



HAL
open science

Toucher, déformer et assembler des molécules du bout des doigts

Marc Baaden

► **To cite this version:**

Marc Baaden. Toucher, déformer et assembler des molécules du bout des doigts. Le calcul intensif: technologie clé pour le futur, Les Cahiers de l'ANR - n° 3, 2010, pp.71. hal-03977530

HAL Id: hal-03977530

<https://hal.science/hal-03977530>

Submitted on 7 Feb 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Projet FVNANO

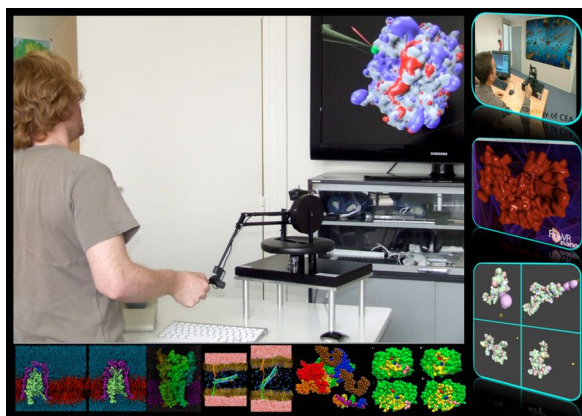
Toucher, déformer et assembler des molécules du bout des doigts

Un laboratoire virtuel pour étudier des molécules biologiques et des matériaux

Ces dix dernières années, la société a été le témoin de progrès importants en physique et en chimie appliquées à l'infiniment petit. Les avancées à l'échelle atomique et moléculaire ont été fédérées par le terme de nanotechnologies. Nos recherches dans ce domaine portent sur le développement et l'utilisation de simulations numériques pour l'étude des biomolécules ou des matériaux. Ces simulations miment par exemple le comportement dynamique extrêmement complexe de molécules comme l'ADN, support de l'information génétique, ou comme les protéines, à la fois ouvriers et briques de la cellule. Ces macromolécules biologiques assurent leur fonction en interagissant sélectivement entre elles au cours d'un gigantesque « LEGO™ » moléculaire au cœur de l'usine cellulaire. Le but de ce travail est d'aboutir à un véritable laboratoire virtuel dédié à la manipulation de structures moléculaires sur ordinateur. Les retombées de cet outil concerneront la recherche à la fois fondamentale et appliquée dans le domaine des nanotechnologies, de la recherche biomédicale et des matériaux.

La réalité virtuelle et les simulations interactives au service de la compréhension des systèmes moléculaires

Pour explorer le LEGO moléculaire décrit ci-dessus, nous développons actuellement une approche pluridisciplinaire très innovante, combinant les simulations moléculaires et les techniques issues de la réalité virtuelle. Dans cette approche, le chercheur peut observer en temps réel les mouvements qui animent les molécules durant la simulation. Il peut aussi saisir, allonger et manipuler ces molécules de manière interactive, pour étudier à la fois leur déformation et leur agencement, dont la compréhension est primordiale pour par exemple mettre en lumière les dysfonctionnements à l'échelle moléculaire qui donnent naissance à des maladies. Ceci est facilité par une manipulation très intuitive des molécules qui sont rendues palpables par un périphérique à retour d'effort. Nous avons déjà appliqué cette méthode à de nombreuses macrostructures moléculaires, notamment des groupes de protéines impliquées dans la fusion membranaire, avec des résultats scientifiques prometteurs. D'autres domaines tels que la physique des matériaux ou la conception de nano-objets pourraient bénéficier ensuite de cette approche.



Le laboratoire « FVNano » en action. La partie centrale de l'image illustre une séance de travail typique. En bas de l'image quelques exemples de systèmes moléculaires étudiés. A droite plusieurs captures d'écran.

Le projet « FVNANO » est un projet de recherche académique coordonné par le laboratoire de biochimie théorique du CNRS. Il associe aussi le laboratoire d'informatique fondamentale de l'université d'Orléans (LIFO), le projet MOAIS de l'INRIA Grenoble et le CEA/DIF à Bruyères-le-Châtel. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 556 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat marquant à cette étape du projet est le travail accompli pour rendre notre logiciel performant, une nécessité pour son utilisation interactive. Différentes boucles de simulation, de visualisation et d'interaction coûteuses en calcul et intimement liées sont à agencer. L'outil développé commence à être utilisé dans plusieurs applications scientifiques « grand défi ». Nous cherchons à avancer dans la compréhension de diverses maladies comme le botulisme ou le tabagisme, ou encore à comprendre des processus fondamentaux comme la réparation de l'ADN endommagée dans la cellule.

Production scientifique et brevets

Plusieurs publications sont parues, entre autres dans J. Comput. Chem., J. Supercomputing, IEEE VR 2008, VRST'08 et VRIPHY'S'08. Un article est à paraître à Pacific Symposium for Biocomputing. Nos travaux ont également été présentés sous forme d'affiche ou de démonstration à de nombreuses manifestations scientifiques nationales et internationales.