

**Splines mécaniques pour la modélisation *continue* multi-échelles 3D des biopolymères**

**Contexte :** Comprendre la structure et le comportement des biopolymères (protéines et Acides Nucléiques (AN)) est très important pour déchiffrer les mécanismes de la vie. Or, les méthodes actuelles de modélisation 3D des biopolymères sont très performantes, mais butent sur deux obstacles majeurs :

- (i) la génération précise 3D de petits segments de quelques monomères (acides aminés ou nucléotides),
- (ii) l'assemblage de ces segments.

Notre objectif est de les résoudre par une nouvelle approche générale, physique et interactive.

Nous avons observé et montré, qu'à cette échelle, les petites boucles d'AN se comporte comme une tige élastique en flexion et en torsion, au moyen de la théorie d'élasticité, et que leurs repliements deviennent simples comme montré en Fig.1 [Santini *et al.* 2009, Baouendi *et al.* 2012]. La trajectoire d'une tige élastique donnée peut être imposée aux extrémités par les forces et couples appliqués, ou bien par les conditions géométriques d'encastrement. Nous avons montré qu'elle pouvait aussi être décrite par des paramètres géométriques : rayon et pas d'une hélice de cœur, et rayons de tubes enveloppes autour de cette hélice (Fig. 2) ([Ameline *et al.* 2017, 2018, téléchargeables sur site web ljp).

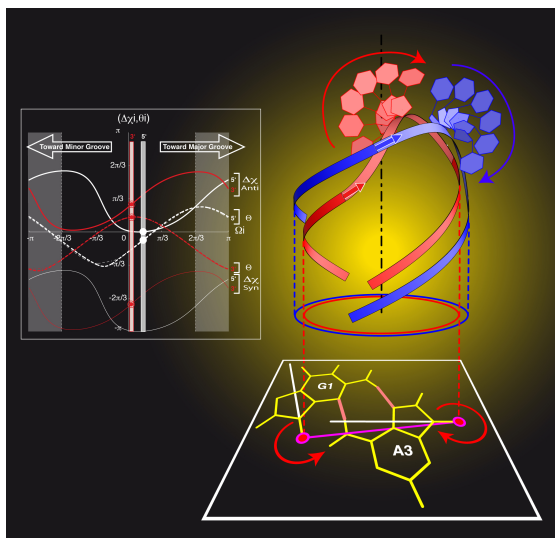
Récemment, nous avons montré que ces mêmes paramètres géométriques décrivent aussi les segments de biopolymères. Autrement dit, il est donc possible d'établir une équivalence entre les tiges élastiques (continues) et des chaînes articulées (discrètes) de biopolymères, c'est-à-dire par définition de construire des splines mécaniques. Elles devraient remplacer les splines polynomiales, ou rubans utilisés en visualisation moléculaire pour matérialiser les squelettes de biopolymères (*cf.* Fig. 2).

**Objectif du stage :** Les solutions des trajectoires de Tiges Élastiques sont bien connues, mais ne sont pas uniques. La première étape consiste à calculer des grandeurs géométriques : chiralité, enlacement, entortillement, et d'énergie qui donneront accès à une solution unique. La seconde étape vise à caractériser toutes les solutions, en s'attachant en particulier aux régions pertinentes pour les principaux éléments 3D constitutifs des :

- protéines à l'échelle des atomes
- des AN, à l'échelle des atomes ou des méta-atomes

Ces splines mécaniques devraient compléter toutes les approches de modélisation existantes. Ce sont des objets physiques et mécaniques précis qui ouvrent de nouvelles perspectives. Elles sont pertinentes pour décrire les biopolymères à différentes échelles, les rabouter, les assembler (comme des legos moléculaires), et les manipuler interactivement par la virtualisation moléculaire avec retour haptique.

**Techniques utilisées :** Modélisation sur ordinateur avec *Mathematica*, et plateformes de modélisation moléculaire (Chimera, VMD, ...).



**Figure 1 :** Construction de boucles d'AN à partir de tiges élastiques (rubans) et de rotations des nucléotides autour des tiges, pour les mettre littéralement en place.

Description Discrète		Description Continue
Biopolymère	Chaîne Articulée	Tige Élastique (Physique)

**Figure 2 : Splines mécaniques :**

Le squelette du biopolymère est une Chaîne Articulée qui peut être décrite avec les mêmes paramètres géométriques qu'une Tige Élastique == splines mécaniques.

Équipes et responsables :

Modélisation Mésoscopique des Biopolymères (LJP) : Jean COGNET / Interactions multi-échelles (ISIR) : Sinan HALIYO

Courriel : [jean.cognet@sorbonne-universite.fr](mailto:jean.cognet@sorbonne-universite.fr) Tél : 01 44 27 4712 Sites : <http://www.labos.upmc.fr/ljp/?article12>  
<https://www.ibps.upmc.fr/fr/Recherche/umr-8237-ljp/modelisation-mesoscopique-biopolymeres>