

## M2 Physics of Complex Systems (i-PCS) : Proposition de stage 2019-2020

<b>Laboratoires :</b>	<b>Laboratoire Jean Perrin UMR 8237 (LJP)</b> T32-33 4 <sup>e</sup> <a href="http://www.labos.upmc.fr/ljp/?article12">http://www.labos.upmc.fr/ljp/?article12</a>	<b>Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique UMR 7222 (ISIR)</b> T55-65 Pyramide,
	 <b>UFR 925 (Physique)</b>	 <b>UFR 919 (Ingénierie)</b>
	<b>Sorbonne Université et CNRS, 4 place Jussieu, 75005 PARIS</b>	
<b>Directeurs</b>	<b>Georges DEBRÉGEAS</b>	<b>Raja CHATILA</b>
<b>Responsables :</b>	<b>Jean COGNET (LJP) 01.44.27.47.12</b>	<b>Sinan HALIYO (ISIR) 01.44.27.63.84</b>
<b>e-mail</b>	<a href="mailto:jean.cognet@sorbonne-universite.fr">jean.cognet@sorbonne-universite.fr</a>	<a href="mailto:sinan.haliyo@sorbonne-universite.fr">sinan.haliyo@sorbonne-universite.fr</a>

### *Construction d'une description générale multi-échelle des biopolymères*

#### Projet scientifique :

**Contexte :** la modélisation moléculaire des biopolymères (protéines, acides nucléiques ADN et ARN) a pour objectif de les décrire, déformer et simuler pour résoudre leurs conformations, pour les étudier, seuls ou en interaction, ou pour concevoir des molécules thérapeutiques.

Une première approche très efficace consiste à décrire leurs conformations comme une tige élastique en flexion et en torsion, figurée par un ruban, au moyen de la théorie d'élasticité non-linéaire [Santini *et al.* 2009, Baouendi *et al.* 2012]. Nous disposons maintenant d'un système analytique interactif robuste capable de générer toutes les solutions du problème de repliement des tiges flexibles [Ameline *et al.* 2017, 2018] (références téléchargeables : *cf.* site web).

Une autre approche consiste à décrire leurs conformations par des trajectoires de chaînes articulées infinies. Récemment, nous avons montré que ces deux descriptions infinies, continue (tige élastique), et discrète (chaîne articulée), ont les mêmes paramètres géométriques, ce qui donne un moyen d'équivalence entre elles.

**Objectif du stage :** La première étape consiste à finaliser les correspondances détaillées entre ces deux descriptions, pour aboutir à la construction de « vraies splines élastiques 3D » (à partir de solutions de l'élasticité non-linéaire des tiges, et non d'ajustements polynomiaux par morceaux). Ces « vraies splines » présentent les avantages suivants : grandes déformations sans rupture (des liaisons chimiques), trajectoire d'énergie minimale, analyse en terme d'énergies élastiques, multi-échelles, et des propriétés de rabouillage des segments successifs du biopolymère. Plus précisément, il s'agit de faire la preuve de concept que cette approche est un nouveau point de vue, et qu'il peut rendre compte de toutes les conformations de protéines, puis traiter des conformations plus difficiles comme celles des peptides cycliques. À terme, les splines peuvent être « actives » car elles peuvent être soumises à des interactions à la disposition des utilisateurs pour toutes les questions de modélisations : reconnaissance, interaction, docking.

Ces approches de modélisation ouvrent sur de nouvelles perspectives aussi bien pour la modélisation que pour la manipulation interactive des biopolymères par la virtualisation moléculaire avec retour de force haptique.

**Techniques utilisées :** Modélisation mathématique et mécanique sur ordinateur avec *Mathematica*.

**Qualités du candidat requises :** étudiant de Master d'Ingénierie ou de Physique, un élève ingénieur, souhaitant explorer un sujet théorique à l'interface de la mécanique et de la biophysique.