

MASTER BIOINFORMATIQUE (2019-2020)
Université Paris Diderot
M2 Parcours APPRENTISSAGE ISDD : Modélisation des macromolécules

SEMESTRE 3 (30 ECTS)

REMISE A NIVEAU
Responsables : AC Camproux-G. Moroy

BQAAY000 Bases de Unix et R (Mise à niveau)
Responsable : G. MOROY

Intitulé : Base de Unix et R (Mise à niveau)
Responsable pédagogique : Gautier Moroy

Objectifs en termes de connaissances : Acquérir les bases de l'utilisation du système d'exploitation Unix et du logiciel R.

Compétences visées : Etre familiarisé avec Unix et R pour être autonome au cours des sessions pratiques des enseignements d'informatique, de bioinformatique et de statistiques.

Programme
Concepts fondamentaux du système d'exploitation Unix et du logiciel R.

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	

Intitulé : Mise à niveau Toxicologie-biochimie-chimie
Responsable pédagogique : A-C Camproux

Objectifs en termes de connaissances : Le « drug designer » est en général à l'interface entre le biologiste, le clinicien et le chimiste. Il doit donc avoir une initiation à certaines méthodes biophysiques fréquemment utilisées dans des projets de « drug design ». Il existe ainsi un large éventail de méthodes biophysiques qui permettent d'étudier les interactions protéine/protéine ou protéine/ligand en définissant la zone de contact ou caractérisant les constantes thermodynamiques et/ou cinétiques qui régissent l'interaction.

Nécessaire de chimie pour le drug design * Chemical chemistry toolbox

Basics Chemistry

Atoms useful for drugs, hybridization, chemical functions, heteroaromatics, families of drugs IUPAC names & nomenclatures Isomers, Tautomers Stereochemistry, pseudo stereochemistry

pKa of common groups, Most reactive groups

Preferred conformations of important groups (3, 4, 5 and 6 saturated rings, amide, sulphonamide, biphenyls)

Introduction to matched molecular pair analysis

Elements of IP (Intellectual Property), SciFinder (logiciel d'interrogation de la base CAS)

Compétences visées : Le but du cours est d'initier les étudiants à différentes méthodes expérimentales permettant de détecter et caractériser des interactions moléculaires. Boîte à outils en chimie : Chimie Pharmacophore

Programme :

Les méthodes permettant de comprendre les principes de bases de thermodynamique, diffusion, et les méthodes optiques seront abordées. Notamment, certaines techniques physico-chimiques telles que diffusion de la lumière, les méthodes optiques, le dichroïsme linéaire et circulaire, la fluorescence et les spectroscopies UV-visible. De plus, le cours va introduire trois autres méthodes expérimentales pour l'identification et la caractérisation des interactions des biomolécules in vitro : la Résonance Magnétique Nucléaire, la Calorimétrie de Titration Isotherme (ITC), le FRET, acronyme de "Fluorescence Resonance Energy Transfert", et BRET, acronyme de "Bioluminescence Resonance Energy Transfer".

Des articles utilisant d'autres approches fondamentales pour le « drug design » telles que la Résonance Plasmonique de Surface (RPS) et les méthodes immunologiques (tests ELISA, GST pulldown), seront analysés et présentés par les étudiants. Le cours comportera des enseignements d'enzymologie centrés en particulier sur l'étude des interactions entre enzymes et ligands (substrats, inhibiteurs, effecteurs allostériques...).

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	

BQ2CT200 STAGE 1 (1 à 2 semaines) (1 ECTS)
Responsable : A-C. CAMPROUX & S. MURAIL
MODULES SPECIFIQUES PARCOURS APPRENTISSAGE

DATA ANALYSIS IN DRUG DESIGN (8 ECTS)
Responsable : A-C. CAMPROUX

1 EC selon le niveau : BQ2CY030 Projet Python 1 ou BQAAY080 Programmation Python 2 (3 ECTS)

BQ2CY020 Projet Python 1 (3 ECTS)
Responsables : P. FUCHS & P. POULAIN

Intitulé : Projet Python
Responsables pédagogiques : P. Fuchs & P. Poulain

Objectifs en termes de connaissances : Former des bioinformaticiens à la programmation Python par la pratique.

