

DESCRIPTION DES COURS DU MASTER EN BIOINFORMATIQUE ET MODÉLISATION

Document provisoire

Deuxième année du master (MA2)

Année académique 2008-2009

Attention, ce document est fourni à titre provisoire .

Les informations concernant les mnémoniques et/ou les titulaires des cours ne sont pas définitives et pourront être modifiées dans les semaines qui viennent.

DESCRIPTION DES COURS DU MASTER EN BIOINFORMATIQUE ET MODELISATION	1
Sites web	2
<i>Cours communs</i>.....	3
<i>INFO-F-5XX</i> <i>Projet de conception et de réalisation d'un logiciel pour la bioinformatique ou la modélisation</i> 3	
<i>Génomique, protéomique et évolution</i>	4
<i>STAT-F-506</i> <i>Statistiques appliquées à la bioinformatique</i>	4
<i>STAT-F-507</i> <i>Algorithmique appliquée à la bioinformatique</i>	5
<i>BIOL-F-523</i> <i>Analyse de données de génomique fonctionnelle</i>	6
<i>BIOL-F-524</i> <i>Méthodes d'apprentissage automatique pour la bioinformatique</i>	7
<i>BMOL-F-501</i> <i>Analyse des réseaux d'interactions moléculaires</i>	8
<i>BMOL-F-414</i> <i>Génétique moléculaire de l'évolution</i>	9
<i>Modélisation des processus dynamiques en Biologie</i>.....	10
<i>BIOL-F-525</i> <i>Dynamique des systèmes biologiques</i>	10
<i>CHIM-F-420</i> <i>Systèmes non linéaires : méthodes analytiques et numériques</i>	11
<i>BIOL-F-514</i> <i>Chronobiologie : Modélisation des rythmes du vivant</i>	12
<i>BIOL-F-527</i> <i>Dynamique des sociétés cellulaires et animales</i>	13
<i>PHAR-F-500</i> <i>Pharmacocinétique et pharmacodynamique</i>	14
<i>Biophysique et Bioinformatique structurale</i>	15
<i>BIOL-F-528</i> <i>Biophysique et bioinformatique structurale II</i>	15
<i>BIOL-F-529</i> <i>Détermination de structures spatiales de macromolécules par radiocristallographie</i> 16	
<i>BIOL-F-530</i> <i>Théorie des nœuds et structure macromoléculaire</i>	17
<i>BIOL-F-531</i> <i>Moteurs moléculaires et processus stochastiques</i>	18
<i>BING-H-501</i> <i>Conception rationnelle de médicaments</i>	19

SITES WEB

Site pour la communication du matériel de cours

<http://www.bioinfomaster.ulb.ac.be/>

Catalogue des cours ULB

Master en Bioinformatique et Modélisation

<http://www.ulb.ac.be/catalogue/sciences/MA-BINF.html>

Année préparatoire au Master en Bioinformatique et Modélisation (EP-BINF)

<http://www.ulb.ac.be/catalogue/sciences/EP-BINF.html>

Horaire des cours de la Faculté des Sciences ULB

<http://www.ulb.ac.be/facs/sciences/horaires/>

COURS COMMUNS

INFO-F-5XX Projet de conception et de réalisation d'un logiciel pour la bioinformatique ou la modélisation

Collège

Informatique

Titulaire(s) pressenti(s)

Tom Lenaerts

Prérequis

Les étudiants devront avoir une formation préalable en algorithmique, programmation et conception logicielle.

But

Le but de ce module est d'amener les étudiants à mettre en pratique les concepts acquis aux cours d'algorithmique et de programmation, en les appliquant à un problème de bioinformatique ou de modélisation de systèmes biologiques.

Résumé

Le module est axé autour d'un travail personnel, qui consistera à concevoir, développer et évaluer un logiciel permettant l'analyse d'un problème biologique lié aux thèmes abordés dans les autres cours du Master en Bioinformatique et Modélisation. Chaque étudiant réalisera son travail au sein d'un laboratoire impliqué dans le Master.

Le logiciel sera testé sur une série de cas d'études, visant à démontrer le bon fonctionnement du programme et à évaluer ses performances informatiques, ainsi que la pertinence biologique des résultats. Il fera l'objet d'une documentation à deux niveaux: documentation du code, et guides d'utilisateurs.

Les travaux feront l'objet d'un rapport décrivant les motivations du projet, les fonctionnalités du logiciel, et les résultats des tests de performances.

