



Offre de stage KREATiS 2022 n° 2

Implémenter en langage Python la génération automatique de rapports QPRF au format ms.docx

Type de stage : stage de programmation

Date de début : à partir de février 2022

Durée : 3 mois (12 semaines)

Lieu : aux bureaux de KREATiS et/ou en télétravail

Niveau d'études : Bac+2/ Bac+3

Contexte

KREATiS est une entreprise développant des modèles de prédiction *in silico* pour les propriétés des substances chimiques, telles que le coefficient de partage octanol-eau, la solubilité dans l'eau ou la toxicité sur les poissons. Dans le cadre des requêtes client pour prédire les propriétés de substances chimiques, les résultats des prédictions sont rendus sous forme d'un ensemble de rapports au format réglementaire, i.e. QPRF (QSAR Prediction Reporting Format), QMRF (QSAR Model Reporting Format) et rapport d'étude.

Description du stage

L'objet de ce stage est d'implémenter un ensemble de fonctionnalités permettant la génération automatique de rapports QPRF à partir de données en entrée fournies par des outils de prédiction. Les fonctionnalités nécessaires pour la réalisation du projet sont : (1) une base de données comportant des informations fixées, utilisées pour l'assemblage du texte des paragraphes de QPRF, (2) un programme qui génère le rapport QPRF au format ms.docx en respectant l'ensemble des styles visuels adoptés par KREATiS, (3) production d'une documentation technique permettant la prise-en-main de l'outil et son maintien programmatique par la suite, (4) dans le cas où un rapport de stage soit exigé par l'institution de formation du stagiaire, ce rapport devrait être préparé et soumis aux encadrants KREATiS pour correction et modifications au minimum 10 jours ouvrés (2 semaines calendrier) avant la date due pour le rendu du rapport, et en conséquence, le rapport doit être soumis aux encadrants KREATiS pour validation finale au minimum 3 jours ouvrés avant la date due du rapport.

En particulier, le/la stagiaire aura pour mission de :

1. Implémenter la base de données de type relationnel contenant les différents éléments nécessaires à l'assemblage du QPRF. Le système de gestion requis pour la mise-en-place de la BDR est PostgreSQL. (*calendrier de réalisation de l'étape : (4° / 12 semaines)*)
2. Concevoir et implémenter en Python les algorithmes pour :
 - l'interactions avec la SGBDR. (*calendrier de réalisation de l'étape : (4° / 12 semaines)*)
 - la lecture des données en entrée (texte brut et csv) fournis par l'utilisateur. (*calendrier de réalisation de l'étape : (5° / 12 semaines)*)
 - la conversion d'unités pour l'harmonisation du rapport (l'utilisation de plusieurs logiciels de prédiction peut fournir un ensemble de résultats exprimés en unités différentes). (*calendrier de réalisation de l'étape : (7° / 12 semaines)*)

- le choix du texte prédéfini (DBR) à reporter selon la gamme de grandeur des prédictions. (*calendrier de réalisation de l'étape : (7° / 12 semaines)*)
 - la génération du rapport QPRF au format ms.docx en respectant le style visuel adopté par KREATiS. (*calendrier de réalisation de l'étape : (10° / 12 semaines)*)
3. Rédaction de la Documentation permettant la pris-en-main de l'outil par un utilisateur non-programmeur, et contenant une description technique permettant aux programmeurs d'assurer le maintien et la continuité de l'outil. (*calendrier de réalisation de l'étape : (12° / 12 semaines)*)

Le stage se déroule dans le cadre d'un projet interne déjà en cours. L'état d'avancement du projet interne aurait permis la mise-en-disposition pour la date de commencement du stage (à partir du mois de février 2022) les données brutes à intégrer dans la BDR, ainsi que l'élaboration de l'architecture de la BDR. Ainsi le/la stagiaire aura pour charge l'implémentation de la BDR, néanmoins, des modifications motivées et pertinentes de la BDR à l'initiative du/de la stagiaire seront les bienvenues.

En ce qui concerne le reste des fonctionnalités attendues pour accomplir le but du projet de stage, le/la stagiaire aura à charge l'initiative de décider de leur conception en respectant quelques limites techniques imposés. Ces limites étant : programmation exclusivement en Python >3.5, autres langages de programmation seront tolérés si Python n'est pas utilisable pour une des étapes du projet, l'outil doit être fonctionnel dans un environnement Windows (et de préférence aussi sous Linux), une documentation technique décrivant la conception de l'outil et ces particularités est attendue.

Lors de ce projet le/la stagiaire aura l'opportunité d'améliorer ses compétences et de pratiquer la programmation de bases de données relationnelles et l'automatisation de tâches laborieuses de bureautique. En participant à ce projet, le/la stagiaire contribuera au principe des 3 Rs (raffiner, réduire et remplacer les études sur animaux) et à une évaluation plus efficace de la dangerosité des substances auxquelles les humains et l'environnement sont exposés.

Le/la stagiaire sera encadré par un docteur en biologie et biologie computationnelle qui est le développeur de la plateforme iSafeRat® SESAME-3D. Le travail dans les bureaux de KREATiS ou le télétravail sont possibles ; une présence régulière au sein des bureaux de KREATiS est fortement souhaitée. La convention de stage aura les termes suivants : la signature d'Accord de confidentialité entre KREATiS et le/la stagiaire, une indemnité horaire selon la base légale pour un stage selon le niveau d'études du/de la stagiaire, le temps de travail serait de 35 heures/semaine, tickets resto pour les jours travaillées et une prise en charge par l'employeur de 50% des frais mensuels de transport en commun.

Connaissances et compétences recherchées

- Python, SQL, Microsoft Office
- Programmation dynamique
- Anglais (essentiel pour une documentation fructueuse)
- Capacité à travailler et communiquer dans une équipe pluridisciplinaire

Si vous êtes intéressé(e), merci de nous envoyer votre candidature (CV et lettre de motivation) à l'adresse suivante : zlatomir.todorov@kreatis.eu et en indiquant la référence **K2202AUTOQPRF** dans le titre de votre e-mail.

Une opportunité en plus, KREATiS est susceptible de proposer un futur contrat d'apprentissage/alternance si les compétences et les motivations du/de la stagiaire au cours de notre collaboration sont appréciées.

23 rue du Creuzat – ZAC St Hubert - 38080 L'ISLE D'ABEAU - FRANCE

Email: contact@kreatis.eu