

Laboratoire LAMBE

Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement
Université d'Evry val d'Essonne

Séminaire le 05 avril 2018 à 14h30 – Salle Blanche LAMBE

Application de la théorie des graphes pour la modélisation et l'analyse moléculaire

**Franck Quessette,
Maître de Conférences**

**Université de Versailles Saint Quentin UVSQ - Université Paris Saclay
Laboratoire DAVID, Equipe ALMOST**

Les applications de la théorie des graphes sont aussi nombreuses que variées. Au cours de cette dernière décennie, la chimie est un des domaines ayant connu une large utilisation de la théorie des graphes. Un des objectifs de cette utilisation est d'identifier et de caractériser des structures des systèmes moléculaires et d'analyser leur évolution au cours du temps. Les graphes sont utilisés pour modéliser les systèmes moléculaires où par exemple les atomes représentent les sommets du graphe et les liaisons/connexions formées entre ces atomes (liaisons covalentes, liaisons hydrogène, etc.) représentent les arêtes du graphe. L'idée d'une telle modélisation est de s'abstraire de la géométrie (les positions exactes des atomes, bases, acide aminés, etc.) tout en gardant les éléments clés (les interactions) qui permettent de caractériser la structure avec un niveau de granularité choisi.

Dans le cadre d'une collaboration entre l'équipe DAVID-UVSQ et l'équipe Théorie et Modélisation LAMBE-UEVE, financée par le LABEX CHARMAT, nous avons conçu un algorithme pour l'identification des structures (conformations) des systèmes moléculaires explorées dans les trajectoires de simulations de dynamique moléculaire, à l'échelle de granularité atomique [1]. Dans l'exposé, je présenterai notamment ce projet mais également d'autres travaux effectués au sein de notre équipe et qui utilisent des techniques et des algorithmes de la théorie des graphes pour décrire les systèmes moléculaires typiquement d'intérêt en chimie et en biologie.

[1] D. Barth, S. Bougueroua, M.-P. Gaigeot, F. Quessette, R. Spezia, and S. Vial. A new graph algorithm for the analysis of conformational dynamics of molecules. ISCS 2015, pages 319–326. Springer, 2016.