Bibliographie

Il n'y a pas de bibliographie spécifique à ce cours.

Coordonnées des enseignants

Email: [email]

Localisation du bureau: [localisation du bureau].

Adresse postale: [adresse postale]

Méthode d'enseignement

5 ECTS (théorie: 0, exercices: 0, travaux pratiques: 1, travaux personnels: 4)

Méthode d'évaluation

Les projets seront évalués sur base d'un rapport écrit, d'une inspection du code implémenté, et de tests du bon fonctionnement du logiciel.

Langue

Français.

Campus

P

Semestre

1

GÉNOMIQUE, PROTÉOMIQUE ET ÉVOLUTION

STAT-F-506 Statistiques appliquées à la bioinformatique

Collège

Mathématiques

Titulaire

Jacques van Helden

Prérequis

Les étudiants sont sensés avoir déjà suivi un cours général d'introduction aux statistiques.

But

Le but de ce cours est de fournir approche conceptuelle et pratique des méthodes statistiques couramment utilisées en bioinformatique.

Résumé

Le but de ce module est de présenter les concepts de probabilités et statistiques, et de les appliquer à l'analyse de problèmes bioinformatique. L'approche pédagogique se veut orientée par les applications : chaque partie du cours consistera à partir d'un problème concret faisant appel à un traitement statistique, et à découvrir progressivement la théorie en envisageant les différentes façons de résoudre ce problème.

Les thèmes traités recouvreront partiellement les méthodes introduites dans les cours d'introduction aux statistiques (statistiques descriptives, théorie des probabilités, tests d'hypothèse), mais (d'après notre expérience), un rappel et une mise en contexte de ces méthodes pour la bioinformatique est loin d'être inutile.

Le cours abordera également des méthodes d'analyse multidimensionnelle (analyse en composante principale, « multidimensional scaling », « clustering », analyse discriminante), qui ne font pas partie des cours de base de statistiques, mais sont de plus en plus fréquemment utilisées pour l'analyse des données du transcriptome, du protéome, et d'autres données à haut débit.

Les leçons théoriques seront accompagnées de séances d'exercices, où les étudiants s'entraîneront à résoudre des problèmes sur papier, et de travaux pratiques visant à analyser des données concrètes au moyen de logiciels de statistiques (R, TIGR MEV).

Bibliographie

Jacques van Helden. Statistics for Bioinformatics. Oxford University Press. *En préparation*. (des copies pré-publication seront mises à la disposition des étudiants).

Coordonnées des enseignants

Email: Jacques.van.Helden@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bâtiment BC, aile C, local C6.102.

Adresse postale: SCMBB - Université Libre de Bruxelles. Campus Plaine. CP 263. Boulevard du Triomphe. 1050 Bruxelles – Belgium

Méthode d'enseignement

3 ECTS (théorie: 2, exercices: 1, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen écrit

Langue

Le cours se donnera en français, les supports écrits seront en anglais.

Campus

P

Semestre

1

STAT-F-507 Algorithmique appliquée à la bioinformatique

Collège

Informatique

Titulaire

Jean Cardinal

Prérequis

Les étudiants doivent avoir suivi au moins un cours d'introduction à l'algorithmique.

But

Survol des outils algorithmiques existants pour la génomique et la phylogénie : recherche de motifs, manipulation de séquences, arbres et graphes.

Résumé

Ce module traitera plus particulièrement des méthodes et notions suivantes:

- algorithmes efficaces de recherche de motifs,
- arbres à suffixes: construction et applications,
- algorithmes de programmation dynamique, application à l'alignement de séquences,
- graphes: définition, utilisation, algorithmes fondamentaux,
- problèmes NP-difficiles, algorithmes d'approximation.

Le cours sera enrichi de la lecture d'articles de recherche récents dans le domaine de l'algorithmique pour la bioinformatique.

Bibliographie

D. Gusfield, [Algorithm on Strings, Trees, and Sequences: Computer Science and Computational Biology](#), Cambridge Press.

Coordonnées des enseignants

Email: jcardin@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bât. NO, aile N, bureau 2.N8.110

Adresse postale: ULB, CP212

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 1)

Méthode d'évaluation

A définir

Langue

Cours en français ou anglais, supports écrits en anglais.

