



**Marketing Services
Direction Recherche**

Offre de stage

Conception d'un espace de molécules pour aider à la compréhension de phénomènes physico-chimiques d'intérêt.

Durée: 6 mois, à partir de janvier-février 2018.

Localisation: TOTAL MS - Centre de Recherche de Solaize, Solaize, France (Lyon area)

Lien: <http://careers.total.com/>

Référence : 9870BR

Description du poste

Situé près de Lyon, le **Centre de Recherche de Solaize** (CRES) de la branche Marketing & Services du groupe Total, a pour vocation la recherche de produits pétroliers tels que les lubrifiants, carburants, bitumes et fluides spéciaux.

Le CRES travaille également sur la formulation de nouveaux produits différenciants, innovants et à forte valeur ajoutée pour nos clients.

Le département Chimie et Procédés des Bio Composants développe des biomolécules et apporte aux clients des solutions biosourcées et a pour objectif également de développer de nouveaux biocomposants à travers une méthodologie de rétro-synthèse prédictive.

CONTEXTE ET MISSIONS :

Dans le cadre du développement de sa plateforme de chémoinformatique, le département CPB (Chimie et Procédés des Bio-composants) souhaite développer un outil de visualisation et d'aide à la conception de molécules d'intérêt pour TOTAL.

Les missions qui seront confiées sont les suivantes :

- Sélection des molécules et des propriétés d'intérêt, à partir de sources de données publiques et internes du groupe
- Sélection de descripteurs chimiques à considérer
- Organisation des données et création de modèles prédictifs de relations structures/propriétés
- Sélection d'une méthode de représentation des données (ACP, SOM, GTM)
- Aide à l'interprétation des différents espaces créés (expérimentaux et *in silico*)

MOYENS ET OUTILS :

- Application de diverses méthodes d'apprentissage statistique, data science et de chémoinformatique
- Utilisation d'outils informatiques pour le requêtage de bases de données, l'analyse et la visualisation de données, la manipulation de structures chimiques.
- Le (la) stagiaire sera en collaboration avec les chimistes du laboratoire et les formulateurs produits TOTAL afin d'interpréter les résultats d'analyse et guider la synthèse de nouvelles molécules.

INTERETS POUR L'ETUDIANT :

- Immersion dans un des laboratoires pilotes du développement de bioproduits chez TOTAL
- Proximité du développement produit chez TOTAL Marketing & Services et du développement biotechnologies chez TOTAL Raffinage Chimie / Biofuels
- Sujet pluridisciplinaire, à la frontière entre la data science et la chimie, mettant en pratique des méthodes de pointe dans les deux domaines.

PROFIL RECHERCHE :

Formation : Université ou école d'ingénieurs, formation mixte chimie / physique / mathématiques appliquées / informatique

Niveau d'études : Bac+5

Compétences techniques :

- Bonnes connaissances en statistiques et mathématiques appliquées, notamment dans le domaine de l'apprentissage statistique et data science
- Bonnes connaissances générales en chimie (chimie organique en particulier) et physico chimie
- Compétences en programmation appréciées (Python)
- Une première expérience en chémoinformatique serait un plus.

Compétences comportementales :

- Goût pour la pluridisciplinarité
- Capacité à comprendre et mettre en relation des concepts physiques, chimiques et mathématiques
- Capacité à communiquer ses résultats à des personnes de profils techniques variés
- Esprit d'initiative, autonomie, force de proposition et esprit d'équipe

Compétences linguistiques : Bonne maîtrise du français et de l'anglais.