

**MASTER EN BIOINFORMATIQUE**  
**In Silico Drug Design - Macromolécules MSc**  
**Université Paris Cité**  
**2024-2025**

**SEMESTRE 1 (30 ECTS)**

**UE 0 UPGRADE**  
**Coordinateur : G. MOROY**

**EC 100 Unix et R:Base (Mise à jour)**  
**Coordinateur : G. MOROY**

**Titre :** Unix et R:Base (Mise à niveau)  
**Responsable pédagogique :** Gautier Moroy

**Objectifs de connaissance :** Acquérir les bases de l'utilisation du système d'exploitation Unix et du logiciel R.

**Compétences visées :** Connaître Unix et R pour être autonome lors des séances pratiques d'informatique, de bio-informatique et de statistiques.

**Programme**

Principes fondamentaux du système d'exploitation Unix et du logiciel R.

**UE1 FONDAMENTAUX (7 ECTS)**  
**Coordinateur : C. ETCHEBEST**

**BQAAY240 Structure des biomolécules (2 ECTS) Responsable : N. CAULET**

**Titre :** Structure des biomolécules  
**Enseignant :** N. Caulet

**Objectifs de connaissance :**

- Principes et méthodes spectroscopiques pour l'étude de la structure 3D et de la dynamique des macromolécules biologiques

**Compétences ciblées :**

Maîtriser les spécificités des structures et des interactions des macromolécules biologiques et leur caractérisation par des techniques expérimentales.

**Programme :**

- Génomique et protéomique structurale : repliement en 3D des macromolécules : ADN, ARN et protéines, membranes biologiques.  
- Techniques biophysiques : Dichroïsme circulaire, fluorescence, électrophorèse, spectrométrie de masse, microscopie électronique.

**BQAAY210 Enzymologie (4 ECTS)**  
**Coordinateur : J. Dairou**

**Titre : Biochimie**

**Coordinateurs de l'enseignement :** J. Dairou

**Objectifs de connaissance :**

- Principes de la thermodynamique
- Concept d'enzymologie et de cinétique chimique

**Compétences ciblées :**

Maîtriser les spécificités des structures et des interactions des macromolécules biologiques et leur caractérisation par des techniques expérimentales.

**Programme :**

- Génomique et protéomique structurale : repliement en 3D des macromolécules : ADN, ARN et protéines, membranes biologiques.
- Techniques biophysiques : Dichroïsme circulaire, fluorescence, électrophorèse, spectrométrie de masse, microscopie électronique.
- Techniques thermodynamiques pour l'étude des interactions : microcalorimétrie, dialyse à l'équilibre
- Concepts avancés d'enzymologie
- Cinétique d'interaction.

**EC 103 Biostatistique et programmation R (3 ECTS)**  
**Coordinateur : L. REGAD**

**Titre : Biostatistique et programmation R**

**Coordinateur de l'enseignement :** L.  
Regad

**Objectifs de connaissance :** L'objectif de l'enseignement dispensé est de fournir aux étudiants une formation de base en biostatistique.

**Compétences visées :** Maîtriser les bases statistiques de l'exploration et du traitement des données biologiques en langage R.

**Programme :**

Rappels de probabilités, introduction à la biostatistique

Estimation et inférence statistique

Tests classiques, test de Student, test du Chi<sup>2</sup>, test du coefficient de corrélation de Pearson Analyse de la variance et introduction aux plans factoriels

Tests non paramétriques

Introduction aux techniques d'apprentissage supervisées par les méthodes de CART / ou de plan factoriel

ou

**EC 104 Projet tutoré en biostatistique et R (3 ECTS)**  
**Coordinateurs : AC CAMPROUX & A. BADEL**

**Titre : Projet tutoré en Biostatistique et R**

**Responsables pédagogiques : AC Camroux & A.Badel**

**Objectifs de connaissance** : A l'issue de la formation, les étudiants seront capables de déterminer l'analyse statistique permettant de répondre à la question biologique posée, et de mettre en œuvre cette analyse.

