

Proposition de stage (2025) :

Portage et développement sur un logiciel d'analyse de spectrométrie de masse

L'utilisation nouvelle de faisceau de nanoparticules d'or énergétiques permet d'analyser tous types de surfaces (métallique, organique et minérale) et fournit des analyses riches et complexes. Les applications sont donc nombreuses et variées dans des domaines tels que la biologie, les semi-conducteurs, les matériaux accélérateur ou encore les météorites. La plateforme Mosaic-Andromède est équipée d'un accélérateur électrostatique 4 MV, d'une source d'ions AuSi de type LMIS (Liquide Métal Ion Source) et d'un spectromètre de masse par temps de vol. La conception et le développement du spectromètre de masse ont été réalisés par une équipe de recherche du laboratoire (FIIRST).

Le logiciel open source mMass disponible sous GitHub est utilisé par l'équipe FIIRST off-line pour analyser les spectres de masse obtenus par la plateforme. Cependant, d'une part, ce logiciel déjà ancien est écrit en Python 2.7 et, d'autre part, il manque des fonctionnalités qui seraient particulièrement utiles aux utilisateurs.

L'objectif du stage est d'adapter mMass aux besoins des utilisateurs de l'équipe FIIRST. La première étape consistera à porter le code de Python 2.7 à Python 3.12. Dans une seconde étape, un travail de rétro engineering sera effectué afin de comprendre les algorithmes mis en œuvre pour l'étalonnage des spectres et l'identification des pics. Ces algorithmes seront traduits en langage clair à destination des utilisateurs. Enfin, le stagiaire s'attachera à améliorer l'ergonomie du logiciel et à ajouter de fonctionnalités, notamment pour les E/S, en conformité avec le cahier des charges qui lui aura été fourni.

Prérequis : bonne pratique de la programmation en langage Python.

Encadrement : le stage sera co-encadré par l'équipe du pôle de physique nucléaire FIIRST et le Service Développement du Département Informatique, assurant ainsi une approche intégrée entre les aspects utilisation et développement. Le Service Développement regroupe une vingtaine d'ingénieur-e-s ayant une grande expertise en développement logiciel (web et scientifique), HPC et IA.

Mots-clés : python, algorithmie, spectrométrie de masse.

Lieu du stage : IJCLab (Laboratoire de Physique des 2 Infinis Irène Joliot-Curie), Bâtiment 201, Campus Vallée (proche RER Orsay-Ville), 91405 Orsay,

Responsables du stage :

Françoise Bouvet (IJCLab, Pole Ingénierie / Département Informatique / Service Développement) : francoise.bouvet@ijclab.in2p3.fr

Isabelle Ribaud (IJCLab Pole nucléaire / Equipe FIIRST) : isabelle.ribaud@ijclab.in2p3.fr

Rémunération : Gratification de stage CNRS environ 615 € /mois, remboursement partiel des frais de transport possible.

Durée du stage : 2 à 3 mois (adaptable).