CH-352

Eléments de cheminformatique

Patiny Luc

Cursus	Sem.	Type
Chimie	BA6	Obl.
HES - CGC	E	Opt.

Langue d'enseignement	français
Crédits	3
Session	Eté
Semestre	Printemps
Examen	Pendant le semestre
Charge	90h
Semaines	14
Heures	**3 hebdo**
Cours	2 hebdo
Exercices	1 hebdo
Nombre de places	

Résumé

Introduction aux concepts de base de cheminformatique et aux principaux outils utilisés. Applications potentielles de ces outils en recherche pour la gestion de l'information.

Contenu

- Stockage de l'information: LIMS-ERM- ELN
- Différents formats de données (Refer, Medline, SMILES, MOL, SDF; PDB, JCAMP, PDF...)
- Structures chimiques: 1. canonisation et recherche par structure exacte 2. symmétrie, stéréochimie 3. "fingerprints" 4. recherche par sous-structure
- Analyse et utilisation des données
- Page WEB, Javascript/Applet, utilisation de Jmol
- Exportation et partage de l'information chimie
- "data-mining" et création de modèles empiriques pour la prédiction de données

Mots-clés

cheminformatiques, data-mining

Compétences requises

Cours prérequis obligatoires

Un cours de chimie organique

Cours prérequis indicatifs

Le cours nécessite des connaissances de base de chimie

Acquis de formation

A la fin de ce cours l'étudiant doit être capable de:

- Chercher l'information chimique dans des bases de données
- Organiser les données chimiques

- Utiliser différents formats de données chimique et effectuer des conversions
- Analyser des données chimiques et en extraire une connaissance
- Discuter des différents formats de stockage des données
- Expliquer quelques méthodes permettant la création de modèle de prédiction
- Décrire les algorithmes permettant la recherche par sous-structure, la canonisation de molécules, la similarité de molécules et la recherche de réactions

Compétences transversales

- Accéder aux sources d'informations appropriées et les évaluer.
- Faire preuve d'esprit critique
- Utiliser les outils informatiques courants ainsi que ceux spécifiques à leur discipline.

Méthode d'enseignement

Ex Cathedra et exercices sur ordinateur

Travail attendu

Présentation d'un site web
Présentation d'un sujet approfondissant les notions vues au cours
Présentation d'un résultat d'analyse

Méthode d'évaluation

Continu

Ressources

Bibliographie

Fournie au cours et sur http://e-chemistry.epfl.ch

Sites web

- http://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=11471
- http://www.cheminfo.org/flavor/cheminformatics

Liens Moodle

- http://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=11471