Conclure sur les résultats statistiques et biologiques de leur étude

**Compétences visées** : Appliquer de manière appropriée les concepts de la biostatistique et de la programmation R pour résoudre un problème biologique. Analyse de fichiers biologiques à partir de FP en biologie

**Programme** : Projet tutoré en biostatistique et R

**EC 105 : English communication (2 ECTS)**  
**Coordinateur : Enseignants de l'EILA (Université Paris Cité)**

**Titre** : Communication en anglais

**Coordinateur pédagogique** : Enseignant

ELAAE **Programme** : Anglais

**disciplinaire**

Pratiquer l'anglais écrit et parlé.

**Compétences ciblées** :

Connaissance approfondie de l'anglais scientifique.

**Programme** :

Formation en ligne à l'anglais de spécialité, à la compréhension et à la rédaction scientifiques.

**UE2 OUTILS DE PROGRAMMATION ET DE MATHÉMATIQUES (9 ECTS)**  
**Coordinateurs : JC GELLY & A.**  
**BADEL 3 ECUs selon le niveau**

**EC 201 Mathématiques I (3 ECTS)**  
**Coordinateur : AC. CAMPROUX**

**Titre** : Mathématiques I

**Coordinateur de l'enseignement** : AC Camproux

**Objectifs de connaissance** :

L'objectif de ce module est de fournir les principes mathématiques et algorithmiques de base pour la conception de médicaments.

**Compétences visées** : Comprendre les principes mathématiques des méthodes numériques couramment utilisées. Capacité à analyser un problème de modélisation et à utiliser correctement les méthodes appropriées.

**Programme** :

- Étude des fonctions : limites, dérivées, graphiques.
- Algèbre linéaire : vecteurs et matrices, opérateurs dans l'espace (rotations, dilatations),

inversion de matrices, valeurs propres et déterminants, solutions d'équations différentielles linéaires.

- Optimisation : fonctions multidimensionnelles, matrices hessiennes
- Introduction aux fonctions énergétiques (docking-scoring)

(ou EC202 si niveau avancé)

**EC 202 Optimisation et apprentissage de la biologie (3  
ECTS) Coordinateurs : D. FLATTERS, F.  
GUYON**

**Titre :** Optimisation et apprentissage de la biologie **Responsables pédagogiques :** D. Flatters, F. Guyon

**Objectifs de connaissance :**

Principes d'optimisation et applications à la modélisation en biologie ;  
Applications et mise en œuvre des mathématiques aux problèmes de la biologie informatique  
(accessible aux biologistes)

**Compétences visées :** Compréhension et développement d'algorithmes utilisés pour la modélisation de l'analyse des données et des méthodes d'apprentissage

**Programme :**

Analyse des fonctions à plusieurs variables : gradient, Hessien et développements limités, conditions d'optimalité ;  
Algorithmes de gradient, gradients conjugués, méthodes de quasi-Newton Applications classiques de l'optimisation à l'analyse de données ;

**Titre : Programmation Python 1**  
**Coordinateurs pédagogiques : P. Fuchs & P. Poulain**

**Objectifs de connaissance** : Former les biologistes à la programmation Python. Python est le langage de programmation le plus utilisé aujourd'hui en bio-informatique, notamment pour l'analyse des données.

**Compétences visées** : Connaître les principaux concepts liés à la programmation Python. Être capable d'écrire des scripts d'analyse simples.  
Évaluer la pertinence d'un résultat renvoyé par un programme.

**Programme :**

- Concept de programmation
- Introduction au langage Python
- Principaux types de données (entiers, nombres réels, listes, chaînes de caractères, dictionnaires, tuples)
- Boucles, comparaisons, tests
- Modules
- Gestion des entrées/sorties avec des fichiers
- Fonctions

**Titre : Programmation Python 2**  
**Coordinateurs pédagogiques : P. Fuchs & P. Poulain**

**Objectifs de connaissance** : Former les bioinformaticiens à la programmation Python. Acquérir une autonomie dans le développement d'un programme Python. Python est le langage de programmation le plus utilisé aujourd'hui en bio-informatique, notamment pour l'analyse de données. Il est très demandé dans les laboratoires, mais aussi dans les entreprises privées.

**Compétences visées** : Comprendre les principaux concepts liés à la programmation Python.  
Être capable d'écrire des programmes (i) pour analyser de grandes quantités de données, (ii) pour produire des données (par exemple, une simulation de système).  
Être capable de développer/déboguer un programme en Python.

