

5^{ème} journée de l'Institut Farman

Jeudi 24 novembre 2011 – Pavillon des Jardins Programme

9h00 - 9h30 : Accueil – Café & croissants

9h30 - 9h45 : Ouverture de la journée : Pierre-Paul Zalio.

9h45-10h45 : Chair : P. Larzabal

9h45-10h00 : *G. Belkacem*, Projet COUPLET (SATIE – LSV - LMT)

10h00-10h15 : *P.Y. Joubert*, Projet IMADEF (SATIE,CMLA)

10h15-10h30 : *A. Souto Lebel*, Projet IMPACT (LMT-LURPA)

10h30-10h45 : *L. Desvilletes*, Projet COMOSEC (LMT, CMLA)

10h45-11h15 : Pause café

11h15-12h45 : Chair : A. Benallal

11h15-12h15 : **Luba Tchertanov (LBPA, ENS Cachan)**

Simulation des états et des processus physio-pathologiques dans les systèmes biologiques

12h15-12h30 : Discussions

12h30-14h00 : Buffet et discussions autour des posters dans la cafétéria du Pavillon des Jardins

14h00-15h15 : Chair : F. De Vuyst

14h00-15h00 **Jean-Daniel Fekete (LRI, Univ. Paris Sud)**

Visualisation Exploratoire de réseaux sociaux : avancées récentes et défis

15h00-15h15 : Discussions

15h15-15h45 : Pause café

15h45-17h00 : Chair : L. Mathieu

15h45-16h00 : *F. De Vuyst*, Projet LBM-FSI-GPU (CMLA - LMT)

16h00-16h15 : *R. Soulat*, Projet BOOST (SATIE, LSV)

16h15-16h30 : *F. Thiebaut*, Projet COMPAS (LURPA-LMT)

16h30-16h45 : *J.J. Lesage*, Projet CRAFT (LURPA,LSV,CMLA)

Résumés :

Luba Tchertanov (BiMoDyM, LBPA, CNR-ENSC, LabEx LERMIT)

Simulation des états et des processus physiopathologiques dans les systèmes biologiques

Résumé :

La cellule est un système biologique ouvert, complexe et intégré. Son fonctionnement est gouverné par un réseau dynamique d'interactions entre partenaires moléculaires. Un grand nombre de protéines agissent comme des nœuds de ce réseau, qui transmettent les signaux extracellulaires en activant de multiples voies de signalisation. La fonction de ces protéines peut être altérée par des mutations, provoquant des maladies graves représentant un lourd coût pour la société : le cancer, l'arthrite, les troubles cardiovasculaires ou la maladie d'Alzheimer.

Pour étudier ces phénomènes, les méthodes de bioinformatique et modélisation moléculaire constituent des outils indispensables. Elles permettent de simuler les processus dynamiques responsables des états physiopathologiques des systèmes biologiques et donnent accès à des propriétés parfois difficiles, voire impossible, à mesurer expérimentalement.

En particulier, nous utilisons ces méthodes pour caractériser la structure, la dynamique interne et les déterminants de la reconnaissance moléculaire chez les récepteurs protéines kinases, (RTKs) et le récepteur au glutamate (NMDA), des acteurs clés de la signalisation et de la physiopathologie du cancer et des maladies cardiovasculaires. Ces cibles thérapeutiques majeures sont sujettes au développement rapide de résistance aux médicaments. Très récemment, nous avons mis en évidence des effets de mutations activatrices sur la dynamique interne des RTKs, KIT et FMS. Ces effets décrits au niveau atomique, sont localisés à la fois à proximité du point de mutation et au niveau d'un fragment protéique distant. Nous avons également décrit la propagation des effets de la mutation à travers le réseau de résidus de la protéine. Ce travail combinant plusieurs méthodes théoriques contribue à la connaissance des déterminants structuraux, dynamiques et thermodynamiques de l'effet de mutations oncogènes. Ces résultats nous permettront de proposer de nouveaux inhibiteurs de RKTs, spécifiques des formes mutées résistantes.

Le fonctionnement de la cellule peut aussi être perturbé par des agents étiologiques (infectieux), par exemple, le virus HIV, le cas du SIDA. Nous étudions l'intégrase (IN), enzyme responsable de l'intégration virale dans l'ADN cellulaire. Cet enzyme remplit ses fonctions en utilisant sa capacité de flexibilité exceptionnelle. Nos résultats et nos concepts ouvrent une voie pour la définition de cibles thérapeutiques non explorées qui ensuite servira pour le développement de nouvelles générations d'inhibiteurs.

Jean-Daniel Fekete (LRI, Univ. Paris Sud)

Visualisation Exploratoire de réseaux sociaux : avancées récentes et défis

Résumé :

Depuis dix ans, des progrès significatifs ont été réalisés dans le domaine de la visualisation interactive des réseaux sociaux. Ces progrès permettent d'explorer et de naviguer dans des réseaux de plusieurs millions de sommets et d'arêtes, ainsi que dans des réseaux très denses, dans des réseaux multi-valués (avec de multiples attributs associés aux sommets et aux arêtes), et maintenant dans des réseaux dynamiques.

Nous allons passer en revue les nouvelles représentations visuelles, les interactions associées et les algorithmes de calcul de placement qui permettent d'améliorer notablement l'analyse exploratoire de ces réseaux sociaux.

Nous décrirons aussi les défis auxquels les chercheurs font face et qui permettront d'explorer des réseaux dynamiques, agrégés selon plusieurs hiérarchies, ainsi que liés à des données complexes.

Les projets de l'Institut Farman :

*Projet BOOST (SATIE, LSV):
Concepts in Localization of Vibrations of Irregular Systems*

*Projet CLOVIS (LMT-CMLA):
Concepts in Localization of Vibrations of Irregular Systems*

*Projet COMOSEC (LMT, CMLA):
Contrôle des modèles de simulation utilisés pour les équations cinétiques*

*Projet CRAFT (LURPA,LSV,CMLA):
Critical Risks Analysis by Fault Trees*

*Projet EVMC (LMT-SATIE):
Etude du vieillissement des métallisations de composants à semi-conducteur de l'électronique de puissance*

*Projet IMADEF (SATIE,CMLA):
Imagerie de défauts dans des pièces électriquement conductrices par la méthode des courants de Foucault et algorithmes de reconstruction généralisée*

*Projet IMPACT (LMT-LURPA):
Influence des conditions d'usinage à gde vitesse des pièces de forme complexe sur leur tenue en fatigue*

*Projet COMPAS (LURPA-LMT):
COMpliant Part ASsembly : simulation and validation*

*Projet COUPLET (SATIE, LSV, LMT):
COUPLage Electro Thermique*

*Projet FSI-LBM-GPU (CMLA, LMT):
Fluid Structure Interaction using Lattice Boltzmann Methods on Graphics Processing Units*