

Thèse CIFRE "Méthodes d'apprentissage en simulation moléculaire"

Contexte scientifique.

Les propriétés pharmaceutiques des molécules sont déterminées en grande partie par leur affinité avec leur cible. La simulation numérique directe des processus atomiques sous-jacents, modélisés par une équation différentielle stochastique du type dynamique de Langevin, ne permet toutefois pas d'observer spontanément lesdits phénomènes. Il faut pour cela biaiser la dynamique, par une approche de type échantillonnage d'importance, en s'appuyant sur des profils d'énergie libre associés aux directions d'évolution les plus lentes. Ces directions sont traditionnellement déterminées grâce à l'intuition bio-physico-chimique. L'objectif de cette thèse est de mettre en oeuvre des méthodes d'apprentissage, à la fois supervisées et non-supervisées, pour déterminer de manière automatique les directions lentes à biaiser.

Profil de l'étudiant(e)

Nous recherchons un(e) étudiant(e) avec une solide formation en mathématiques appliquées et intéressé(e) par les applications en biologie moléculaire.

Détails pratiques

Le doctorant sera employé par un grand groupe pharmaceutique français. Le travail de thèse sera majoritairement effectué au CERMICS (Ecole des Ponts, RER A Noisy Champs), sous la direction de Tony Lelièvre et Gabriel Stoltz. Le salaire annuel brut est de 40 keuros, auquel s'ajoutent les avantages sociaux de l'entreprise (mutuelle, prise en charge partielle des frais de transport quotidiens, comité d'entreprise, etc).

Contact : gabriel.stoltz@enpc.fr