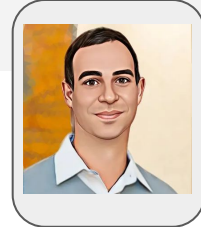
Modélisation in silico de structures 3D de protéines. Prédiction de mutations, de fixation de ligands

Genaëlle André & Sylvain Marthey
Théorie 20 % - Pratique 80 % - 10 stagiaires par session¹ - 1 poste informatique par stagiaire





28 & 29 mai 2026
Jouy-en-Josas



- **ORCID** : 0000-0001-8468-3424
- **Page Web** : <https://curie.fr/plateforme/curiecoretech-bioinformatique-cubic>
- **Institut** :
 - Institut Curie U1331
- **Équipes / GT** :
 - CUBIC (plateforme de bioinformatique)
- **Ville** :
 - Paris
- **Compétences**
 - Gestion de données FAIR
 - Bash, Python, Nextflow, Slurm
 - apptainer, git
 - Informatique, Bioinformatique
 - HPC
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - Helper





- **ORCID :** [0000-0002-8690-7898](https://orcid.org/0000-0002-8690-7898)
- **Page Web :**
- **Institut :**
 - ❑ Institut Curie U1331
- **Équipes / GT :**
 - ❑ CUBIC (plateforme de bioinformatique)
- **Ville :**
 - ❑ Paris
- **Compétences**
 - ❑ Bash, Python, Nextflow, Slurm
 - ❑ apptainer, git
 - ❑ Informatique, Bioinformatique
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - ❑ Helper ChimeraX + Alphafold + AFM



- **ORCID :**
- **Page Web :**
- **Instituts :**
 - Institut Curie
 - Institut Français de Bioinformatique
- **Équipe :**
 - Plateforme de bioinformatique de l'Institut Curie
- **Ville :**
 - Paris
- **Compétences**
 - Nextflow
 - Git
 - Singularity apptainer
 - Slurm
- **Interventions**
 - helper

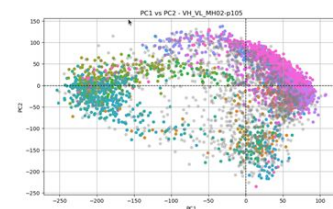
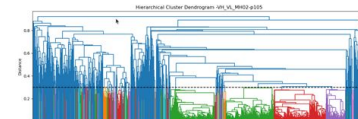
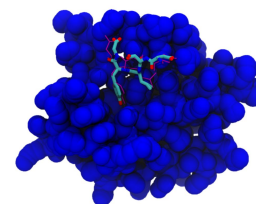
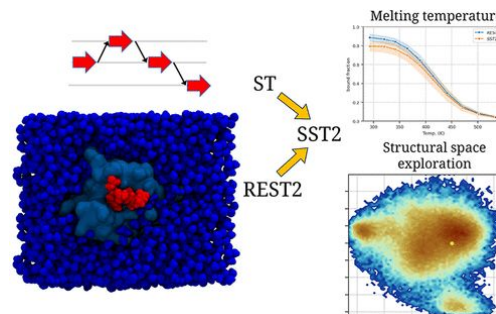
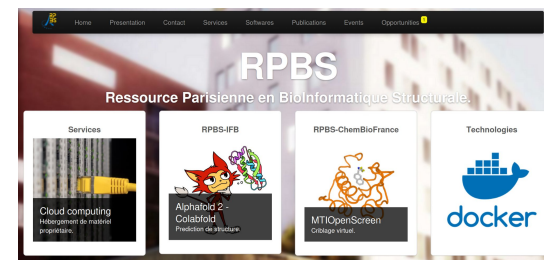