Campus

P

Semestre

1

BIOL-F-523 Analyse de données de génomique fonctionnelle

Collège

Biologie moléculaire

Titulaire

Vincent Detours

Prérequis

Les étudiants sont sensés avoir déjà suivi un cours général d'introduction aux statistiques. Ce cours est complémentaire de celui de Gianluca Bontempi, 'Méthodes d'apprentissage automatique pour la bioinformatique' (BIOL-F-524), il est bénéfique mais pas obligatoire de l'avoir suivi.

But

La génomique fonctionnelle est une collection de technologies qui appréhendent à l'échelle du génome entier le fonctionnement des gènes. Les statistiques sont un outil d'investigation central dans ce domaine. Le but du cours est de stimuler leur utilisation créative mais biologiquement pertinente.

Résumé

Les millions de mesures produites lors d'une expérience de génomique fonctionnelle appellent une analyse statistique sophistiquée et une interprétation biologique adaptée à une appréhension globale du génome. Le cours offre un panorama des possibilités immenses et du maniement délicat de ce nouvel outil.

Le cours s'articule autour de l'analyse critique d'articles de recherche qui ont révolutionné le domaine par les possibilités méthodologiques, biologiques et cliniques qu'ils ont ouvertes (ou dans certains cas, cru ouvrir). Les thèmes biologiques abordés donnent une large part aux recherches sur la progression et l'agressivité des cancers et aux mécanismes cellulaires fondamentaux qui y sont associés.

L'arsenal statistique est présenté de façon informelle en insistant sur son adéquation aux questions biologiques posées. J'insiste plus particulièrement sur un certain nombre d'illusions statistiques et d'erreurs d'interprétation courantes dans le domaine.

Des séances de travaux pratiques donnent aux étudiants l'occasion de reproduire certains résultats de première importance, par exemple prédire la survie des patients cancéreux à partir de l'expression des gènes dans leur tumeur primaire.

Bibliographie

Les articles analysés seront fournis à mesure que le cours progresse.

Coordonnées des enseignants

Email: vdetours@ulb.ac.be

Localisation du bureau et adresse postale: IRIBHM - Bldg C, room C.4.116 - ULB, Campus Erasme, CP602 - 808 route de Lennik - 1070 Brussels – Belgium.

Méthode d'enseignement

3 ECTS (théorie: 1, TP: 1, travail personnel: 1)

Méthode d'évaluation

Travail personnel.

Langue

Le cours se donnera en français, les supports écrits seront en anglais.

Campus

P

Semestre

1

BIOL-F-524 Méthodes d'apprentissage automatique pour la bioinformatique

Collège

Informatique

Titulaire

Gianluca Bontempi

Prérequis

STAT-F-506

But

Présenter les méthodes statistiques d'apprentissage automatique pour construire et évaluer des modèles de prédiction et de classification à partir de données biologiques.

Résumé

Le cours se focalisera sur les algorithmes d'apprentissage supervisé (régression et classification), les techniques d'estimation, de validation, de sélection de modèles et de sélection de variables. En particulier, le cours présentera les réseaux de neurones, les arbres de classifications, les méthodes locales, les classifieurs KNN et Naive-Bayes et les algorithmes SVM. Tous les algorithmes seront illustrés par des applications bioinformatiques (analyse des données microarray, analyse des données du protéome, prédiction de fonctionnalité, inférence des réseaux). Une série d'exercices, à l'aide d'un outil open-source (R) pour la visualisation et l'analyse statistique, permettront aux étudiants de mettre en pratique les notions vues au cours sur des jeux de données médicales et biologiques.

Bibliographie

- W.J. Ewens, G. R. Grant (2002) Statistical methods in Bioinformatics: an introduction. Springer
- T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman (2002) The Elements of Statistical Learning. Springer.
- Sélection d'articles de la littérature.

Coordonnées des enseignants

Email: gbonte@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus La Plaine, NO8-107

Adresse postale: Département d'Informatique, Bld de Triomphe, CP 212

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 0, travaux pratiques: 1, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

examen oral

Langue

Le cours se donnera en français, les supports écrits seront en anglais.

Campus

P

Semestre

1

BMOL-F-501 Analyse des réseaux d'interactions moléculaires

Collège

Biologie moléculaire

Titulaire

Jacques van Helden

Prérequis

But

Le but de ce cours sera de présenter les applications de l'algorithmique des graphes à l'analyse des réseaux d'interactions moléculaires (régulation transcriptionnelle, réseaux métaboliques, réseaux d'interactions protéiques).

