

PROPOSITION DE STAGE DE M1 OU M2

Lieu

INRIA (Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique),
Equipe-Projet Inria TOSCA
Responsable scientifique : Denis Talay, Directeur de Recherche INRIA et
Professeur chargé de cours à l'École Polytechnique.

Adresse

Centre de Recherche Sophia Antipolis – Méditerranée
2004 Route des Lucioles
BP 93
06902 Sophia Antipolis CEDEX

Encadrement

Mireille BOSSY, Nicolas CHAMPAGNAT
Chargés de Recherche INRIA
Tél. : 04 92 38 79 82, 04 92 38 75 53
Mireille.Bossy@sophia.inria.fr, Nicolas.Champagnat@sophia.inria.fr
et Denis TALAY

Rémunération, logement

Prendre contact avec l'équipe.

Description du sujet

MÉTHODES PROBABILISTES EN DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

La modélisation moléculaire ainsi que les simulations de dynamique moléculaire sont des outils incontournables pour la compréhension de la formation et du fonctionnement des protéines. La puissance de calcul des ordinateurs permet de nos jours de simuler la dynamique d'assemblages macromoléculaires constitués de quelques dizaines de milliers d'atomes sur quelques dizaines de nanosecondes. Cependant, les assemblages macromoléculaires réels comprennent souvent plus de 500 000 atomes pour des durées pertinentes de l'ordre de la microseconde. L'analyse et la simulation de tels systèmes représente un défi important.

Les intérêts de l'équipe TOSCA dans ce domaine portent notamment sur deux sujets :

1. les méthodes probabilistes pour l'interprétation et la résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann des dynamiques moléculaires, qui permet de calculer le potentiel électrostatique autour d'une protéine ;

2. l'approximation de la mesure invariante de systèmes d'équations différentielles stochastiques de type Langevin, dans le but de calculer certaines quantités globales comme l'énergie libre d'une molécule, qui s'exprime comme une intégrale par rapport à cette mesure invariante.

Notre travail se développe en collaboration avec des biologistes, en particulier de l'Institut Pasteur à Paris.

Le sujet du stage sera lié à l'une des problématiques précédentes. Il sera défini en fonction du niveau (M1 ou M2) du stagiaire, et de ses intérêts : l'accent pourra être mis sur des questions d'analyse mathématique des modèles, ou sur l'analyse numérique des méthodes originales de simulation de la dynamique temporelle d'une protéine, ou de calcul de quantités globales liées à une protéine, telles l'énergie libre ou le potentiel électrostatique.

Compétences et profil

Le candidat à un stage de M1 devra montrer un goût marqué pour la modélisation et les applications, et avoir des connaissances en probabilités.

Le candidat à un stage de M2 devra avoir de bonnes connaissances en probabilités et calcul stochastique. Des connaissances en C/C++ seront également appréciées.

Le candidat sera amené à travailler dans un environnement multidisciplinaire et devra montrer un intérêt pour les applications biologiques.