

**PROPOSITION DE STAGE**  
**Année Universitaire 2014– 2015**

A envoyer à Mr Taboureau O:

[olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr](mailto:olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr)

**Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:** Marcel Hibert

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : UMR 7200 CNRS

Adresse précise du Laboratoire :

Laboratoire d'Innovation Thérapeutique UMR 7200 CNRS

Université de Strasbourg Labex Médalis Faculté de Pharmacie, CS 60024, F-67401 Illkirch

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) :

E-mail :

---

**Nom du Responsable du stage :** Dr. Esther KELLENBERGER

Numéro de Téléphone +33 3 68 85 42 21

Numéro de Télécopie +33 3 68 85 43 10

E-mail : [ekellen@unistra.fr](mailto:ekellen@unistra.fr)

---

**Titre du stage :** Veille scientifique des programmes de drug design

**Description du sujet (quelques lignes):**

- une veille scientifique des programmes de drug design disponible sur GPU, ce qui implique un travail bibliographique et une enquête pour connaître la disponibilité de ces programmes

- un benchmarking du programme BINDSURF, programme de docking fonctionnant sur GPU. Le test sera réalisé sur la sc-PDB, c'est-à-dire près de 10000 complexes ligand-protéine. L'accès au cluster GPU implique l'utilisation d'un centre de calcul HPC (système de file d'attente slurm). Les compétences pratiques visées sont: maîtrise du programme de docking, adaptation si nécessaire des formats des entrées pour le docking, automatisation d'une tâche simple sur cluster GPU, connaissance des critères d'évaluation d'un programme de docking.