Compétences visées : Connaître les principaux concepts liés à la programmation Python.
 Être capable d'écrire des programmes (i) d'analyse de grandes quantités de données, (ii) produisant des données (e.g. simulation d'un système).
 Être capable de développer / déboguer un programme en Python.

Programme :

- Principaux type de données (entiers, floats, listes, chaînes de caractères, dictionnaires, tuples)
- Boucles, comparaisons, tests
- Modules
- Gestion des entrées /sorties avec les fichiers
- Fonctions
- Expressions régulières

Notion de classes en Python

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit	100	ET	écrit ou oral	100	

BQAAY080 Programmation Python 2 (3 ECTS)
Responsable : P. FUCHS

Intitulé : Programmation python 2
Responsables pédagogiques : P. Fuchs & P. Poulain

Objectifs en termes de connaissances : Former des 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 bioinformatique, notamment pour l'analyse de données. Il est très demandé dans les laboratoires, mais aussi dans les entreprises privées.

Compétences visées : Connaître les principaux concepts liés à la programmation Python.
Être capable d'écrire des programmes (i) d'analyse de grandes quantités de données, (ii) produisant des données (e.g. simulation d'un système).
Être capable de développer / déboguer un programme en Python.

Programme :

Principaux type de données (entiers, floats, listes, chaînes de caractères, dictionnaires, tuples)

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

Notion de classes en Python

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY050 Analyses de données et Drug Design (3 ECTS)
Responsables : A-C CAMPROUX & L. REGAD

Intitulé : Analyses de données et Drug Design

Responsables pédagogiques : A-C Camproux & L. Regad

Objectifs en termes de connaissances : Apprendre aux étudiants à combiner et optimiser différentes méthodes d'apprentissage non supervisées et supervisées pour analyser des données de drug design, dans l'espace es cibles et des molécules avec les problèmes particuliers associés, sélection de descripteurs et critère de sélection, optimisation des modèles, comparaison et robustesse des modèle en cross-validation. L'application des différentes notions sera faite à l'aide du logiciel statistique R.

Compétences visées : Optimiser et combiner différentes méthodes d'apprentissage sur un jeu de données de drug design

Programme : Exemple sur espace des protéines

- Méthodes descriptives ou exploratoires :

Méthodes factorielles (Analyse en Composantes Principales) (et Méthodes de classification hiérarchique ou de partitionnement) qui proposent des groupements en classes d'objets à la suite de calculs algorithmiques

- Méthodes explicatives et/ou prédictives :

Protocole de validation croisée, critère d'optimisation.

Modèle linéaire et PLS, (Régression logistique) CART & RF ou Analyse discriminante linéaire.

SVM et Réseaux de neurone, ouverture vers le deep learning

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY060 Application en Drug Design & QSAR (1 ECTS)
Responsables : O.TABOUREAU & L. REGAD

Intitulé : Application en Drug Design & QSAR
Responsables pédagogiques : O. Taboureau & L. Regad

Objectifs en termes de connaissances : Application des méthodes d'apprentissage supervisées et QSAR pour prédire l'activité des petites molécules contre une cible d'intérêt.
Développement de filtres de chimiothèques à partir des méthodes supervisées. Application de ces filtres pour la recherche de nouveaux inhibiteurs d'une cible donnée.

Compétences visées : Mise en place d'un protocole pour identifier le meilleur modèle QSAR permettant de prédire l'activité d'une molécule.
Développement de filtrages de chimiothèques dans le cadre d'un projet de *drug design*.
Développement de script R pour le développement et optimisation de modèles supervisés

Programme : Le but de cet enseignement est de mettre en application les différentes techniques non supervisées et supervisées vues en cours afin de développer un modèle QSAR pour prédire l'activité de petites molécules pour une cible donnée. Ces modèles seront ensuite utilisés pour filtrer des chimiothèques. Ce projet sera réalisé avec le logiciel statistique R.
La cible d'intérêt et les des molécules candidates pour la fixation de cette cible, seront traitées dans les autres UE du Master afin de proposer un projet de drug design in silico complet, voire projet en Drug design

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY070 Séminaires et R&D (1 ECTS)
Responsable : A-C CAMPROUX

Intitulé : Séminaires et R&D
Responsable pédagogique : A-C Camproux

Objectifs en termes de connaissances : Ces rencontres permettront aux étudiants d'échanger et de discuter avec des personnes confrontées au quotidien avec les problèmes de recherche d'actualité en drug design. Ces séminaires incluront des présentations de laboratoires reconnus en drug design et chemoinformatique nationaux et internationaux, de Plates-formes (RPBS, Orphanet), d'équipe de recherche du domaine, de thésards anciens étudiants du Master. visite sur site + présentation enjeu recherche (peptides) en privé et académique

Compétences visées : Ces rencontres permettront aux étudiants d'échanger avec des personnes confrontées au quotidien avec les problèmes de recherche et développement en drug design in silico.