**Programme :**

Principaux types de données (entiers, nombres réels, listes, chaînes de caractères, dictionnaires, tuples)

- Boucles, comparaisons, tests
- Modules
- Gestion des entrées/sorties avec des fichiers
- Fonctions
- Expressions

régulières Classes Python

**EC 205 Algorithmique I (3 ECTS)**  
**Coordinateurs : C. DELPORTE & H. FAUCONNIER**

**Titre : Algorithmes 1**

**Coordinateurs pédagogiques : C. Delporte, H. Fauconnier**

Le cours introduira les méthodes générales de conception d'algorithmes (récursion, dynamique de programmation, algorithmes gourmands, etc.) sur les algorithmes de base : les différents tris élémentaires, le tri, le tri rapide, la structure du tas, la recherche d'arbres binaires, les fonctions de hachage, la traversée de graphes.

Ce cours présentera les principaux algorithmes utilisés pour résoudre de manière approximative ou exacte certains problèmes issus de la biologie. L'objectif est de permettre aux étudiants de comprendre les principes sous-jacents aux méthodes implémentées dans les logiciels (par exemple BLAST) et d'être en mesure d'évaluer de manière critique les outils qui peuvent être mis à leur disposition au cours de leur carrière professionnelle.

**Compétences ciblées :**

Les concepts de complexité (NP-complétude et approximation polynomiale) seront enseignés en fonction des problèmes abordés.

**EC 206 ECUE en M1 BI-UE2 (3 ECTS)**

**UE3 ÉTUDE PRATIQUE ET APPROFONDIE (8 ECTS)**

**Coordinateur : V.  
GRUBER 3 ECUs au choix**

**EC 304 Base de données toxicologiques (3  
ECTS) Coordinateur : A. BAEZA**

**Titre : Base de données  
toxicologiques Coordinateur de  
l'enseignement : A. Baeza**

**Objectifs de connaissance :**

Introduction à la toxicologie, au devenir des xénobiotiques et des médicaments.

**Compétences ciblées :**

Fournir les bases du devenir des xénobiotiques (médicaments) et de la toxicologie.

**Programme :**

- Introduction à la toxicologie, cellule, cibles toxiques (nécrose, apoptose, adaptation)
- Le devenir des xénobiotiques, la réactivité chimique des espèces oxydantes. Implication en toxicologie. Stress oxydatif et mécanismes de protection.
- Voies de signalisation et mécanismes de toxicité. Relations structure-toxicité. ECOTOX
- Xénobiotiques-inflammation et xénobiotiques-reproduction
- Modèles cellulaires en toxicologie prédictive. Les omiques. Méthodes d'évaluation de la toxicité et dossiers réglementaires



**Titre : ADME/chimétrie**

**Coordinateur de l'enseignement : O. Taboureau**

**Objectifs de connaissance :**

L'objectif de ce module est de donner une introduction aux propriétés ADMET et de proposer des outils permettant de prédire à l'avance les éventuels problèmes d'ADMET (Administration-Distribution-Métabolisme-Excrétion-Toxicité) associés à une petite molécule.

**Compétences ciblées :**

Comprendre et utiliser les outils ADMET pour optimiser la conception d'une molécule et limiter ou éviter les effets secondaires ou toxiques qui lui sont associés. (KNIME)

**Programme :**

- Descripteurs chimiques et pharmacophores basés sur les ligands
- Formation et pratique de KNIME
- Description des propriétés ADMET
- Utilisation d'outils pour prédire les sites de métabolisation, les groupes d'atomes réactifs et toxiques, les cibles protéiques associées aux effets secondaires.
- Évaluation des risques potentiels associés à une molécule et comment optimiser la conception de cette molécule.

**Titre : Chimie ROS (Réactivité et synthèse organique)**

**Responsable pédagogique : F. Chau**

**Objectifs de connaissance :**

Fournir aux étudiants des outils de chimie moléculaire pour :

- comprendre les processus chimiques/biochimiques/biologiques et la réactivité des molécules naturelles/synthétiques.
- savoir maîtriser les principaux mécanismes réactionnels de la chimie organique et les appliquer à la synthèse de molécules cibles.

**Compétences ciblées :**

- comprendre les processus chimiques/biochimiques/biologiques et la réactivité des molécules naturelles/synthétiques.
- savoir maîtriser les principaux mécanismes réactionnels de la chimie organique et les appliquer à la synthèse de molécules cibles.

