

## Offre de thèse – 2024-2027

### *Thèse MÉRISME : Membranes Et Récepteurs matriciels ; Interactions par Simulations Multi-Echelles*

**Sujet :** La modélisation dynamique de systèmes moléculaires à l'échelle mésoscopique représente un enjeu au niveau des interfaces matricielles. En effet, à cette échelle, il n'existe pas d'outils d'observation directe et les simulations permettent de mieux comprendre les acteurs moléculaires de ces interfaces et leurs impacts dans diverses pathologies, notamment associées au vieillissement. Dans cette optique, l'unité MEDyC a développé l'outil DURABIN basé sur la dynamique des corps rigides. Cependant, la représentation membranaire de l'outil DURABIN est succincte et le projet de la thèse MERISME vise à paramétrer/améliorer DURABIN pour l'étude de la dynamique des protéines membranaires via le développement d'une approche multi-échelle (tout atome AT, gros grains CG et corps rigides CR). Une représentation plus fidèle de la membrane est importante car il a été montré que la composition et l'organisation de celle-ci joue un rôle fonctionnel important et que des protéines membranaires de grandes tailles comme les intégrines, CD44 ou CD36, les métalloprotéinases ou l'EBP du Complexe Récepteur de l'Elastine présentent une affinité pour des domaines de la membrane plasmique. Les techniques de modélisation permettront de mieux comprendre les mécanismes d'activation et de recrutement des récepteurs matriciels à la membrane.

Ce projet implique des méthodes bioinformatiques avec la construction de modèles (protéiques et membranaires) et leurs simulations numériques (dynamiques moléculaires et browniennes) à différentes résolutions (AT, CG, CR); et des développements informatiques avec l'utilisation de Unity et de Blender pour ajouter de nouvelles fonctionnalités à DURABIN. Ce projet fait de plus appel à des connaissances en biochimie et en biophysique. Les calculs de dynamique moléculaire seront principalement réalisés sur le serveur régional Romeo.

**Candidature :** Le(la) candidat(e), bio-informaticien(ne) ou informaticien(ne) devra avoir de bonnes connaissances de programmation c++, bash et python sous linux. Il intégrera une équipe de biologistes, bioinformaticiens et biophysiciens d'une dizaine de personnes. Le(la) candidat(e) recruté(e) disposera de compétences en informatique, bioinformatique et en biologie structurale. La thèse devrait idéalement commencer au 1<sup>er</sup> septembre ou au 1<sup>er</sup> octobre 2024.

Le(la) candidate doit fournir une lettre de motivation et un curriculum vitae ainsi qu'une lettre de recommandation à l'adresse [stephanie.baud@univ-reims.fr](mailto:stephanie.baud@univ-reims.fr)

**Mots-clés :** calcul scientifique, modélisation moléculaire, dynamique moléculaire, représentations multi-échelles

**Équipe – lieu :** Équipe Modélisation Moléculaire et Imagerie Multi-échelle (MIME)  
Bat. 18, Campus Moulin de la housse, 51100 Reims

**Directeur de thèse :** Pr. Stéphanie Baud (03 26 91 33 20, [stephanie.baud@univ-reims.fr](mailto:stephanie.baud@univ-reims.fr))

**Co-directeur :** Dr Jean-Marc Crowet, maître de conférences

**Co-encadrant :** Dr Hua Wong, ingénieur de recherche



## Thesis offer – 2024-2027

### ***MERISM Thesis: Membranes and Matrix Receptors; Interactions by Multi-Scale Simulations***

**Subject:** The dynamic modeling of molecular systems at the mesoscopic scale represents a challenge at the level of matricellular interfaces. Indeed, at this scale, there are no direct observation tools and simulations allow us to better understand the molecular players in these interfaces and their impacts in various pathologies, particularly associated with aging. With this in mind, the MEDyC unit has developed the DURABIN tool based on the dynamics of rigid bodies. However, the membrane representation of the DURABIN tool is succinct and the MERISME thesis project aims to parameterize/improve DURABIN for the study of the dynamics of membrane proteins via the development of a multi-scale approach (all atom AT, large grains CG and rigid bodies CR). A more faithful representation of the membrane is important because it has been shown that its composition and organization plays an important functional role and that large membrane proteins such as integrins, CD44 or CD36, metalloproteinases or the EBP from the Elastin Receptor Complex have an affinity for plasma membrane domains. Modeling techniques will provide a better understanding of the mechanisms of activation and recruitment of matrix receptors to the membrane.

This project involves bioinformatics methods with the construction of models (protein and membrane) and their numerical simulations (molecular and Brownian dynamics) at different resolutions (AT, CG, CR); and IT developments with the use of Unity and Blender to add new features to DURABIN. This project also calls on knowledge in biochemistry and biophysics. Molecular dynamics calculations will mainly be carried out on the regional Romeo server.

**Application:** The candidate, bioinformatician or computer scientist, must have good knowledge of C++, bash and python programming under Linux. He will join a team of biologists, bioinformaticians and biophysicists of around ten people. The recruited candidate will have skills in computer science, bioinformatics and structural biology. The thesis should ideally begin on September 1 or October 1, 2024.

The candidate must provide a cover letter and a curriculum vitae as well as a letter of recommendation to [stephanie.baud@univ-reims.fr](mailto:stephanie.baud@univ-reims.fr)

**Keywords:** scientific computing, molecular modeling, molecular dynamics, multi-scale representations

**Team – location:** Molecular Modeling and Multi-scale Imaging (MIME) Team  
Bat. 18, Campus Moulin de la Housse, 51100 Reims

**Thesis director:** Pr. Stéphanie Baud (03 26 91 33 20, [stephanie.baud@univ-reims.fr](mailto:stephanie.baud@univ-reims.fr))

**Co-director:** Dr Jean-Marc Crowet, lecturer

**Co-supervisor:** Dr Hua Wong, research engineer