Modalités d'évaluation : Présence et fiche résumée

Programme : Cette EC a pour objectif de sensibiliser les étudiants au fonctionnement de la recherche en IsDD, que cela soit au niveau académique ou en entreprises (start-up et grandes entreprises pharmaceutiques).

Partie 1 : Séminaires portant sur la préparation du stage Comment rechercher un stage, trouver le bon stage Comment faire un CV et une lettre de motivation

- Comment faire une présentation orale, un rapport de stage, structurer une publication
- Remplir une convention de Stage (...)

Partie 2 : Séminaires et le fonctionnement de l'après Master et le fonctionnement de la recherche en France et à l'étranger et la recherche en France et à l'étranger.

Présentation des écoles doctorales : Exemples de présentation pour l'obtention d'une bourse ministérielle par des étudiants des Masters ISDD et BI : Les bourses DIMs, ANR et assimilés : Les thèses à l'étranger et Financements européens et internationaux . Se faire un réseau (LinkedIn, l'Association du Master ISDD Groupe du master, s'inscrire, les anciens, société de chémoinformatique et bioinformatique)

Recherche en entreprise Les étudiants rencontreront des intervenants professionnels (Sanofi, Discngine, Servier start-up) qui leur présenteront leur entreprise et leurs fonctionnements, une visite sur le site de Sanofi est organisée. Des anciens étudiants ISDD viendront leur présenter leurs profession et parcours,

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
Sans note - resultat sur l'assiduité	gestion des absences : rapport écrit sur un des seminaires	Sans note - resultat sur l'assiduité	gestion des absences : rapport écrit sur un des seminaires	Sans note - resultat sur l'assiduité	gestion des absences : rapport écrit sur un des seminaires	

ANALYSE ET DYNAMIQUE MOLECULAIRE & DRUG DESIGN (7 ECTS)
Responsable : D. FLATTERS

BQ2CY090 Exploration structurale des protéines (3 ECTS)
Responsable : L. REGAD

Intitulé : Exploration structurale des protéines
Responsable pédagogique : L. Regad

Objectifs en termes de connaissances :

Optimiser une cible thérapeutique, Connaissance de la structure des protéines et de leur variabilité. Donner aux étudiants les bases d'une exploration avancée de la structure des protéines en vue d'une préparation à la recherche de composés actifs. Recherche de poche druggable et de l'effet des mutations

Compétences visées : Optimiser une cible thérapeutique, Connaissance de la structure des protéines et de leur variabilité. Donner aux étudiants les bases d'une exploration avancée de la structure des protéines en vue d'une préparation à la recherche de composés actifs.

Programme :

PRÉPARATION AU 3D- STRUCTURE-BASED

Analyse des Macromolécules 3D

- 1) Construction de modèles 3D de protéines par modélisation par homologie et alignement de séquence avancée (modeller, pymol), optimisation des boucles
- 2) Les Modes Normaux
- 3) Les peptides
- 4) Etude des mutations et de la variabilité structurale, SA-Conf, foldX Identification/estimation des poches et leur druggabilité (Pockdrug, acc)
Ou 4') Formation à Jupiter
- 5) Métadynamiques et dynamiques accélérées

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

CHOIX DE EC Q2CY100 ou BQ2CY110, selon le niveau

Q2CY100 Analyse dynamique des cibles I (2 ECTS)
Responsable : D. FLATTERS

Intitulé : Analyse dynamique des cibles I
Responsable pédagogique : D. Flatters , C. Etchesbest

Objectifs en termes de connaissances : Comprendre les notions théoriques gouvernant les techniques de modélisation moléculaire (champ de force, minimisation, dynamique moléculaire) Savoir comment appliquer ces notions aux biomolécules (peptides, protéines, etc)

Compétences visées : Etre capable de modéliser un système moléculaire de base (une biomolécule dans l'eau)