**Programme**

- Stéréochimie des composés organiques.
- Effets électroniques et stériques.
- Réactivité des groupes fonctionnels chimiques des biomolécules : hydroxyle, carbonyle, carboxyle, amine, thiol et phosphate.
- Chimie des grandes classes de molécules organiques : description, réactivité et applications.

## UE4 ORIENTATION THÉMATIQUE I (6 ECTS)

Coordinateurs : O. TABOUREAU, D.  
FLATTERS 2 ECU au choix

### EC 401 Chimio-informatique (3 ECTS)

Coordinateur : J. DIHARCE

**Titre : Chimio-informatique**

**Coordinateur de l'enseignement :**

**J. Diharce**

**Objectifs de connaissance :**

L'objectif de ce module est de présenter aux étudiants le domaine de la chimio-informatique et son application dans la conception de médicaments.

**Compétences ciblées :**

Introduction à la chimio-informatique. Représentation chimique, descripteurs chimiques, visualisation. Introduction aux méthodes d'analyse

**Programme :**

- Représentation chimique (1D, 2D, 3D)
- Base de données chimiques
- Descripteurs chimiques et pharmacophores.
- Visualisation des descripteurs et des molécules
- Similitude des molécules et de l'amas
- Introduction aux méthodes structure-activité (QSAR)
- Criblage virtuel

### EC 402 Chimie : chiralité - liaisons non covalentes (3 ECTS)

Coordinateurs : F. MAUREL, O. TABOUREAU

**Titre : Chimie : chiralité - liaisons non covalentes**

**Responsables pédagogiques : F. Maurel, O.**

**Taboureau**

**Objectifs de connaissance :**

Présentation des principales interactions non covalentes qui s'établissent au sein des systèmes biologiques ou dans les complexes ligands-macromolécules biologiques. L'accent est mis sur les caractéristiques et les traits distinctifs (nature et intensité) de ces interactions. L'objectif est de montrer comment ces forces se distinguent par leur nature et leur intensité des liaisons chimiques covalentes, ce qui les amène à jouer un rôle essentiel pour assurer les structures tridimensionnelles des molécules vivantes, ou pour guider l'interaction d'une petite molécule dans un récepteur biologique (protéine ou ADN). Nous montrerons comment il est possible de traduire les caractéristiques de chacune de ces forces en potentiels appropriés. Enfin, des stratégies d'implémentation de ces termes dans des calculs de modélisation moléculaire seront introduites. Une partie pratique sur ordinateur permettra d'aborder des cas concrets où chacune de ces forces joue un rôle particulier.

**Compétences ciblées :**

Présentation des principales interactions non covalentes qui s'établissent dans les systèmes biologiques ou dans les complexes ligands-macromolécules biologiques.

**Programme :**

- Introduction à la chimie
- Les bases de la chimie telles que les atomes, les fonctions chimiques et les hétérocycles utiles pour le développement de médicaments. Les conformations préférées et les groupes réactifs seront également présentés.

**EC 403 Option for Drug Design (3 ECTS)**  
**Coordinateur : O. TABOUREAU**

**Titre : Option en conception de médicaments / Chimio-informatique**

**Coordinateur de l'enseignement :** O. Taboureau

Enseignants : professeurs invités, chercheurs...

**Objectifs de connaissance :**

Découverte d'outils et de technologies utiles pour la conception de médicaments, QSAR, apprentissage profond, bioinformatique structurale, approche thermodynamique...

**Compétences ciblées :**

Apprendre les outils/logiciels utilisés en chimio-informatique et en modélisation moléculaire.

**SEMESTRE 2 (30 ECTS) Université Paris Cité**

**EU 5 FONDAMENTAUX AVANCÉS (6 ECTS)**  
**Coordinateur : AC. CAMPROUX**

**EC 501 Big Data Analysis (3 ECTS)**  
**Coordinateurs : AC Camproux, A. Badel**

**Titre : Analyse de données massives**

**Coordinateurs de l'enseignement :** AC. Camproux, A. Badel

**Objectifs de connaissance :** Le but du cours est d'initier les étudiants aux méthodes d'apprentissage non supervisées (classification, analyse en composantes principales) et supervisées (Cart, Random Forest, régression linéaire et PLS, analyse discriminante linéaire et logistique de régression) afin de leur permettre d'analyser et de traiter de grands ensembles de données multidimensionnelles en bio-informatique. L'application des différents concepts se fera à l'aide du logiciel statistique R. L'évaluation des performances des méthodes et la sélection des descripteurs seront abordées.

