

CH-352

**Eléments de chiminformatique**

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
<b>Heures</b>	<b>3 hebdo</b>
Cours	2 hebdo
Exercices	1 hebdo
<b>Nombre de places</b>	

**Résumé**

Introduction aux concepts de base de chiminformatique 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. symétrie, 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

- <https://go.epfl.ch/CH-352>