

**MASTER BIOINFORMATIQUE (2019-2020)**  
**Université Paris Diderot**  
**M2 Parcours recherche-ISDD: Modélisation des macromolécules**  
**M2 Parcours -ISDD: Molecules Bioactives**

Capacité accueil : 25

**SEMESTRE 3 (30 ECTS)**

**BLOC UE 0 REMISE A NIVEAU**  
**Responsables : AC Camproux-G. Moroy**

**EC 001- BQAAY000- Bases de Unix et R (Mise à niveau)**  
**Responsable: L. Regad & Gautier Moroy**

**Intitulé** : Base de Unix et R (Mise à niveau)

**Responsable pédagogique** : **Gautier Moroy & L. Regad**

**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	

Comptabilité : acc

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Bases de Unix et R (Mise à niveau)	5	0				20	0	2	25	47.5		

**Intitulé : Mise à niveau Toxicologie-Méthodologie**

**Responsable pédagogique : A-C Camproux**

### **Basics Chemistry**

**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

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 : Toxicologie**

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 centres en particulier sur l'étude des interactions entre enzymes et ligands (substrats, inhibiteurs, effecteurs allostériques...).

### **Rappels de Biostatistique**

R et biostatistique de base

**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	

**Comptabilité : acc**

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Coût enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Biostat	10	1	6			4			20	30	30	
Mise à niveau Toxicologie-	20	1							20	30,0	14,5	

*N Triballeau + J. Dairou, V Arluison*

**14,5h Dairou (4), V. Arluison (7), F. Rodrigues (3,5)**

**14,5hC + 5,5 h pour J NT +**

**10h de cours + 10h de TP pour méthodo**

Mise à niveau Biochimie Toxicologie-Méthodologique  
et ADDI en M2ISDD

Déclaration AB: 8h (2h deCours + 5hTP) rappels

Déclaration Audrey: 4h de TP du module rappel

Déclaration acc: 13h (8h de cours / 1hTP) rappel

**Avec ADD1**

Déclaration AB: 18h avec 10h TP ADD1 et (2h deCours + 5hTP) rappels

Déclaration Audrey: 4h de TP du module rappel

Déclaration acc: 10h Cours ADD1 et (8h de cours / 1hTP) rappel

**UE1 - DATA ANALYSIS IN DRUG DESIGN (8 ECTS)**  
**Responsable : A-C. CAMPROUX**

**3 modules selon niveau**

**- BQAAY070- Programmation Python I (3 ECTS)**  
**Responsable: P. Fuchs & P. Poulain**

**Intitulé : Programmation Python I**

**Responsables pédagogiques : P. Fuchs & P. Poulain**

**Objectifs en termes de connaissances :** Former des bioinformaticiens à la programmation Python

**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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Projet python1	14		16	1	1				16	16,0		

**- 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Programmation python 2	15	0				15	0	1	30	0,0		

**12h c+18TP : python**

**EC 103 - BQ2CY030-Projet Python (3 ECTS)**  
**Responsable: S. Murail**

**Intitulé : Projet Python**

**Responsables pédagogiques : S. Murail**

**Objectifs en termes de connaissances :** a. Former à la programmation Python ou b. Effectuer des projets en python (niveau avancé dans le cadre de projet de drug design ou bioinformatique structurale).

### **Compétences visées :**

- a. 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.

- b. Être capable de développer un projet en Python dans le cadre de projet de drug design ou bioinformatique structural).

### **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	ecrit	100	ET	écrit ou oral	100	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Projet python1			16	1	1				16	16,0		

**EC 104- 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 des 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 non supervisées : 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 supervisées : explicatives et/ou prédictives :  
Protocole de validation croisée, critère d'optimisation.  
Modèle linéaire et PLS, Analyse discriminante linéaire & Régression logistique.  
SVM et Réseaux de neurone, ouverture vers le deep learning

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	ecrit	100	ET	écrit ou oral	100	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Analyse de données et Drug Design												

**EC 105 - 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Application en Drug Design & QSAR	2	1	5	1	1	8	1	2	15	24,0	29,0	

**17,5hC+16hTD+ 22hTP (15+2 + 5+ 15\*2+ 8\*2)**

**EC 106 - 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 chimoinformatique 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, inscription Didel,