**Compétences visées :** Apprendre à appliquer et à choisir différentes méthodes d'apprentissage sur un ensemble de données

**Programme**

Exemple d'espace protéique

- Méthodes descriptives ou exploratoires :

Les méthodes factorielles (analyse en composantes principales), qui produisent essentiellement des visualisations graphiques planes ou tridimensionnelles pour décrire un ensemble de données. Les

méthodes de classification (hiérarchique ou partitionnement), qui proposent des regroupements en classes d'objets à la suite de calculs algorithmiques.

- Méthodes explicatives et/ou prédictives : Méthodes permettant d'expliquer ou de prédire, selon des règles de décision, une variable d'intérêt quantitatif ou qualitatif à l'aide d'un ensemble de variables explicatives. Modèle linéaire, PLS, régression logistique, CART. Analyse discriminante. Validation croisée.

**EC 502 Approches biophysiques pour l'étude des interactions (3 ECTS)**  
**Coordinateurs : V. Gruber & W. Majeran**

**Titre : Approches biophysiques de l'étude des interactions**  
**Coordinateurs pédagogiques : V. Gruber & W. Majeran**

**Objectifs de connaissance** : Apprendre les méthodes biophysiques, moléculaires et cellulaires pour l'étude des interactions entre macromolécules. Comprendre les concepts de la biologie des systèmes et des interactomes.

**Compétences visées** : Maîtriser les méthodes biophysiques, moléculaires et cellulaires pour l'étude des interactions entre macromolécules. Maîtriser les concepts de la biologie des systèmes et des interactomes.

**P r o g r a m m e**

- Concept d'interactome
- Principes et techniques biophysiques des interactions protéine-protéine (double hybride, co-immunoprécipitation, TAP-Tag, FRET, BRET, essais de complémentation protéine-fragment, spectrométrie de masse)
- Principes et techniques biophysiques des interactions entre macromolécules
- Études dynamiques et structurelles des interactions RMN
- Concept de biologie des systèmes et applications

**UE 6 ORIENTATION THÉMATIQUE II (18 ECTS)**  
**Coordinateurs : G. MOROY, O. TABOUREAU**

**EC 601 Protein-Protein Docking\* en anglais (3 ECTS)**  
**Coordinateurs : AC. Camproux, O. Taboureau**

**Titre : Protein-Protein Docking\* Cours en anglais**  
**Responsables pédagogiques : AC Camproux, O. Taboureau**

**Objectifs de connaissance** : Prédiction des interactions entre protéines. Prédiction des interactions protéine-protéine. L'amarrage protéine-protéine

**Compétences visées** : Les étudiants apprendront les méthodes informatiques de pointe pour la prédiction des interactions entre protéines par des simulations d'amarrage. Ils seront capables d'aborder des problèmes réels d'amarrage de protéines et d'utiliser les méthodes et les serveurs web disponibles pour modéliser la structure du complexe protéine-protéine à partir de sous-unités non apparentées. Ils apprendront à intégrer les informations provenant de l'amarrage, des données sur les mutations, de la conservation des séquences et de la prédiction des sites de liaison.

**P r o g r a m m e**

Prédiction des interactions entre protéines. Prédiction des interactions protéine-protéine. Arrimage protéine-protéine. Méthodes de calcul pour définir les fonctions de score et d'affinité. Modélisation de la flexibilité de l'association protéine-protéine. Identification des points chauds de liaison dans la conception de médicaments. Approches moléculaires multi-docking.

**EC 602 Introduction à la conception de médicaments in silico (3 ECTS) Coordinateur : G. Moroy**

**Titre : Introduction à la conception de médicaments in silico Coordinateur de l'enseignement : G. Moroy**

**Objectifs de connaissance** : L'objectif de ce cours est de présenter les bases théoriques, les algorithmes et les programmes utilisés pour effectuer des recherches en *drug design*. En particulier, les approches chimio-informatiques qui concernent l'étude des molécules potentiellement thérapeutiques et les approches bio-informatiques basées sur la structure de la protéine ciblée.