Résumé

Le cours inclura notamment une présentation des différents modèles statistiques pour la genèse de réseaux aléatoires, les propriétés topologiques des réseaux (connectivité, rayons, robustesse, ...), la recherche de chemins, la recherche de motifs, le clustering sur les graphes et la détection de modules fortement connectés, et la visualisation de graphes. Les travaux pratiques consisteront à utiliser des logiciels d'analyse de graphes pour analyser des réseaux d'interactions moléculaires.

Les approches et exemples traités s'adapteront à l'évolution des publications du domaine.

Bibliographie

La bibliographie consistera en sélections d'articles soumis à discussion, et adaptés chaque année en fonction de l'actualité scientifique.

Coordonnées des enseignants

Email: Jacques.van.Helden@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bâtiment BC, aile C, local C6.102.

Adresse postale: SCMBB - Université Libre de Bruxelles. Campus Plaine. CP 263. Boulevard du Triomphe. 1050 Bruxelles – Belgium

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 0, travaux pratiques: 1, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen écrit

Langue

Le cours se donnera en français, les supports écrits seront en anglais.

Campus

P

Semestre

1

BMOL-F-414 Génétique moléculaire de l'évolution

Collège

biologie moléculaire

Titulaires

Patrick Marduly

Prérequis

Notions de biologie évolutive (cours de BAC3): variation génétique, sélection, dérive génique, recombinaison, généalogies de gènes, distances moléculaires (modèle JC).

But

Décrire les concepts majeurs de la génétique moléculaire de l'évolution

Résumé

Description des concepts de génétique micro-évolutive et de génétique macroévolutive : contraintes historiques et paramètres contemporains déterminant la variation moléculaire au sein des espèces et des populations, généalogie de gènes, variants moléculaires neutres et sous sélection, phylogéographie, mécanismes de spéciation, homologie, alignements moléculaires arbres et graphes, parcimonie, modèles complexes de substitution, maximum de vraisemblance, hétérogénéité des taux de substitution, transitions évolutives majeures, vie & Intelligence artificielles.

Bibliographie

Copie des diapositives projetées lors des cours (disponibles via le web) – Références d'articles de synthèse (fournies par le titulaire) dans des journaux scientifiques – Références d'articles de recherche (fournies par le titulaire) pour la réalisation éventuelle d'un travail personnel.

Coordonnées des enseignants

Email: gsciarra@ulb.ac.be, pmarduly@ulb.ac.be

Localisation du bureau: AE-4-104.

Adresse postale: cp 300

Méthode d'enseignement

3 ECTS (théorie: 3, exercices: 0, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

examen oral

Langue

Français (références en anglais)

Campus

P ou S?

Semestre

2

MODÉLISATION DES PROCESSUS DYNAMIQUES EN BIOLOGIE

BIOL-F-525 Dynamique des systèmes biologiques

Collège

Biologie moléculaire

Titulaire

Marcelle Kaufman et Didier Gonze

Prérequis

Les étudiants devront avoir suivi un cours d'introduction aux méthodes d'analyse des équations différentielles. En outre, ils auront suivi le cours de "Modélisation des systèmes biologiques" (BIOL-F-451).

But

Le but de ce cours est de présenter, au travers d'exemples biologiques concrets, différentes méthodes d'analyse et de simulation de la dynamique des réseaux de régulation.

Résumé

La biologie des systèmes cherche à mettre en évidence les propriétés dynamiques et fonctionnelles de réseaux moléculaires aussi complexes que les réseaux génétiques, les réseaux métaboliques, les réseaux de communication intra- et extracellulaire. En s'appuyant sur la modélisation et la simulation, elle permet d'aider à comprendre les mécanismes à la base du fonctionnement de ces réseaux de régulation, d'étudier leur stabilité en réponse à différentes perturbations, de tester différentes hypothèses pour concevoir de nouvelles expériences.

Dans le cadre de l'étude de systèmes de régulation génétiques et biochimiques, le cours introduira les principales approches utilisées pour modéliser la dynamique des processus biologiques. Ces approches incluront des méthodes d'analyse qualitatives (approches discrètes et automates logiques) et quantitatives (approches différentielle et stochastique) ainsi que l'analyse de réseaux biologiques en termes des circuits et motifs de régulation qui les composent.

Le cours sera illustré par des exemples issus d'articles de modélisation récents. Les travaux pratiques consisteront en des simulations sur ordinateur et discussions d'articles.