- **ORCID** : <https://orcid.org/0000-0002-3842-5333>
- **Page Web** :
<https://samuelmurail.github.io/PersonalPage/>
- **Institut** :
 - Université Paris Cité
- **Équipes / GT** :
 - TPM2PI (Peptides Thérapeutiques: Modulation des Interactions Protéine-Protéine)
 - Plateforme RPBS
- **Ville** :
 - Paris
- **Compétences**
 - Simulation de DM
 - Bioinformatique structurale
 - Web Server
 - Programmation
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - Helper/formateur



Inserm
La science pour la santé
From science to health



- **ORCID :** [0009-0005-5652-684X](https://orcid.org/0009-0005-5652-684X)
- **Institut :**
 - Université de Lille
- **Équipes / GT :**
 - UGSF: Unité de Glycobiologie structurale et fonctionnelle
- **Ville :**
 - Villeneuve-d'Ascq
- **Compétences**
 - Bioinformatique structurale
 - Programmation
 - Calcul
- **Interventions dans formation AlphaFold**
 - Formateur MassiveFold
 - Helper

MASSIVEFOLD





■ **ORCID :** [0000-0002-6807-6621](https://orcid.org/0000-0002-6807-6621)

■ **Page Web :**

<https://scholar.google.fr/citations?user=gEqkBFkAAAAJ&hl=fr&oi=ao>

■ **Institut :**

□ CNRS

■ **Équipes / GT :**

□ UGSF: Unité de Glycobiologie structurale et fonctionnelle - Equipe BIND

□ Plate-forme Bilille

■ **Ville :**

□ Villeneuve-d'Ascq

■ **Compétences**

□ Bioinformatique structurale

□ Réseaux biologiques

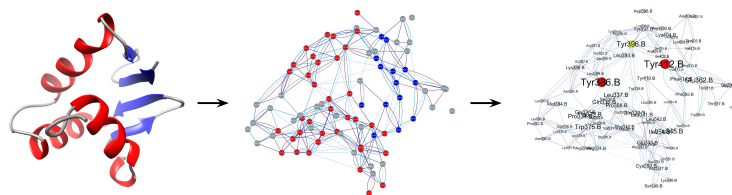
□ Calcul

■ **Interventions dans formation AlphaFold**

□ Formateur MassiveFold

MASSIVEFOLD

 **Université
de Lille**



- Institut :
 - ❑ CNRS, Institut Français de Bioinformatique
- Équipes / GT :
 - ❑ Equipe Cloud IFB-core / PRABI-AMSB
 - ❑ GT IFB M1. Calcul Et Stockage
 - ❑ MUDIS4LS WP2 & WP4
 - ❑ Cloud4SAMS WP3
- Ville :
 - ❑ Villeurbanne
- Compétences
 - ❑ Bioinformatique
 - ❑ Calcul scientifique et infrastructure distribuée
 - ❑ Infrastructures cloud et HPC/IA
 - ❑ Intégration d'applications bioinformatiques
- Interventions dans formation AlphaFold
 - ❑ Organisateur et formateur



INSTITUT FRANÇAIS DE BIOINFORMATIQUE



prabi Analyse et Modélisation des Systèmes Biologiques





RAINBIO - APPLIANCES BIOINFORMATIQUES DANS LE CLOUD

Catalogue des appliances bioinformatiques dans le cloud, filtrez-les en utilisant les termes présents dans l'ontologie EDAM, ou en langage naturel.