Etre capable de lire une publication de manière critique utilisant la modélisation moléculaire

Etre capable d'effectuer un stage dans un laboratoire utilisant la dynamique moléculaire

Programme :

- Champ de forces semi-empirique et mécanique moléculaire : description des forces de base (Potentiels harmoniques et de torsion, interactions électrostatiques, interactions de van der Waals)
- Optimisation de géométrie moléculaire (minimisation d'énergie)
- Simulation et Analyse trajectoire de dynamique moléculaire (DM) (algorithme & calculs de propriétés conformationnelles)

Chaque thème sera abordé de manière théorique en CM et de manière pratique en TP (modélisation d'une biomolécule dans l'eau avec le logiciel GROMACS)

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY110 Analyse dynamique des cibles II (2 ECTS)
Responsable : G. MOROY

Intitulé : Analyse dynamique des cibles II

Responsable pédagogique : G. Moroy

Objectifs en termes de connaissances : Savoir appliquer les connaissances acquises pour l'étude de la dynamique de protéines.

Compétences visées : Savoir sélectionner les outils bioinformatiques adéquats à l'étude de la flexibilité d'une protéine.

Programme :

Etude de la flexibilité des protéines.

Analyse des résultats de simulation de dynamiques moléculaires.

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY080 Modélisation structurale et dynamique (2 ECTS)
Responsables : G. MOROY & D. FLATTERS

Intitulé : Modélisation structurale et dynamique

Responsable pédagogique : G. Moroy & D. Flatters

Objectifs en termes de connaissances : Etre capable de proposer et d'appliquer un protocole combinant étude structurale et dynamique des protéines.

Compétences visées : Comprendre et maîtriser les outils bioinformatiques aidant à l'étude structurale et dynamique des protéines.

Programme : Génération et analyses des structures issues des trajectoires de simulation de dynamique moléculaire d'une protéine d'intérêt.

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

CRIBLAGE HAUT DEBIT : STRUCTURE & LIGAND-BASED (5 ECTS)
Responsable : G. MOROY

BQ2CY130 Ligand-based (1 ECTS)
Responsable : O. TABOUREAU

Intitulé : Ligand-based**Responsable pédagogique : O. Taboureau****Intervenants : O. Spérandio, D. Lagorce**

Objectifs en termes de connaissances : Apprentissage pratique de la préparation in silico de chimiothèques en vue d'un criblage virtuel, basé sur la structure de ligands de référence incluant une partie i) génération de modèles moléculaires tridimensionnels pour petites molécules (1D/2D à 3D), ii) calculs des descripteurs de ligands, iii) les aspects pharmacocinétiques (ADME/tox) reposant sur des critères physico-chimiques spécifiques. Comment passer du 1D-2D-3D, la tutomérisation.

Le criblage en ligand-based

Compétences visées : Génération de librairie de composés et criblage en ligand-based

Programme : Cette UE a pour but de fournir un apprentissage pratique de la préparation in silico de chimiothèques en vue d'un criblage virtuel, basé sur la structure de ligands de référence. Le programme comprend une partie génération de modèles moléculaires tridimensionnels pour petites molécules (1D/2D à 3D) et de calculs des descripteurs de ligands.

+ Fichiers molécule (petit rappel)

+Maîtrise des différents formats de fichier molécule, PDB, smile, SMARTS, mol2, MDL-sdf. Avantages, limitations et cadres d'utilisation des différents types de fichiers.

+ Manipulation des molécules 3D avec Pymol...PDB, mol2, sdf, différents comportements.

+ Maîtrise des règles principales ADME/tox : (FAFdrug)

- Lipinski, Weber, Egan,...
- Notion de Frequent, Hitter, Aggrégants
- Fragments toxiques

Passage 2D à 3D : rdkit ou frog et openbabel

Expérience de calcul de descripteurs sur les logiciels : Knime, frog, babel

Notion de Pharmacophore

Criblage ligand-based.