Bibliographie

La bibliographie consistera en une sélection d'articles de modélisation soumis à discussion, et adaptés chaque année en fonction de l'actualité scientifique.

Coordonnées des enseignants

Email: Marcelle.Kaufman@ulb.ac.be (M. Kaufman), dgonze@ulb.ac.be (D. Gonze)

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bâtiment NO, local 2.O.5.210 (M. Kaufman), local 2.O.5.214 (D. Gonze).

Adresse postale: Service de Chimie Physique et Biologie théorique, Université Libre de Bruxelles, Campus Plaine, CP 231, Bvd du Triomphe, 1050 Bruxelles (M. Kaufman), SCMBB, Université Libre de Bruxelles, Campus Plaine, CP 263, Bvd du Triomphe, 1050 Bruxelles (D. Gonze).

Méthode d'enseignement

5 ECTS (théorie: 3, exercices: 0, travaux pratiques: 2, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1

CHIM-F-420 Systèmes non linéaires : méthodes analytiques et numériques

Collège

chimie

Titulaire

Thomas Erneux

Prérequis

Une connaissance de base du calcul différentiel et intégral

But

Introduire des méthodes analytiques et numériques pour l'étude de problèmes non linéaires en chimie et en biologie

Résumé

L'objectif de ce cours est de présenter un certain nombre d'outils analytiques et numériques nécessaires pour l'étude de problèmes non linéaires en chimie et en biologie. Ceux-ci seront introduits par des exemples concrets allant de modèles de population à la propagation d'impulsions électriques le long d'une fibre nerveuse.

Le cours se divisera en différentes parties (modèles temporels discrets, équations différentielles ordinaires, équations aux dérivées partielles, modèles stochastiques, et automates cellulaires) avec des thèmes récurrents (analyse de stabilité, bifurcations, réponse dynamiques, comparaisons avec l'expérience).

Les leçons théoriques seront accompagnées de séances d'exercice où les étudiants auront la possibilité de tester les différentes méthodes analytiques.

Bibliographie

G. de Vries, T. Hillen, M. Lewis, J. Müller, B. Schönfisch, A course in Mathematical biology, Quantitative modeling with mathematical and computational methods, SIAM Publications 2006 .

Coordonnées des enseignants

Email: TERNEUX@ULB.AC.BE

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bâtiment NO 6^{ème} étage, local 2.06.105

Adresse postale: Université Libre de Bruxelles, Optique Nonlinéaire Théorique, Campus Plaine, C.P. 231, 1050 Bruxelles, Belgium

Méthode d'enseignement

3 ECTS (théorie: 2, exercices: 1)

Méthode d'évaluation

Examen écrit

Langue

Le cours sera donné en français ou en anglais

Campus

P

Semestre

1

BIOL-F-514 Chronobiologie : Modélisation des rythmes du vivant

Collège

Biologie moléculaire

Titulaire

Albert Goldbeter

Prérequis

Les bases biologiques et mathématiques seront données dans les cours de M1 du Master Bioinformatique et Modélisation.

But

Le but du cours est d'examiner le mécanisme moléculaire des principaux rythmes biologiques, d'identifier les processus de régulation cellulaire impliqués dans le phénomène oscillant, et de les modéliser.

Résumé

Après une présentation des faits expérimentaux les plus saillants, des modèles théoriques fondés sur les données expérimentales seront présentés. Les prédictions de ces modèles, obtenues par simulations numériques, seront comparées aux résultats de l'expérience. Le cours donne une illustration de l'apport de la Biologie computationnelle et de la Biologie des Systèmes à la compréhension de la dynamique des processus cellulaires au sein de réseaux de régulation complexes.

Le cours couvre les oscillations métaboliques (oscillations glycolytiques chez la levure), les oscillations du calcium intracellulaire, les communications intercellulaires de nature pulsatile (oscillations d'AMP cyclique et rythmes hormonaux), les rythmes cardiaque et neuronaux, les rythmes circadiens, et des rythmes cellulaires récemment découverts.

Bibliographie

Coordonnées des enseignants

Email: agoldbet@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bâtiment NO, aile O, local 2.O.5.209.

Adresse postale: Service de Chimie Physique et Biologie théorique, Université Libre de Bruxelles, Campus Plaine, CP 231, Bvd du Triomphe, 1050 Bruxelles.

