

Equipe Inria-Loria CAPSID

Appel à candidat.e.s pour les concours de recrutement 2021 et 2022

(see English version next page)

L'équipe CAPSID¹ au LORIA (Inria-CNRS-Université de Lorraine, Nancy) développe des méthodes computationnelles pour la classification et la modélisation des protéines et de leurs interactions avec divers ligands (ARN, protéines, médicaments). Pluridisciplinaire, l'équipe CAPSID rassemble des chercheurs et enseignants-chercheurs venus d'horizons variés comme la biologie, l'informatique et la chimie. Eprouvée par le départ de Dave Ritchie en 2019, l'équipe souhaite renforcer son axe bioinformatique structurale en recrutant sur un profil informatique orienté apprentissage/IA ("machine learning/deep learning") appliqué dans ce domaine.

Ainsi nous souhaitons soutenir des candidat.e.s (francophones ou anglophones) aux concours 2021 comme chercheur CNRS² (section 6) ou INRIA *Starting research position*³ ainsi que des candidatures (francophones) sur un poste d'enseignant-chercheur à l'Université de Lorraine (section 27) en 2022.

Les principaux projets récents et actuels de l'équipe en bioinformatique structurale portent sur:

- la modélisation des complexes entre protéines et polymères hyper-flexibles (en particulier ARNsb, mais aussi ADNsb et GAGs) par assemblage combinatoire de fragments;
- l'optimisation de fonctions de score pour l'évaluation des modèles ARN-protéine;
- l'exploration de l'espace des rotations pour la modélisation des assemblages multi-protéiques;
- le docking ligand-récepteur appliqué aux interactions croisées entre récepteurs nucléaires ou au criblage virtuels d'inhibiteurs de la protéine spike du SARS-Cov-2;
- l'utilisation des techniques de machine learning ou de deep learning pour la classification des domaines protéiques;
- le calcul distribué appliqué au clustering des poses lors de simulations en dynamiques moléculaires (pour le choix des conformères représentatifs);
- la représentation différentielle des formes des protéines HLA pour comprendre le rejet de greffe;
- les approches de grands graphes distribués pour l'annotation fonctionnelle des protéines.

Des projets en continuité avec, ou complémentaires à, ces projets seront particulièrement appréciés. L'équipe CAPSID bénéficie de l'environnement privilégié d'un grand laboratoire d'informatique implanté sur le campus de la Faculté des Sciences et Techniques. Elle dispose d'une importante plateforme de ressources partagées en terme de calcul, stockage et compétences, ainsi que d'un accès direct aux clusters de calcul du projet Grid 5K.

L'équipe CAPSID a développé un important réseau de collaborations locales et internationales avec des biologistes, physiciens et informaticiens. En particulier:

- IMoPA (UMR 7567 CNRS-UL, Nancy) : Ingénierie Moléculaire et Physiopathologie Articulaire, biologie moléculaire et structurale, ARNs et GAGs.
- DynAMic (UMR 1128 INRAE-UL, Nancy) : Dynamique des Génomes et Adaptation Microbienne, mécanismes de transfert horizontal des antibioresistances.
- LPCT (UMR 7019 CNRS-UL, Nancy) : Laboratoire de Physique et Chimie Théorique, simulations par dynamique moléculaire.
- CHRU Nancy: CIC-P ; Centre d'Investigation Clinique Plurithématique, mécanismes moléculaires des insuffisances cardiaque et rénale.
- TUM (Technical University Munich, Allemagne) : Department of Physics, (Pr. Martin Zacharias), biophysique, docking gros-grain ; Department of Chemistry, (Pr. Michael Sattler), NMR et interactions proteines-ARNs.
- VUB (Vrije University Brussels, Belgique) : Bio2Byte, (Pr. Wim Vranken), design de protéines liant l'ARN.