App Store (62) Appliances Outils Topics

App Store (62)	Appliances	Outils	Topics		
Analyse <ul style="list-style-type: none">❑ R - base, R - Shiny, Web interface❑ Biomarkers, Oncology, Workflow, Data visualization	AnalysesSV <ul style="list-style-type: none">❑ bioconda, BEDTools, BWA, Jupyter, Matplotlib, pandas, SAMtools❑ DNA polymorphism, variant calling, bioinformatics, genomics	ANF MetabioDiy <ul style="list-style-type: none">❑ Bioconductor, DESeq2, devtools (R), ggplot2, gridExtra, phyloseq❑ Bioinformatics, computational biology, Data management, bioinformatics	ANF OMERO-FARBY <ul style="list-style-type: none">❑ bioconda, CellProfiler, Jupyter, Matplotlib, Numpy, pandas, phyto❑ Microarray experiment, Data architecture & analysis and design, Mathematics, Comp	Akomics <ul style="list-style-type: none">❑ AskOmics❑ Data integration and wa	atellerstar2AD <ul style="list-style-type: none">❑ FastQC, SPHides❑ Sequence assembly
Bi <ul style="list-style-type: none">❑ ComparativeGenomics	Bioimaging Desktop <ul style="list-style-type: none">❑ Bureau virtuel, Icy, ImageJ-Fiji, MATE, Napari, OMERO.insight, O❑ Light microscopy, Medical imaging, Inf	biom3d <ul style="list-style-type: none">❑ Biom3d, Bureau virtuel, python 3, XGBo, XFCF❑ Bioinformatics, Biology, B	BioPipes <ul style="list-style-type: none">❑ bioconda, cwltool, Docker, Ne❑ Bioinformatics, Bioinformatics, Workflows	blister <ul style="list-style-type: none">❑ bioconda, Bowtie2, FastQC, S❑ Bioinformatics, Genomics, M	CoursAnalysesNanoporeSG <ul style="list-style-type: none">❑ Data architecture, analy
Cytoscape <ul style="list-style-type: none">❑ Bureau virtuel, Cytoscape, X2❑ Bioinformatics, Data visu	Debian 12 <ul style="list-style-type: none">❑ Ansible, bioconda, Docker❑ Bioinformatics, Informatics	Debian 13 <ul style="list-style-type: none">❑ Ansible, bioconda, Docker❑ Bioinformatics, Informatics	Decomics <ul style="list-style-type: none">❑ Bioconductor, ggplot2, Shiny❑ Bioinformatics, computational	DRomics <ul style="list-style-type: none">❑ Bioconductor, DESeq2, DRomi❑ R - base, Shiny	DRomicsInterpreter <ul style="list-style-type: none">❑ Bioconductor, DESeq2, DRomi❑ R - base, RStudio, Shiny
EBAME-Ambio <ul style="list-style-type: none">❑ Anvi❑ Genomics, Omics, Metageno	EBAME-MetaTOR <ul style="list-style-type: none">❑ Bowtie2, CheckM, Hmmer, Pli❑ Sequence alignment, Phylogenetics, P	EBAME-Quince <ul style="list-style-type: none">❑ bioconda, Bowtie2, DESeq2, BWA, CONCOCT, DESeq2, Diamond❑ Transcriptomics, Informa	ENSL-CPES-RNAseq 2025 <ul style="list-style-type: none">❑ bioconda, Bowtie2, DESeq2, e❑ Sequence alignment, ChIP-seq, Mate	ETBI AnalyseMultivariée <ul style="list-style-type: none">❑ BioSlyde, Bio4R, clusterProfil❑ ComplexHeatmap, DESeq2, D	ETBI Reseaux <ul style="list-style-type: none">❑ BiNGO (Cytoscape), Bureau vi❑ tual, compositions (R), Cytoscap
formation_CIRI <ul style="list-style-type: none">❑ DESeq2, FastQC, HISAT2, RSt❑ Bioinformatics	Formation LBSE-NOS 2024 <ul style="list-style-type: none">❑ BEDTools, Bioconductor, DES❑ HISAT2, IGV - Integrative Ge	frangIPANE <ul style="list-style-type: none">❑ ABySS, bioPython, BWA, CD❑ HIT, Docker, Jupyter, python3, S	génomique_environnement <ul style="list-style-type: none">❑ Bioconductor, BLAST, Bowtie❑ 2, Cutadapt, FastQC, HMMER, R	Integron_finder <ul style="list-style-type: none">❑ HMMER, Informal, prodigal❑ Bioinformatics and structural analys	Jupyter <ul style="list-style-type: none">❑ Julia, Jupyter, R - base