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 2, exercices: 0, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1

BIOL-F-527 Dynamique des sociétés cellulaires et animales

Collège

Biologie des organismes

Titulaire

Deneubourg JL

Prérequis

Les étudiants auront suivi les cours d'introduction à la modélisation

But

Le but du cours est de présenter les principales méthodes de modélisation utilisées dans l'étude de la dynamique des systèmes sociaux cellulaires et animaux.

Résumé

Grâce à l'étude de cas, les méthodes utilisées dans l'étude des dynamiques sociales seront présentées (principalement équations différentielles et simulations stochastiques). Un accent particulier sera mis d'une part sur la formulation mathématique des comportements et des communications et d'autre part sur la validation expérimentale des modèles. Les cas retenus illustreront les comportements collectifs les plus fréquemment observés (décision collective, agrégation, synchronisation,...) et le caractère générique des interactions entre individus et des organisations collectives que l'on retrouve à l'œuvre du cellulaire à l'animal (invertébrés et vertébrés).

Bibliographie

Camazine, S., Deneubourg, J.L., Franks, N.R., Sneyd, J., Theraulaz, G. & Bonabeau, E. (2003) *Self-Organization in Biological Systems*, Princeton University Press, Princeton.

Coordonnées des enseignants

Email: jldeneub@ulb.ac.be

Localisation du bureau: bâtiment N.O., 5eme niveau, aile N

Adresse postale: Ecologie sociale, CP 231

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 1, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Oral avec support d'un rapport

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1

PHAR-F-500 Pharmacocinétique et pharmacodynamique

Collège

Chimie

Titulaire

Leloup Jean-Christophe

Prérequis

-

But

Le but de ce cours sera d'étudier à l'aide de modèles mathématiques les effets au cours du temps de médicaments sur l'organisme selon leur pharmacocinétique (PK) et leur pharmacodynamique (PD).

Résumé

La pharmacocinétique (PK) décrit ce que "l'organisme fait au médicament". C'est l'étude du devenir d'un principe actif contenu dans un médicament dans l'organisme. Elle comprend plusieurs phases se déroulant simultanément dont les principales sont l'absorption et la distribution entre différents compartiments au sein de l'organisme. La détermination des paramètres pharmacocinétiques d'un médicament apportera les informations qui permettent de choisir les voies d'administration, la forme galénique, ou la posologie. La pharmacodynamique (PD) décrit ce que "le médicament fait à l'organisme". C'est l'étude du mode d'action du médicament (interaction entre le principe actif et l'organe cible) ainsi que de ses effets biochimiques ou physiologiques. Lors de ce cours, différents exemples seront donnés et analysés en détail à l'aide de modèles mathématiques PK/PD.

Bibliographie

La bibliographie consistera en une sélection d'articles soumis à discussion, et adaptés chaque année en fonction de l'actualité scientifique et des interactions avec des entreprises pharmaceutiques.

Coordonnées des enseignants

Email: jleloup@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus Plaine, Bâtiment NO, aile O, local 2.O5.114

Adresse postale: Unité de Chronobiologie théorique - Université Libre de Bruxelles - Campus Plaine CP231, Boulevard du Triomphe, 1050 Bruxelles, Belgique.

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 2, exercices: 0, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral

Langue

Le cours se donnera en français, les supports écrits seront en français et anglais

Campus

P

Semestre

1

BIOPHYSIQUE ET BIOINFORMATIQUE STRUCTURALE

BIOL-F-528 Biophysique et bioinformatique structurale II

Collège

Biologie moléculaire

Titulaires

- Marianne Rooman (1 ECTS th.)
- Dimitri Gilis (2 ECTS th., 2 ECTS trav. pr., 1 ECTS, tr. pers.)

Prérequis

Biophysique et bioinformatique structurale I (BIOL-F-450)

But

Ce cours a pour objectif de fournir des compléments de biophysique et de présenter de manière détaillée les diverses approches utilisées dans le domaine de la bioinformatique structurale, introduites dans le cours BIOL-F-450.

Résumé

Ce cours abordera les aspects suivants:

- Classification de structures de protéines.
- Types de fonctions d'énergie décrivant les interactions intra- et inter-moléculaires.
- Méthodes de prédiction de la structure secondaire de protéines.
- Méthodes de prédiction de la structure tertiaire de protéines: modélisation comparative, reconnaissance de repliement, approches *ab initio*.
- Méthodes de prédiction de protéines membranaires.
- Simulation du repliement de protéines et prédiction de leur noyau de nucléation.
- Méthodes de prédiction de la fonction de protéines.
- Méthodes pour l'étude de la dynamique de biomolécules.
- Prédiction de la structure de complexes protéine-protéine, protéine-ligand et protéine-ADN.
- Introduction à l'application de méthodes de chimie quantique dans le domaine de la bioinformatique structurale.
- Migration de charges/courant dans l'ADN.