Des informations de M1 seront à distribués de chemoninformatique pourront être distribués aux étudiants nouveaux entrants. (**edragon**, Rdkit)**Modalités d'évaluation :**

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY120 Structure-based (3 ECTS)
Responsable : G. MOROY

Intitulé : Structure-based

Responsable pédagogique : G. Moroy

Intervenants : O. Spérandio, D. Lagorce, Gautier Moroy, O. Sperandio

Objectifs en termes de connaissances : L'objectif de cet enseignement est de présenter les concepts théoriques avancés, les algorithmes et les programmes associés pour la conception de molécules thérapeutiques par des approches se basant sur la structure de la protéine cible. Prise en compte de la flexibilité de la protéine et du ligand.

Comment faire du docking avec des liaisons covalentes ?

Etude de la stabilité par dynamique moléculaire de l'interaction protéine-ligand.

Compétences visées : Comprendre et maîtriser les outils bioinformatiques aidant à la conception de molécules thérapeutiques en se basant sur la structure de la protéine cible.

Programme : Présentation et utilisation de plusieurs programmes de docking et de criblage virtuel. Autodock & Rdock, seed (fragment-based)

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY140 Hits to lead (1 ECTS)
Responsable : O. TABOUREAU

Intitulé : Hits to leads

Responsable pédagogique : O. Taboureau

Intervenants : O. Taboureau & H. Xhaard

Objectifs en termes de connaissances : Le but du criblage est d'identifier des molécules présentant une activité biologique d'intérêt thérapeutique vis-à-vis d'une cible thérapeutique. Le haut débit, in silico ou in vitro, permet de tester plusieurs milliers de molécules par semaine. Le criblage pharmacologique («screening») est la première étape dans le processus de découverte de nouveaux médicaments. Les molécules identifiées lors de la phase de criblage initial (les touches ou Hits) sont loin d'être encore des médicaments. Leur liaison à leur cible demeure trop faible, elles devront donc être optimisées (leads). Grâce à des transformations subtiles et progressives de la structure de la touche, le chimiste médicinal et le drug designer vont permettre à celle-ci de se fixer de manière plus efficace à sa cible. Toutefois cette seule augmentation d'affinité ne suffira pas à faire de la touche un candidat médicament. Avant d'être évalué dans des modèles d'efficacité animale puis chez l'homme le produit devra satisfaire plusieurs autres contraintes, a) spécificité, b) biodisponibilité adaptée, c) propriétés pharmacocinétiques appropriées, d) absence de toxicité.

Compétences visées : Les étudiants découvriront, via des exemples précis, les principales stratégies permettant d'optimiser une touche initiale vers le candidat médicament et la molécule thérapeutique mise sur le marché

Programme : Plusieurs approches expérimentales et des méthodes de conception rationnelle in silico peuvent être utilisées pour transformer un « hit » en « lead » (diffraction de RX, RMN, chimie médicinale, SAR, QSAR, « rescoring », simulation moléculaire, méthodes « ligand-based », « fragment-based »...).

Plusieurs exemples d'optimisation seront abordés avec des applications dans le domaine des maladies infectieuses, du cancer, des maladies cardio-vasculaires et du système reproducteur.

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

BQ2CY210 STAGE 2 (2 mois) (7 ECTS)
Responsable : A-C. CAMPROUX & S. MURAIL
Parcours APPRENTISSAGE

Intitulé : Stage 2 et 2 bis sur deux périodes (novembre et décembre)

Responsable pédagogique : A-C. Camproux & S. Murail

Objectifs en termes de connaissances :

Formation par la recherche dans un contexte de laboratoires (R&D) en drug design in silico.

Compétences visées :

Acquérir les compétences pour conduire un projet en Recherche et Développement combinant la biologie, la chimie et l'informatique dans un laboratoire ou une plate-forme dédiée au drug design in silico avec des interfaces médicales. S'adapter à un environnement de travail. Maîtriser des outils de communication.

Programme

- Conduite d'un projet de recherche et développement dans le cadre du milieu professionnel la biologie, la chimie et l'informatique Adaptation au milieu professionnel

Acquisition des outils de recherche bibliographique, de communication et des méthodes rédactionnelles

Modalités d'évaluation :

- Session 1 : ET (E/0, 100%)

PROJET DE CRIBLAGE HAUT DÉBIT (2 ECTS)
PARCOURS APPRENTISSAGE
Responsable : G. MOROY

BQ2CY190 Application de criblage haut-débit (2 ETCS)
Responsable : G. MOROY

Intitulé : Application de criblage haut-débit

Responsable pédagogique : G. Moroy

Objectifs en termes de connaissances :

Savoir appliquer les connaissances acquises pour proposer des molécules inhibitrices d'une protéine cible.

