

# La recherche en STIC : défis scientifiques et domaines émergents

## Calcul Numérique

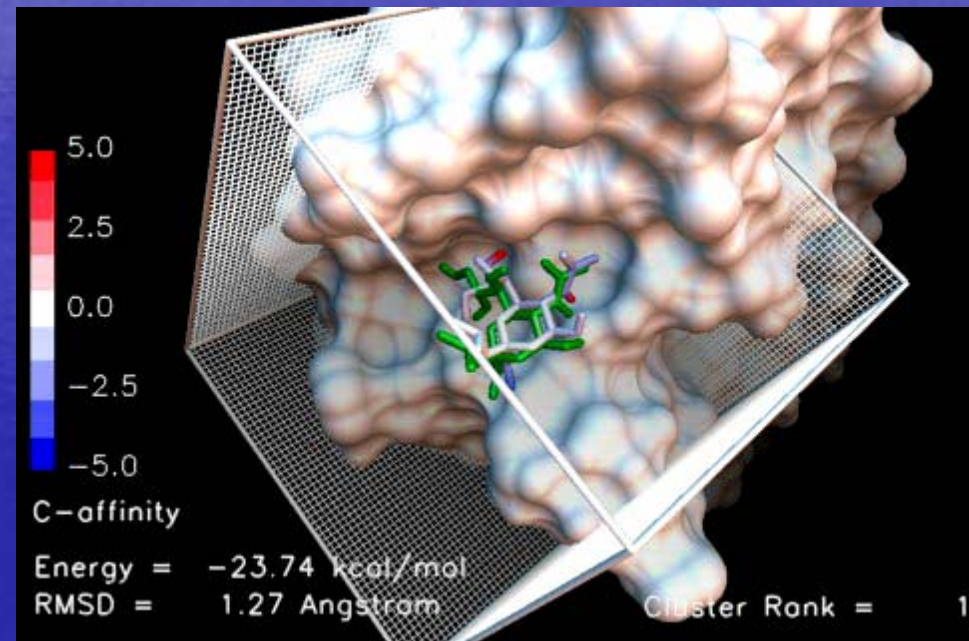
Philippe Chartier - 12 Octobre 2005

INSTITUT NATIONAL  
DE RECHERCHE  
EN INFORMATIQUE  
ET EN AUTOMATIQUE



# Un domaine émergent : la Simulation Moléculaire

- Biologie-pharmacie : repliement de protéines (protein-folding), appariement protéine-ligand (docking)
- Chimie : calcul d'enthalpie, d'énergie libre
- Physique : propagation de défauts, propriétés élastiques, localisation d'électrons dans les molécules...

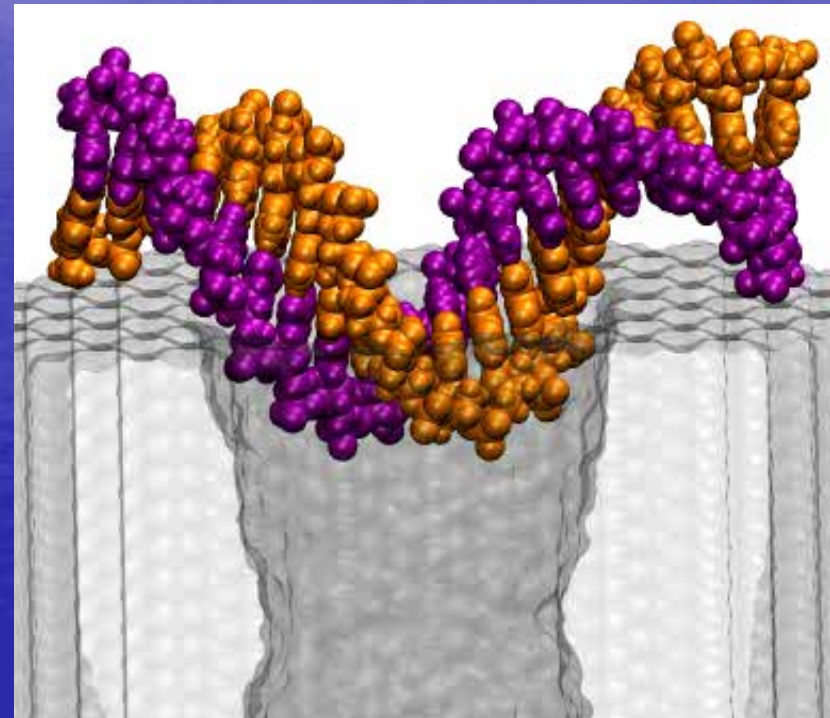


# Variété des échelles et des approches

- Echelle des atomes / échelle des électrons : dynamique classique (**Newton**) / dynamique quantique (**Schrödinger**)
- Simulation à énergie constante / température constante : approche déterministe (**Newton**) / stochastique (**Langevin**)