**Programme :** **Ce module 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 (A. Rodrigues, SAOIP) ? Comment faire un CV et une lettre de motivation (D. El Abbassi, E. Querel, SAOIP)

- Comment faire une présentation orale, un rapport de stage, structurer une publication (AC Camproux)
- 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 : AC Camproux, Exemples de présentation pour l'obtention d'une bourse ministérielle par des étudiants des Masters ISDD et BI : Les bourses DIMs, ANR et assimilés : L Regad. Les thèses à l'étranger et Financements européens et internationaux : O Taboureau, Se faire un réseau (LinkedIn, l'Association du Master ISDD Groupe du master, s'inscrire, les anciens, société de chimoinformatique et bioinformatique)

**Recherche en entreprise** Des anciens étudiants ISDD viendront leur présenter leurs profession et parcours, 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 et/ ou Servier est organisée.**

### 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Coût enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Séminaires Plateformes R&D			10	1	1	4	1	1	14	14,0	14,0	

### 6hC

(2hc+ 5+ 5)

## **UE2 -ANALYSE ET DYNAMIQUE MOLECULAIRE & DRUG (7 ECTS)**

**Responsable : D. FLATTERS**

### **EC 201 - BQ2CY090- Exploration structurale des protéines (3 ECTS)**

**Responsable: L. REGAD**

**Intitulé : Exploration structurale des protéines (APRES dynamique)**

**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) Structures 3D des macromolécules biologiques : visualisation sous Pymol, carte de densité électronique
- 3) Etude des mutations et de la variabilité structurale, (SA-Conf, foldX)
- 4) Identification/estimation des poches et leur druggabilité (Pockdrug, alphaFold)
- 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Exploration structurale des protéines	15	1				15	2	1	30	52,5	52,5	

### 15h c+15TP : (Tuffery, guerois?), mouawad ? DF

c3		TP4	FD	C2		TP4	samuel
----	--	-----	----	----	--	-----	--------

### PT 6h, LM : 6h, métadynamique (1j)

- 1) **Modélisation par homologie et modélisation des boucles (Flatters D. ) 2j**
  - 2) **Mouawad : mode normaux, O ?K 22 novembre (1an)**
  - 3) **Guerois : cytoscape + interaction prot-prot ——— (jupiter) (1,5j)**
  - 4) **Tuffery : peptide ? Poche (1)**
  - 5) **Sjoerde alphaFOLD**
- 5) Métadynamiques et dynamiques accélérées (Fabio Pierruccini, [massimiliano.bonomi](http://massimiliano.bonomi) (long trme))

## CHOIX DE EC 202 ou EC 203 selon le niveau

**EC 202 - BQ2CY100- 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Analyse dynamique des cibles I	9	1				9	1	1	18	22,5	22,5	

**12h c+20TP : tt DM**

**EC 203 - 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Analyse dynamique des cibles II	6	1				12	1	1	18	21,0	21,0	

**(12hC + 21TP) \* 0.5 + 21 : (9+6+ 6, 9+ 12+ 14\*2)**

**EC 204 - 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Coût enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Modélisation structurale et dynamique des cibles	6	1				14	1	2	20	37,0	37,0	

**UE3 - CRIBLAGE HAUT DEBIT: STRUCTURE & LIGAND-BASED (5 ECTS)**  
**Responsable : G. MOROY**

**EC 302 - BQ2CY130- Ligand-based (1 ECTS)**  
**Responsable : O. TABOUREAU**

**Intitulé : Ligand-based**

**Responsable pédagogique : O. Taboureau**

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

**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.
- + Visualisation des descripteurs, visualisation des molécules
- + Maîtrise des règles principales ADME/tox : (FAFdrug, David?)  
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
- Notion de Pharmacophore
- Criblage ligand-based, notion de decoys

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

Expérience de calcul de descripteurs sur les logiciels :

1 journée Rdkit

+ MOE (poly de Karine+ slide Chemometrie), **edragon**

### 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Ligand-based	8	1				4	1	2	12	20,0	10,0	

(1D-2D-3D + frog+ Rdkit)

1j OT: kime= 1/2 + 2h fafdrug

+1/2 j Gautier (4h TP babel, Rdkit) (2h a trouver)

+ 1/2 Samuel: Jupiter ligand based

1j OS 1/2 j criblages ligand-based + TP -ligand-based

7,5

OT: 1hC+ 3HTP (4,5)

1/2 journée : Rappel knime (poly OS) + TP avec la préparation d'une chimiothèque (2/3) et (1/3) (add)

### ancien

1/2 j criblages ligand-based + TP -ligand-based + Decoys (?)