**Compétences ciblées** :

- Représentation et manipulation de structures chimiques.
- Descripteurs moléculaires pour le criblage virtuel et relations structure-activité et structure-propriété.
- Introduction à la conception de médicaments basée sur la structure en identifiant la protéine ciblée (docking, criblage virtuel, flexibilité du récepteur).
- Structures des protéines
- Outils en ligne pour faciliter la conception de médicaments.

**Programme**

Introduction à la conception de médicaments : Approches basées sur la structure  
Interaction protéine-ligand, docking, criblage virtuel, flexibilité, pharmacophore

**EC 603 Bioinformatique structurale 2 : Dynamique\* (3 ECTS) Coordinateurs : D. Flatters, P. Fuchs**

**Titre : Bioinformatique structurale 2 : Dynamique\***  
**Coordinateurs de l'enseignement : D. Flatters, P. Fuchs**

**Objectifs de connaissance** : L'objectif de ce cours est de fournir les bases essentielles à la compréhension des principes régissant les techniques de modélisation moléculaire. Ces techniques sont utilisées lors des étapes d'affinement des structures développées par les techniques biophysiques conventionnelles (RX, RMN).

**Compétences ciblées** :

L'objectif du cours est d'initier les étudiants aux différentes méthodes expérimentales de détection et de caractérisation des interactions moléculaires. Un projet de modélisation moléculaire sera réalisé par les étudiants afin qu'ils acquièrent une expérience pratique de la modélisation moléculaire, deux niveaux de difficulté étant proposés pour le projet suite à leur formation préalable en M1

**Programme**

Ce module présente les approches qui permettent le calcul théorique de différentes propriétés physico-chimiques étudiées expérimentalement.

- Champ de force semi-empirique. Mécanique moléculaire
- Description des forces de base
- Potentiel harmonique (printemps). Interaction électrostatique.
- Forces de tassement et interaction de van der Waals
- Détermination des paramètres du champ de force
- Minimisation de l'énergie et méthodes d'exploration de l'espace conformationnel
- Minimisation
- Introduction
- Dynamique moléculaire Calculs de différentes propriétés Mesures de quantités dynamiques
- Estimation de l'erreur

**EC 604 Bioinformatique structurale en toxicologie  
Macromolécules + pharmacologie des systèmes (3  
ECTS) Coordinateur : D. Flatters & O. Taboureau**

**Titre :** Bioinformatique structurale en toxicologie  
**Coordinateurs pédagogiques :** D. Flatters, G. Moroy, O. Taboureau

**Macromolécules Pharmacologie des systèmes**

**Objectifs de connaissance :** Introduction à la structure 3D des macromolécules  
Structures 3D de macromolécules biologiques et visualisation avec Pymol. Construction de modèles  
3D de protéines par modélisation homologique.  
Pharmacologie des systèmes.

**Compétences ciblées :**  
Structures 3D de macromolécules biologiques et visualisation avec Pymol. Construction de modèles  
3D de protéines par modélisation homologique.  
Comprendre la pharmacologie d'un médicament, l'action d'un médicament à différents niveaux d'un  
système biologique.

**P r o g r a m m e**  
Visualisation des macromolécules. Alignement de séquences Comparaison de structures.  
Définition de la pharmacologie systémique Description des différentes sources de données utiles à  
l'analyse de l'action d'une molécule sur un système biologique. Présentation et application d'un outil de  
visualisation de ce type de données.

**EC 303 Systèmes biologiques et ligands, base de données  
(3 ECTS) Coordinateurs : O. TABOUREAU**

**Titre :** Systèmes biologiques & ligands, base de  
données **Coordinateurs pédagogiques :** O.  
Taboureau

**Objectifs de connaissance :**  
2 techniques seront apprises durant ce cours. L'une sur le développement de bases de données en  
utilisant MySQL. La seconde portera sur la manipulation d'outils de développement et d'analyse de  
réseaux biologiques en utilisant Cytoscape.

**Compétences ciblées :**  
Compréhension de l'association de molécules, de protéines, de phénotypes sous forme de réseaux.  
Utilisation des données issues des systèmes biologiques. Initiation au développement de bases de  
données. Aperçu des bases de données dans ce domaine.