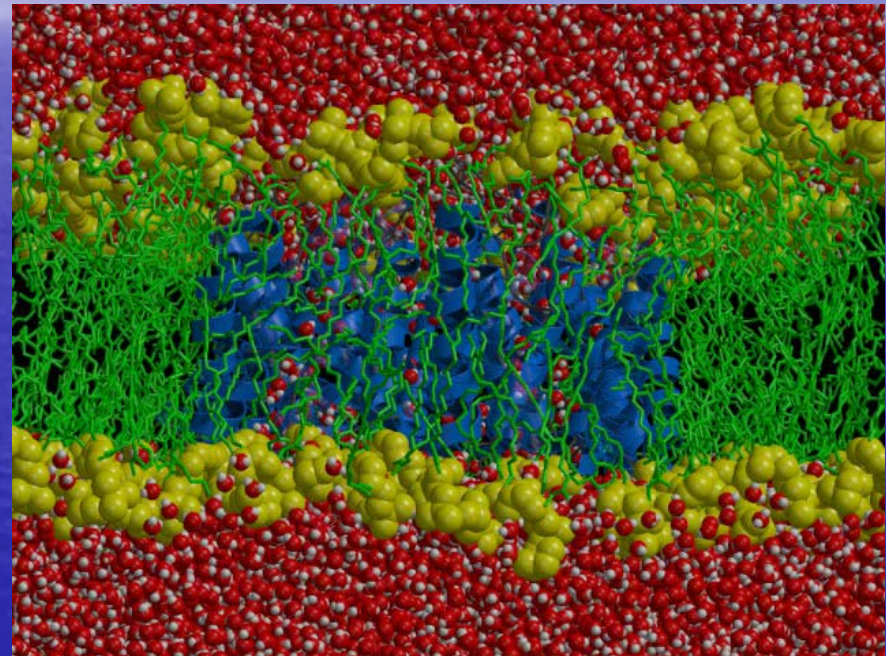
# Difficultés de nature qualitative

- Modélisation des potentiels de forces
- Préservation des structures
- Visualisation et interprétation



# Difficultés de nature quantitative

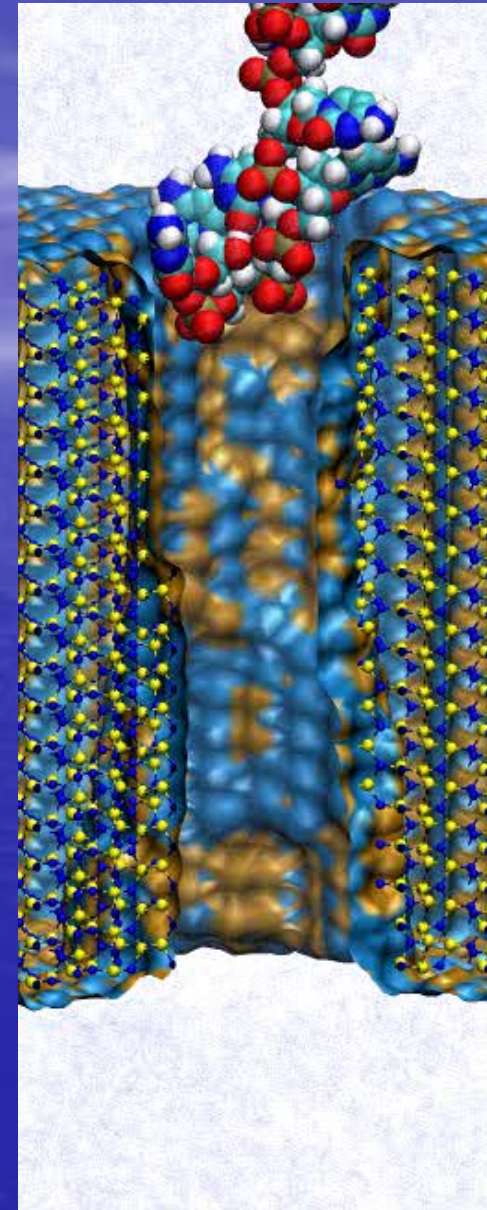
- Systèmes moléculaires énormes (1 million)
- Séparation des échelles de temps (oscillations d' 1ns~1s / simulation d' 1fs)



Canaux H<sub>2</sub>O à travers la membrane d'une cellule  
**Peter Agre** et **Roderick MacKinnon**  
Prix Nobel de Chimie 2003

# Défis scientifiques

- Analyses mathématique et numérique : intégrateurs robustes, réduction des modèles (IPSO, MICMAC)
- Algorithmique parallèle, programmation et mise en œuvre (PARIS, SAGE, ScAIApplix)
- Visualisation / interprétation



# Quelques solutions apportées par l'intégration numérique géométrique

- Précision : approche qualitative privilégiée
- Taille : réduction des modèles par approximation en paquets d'ondes Gaussien
- Structures : méthodes intrinsèquement symplectiques, symétriques, ou préservant le volume, l'énergie...