1/2j : M2 ()+ 1 partie chemical space cours TP

Séminaire (PPI : OS)

3 H tp (David + Samuel) 3\*2

2h\*2 TP Gautier : 2+2

1+3 = 4,5

1j à dispatcher sur ,5j OS: 6h eqtd

**EC 301- BQ2CY120- Structure-based (3 ECTS)**  
**Responsable : G. MOROY**

**Intitulé : Structure-based**

**Responsable pédagogique : G. Moroy**

**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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Structure-based	14	1				16	1	2	30	53,0	53,0	

8h+14=22, 4\*2, 16\*2

(Préparation de chimiothèque 1j OS)

**Gautier, Samuel, OS.**

**11h c+15TP :**

**(19+ 0+ 26 , projet 4 +0+12) = 23+38**

**EC 303- BQ2CY140- Hits to lead (1 ECTS)**  
**Responsable : O. TABOUREAU**

**Intitulé : Hits to lead**

**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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Hits to lead	8	1				2	1	1	10	14,0	9,0	

**Henri Xhaard, OT (2hC OT + 1hTP soutenance + 6hcours + 1 TP = 10hEQTP )**

**0h 6+5+2**

## **UE spécifiques Macromolécules RECHERCHE**

### **BLOC UE4- Parcours RECHERCHE –MODELISATION DES MACROMOLECULES**

**UE4 ANALYSE DE L'ESPACE DES MOLECULES (4 ECTS)**

**Responsable : O. TABOUREAU**

**Parcours RECHERCHE –MODELISATION DES MACROMOLECULES EC 401 -  
BQ2CY150- Toxicologie et Biotransformation (3 ECTS)  
Responsables: A. BAEZA, F. RODRIGUES-LIMA**

**Intitulé : Toxicologie et biotransformation**

**Responsables pédagogiques : A. Baeza, F. Rodrigues-Lima, J. Dairou, F. Buzi**

**Objectifs en termes de connaissances :**

- Enzymes du métabolisme des médicaments
- Transporteurs des xénobiotiques
- Pharmacocinétique
- les différents types de réponse toxique
- mécanismes d'action des toxiques

**Compétences visées :** Donner les bases du devenir des xénobiotiques (médicaments) et de toxicologie

**Programme :**

- Enzymes du métabolisme des médicaments
- Transporteurs des xénobiotiques
- Pharmacocinétique
- les différents types de réponse toxique
- mécanismes d'action des toxiques.

**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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Toxicologie et biotransformation	19	1	8	1	1				27	36,5	36,5	

**19C+ 8HTP**

**A. Baeza, (6h) F. Rodrigues-Lima (3) , J. Dairou (3), F. Buzi (6) + 4h soutenance \*2 + 1h exam**

**Parcours RECHERCHE –MODELISATION DES MACROMOLECULES EC 402 -  
BQ2CY160 - Chimie médicinale, molécules pharmaceutiques (1 ECTS)  
Responsables: C. MAYER & F. BARBAULT**

**Intitulé : Chimie médicinale, molécules pharmaceutiques**

**Responsables pédagogiques : C. Mayer & F. Barbault**

**Objectifs en termes de connaissances :**

Les étudiants après avoir acquis des compétences en « drug design » travailleront à l'interface entre plusieurs disciplines, ils devront donc avoir certaines bases de médecine moléculaire, des connaissances sur certains médicaments utilisés à ce jour ainsi que des informations sur certaines molécules en phase de développement. Une compréhension de base sur les méthodes computationnelles de drug-design, telles que les approches basées sur les structures de la cible ou des ligands (structure-based et ligand-based), sont requises.