Bibliographie (non exhaustive)

- Introduction to Bioinformatics, Arthur M. Lesk (Oxford University Press)
- Protein structure prediction, Michael J. E. Sternberg (Oxford University Press)
- Bioinformatics in the post-genomic era, Jeff Augen (Addison-Wesley)

Coordonnées des enseignants

Email: mrooman@ulb.ac.be & dgilis@ulb.ac.be

Localisation des bureaux: Solbosch, UD3.203 et UD3.204

Adresse postale: Unité de Bioinformatique génomique et structurale, Université Libre de Bruxelles, av. Roosevelt, 50, CP 165/61, 1050 Bruxelles

Méthode d'enseignement

5 ECTS (théorie: 3, travaux pratiques: 2, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral.

Langue

Français

Campus

Solbosch

Semestre

1

BIOL-F-529 Détermination de structures spatiales de macromolécules par radiocristallographie

Collège

biologie moléculaire

Titulaire

René Wintjens

Prérequis

Une connaissance de base des notions de conformation de protéines est un atout, ainsi qu'une bonne maîtrise des commandes informatiques d'un système d'exploitation de type Unix.

But

Initiation à la radiocristallographie (uniquement les aspects de traitement des données assisté par l'ordinateur)

Résumé

Programme du cours

- 1- introduction et principes : méthodes de diffraction, loi de Bragg, réseau réciproque, facteur de structure, problème de phase, détermination du groupe d'espace
- 2- méthodes de résolution et affinement des structures : méthode de Patterson, méthode de l'atome lourd, synthèses de Fourier, densité électronique, utilisation de la diffusion anormale, problème de phase, méthodes d'affinement, validation et vérification des structures, logiciels pour la résolution et l'affinement des structures cristallines
- 3- exercices pratiques : résolution du problème de phase, remplacement moléculaire, phasage expérimental, bases de données des structures cristallines

Bibliographie

A définir en cours d'année.

Coordonnées des enseignants

Email: rene.wintjens@ulb.ac.be

Localisation du bureau: 1B4.120 campus PLAINE

Adresse postale: CP 206/04

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 1, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

En fonction du nombre d'étudiants : examen oral ou écrit ou travail personnel à réaliser.

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1

BIOL-F-530 Théorie des nœuds et structure macromoléculaire

Collège

Biologie moléculaire

Titulaire

Pierre Bieliavsky

Prérequis

Calcul différentiel et intégral multivarié élémentaire. Algèbre linéaire et calcul matriciel élémentaire.

But

Introduire l'étudiant à la notion d'invariant de nœud, exposition de certaines constructions de base et initiation à certaines pratiques de calcul. Applications à l'étude structurale des configurations de l'ADN.

Résumé

On commencera par introduire la notion de nœud et d'entrelac. Nous poursuivrons par une définition d'invariant de nœud relativement à la notion d'isotopie. Ensuite viendra l'encodage diagrammatiques de ces notions via le concept de diagramme de nœud et de mouvements de Reidemeister. On présentera des constructions d'invariants de nœuds élémentaires en se basant sur la notion d'amplitude de nœud. Suivra une exposition des notions de polynôme de Kauffman et d'Alexander.

Nous terminerons cette partie par une introduction aux groupe de tresses et algèbre de Hecke. Une seconde partie sera constituée d'une application à l'étude topologique de l'ADN. Suivant la demande, une introduction à certaines applications physiques pourrait être envisagée.

Bibliographie

C.Adams; W.H. Freeman; « The knot book » édition 2001.

Chemical Topology: Applications and Techniques; Mathematical Chemistry Series Vol. 6, D. Bonchev and D.H. Rouvray eds. Gordon and Breach Science Publishers, 2000.

Coordonnées des enseignants

Email: bieliavsky@math.ucl.ac.be

Localisation du bureau: b.126, Département de mathématique, UCL, bat. De Hemptinne, B-1348 Louvain la Neuve.

