

## Sujet de stage de Master 2 : Algorithmique de graphe pour l'analyse de trajectoires d'évolution de structures moléculaires

Laboratoire PRiSM de l'Université de Versailles-St Quentin et Laboratoire LAMBE de l'université d'Evry-Val d'Essonne

**Contacts** : Dominique Barth ([barth@prism.uvsq.fr](mailto:barth@prism.uvsq.fr)) et Marie-Pierre Gaigeot ([mgaigeot@univ-evry.fr](mailto:mgaigeot@univ-evry.fr))

### Sujet

L'objectif du stage de **master 2 en informatique** est la proposition et l'utilisation d'algorithmes de graphes adaptés d'algorithmes classiques, voire originaux, permettant l'analyse de l'évolution d'une structure moléculaire à partir de la suite de ses états à échelle de temps régulière. Ce sujet d'algorithmique est développé en partenariat avec une équipe de physico-chimistes réalisant des simulations de dynamique moléculaire. Dans ce cadre, un grand nombre de structures moléculaires pertinentes sont générées et il est indispensable de les trier par classes, puis de corrélérer ces classes avec des propriétés physico-chimiques comme les spectres vibrationnels et/ou des mécanismes de réactions chimiques.

A partir d'une suite de graphes dont chacun correspond à un état, il s'agira donc d'identifier les étapes qui correspondent à des changements de conformation de la molécule cible (ce qui s'apparente à une problématique de « clustering » de graphes). Cette notion de variabilité sera basée sur la définition de notion de distance entre graphes (distance entre éléments structurels, règles d'éditions ou de réécriture). L'obtention de ces définitions est un des points clefs du stage.

D'un point de vue algorithmique, le projet vise la comparaison de graphes modélisant les différents états des molécules cibles, selon des métriques directement issues des problèmes de dynamique moléculaire visées. Dans ce domaine, de nombreuses approches méta-heuristiques ou aléatoires existantes pourront être la base de la réflexion, mais l'originalité du projet est la prise en compte de particularités structurelles des topologies des molécules visées (planarité, symétrie, contraintes sur certains degrés,...). De plus, les propriétés physico-chimiques considérées ne se traduisent souvent pas directement par un paramètre de graphes unique et précis.

#### **Le stage consiste en quatre grandes étapes :**

- Etude bibliographique ciblée pour la comparaison de structures moléculaires, principalement basée sur l'algorithmique de graphes.
- Modélisation et identification des algorithmes classiques de comparaison de graphes à retenir.
- Définition et validation des nouveaux algorithmes proposés.
- Programmation et évaluation des algorithmes sur des données réelles.

Ce stage se réalisera au sein de l'équipe MAGMAT du PRiSM dans le cadre du Labex CHARMMMAT de l'université Paris-Saclay. Le stage est rémunéré au tarif habituel des Universités (420 €/mois). Un financement de thèse sur ce sujet par le Labex CHARMMMAT est possible.

### **Profil de candidature**

Le candidat devra avoir des compétences en théorie et algorithmique de graphes ainsi qu'une maîtrise de la programmation et de l'évaluation de performances. Des connaissances de bases en structures moléculaires seront appréciées mais non nécessaires.

Les candidatures comportant un CV ainsi que les relevés de notes de Master 1 et 2 disponibles devront être envoyés par email aux contacts indiqués plus haut.