



Intitulé de la formation

Master Calcul Haute Performance et Simulation, Université de Reims Champagne-Ardenne

Nom du responsable

Luiz-Angelo Steffemel

Mail de contact

master-CHPS@univ-reims.fr

Public

Prérequis

(Exemple : Bac +3, débutant/confirmé/expert, etc.)

Principales compétences acquises

<input type="checkbox"/> Bioinformaticien		
<input type="checkbox"/> Biologiste - Chercheur <input type="checkbox"/> Biologiste médical		
<input type="checkbox"/> Chargé de parcours génomique		
<input type="checkbox"/> Clinicien généticien		
<input type="checkbox"/> Clinicien non généticien		
<input type="checkbox"/> Conseiller en génétique		
<input type="checkbox"/> Technicien		
<input checked="" type="checkbox"/> Autre : Informaticiens	Licence Informatique (Bac+3)	Formation destinée à l'apprentissage de méthodes et outils pour le calcul haute performance, la simulation numérique et la visualisation scientifique. Quelques modules offrent des notions en biologie et chimie pour mieux aider l'exploration de problèmes nécessitant du calcul haute performance.



Format et contenu

Théorique

1 – HPC pour la biologie :

Les objectifs sont de montrer comment les informations physiques, chimiques et biologiques sont intégrées dans la mise au point de méthodes informatiques permettant de répondre à des questions biologiques, et comment différentes approches et ressources informatiques sont mises en œuvre en bioinformatique, avec un focus sur les aspects HPC.

Différents niveaux de complexité de la biologie seront succinctement présentés avec les méthodologies utilisées pour générer les données qui seront traitées informatiquement.

Contenu théorique : Données biologiques, méthodes informatiques en bioinformatique et bases de données

- Traitements informatiques des séquences et prédictions structure-fonction
- Modélisation des structures moléculaires et de leurs interactions
- Visualisations dédiées aux données bioinformatiques et aux objets biologiques

2 – HPC pour la Chimie

Acquérir une base minimale de connaissances sur les algorithmes majeurs rencontrés dans les méthodes de la Chimie théorique, en particulier en Chimie quantique

Compétences spécifiques visées :

- Comprendre les concepts de Chimie théorique et les grandes lignes d'une simulation moléculaire quantique sur des ressources HPC
- Connaître la notion de densité électronique et son exploitation en vue d'identifier et quantifier les interactions chimiques au sein des systèmes moléculaires

Pratique (précisez si stage, etc.)

1 – HPC pour la biologie :

Problématique de visualisation et de représentation spatiale de données informatiques

- Traitement des séquences et utilisation des bases de données biologiques
- Structure/fonction/dynamique d'interactions moléculaires

2 – HPC pour la Chimie

Surface d'Énergie Potentielle (SEP) : gradient, point stationnaire, point selle d'ordre 1 et liens en Chimie

- Notion centrale d'orbitale en Chimie quantique
- Notion de densité électronique : calcul et exploitation
- Mises en œuvre à travers le logiciel IGMPlot
- logiciel associé de post-visualisation des résultats (VMD)

Type de formation

- Continue
- Initiale
- DPC
- Autre :

- Licence
- Licence professionnelle
- Master
- DIU
- FST
- Certificat
- Qualification
- Autre :

Proposée par :

- Université
- FSMR
- Société savante
- AURAGEN/ SeqOIA
- Autre :

Durée de la formation

2 ans

**Intérêt de cette formation dans le parcours génomique
(Répond à quels besoins ? Quel débouché ?)**

Cette formation n'est pas en lien direct avec le parcours génomique, mais peut permettre à des individus avec une base en biologie/chimie de s'approfondir dans le calcul haute performance et simulation.



Lien

<https://romeo.univ-reims.fr/chps/>

Avis des anciens élèves

(Disponible sur le site - Extrait de questionnaires de satisfaction)

Petit mot du GT Formation

Cette formation initiale permet d'acquérir des compétences en calculs haute performance nécessaire à la mise en place de pipelines pour le traitement de données massives. Elle peut s'avérer intéressante pour les informaticiens ou bioinformaticiens présents sur les plateformes d'analyse/traitement de données