Adresse postale: Département de mathématique, UCL, bat. De Hemptinne, B-1348 Louvain la Neuve.

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 1, travaux pratiques: 0, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1

BIOL-F-531 Moteurs moléculaires et processus stochastiques

Collège

Physique

Titulaire

Pierre GASPARD

Prérequis

- Connaissances de base sur la biologie de la cellule et les grandeurs physiques d'énergie et de puissance.
- Outils mathématiques pour la biologie MATH-F-402.

But

Le but du cours est de présenter les principes de fonctionnement et de modélisation des moteurs moléculaires.

Résumé

Présentation des résultats récents sur la dynamique des moteurs moléculaires à l'échelle du nanomètre : (1) moteurs rotatifs du FoF1-ATPase et des flagelles bactériennes ; (2) moteurs linéaires myosine-actine et kinésine-microtubule. Leurs changements de conformations sont induits par la réaction d'hydrolyse de l'adénosine triphosphate (ATP) ou par une différence de pH à travers une membrane. Ces changements se produisent de manière aléatoire à cause des fluctuations moléculaires. Leurs mouvements sont donc modélisés en termes de processus stochastiques permettant de comprendre leurs propriétés cinétiques et thermodynamiques. D'autres enzymes consommateurs d'énergie biochimique sont aussi décrits comme des moteurs moléculaires.

Bibliographie

- B. Alberts, D. Bray, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, & P. Walter, Essential Cell Biology (Garland Publishing Inc., New York & London, 1998).
- T. L. Hill, Free Energy Transduction and Biochemical Cycle Kinetics (Dover, New York, 2005).
- A. R. Crofts, Biological Energy Conversion, Biophysics 354 (University of Illinois at Urbana-Champaign) <http://www.life.uiuc.edu/crofts/bioph354/>

Coordonnées des enseignants

Email: gaspard@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus Plaine, bâtiment NO, aile O, local 2.05.106.

Adresse postale: Centre for Nonlinear Phenomena and Complex Systems, Université Libre de Bruxelles, Campus Plaine, Code Postal 231, B-1050 Bruxelles, Belgium.

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie 2 ; exercices 0 ; travaux pratiques 0 ; travaux personnels 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral & rapport écrit

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1

BING-H-501 Conception rationnelle de médicaments

Collège

EIB

Titulaire pressentie

Martine Prévost

Prérequis

Notions de chimie générale, de biochimie, de structure des macromolécules biologiques.

But

Faire comprendre l'importance des méthodes rationnelles expérimentales et assistées par ordinateur dans la conception de molécules thérapeutiques.

Résumé

Les approches assistées par ordinateur jouent un rôle important dans la conception et la découverte rationnelle de médicaments. Elles sont à l'heure actuelle, conjointement aux méthodes expérimentales, largement utilisées dans l'industrie pharmaceutique.

Le cours présentera plusieurs de ces méthodes ainsi que les approches expérimentales. L'analyse bioinformatique de données génomiques et protéomiques, qui constitue une aide pour l'identification du produit du gène le plus approprié pour combattre une maladie spécifique, sera discutée. Les méthodes assistées par ordinateur qui permettent la conception de ligands ciblant le récepteur choisi seront détaillées et plusieurs applications illustreront ces approches. Les techniques *in silico* utilisées pour prédire les propriétés de biodisponibilité et toxicité seront présentées.

Contenu

I Introduction

- Découverte de médicaments (état actuel et perspectives)
- Sources de médicaments

II Approches expérimentales pour la conception de médicaments

- Criblage à haut débit
- Chimie combinatoire
- Cristallographie à haut débit et RMN de criblage

III Approches assistées par ordinateur à la conception de médicaments

- Méthodes pour l'identification de cibles
- Conception rationnelle basée sur la connaissance de ligands
- Conception rationnelle basée sur la connaissance de la structure du récepteur
- Outils de prédiction des propriétés de biodisponibilité et de toxicité

Bibliographie

Copie des diapositives projetées lors du cours (disponibles via le web)

Coordonnées des enseignants

Email: mprevost@ulb.ac.be

Localisation du bureau: Campus de la Plaine, Batiment BC, bureau 1C4.103

Adresse postale: Bld du Triomphe CP 206/2

Méthode d'enseignement

2 ECTS (théorie: 1, exercices: 0, travaux pratiques: 1, travaux personnels: 0)

Méthode d'évaluation

Examen oral

Langue

Français

Campus

P

Semestre

1