Compétences visées :

Savoir sélectionner les outils bioinformatiques adéquats de criblage virtuel visant à proposer des molécules inhibitrices pour une protéine cible donnée.

Programme :

Analyse et préparation de la structure d'une protéine cible.

Préparation d'une chimiothèque adéquate.

Sélection et adaptation d'un protocole de criblage virtuel.

Modalités d'évaluation :

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	
CC	écrit ou oral	100	ET	écrit ou oral	100	

SEMESTRE 4 (30 ECTS) (autour du 25 janvier)
PARCOURS APPRENTISSAGE

BQ2DT030 STAGE 3 (2 ECTS)

PARCOURS APPRENTISSAGE

Responsables : A-C. CAMPROUX & S. MURAIL

Intitulé : Stage 3

Responsable pédagogique : A-C. Camproux & S. Murail

Objectifs en termes de connaissances :

Formation par la recherche dans un contexte de laboratoires (R&D) en drug design in silico.

Compétences visées :

Acquérir les compétences pour conduire un projet en Recherche et Développement combinant la biologie, la chimie et l'informatique dans un laboratoire ou une plate-forme dédié au drug design in silico avec des interfaces médicinales. S'adapter à un environnement de travail. Maîtriser des outils de communication.

Programme

- Conduite d'un projet de recherche et développement dans le cadre du milieu professionnel la biologie, la chimie et l'informatique Adaptation au milieu professionnel

Acquisition des outils de recherche bibliographique, de communication et des méthodes rédactionnelles

Modalités d'évaluation :

- Session 1 : ET (E/0, 100%)

1ère session			2ème session			règles particulières - ex: report d'un CC
(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	(5) type de contrôle	(6) type d'épreuve	règle de calcul	

PROJETS (3 ECTS)

PARCOURS APPRENTISSAGE

Responsable : A-C CAMPROUX

selon projet pro

BQ2DC040 Liste UE à choix Parcours M1 BIB-IPFB-ISDD (3 ECTS)

Ou

BQ4DY010 Conception et Gestion d'un Projet de Recherche (3 ECTS)

BQ2DE060 Bilan et perspective stage recherche et projet Drug design (6 ECTS)

Projets en drug design et Bilan d'un projet de recherche

PARCOURS APPRENTISSAGE

Responsable : A-C. CAMPROUX

Intitulé : Bilan et perspective stage recherche et projet Drug design (6 ECTS)

Responsable pédagogique : A-C Camproux

Objectifs en termes de connaissances :

En bilan de mi-parcours stage de recherche, impliquant un travail de bilan, une réflexion sur les collaborations possibles et les perspectives du projet de recherche

Compétences visées :

- Capacité à élaborer un projet de recherche en ISDD
- Aptitude à conduire un projet de recherche en bio-informatique et drug design
- Gestion d'un projet dans le cadre de la recherche scientifique en drug design
- Etablir une stratégie de veille scientifique

Programme :

En bilan de mi-parcours stage de recherche, impliquant un travail de bilan, une réflexion sur les collaborations possibles et les perspectives du projet de recherche.

Modalités d'évaluation :

- Session 1 : 100% ET, O
- Session 2 : 100% ET, O/E

BQ2DT070 STAGE 4 (5 mois) (19 ECTS)

PARCOURS APPRENTISSAGE

Responsable : A-C CAMPROUX

Intitulé : Stage 4

Responsable pédagogique : A-C Camproux

Objectifs en termes de connaissances :

Formation par la recherche dans un contexte de laboratoires (R&D) en drug design in silico.

Compétences visées :

Acquérir les compétences pour conduire un projet en Recherche et Développement combinant la biologie, la chimie et l'informatique dans un laboratoire ou une plate-forme dédié au drug design in silico avec des interfaces médiales. S'adapter à un environnement de travail. Maîtriser des outils de communication.

Programme :

- Conduite d'un projet de Recherche et Développement dans le cadre du milieu professionnel la biologie, la chimie et l'informatique Adaptation au milieu professionnel
- Acquisition des outils de recherche bibliographique, de communication et des méthodes rédactionnelles
-

Modalités d'évaluation :

- Session 1 : ET (E/0, 100%)
- Session 2 : ET (E/0, 100%)