



CDD Ingénieur Développement Logiciel - Toulouse, France

Les remarquables propriétés des protéines, sont de plus en plus exploitées dans le domaine des biotechnologies, des nanotechnologies, de la chimie verte et de la biologie de synthèse. Dans les prochaines décennies, elles seront amenées à jouer un rôle considérable dans le développement de procédés durables, et à l'essor d'une chimie renouvelable, respectueuse de l'environnement. Elles devraient en particulier permettre de développer des procédés de synthèse de molécules d'intérêt majeur pour toute une pléiade de secteurs ainsi que des processus de transformation de la biomasse renouvelable dans le domaine de l'environnement et des bioénergies.

Pour pouvoir disposer de nouvelles protéines qui répondent aux besoins et aux contraintes de fonctionnement dans ces domaines, une voie émergente consiste à modéliser ces molécules au niveau atomique et à utiliser des codes informatiques dédiés pour concevoir et optimiser des protéines « à façon ». Le projet dans lequel vous serez impliqué consiste à combiner des outils issus de l'intelligence artificielle (robotique, optimisation) et de la biophysique pour construire un prototype de plateforme logicielle capable de guider la conception de nouvelles protéines d'intérêt.

Il s'agit d'un projet R&D multidisciplinaire soutenu par le démonstrateur préindustriel Toulouse White Biotechnology (www.toulouse-white-biotechnology.com), impliquant trois laboratoires localisés à Toulouse: le Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes Biologiques et des Procédés (www.lisbp.fr), l'unité de Mathématiques et Informatiques (mia.toulouse.inra.fr) et le Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes (www.laas.fr). Ce projet vise à produire une plateforme logicielle de design de protéines fondée sur des méthodes innovantes développées par les trois partenaires du projet. Le LISBP et MIAT travaillent conjointement sur l'adaptation d'algorithmes développés en intelligence artificielle pour rechercher et garantir l'identification de designs de protéines d'énergie minimum [1-3]. Le LAAS en collaboration avec le LISBP a été pionnier dans l'utilisation d'algorithmes issus de la robotique pour l'exploration des mouvements des protéines [4-5]. Dans le cadre de ce projet, l'objectif est d'intégrer ces nouvelles méthodes dans un prototype logiciel dédié au design de protéines. Vous serez en charge de l'interfaçage de deux bibliothèques C++ sur lesquelles repose le développement du prototype logiciel de design de protéines. Vous serez accueillis au sein du Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes (LAAS-CNRS - 7, avenue du Colonel Roche BP 54200 31031 Toulouse cedex 4) et travaillerez en étroite collaboration avec tous les partenaires du projet.



twb
White Biotechnology
center of excellence



Profil recherché

- Formation Bac +5, issu(e) d'une école d'ingénieur ou d'une université, spécialisé(e) en informatique.
- Compétences en développement logiciel.
- Maîtrise du langage C++. Connaissances en Python.
- Aptitude à travailler en équipe dans un contexte multidisciplinaire et bonnes qualités de communication.
- Connaissances en biologie structurale (seraient un plus).

Durée

Le poste est disponible à partir du 01/10/2017 et pour une durée de 12 ou 18 mois.

Candidature

Pour candidater, merci d'envoyer un CV, une lettre de motivation et le nom de personnes référentes à :

Sophie Barbe: sophie.barbe@insa-toulouse.fr

Juan Cortés: juan.cortes@laas.fr

Thomas Schiex: thomas.schiex@inra.fr

Références:

- 1-Traoré S, Allouche D, Andre I, De Givry S, Katsirelos G, Schiex T, Barbe S (2013). *A new framework for computational protein design through cost function network optimization*. *Bioinformatics*, 29 (17), 2129-2136.
- 2-Simoncini D, Allouche D, de Givry S, Delmas C, Barbe S, Schiex T (2015) *Guaranteed Discrete Energy Optimization on Large Protein Design Problems*. *J Chem Theory Comput* 11(12):5980-9.
- 3-Traoré S, Roberts KE, Allouche D, Donald BR, André I, Schiex T, Barbe S (2016). *Fast search algorithms for Computational Protein Design*. *J Comput Chem*. (12) 1048-58.
- 4-Al-Bluwi I, Siméon T, Cortés J (2012) *Motion planning algorithms for molecular simulations: A survey*. *Computer Science Review*, 6(4):125-143.
- 5-Barbe S, Cortés J, Siméon T, Monsan P, Remaud-Siméon M, André I (2011) *A mixed molecular modeling-robotics approach to investigate lipase large molecular motions*. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 79(8):2517-2529.