L'enseignement présentera d'une manière intégrée des notions de chimie, de médecine moléculaire, de drug discovery et de biologie. Après un bref retour sur des éléments de chimie médicinale, stéréochimie et nomenclature, le cours introduira des principes de médecine moléculaire et présentera plusieurs exemples de molécules thérapeutiques actuellement sur le marché ou en phase clinique. Une description détaillée sera faite des méthodes de modélisation permettant d'améliorer l'activité biologique d'un premier ligand (hit to lead) en mettant notamment l'accent sur les méthodes QSAR et le bioisostérisme. Les grands systèmes biologiques et les pathologies associées seront abordés, notamment, les maladies infectieuses telles que le paludisme et la tuberculose, et le cancer. Des exemples de molécules thérapeutiques ciblant différents systèmes protéiques seront discutés. Plusieurs structures tridimensionnelles de complexes « cible thérapeutique-médicament » seront examinées afin d'illustrer les principaux concepts de recherche de molécules thérapeutiques couplant des approches in silico et expérimentales dans le contexte de la médecine moléculaire.

**Compétences visées :** Les étudiants pourront acquérir des connaissances sur les grandes pathologies humaines et avoir des exemples pertinents de molécules thérapeutiques couramment utilisées ou en cours de développement

**Modalités d'évaluation :**

Compréhension par les étudiants de ce qu'implique un projet de recherche. Réflexion de leur sujet de recherche. Des tuteurs les guident dans ce travail. La présentation de ce module : conception d'un projet de recherche aux étudiants sera effectuée en milieu de semestre afin que les étudiants aient le temps ensuite de réfléchir et de faire la bibliographie sur leur sujet de stage. Deux réunions de tutorat d'aide et de conseil pour la préparation de ce projet sont proposées avec les tuteurs au cours du semestre.

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	

**Analyse d'article , 1 année sur 2 Claudine ouFlorent**

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Chimie médicinale, molécules pharmaceutiques	6	1				5	1	1	11	14,0	6,5	7,5

**Florent 3hC+ 3 hTP**

**Claudine : 3h cours + 2 TP : Y. Janin**

**19h c+13TP : galon**

## UE 4 - spécifiques Molécules bioactives

**Parcours MOLECULES BIOACTIVES**  
**UE4' ANALYSE DE L'ESPACE DES MACROMOLECULES (4 ECTS)**  
**Responsable : A. BADEL**

**Parcours MOLECULES BIOACTIVES**  
**EC 401- BQ1CY150- Analyse de données I (2 ECTS)**  
**Responsable: A. BADEL**

**Intitulé : Analyse de données I**

**Enseignants pédagogiques : A. Badel, A-C. Camproux**

**Objectifs en termes de connaissances :**

A l'issue de la formation, les étudiants sont à même de déterminer l'analyse statistique qui peut répondre à la question biologique posée et mettre en œuvre cette analyse. Conclure sur les résultats statistiques et biologiques de leur étude

**Compétences visées :** Formation en R et Biostatistique aux étudiants pour manipuler et analyser des données, Classif, PCA, régression logistique et linéaire, problème de sur-apprentissage et performance d'un modèle (méthode de-CART (RF)

**Programme :**

Formation en R et Biostatistique aux étudiants pour manipuler et analyser des données

**Modalités d'évaluation :** 2 compte rendu de TP

- Session 1 : 100 % CC
- Session 2 : 100 % ET

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	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
biostat	10					10	1		20	25	25	

Déclaration AB: 10h TP ADD1

Déclaration acc: 10h Cours ADD1

**Parcours MOLECULES BIOACTIVES**  
**EC 402 - BQ1CY160- Comprendre les macromolécules (2 ECTS)**  
**Responsables: D. Flatters**

**Intitulé : Comprendre les macromolécules**

**Responsables pédagogiques : D. Flatters, G. Moroy**

**Programme :**

- Structures 3D des macromolécules biologiques et visualisation sous Pymol.

Alignement de séquences. Comparaison des structures.