Nous invitons les personnes intéressées à prendre contact très rapidement avec Marie-Dominique Devignes (Responsable d'équipe) sur la base d'une présentation rapide de leur motivation et d'un lien vers leur page personnelle. Une expérience de mobilité internationale après la thèse est un atout essentiel pour ce type de recrutement.

marie-dominique.devignes (at) [loria.fr](mailto:marie-dominique.devignes@loria.fr)

¹ capsid.loria.fr

² <https://www.dgdr.cnrs.fr/drhchercheurs/concoursch/default-fr.htm>

³ www.inria.fr/fr/starting-research-positions

Inria-Loria CAPSID team
Call for candidates for the 2021 et 2022 recruitment competitions
(English version)

The CAPSID¹ team at the LORIA (Inria-CNRS-University of Lorraine, Nancy) is developing computational methods for the classification and modeling of proteins and their interactions with various ligands (RNA, proteins, drugs). The multidisciplinary CAPSID team brings together researchers and teacher-researchers from a variety of backgrounds such as biology, computer science and chemistry. Affected by the death of Dave Ritchie in 2019, the team wishes to strengthen its structural bioinformatics axis by recruiting on a machine learning/deep learning/AI - oriented IT profile applied in this field.

We therefore wish to support candidates (French-speaking or English-speaking) for the 2021 competitions as CNRS researcher² (section 6) or INRIA Starting research position³, as well as applications (French-speaking) for a teacher-researcher position at the Université de Lorraine (section 27) in 2022.

The main recent and current projects of the team in structural bioinformatics relate to:

- modeling of complexes between proteins and hyper-flexible polymers (in particular ssRNA, but also ssDNA and GAGs) by combinatorial assembly of fragments;
- optimization of scoring functions for the evaluation of RNA-protein models;
- the exploration of the space of rotations for the modeling of multi-protein assemblies;
- ligand-receptor docking applied to cross interactions between nuclear receptors or to virtual screening for inhibitors of the SARS-Cov-2 spike protein;
- the use of machine learning or deep learning techniques for the classification of protein domains;
- the distributed calculation applied to the clustering of poses during simulations in molecular dynamics (for the choice of representative conformers);
- the differential representation of HLA protein shapes to understand transplant rejection;
- large distributed graph approaches for the functional annotation of proteins.

Projects in continuity with, or complementary to, these projects will be particularly appreciated. The CAPSID team benefits from the privileged environment of a large IT laboratory located on the campus of the Faculty of Science and Technology. It has a large platform of shared resources in terms of computing, storage and skills, as well as direct access to the computing clusters of the Grid 5K project.

The CAPSID team has developed an important network of local and international collaborations with biologists, physicists and computer scientists. In particular:

- IMoPA (UMR 7567 CNRS-UL, Nancy) : Ingénierie Moléculaire et Physiopathologie Articulaire, molecular and structural biology, RNAs and GAGs.
- DynAMic (UMR 1128 INRAE-UL, Nancy) : Dynamique des Génomes et Adaptation Microbienne, mécanismes of horizontal transfer of antibioresistance.
- LPCT (UMR 7019 CNRS-UL, Nancy) : Laboratoire de Physique et Chimie Théorique, simulations by molecular dynamics.
- CHRU Nancy: CIC-P ; Centre d'Investigation Clinique Plurithématique, molecular mechanisms of heart and kidney failure.
- TUM (Technical University Munich, Allemagne) : Department of Physics, (Pr. Martin Zacharias), biophysics, coarse-grained docking ; Department of Chemistry, (Pr. Michael Sattler), NMR and RNA-protein interactions.
- VUB (Vrije University Brussels, Belgique) : Bio2Byte, (Pr. Wim Vranken), design of new RNA-binding proteins.

We invite those interested to get in touch very quickly with Marie-Dominique Devignes (team leader) on the basis of a quick presentation of their motivation and a link to their web homepage. International mobility experience after the thesis is an essential asset for this type of recruitment.

marie-dominique.devignes (at) loria.fr

¹ capsid.loria.fr

² <https://www.dgdr.cnrs.fr/drhchercheurs/concoursch/default-fr.htm>

³ www.inria.fr/fr/starting-research-positions