**Programme :**

- Association composés chimiques-protéines-phénotypes (maladies, toxicité, etc.)
- Représentation sous forme de réseaux (hiérarchiques, circulaires, etc.)
- Mesures associées à la topologie du réseau
- Outil de développement et d'analyse des réseaux (Cytoscape)
- Développement et utilisation de bases de données utilisant MySQL

## 1 ECUE à choisir parmi les 3 suivantes

### EC 606 Pratiques *in silico* dans les complexes protéiques 3D (3 ECTS) Coordinateurs : K. Moncoq, O. Taboureau

**Titre** : Pratiques *in silico* dans les complexes protéiques 3D (Projet protéine-protéine + approches expérimentales)

**Coordinateurs pédagogiques** : K. Moncoq, O. Taboureau

**Objectifs de connaissance** :

Utilisation d'outils d'amarrage protéine-protéine dans le cadre d'un projet.

Déterminer la structure 3D d'une protéine à l'aide de la cristallographie et de son analyse.

**Compétences ciblées** :

Effectuer une analyse 3D à partir d'un cristal de protéine

**Programme**

Cristallographie : de la diffraction à la modélisation. Visite du synchrotron. La diffraction. Affinement d'une structure. Validation d'une structure.

- Cristallisation : qu'est-ce qu'une protéine cristallisable ?
- Cristallographie : de la diffraction à la modélisation.
- Affinement et validation d'une structure 3D pour la PDB
  
- Traitement des données de diffraction
- Phasage et remplacement moléculaire
- Affinement de la structure (placement d'un ligand, de molécules d'eau, etc.) et validation
- Analyse de la structure en 3D
- Dynamique moléculaire (analyse d'une trajectoire de simulation par VMD)

### EC 607 Méthodes de simulation avancées (3 ECTS) Coordinateur : S. Murail

**Titre** : Méthodes de simulation avancées

**Coordinateur de l'enseignement** : S.

Murail

**Objectifs de connaissance** :

L'exploration des cibles portera sur l'exploration conformationnelle de la cible d'un niveau local (conformation des boucles, chaînes latérales) au niveau des mouvements collectifs intra ou inter domaines (modes normaux, simulation gros-grain) + notion de thermodynamique.

**Compétences ciblées** :

Comprendre l'impact de la flexibilité structurale grâce aux modes normaux et aux simulations à gros grains

**Programme**

L'exploration des cibles portera sur l'exploration conformationnelle de la cible d'un niveau local (conformation des boucles, chaînes latérales) au niveau des mouvements collectifs intra ou inter domaines (modes normaux, simulation gros-grain) + notion de thermodynamique.



**EC 608 Professeur invité ou option drug design (3 ECTS)**  
**Coordinateur : O. Taboureau**

**Titre : Professeur invité ou option drug design**  
**Coordinateur de l'enseignement : O. Taboureau, A- C**  
**Camproux**

**Objectifs de connaissance :**

Découverte d'outils et de technologies utiles pour la conception de médicaments

**Compétences ciblées :**

Découverte de la plate-forme en bioinformatique structurale, en chimio-informatique et en conception de médicaments

**P r o g r a m m e**

Visite sur place, séminaire et

travaux pratiques Ou ECUE WEB

ou stage

**UE 7 STAGE PROFESSIONNALISATION I (6 ECTS)**  
**Coordinateurs : G. MOROY, O. TABOUREAU, C. ETCHEBEST, V.**  
**GRUBER**

**EC 701 Stage 4 (6 ECTS) Coordinateurs :**  
**G. Moroy / V. Gruber / O. Taboureau**

**Titre : Stage 4**  
**Coordinateurs pédagogiques : G. Moroy, V. Gruber, O. Taboureau**

**Objectifs de connaissance :**

Formation à la recherche dans un contexte de laboratoires (R&D), ou de plateformes en drug design, bioinformatique et chimio-informatique.

**Compétences visées :** Appliquer correctement les concepts de la biologie, de la chimie, du drug design et/ou de l'informatique afin de mener un projet de recherche et développement dans un laboratoire ou une plate-forme. S'adapter à un environnement de travail Maîtriser les outils de communication.

**P r o g r a m m e**

- Mener un projet de recherche et de développement dans l'environnement professionnel
- S'adapter à l'environnement professionnel
- Acquérir des outils de recherche bibliographique, de communication et de rédaction

**OU SEMESTRE 2 ERASMUS Université de Milan (30 ECTS)**  
**(Semestre 2 du cours ISDD Molécules bioactives)**