- L'homologie et la conservation du repliement

- Construction de modèles 3D de protéines par modélisation par homologie

- Méthodes bioinformatiques de prédiction de la structure secondaire et tertiaire des macromolécules

**Compétences visées :** Structures 3D des macromolécules biologiques et visualisation sous Pymol. Maitriser les méthodes de prédiction de la structure protéique et ARN et de la modélisation comparative pour établir des modèles structuraux de macromolécules, et évaluer la pertinence d'un modèle 3D.

**Construction de modèles 3D de protéines par modélisation par homologie**

**Modalités d'évaluation :**

- Session 1 : 100 % CC
- Session 2 : 100 % CC

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	

6C		8TP
----	--	-----

**(DF 3+6 en M1) + 6hTP Gautier+ (+ 1h de cours possible Gautier- a dire a AB)**

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Coût enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
3D	10					10	1		20	25	25	

**UE5. PREPARATION A LA RECHERCHE EN DRUG DESIGN (6 ECTS)**

Responsable : L. REGAD

**EC COMMUNE****EC 503- 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	

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Application de criblage haut-débit	6	0	4	0	2	14	0		24	0,0		

**13h c+20TP : python****4hC + 12h**

# EC spécifiques Recherche

EC 501-BQ2CY170 - 3-projets en Drug Design tutoré (2 ECTS)

Responsables : L. REGAD & O. Taboureau

**Intitulé :** 3-projets en Drug Design tutoré

**Responsables pédagogiques :** L. Regad & O. Taboureau

**Objectifs en termes de connaissances :**

- Connaître et combiner les différentes étapes d'un protocole de drug design  
Savoir proposer un protocole de drug design pour identifier de nouveaux inhibiteurs d'une cible donnée

**Compétences visées :**

En fin de semestre, les étudiants combinent et analysent les résultats des différentes projets obtenus sur un même système cible afin de comprendre la complémentarité et la finalité des approches étudiées dans le tronc commun du M2. Savoir développer un pipeline optimisé pour identifier de nouveaux inhibiteurs d'une cible donnée, optimiser et combiner les différents outils nécessaires dans un protocole de drug design.

**Programme :**

Un projet combinant la modélisation moléculaire sur une cible d'intérêt pour évaluer sa flexibilité, la sélection des molécules candidates par des approches de filtrage statistique, et le criblage virtuel (ligand-based et structure-based) de la cible par ses molécules sera effectuée par les étudiants afin qu'ils acquièrent une expérience pratique sur un projet de drug design in silico. Cette cible et molécules seront traitée de façon concrète sous la forme de projets ou compte-rendu durant différents modules du semestre (analyse de donnée et QSAR, modélisation des cibles ou modélisation moléculaire, criblage haut débit). L'objectif de ce projet est que les étudiants lient les différentes approches étudiées et projets obtenus sur un même système afin de comprendre la complémentarité et la finalité de ces approches pour un projet complet de drug design in silico.

Ce projet se basera sur :

- la modélisation moléculaire de la cible d'intérêt pour évaluer sa flexibilité
- des modèles QSAR pour développer des filtres statistiques pour créer une chimiothèque optimisée
- le criblage virtuel (ligand-based et structure-based) pour prédire les molécules inhibitrices à partir de la chimiothèque optimisée.

Dans le cadre de ce module, les étudiants ont la possibilité de participer au Grand Challenge D3R, qui correspond au challenge international de Drug Design hébergé par the University of California, San Diego. Son but est de Prédire la position de petites molécules dans le site de liaison d'une protéine donnée et Prédire l'affinité de petites molécules pour cette même protéine. <https://drugdesigndata.org/about/grand-challenge>

Les différentes étapes du projet seront traitées de façon concrète sous la forme de projets durant différents modules du semestre I (UE : Data analysis & QSAR, UE : Analyse structurale des cibles et leurs dynamiques, UE : criblage haut débit, UE Hits to lead pour l'optimisation des touches).

L'objectif de ce projet est que les étudiants lient les différentes approches étudiées et projets obtenus sur un même système cible afin de comprendre la complémentarité et la finalité de ces approches pour un projet complet de drug design in silico.

