

UAR
Séminaire résidentiel interdisciplinaire 2017
Projet d'horaire des présentations des instituts et des sujets de recherche

Jour	Horaire	Nom/Acronyme de l'institut	Orateur principal
Lundi 30/01	9h00	Namur Institute for Complex systems (naXys)	Timoteo Carletti
	9h30	NALLT	Jeroen Darquennes
	10h00	Institut de Recherches en Didactiques et Education de l'UNamur (IRDENa)	Evelyne Charlier
	10h30	Pause-café	
	11h15	Namur Digital Institute (NADI)	Pierre-Yves Schobbens
	11h45	Namur Institute of Structured Matter (NISM)	Carmela Aprile
	12h30	Lunch	
Mardi 31/01	9h00	Namur Institute for Life Sciences (NARILIS)	Carine Michiels
	9h30	Espace Philosophique de Namur (ESPHIN)	Bertrand Hespel
	10h00	PATH	Jean-François Nieu
	10h30	Pause-café	
	11h15	Development Finance & Public Policies (DeFiPP)	Jean-Marie Baland
	11h45	Institute of Life, Earth and Environment (ILEE)	Patrick Kestemont
	12h30	Lunch	

Jour	Horaire	Titre exposé	Orateur	Abstract
Lundi 30/01	14h00	Hearing the shape of networks: operators, spectrum, and identification	Alexandre Mauroy	
	14h30	Modelling Vibrational Spectroscopies of Chiral Compounds	Vincent Liégeois	Chirality is a property of an object that is distinguishable from its mirror image, that cannot be superposed onto it. This property is very important for molecules, especially in the biological and pharmaceutical domains. Indeed, biological receptors are themselves chiral and therefore interact differently with a molecule or its enantiomer (its mirror image). However, most of the properties of chiral molecules such as the melting point, boiling point, as well as infrared and Raman signatures are the same for the two enantiomers. In this presentation, I'm focusing on vibrational spectroscopies (techniques that probe the vibrational modes of a molecule) and more specifically on Vibrational Circular Dichroism and Raman optical activity spectroscopies that are the optically active counterparts of infrared and Raman spectroscopies. I will demonstrate the importance of quantum chemical simulations to help unraveling the difference of signatures between enantiomers as well as between conformations of the molecule such as the secondary structure of proteins.
	15h00	Random walk in the HPC land	Luc Henrard	La simulation numérique est bien installée comme troisième pilier de la recherche, à côté de la théorie et de l'expérience. De plus en plus de chercheurs y font appel dans leur quotidien. Le calcul intensif (ou High Performance Computing) est caractérisé par l'utilisation (et la maîtrise ?) de ressources de calcul importantes. Je présenterai quelques aspects globaux et locaux du HPC au cours d'une marche aléatoire, qui n'explore donc pas tout l'espace des paramètres.
	15h30	Pause-café		
	16h00	Biodiversity, stress, and ecosystem functions	Frederik De Laender	

	16h30	Pôle de recherche en infectiologie	Benoît Muylkens	Une vie humaine et animale est un parcours parsemé de rencontres plus ou moins sympathiques avec des micro-organismes en tout genre : bactéries, virus, champignons, parasites. De la symbiose (harmonie parfaite entre les partenaires) à la virulence (où le micro-organisme cause une maladie), le panel d'interaction est fascinant et parfois important (en terme de santé) à étudier. Dans cet univers d'interaction, rien n'est figé, tout est évolutif. A titre d'exemple, citons l'adaptation progressive du virus du SIDA et l'atténuation de sa virulence mise en évidence au Botswana, un des pays les plus sévèrement touchés par l'épidémie due au virus de l'immunodéficience humaine (VIH). Cette adaptation reflète le dialogue constant qu'entretiennent l'organisme hôte (l'humain ou l'animal) et les agents infectieux. L'infectiologie est une science où les défis de la santé humaine et animale sont abordés avec des outils identiques qui globalisent les approches de la santé unique. Ce concept ""One health"" (traduit par les compatriotes de Voltaire en ""Une seule Santé"")) imprègne profondément les approches développées en épidémiologie, bactériologie, virologie, parasitologie. A l'Université de Namur et aux cliniques universitaires de Mont Godinne, un groupe de chercheurs de tout horizon (Chimistes, Biologistes de la cellule, Bactériologistes, Vétérinaires, Médecins) a créé un pôle de recherche en infectiologie. Le but de cette communication est de faire découvrir les initiatives nées des dialogues entre disciplines et des travaux faisant appel à des compétences variées en infectiologie au service de la santé humaine et animale.
	17h00			
Mardi 31/01	14h	Projet ERC "Rotifers Highlight Evolution of Asexuals	Karine Van Doninck	
	14h30	Géographie de la santé: approche spatiale et intégrée des risques sanitaires	Catherine Linard	Pourquoi la santé des populations varie-t-elle dans l'espace ? La géographie de la santé s'intéresse à la distribution spatiale des risques sanitaires, ainsi qu'à ses facteurs explicatifs, qu'ils soient de nature environnementale, démographique ou socio-économique. Je m'intéresse plus particulièrement aux maladies infectieuses transmises par des vecteurs, qui ont un lien fort avec l'environnement. Mes recherches combinent différentes approches et outils tels que les Systèmes d'Information Géographique, les statistiques spatiales et les modèles de distribution (de la population humaine, des vecteurs et des maladies) pour une approche intégrée de divers systèmes infectieux.
	15h00	Applications and prospects in multiresolution analyses of molecular structures	Laurence Leherte	Methods to reduce the level of details are essential to allow fast calculations and/or to provide new insights into molecular systems. Various techniques and application domains related to the leveling of molecular structures and molecular properties through low-resolution, smoothing, denoising, or coarse-graining approaches, are involved. Among possible application fields, representations of 3D molecular fields in terms of topological graphs are helpful for alignments of drug molecules and their similarity evaluation, specific topological features can be used as potent descriptors of molecular interactions, and Elastic Network models opens the way to a new understanding of structural and dynamics properties of biological systems at different spatial and time scales. An emphasis is also given on the use of smoothed charge density distribution functions and their extrema to generate reduced point charge models of proteins with applications to Molecular dynamics simulations and conformational sampling of protein complexes. Current and prospective targets are Ubiquitin, the opioid receptor, and the CD2/CD58 system involved in inflammatory and autoimmune diseases. All our theoretical developments and calculations are carried out on the Plateforme Technologique de Calcul Intensif (PTCI), a member of the 'Consortium des Équipements de Calcul Intensif' (CÉCI).
	15h30	Pause-café		
	16h00	Fin des travaux		
	17h00	Départ		