Construction d'un protocole complet de drug design permettant l'identification de nouveaux inhibiteurs d'une cible donnée. La constatation suite aux premières évaluations des promotions de M2 était que les étudiants travaillaient les différents modules de façon cloisonnée et ne comprenaient pas leur complémentarité. Désormais, différents modules (Analyse de données & QSAR, Analyse structurale des cibles et dynamiques, modélisation des cibles, criblage haut débit) sont appliqués sur un même système. En fin de semestre, les étudiants combinent et analysent les résultats des différentes projets obtenus sur un même système cible afin d'analyser la complémentarité et de comprendre la finalité des approches. Les étudiants ont aussi la possibilité de participer au Grand Challenge D3R

international de Drug Design hébergé par the University of California, San Diego <https://drugdesigndata.org/about/grand-challenge>, dont le but est de Prédire la position de petites molécules dans le site de liaison d'une protéine donnée et Prédire l'affinité de petites molécules pour cette même protéine.

**Modalités d'évaluation :**

- Session 1 : 100% ET 100% Projet : soutenance  
Les exposés seront effectués à la fin du semestre (5 minutes bilan + 10' de question)
- Session 2 : 100 % ET

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	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
3-projets en Drug Design tutoré	2	1	6	1	4	4	1	1	6	31		

2+ 24 (soutenance + correction)+4

(0C +3 +6)

Gautier, Delphine, Leslie , Samuel Olicier, acc ((6 EC\*4jhTP)

## EC spécifiques Recherche

**EC 502 - BQ2CY180 - Conception de projet recherche tutoré (2 ECTS)**  
**Responsables: A-C. CAMPROUX**

**Intitulé : Conception de projet recherche tutoré (3 approches )**

**Responsables pédagogiques : A-C Camproux**

**Objectifs en termes de connaissances :**

Conception d'un projet de recherche, au niveau d'un travail de thèse ou d'un projet en entreprise de 3 années en drug design in silico. En préparation du sujet de stage de recherche, impliquant un travail bibliographique, une réflexion sur les collaborations possibles et l'intégration des différents modules d'in silico suivis en Master pour le projet de recherche. Budgétisation du projet.

**Compétences visées :**

Compréhension par les étudiants de ce qu'implique un projet de recherche. Réflexion de leur sujet de recherche. Des tuteurs les guident dans ce travail. La présentation de ce module : conception d'un projet de recherche aux étudiants sera effectuée en milieu de semestre afin que les étudiants aient le temps ensuite de réfléchir et de faire la bibliographie sur leur sujet de stage. Deux réunions de tutorat d'aide et de conseil pour la préparation de ce projet sont proposées avec les tuteurs au cours du semestre. Les étudiants renvoient le rapport en tout début de stage afin de le préparer au mieux.

**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	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR
Conception de projet recherche tutoré	8	0				3			11	0,0	

(8+ 3) +

**15h c+25TP :**

**(8c+ 5+ 3)**

.....

## SEMESTRE 4 (30 ECTS)

### UE RECHERCHE

#### UE6 STAGE (30 ECTS) Responsable : A-C. CAMPROUX

#### EC 601 - BQ2DY010 - Préparation projet recherche tutoré (3 ECTS) Responsables : A-C. CAMPROUX, S. MURAIL

**Intitulé :** Préparation projet recherche tutoré

**Responsables pédagogiques :** A-C. Camproux, S. Murail

**Objectifs en termes de connaissances :**

En préparation du sujet de stage de recherche, impliquant un travail bibliographique, une réflexion sur les collaborations possibles et l'intégration des différents modules d'in silico suivis en Master pour le projet de recherche. Budgétisation du projet.

**Compétences visées :**

Conceptualiser son projet de recherche, identifier les laboratoires du domaine et la compétition, Présentation du projet en terme de faisabilité et échéancier

**Programme :**

En préparation du sujet de stage de recherche, impliquant un travail bibliographique, une réflexion sur les collaborations possibles et l'intégration des différents modules d'in silico suivis en Master pour le projet de recherche. Budgétisation du projet.

Deux réunions de tutorat d'aide et de conseil pour la préparation de ce projet sont proposées avec les tuteurs au cours du semestre.

Rendu d'un bilan ponctuel à mi -parcours du stage

**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	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Préparation projet recherche tutorée			8	1	1	4	1	6	12	32,0	28,0	

$(8+ 0+3) + 0+ 8 + 24 \text{ binome } (2h \text{ tuteur}+ 2h\text{correc}*6)$

**(8c+ 5+ 3)**

**EC 602 - BQ2DY020 - Stage recherche international ou en entreprise (27 ECTS)**  
**Responsable : A-C. CAMPROUX**

**Intitulé** : Stage recherche international ou en entreprise

**Responsable pédagogique** : A-C. Camproux

**Objectifs en termes de connaissances** :

Stage en laboratoire ou travail bibliographique équivalent.

**Compétences visées** :

Le but du cours est d'initier les étudiants à la recherche en laboratoire académique ou privé selon le projet international de l'étudiant, fortement recommandé à l'international pour le parcours Macromolécules

**Programme** : Stage en laboratoire ou travail bibliographique équivalent

**Modalités d'évaluation** : Rapport de 12 pages et exposé en anglais devant un jury international

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	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Stage recherche international ou en entreprise			6	1	5				0	30,0	30,0	

## **UE spécifiques Macromolécules APPRENTISSAGE**

## **UE spécifiques Macromolécules PARCOURS ALTERNANCE**

<b>PARCOURS ALTERNANCE MODULE SPECIFIQUE</b> <b>UE4a.-BQ2CT200 STAGE 1 en ENTREPRISE (1 à 2 semaines) (1 ECTS)</b> <b>Responsable : A-C. CAMPROUX</b>	
---	--

10	5
HTP	Max etudiant

**Note sur stage 1 + stage 2**

<b>PARCOURS ALTERNANCE</b> <b>UE4b. BQ2CY210 STAGE 2 et 2 bis (2 semaines et 2 mois) (7 ECTS)</b> <b>Responsable : A-C. CAMPROUX</b>	
--	--

10	5
HTP	Max etudiant

**Intitulé :** Stage 2 et 2 bis sur deux périodes (2 semaines novembre puis 2 mois : décembre et janvier)

**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 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%)

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	Heures CM	Groupe s CM	Hrs TD	Groupe s TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupe s TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentée l'étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Stage 2						10	0	0	0	0,0		

**PARCOURS ALTERNANCE UE5. ALTERNANCE**  
**Application DE CRIBLAGE HAUT DÉBIT (2 ECTS)**

**Responsable : G. MOROY**

\*\*\*\*\*

**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	

0 heures ?

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Stage 3						0 dans stge 4 (10)	0	0	0	0,0		

**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**

**BQ4DY060 Conception et Gestion d'un Projet de Recherche (3 ECTS)**

Programmation web en M1BI

## PARCOURS ALTERNANCE

UE8-BQ2DE060 Bilan et perspective stage recherche et projet Drug design (6 ECTS)

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

**BQ2DE060 Bilan et perspective stage recherche et projet Drug design (6 ECTS) (A-C. Camproux)**

- **3-Projets en Drug design**
- **Bilan du projet de recherche**

**Analyse de données massives en drug design**

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Stage 3	16		5		2	21	0	0	0	0,0		

## PARCOURS ALTERNANCE

BQ2DT070 STAGE 4 (5 mois) (19 ECTS)

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%)

Intitulé	Heures CM	Groupes CM	Hrs TD	Groupes TD	Nombre enseignants par TD	Heures TP	Groupes TP	Nombre enseignants par TP	Volume horaire présentiel étudiants	Cout enseignant total	HETD effectuées par EC UFR	HETD effectuées par EC autres UFR P7
Stage				10	5	10	2	0	0	0,0		

\*\*\*\*\*\$

**PARCOURS APPRENTISSAGE**

<b>Objectifs en termes de connaissances</b>	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.	
<b>Compétences visées</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Capacité à élaborer un projet de recherche en ISDD</li> <li>- Aptitude à conduire un projet de recherche en bio-informatique et drug design</li> <li>- Gestion d'un projet dans le cadre de la recherche scientifique en drug design</li> <li>- Etablir une stratégie de veille scientifique</li> </ul>	
<b>Contenu de l'UE/ECUE</b>	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..	
<b>Modalités de contrôle des connaissances</b>	Session unique	
	Session 1	100% ET, O
	Session 2	100% ET, O/E

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	