



**École d'ingénieur Denis Diderot**  
Université Paris Cité

# TP Modélisation MD Gros Grain

---

Auteur : Owen GRIERE

Date : 7 octobre 2025

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Fonctions</b>	<b>3</b>
2.0.1	<code>get_arguments</code>	3
2.1	Fonctions utilisées pour le Mapping	3
2.1.1	<code>check_purine</code>	3
2.1.2	<code>centre_de_masse</code>	3
2.1.3	<code>mapping_RIA</code>	3
2.1.4	<code>formatage</code>	3
2.1.5	<code>MAPPING</code>	3
2.2	Fonctions utilisées pour le Champ de force	3
2.2.1	<code>distance</code>	3
2.2.2	<code>E_Lennard_Jones</code>	3
2.2.3	<code>E_elastique</code>	3
2.2.4	<code>compute_energy</code>	3
2.3	Fonctions pour la méthode de Monte Carlo	3
2.3.1	<code>MMC</code>	3
2.4	Fonctions de plot et d'analyse diverses	3
2.4.1	<code>analyse_T_pas</code>	3
2.4.2	<code>analyse_profil</code>	3
<b>3</b>	<b>Le Mapping</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Le champ de Force</b>	<b>5</b>
4.1	Les différents potentiels	5
4.2	Les paramètres associés	5
<b>5</b>	<b>Résultats</b>	<b>6</b>
<b>6</b>	<b>Discussion</b>	<b>7</b>

# 1 Introduction

La simulation MD est une méthode numérique permettant de suivre le mouvement de particules en résolvant les équations de Newton à partir de forces dérivées de potentiels d’interaction. Dans le cas d’une modélisation gros grain (coarse-grain), plusieurs atomes sont regroupés en une seule entité appelée « beads », afin de simplifier la description du système. Cette approche réduit considérablement le nombre de degrés de liberté et donc le coût computationnel. Elle permet ainsi d'accéder à des échelles de temps et d'espace plus grandes que celles atteignables par les simulations atomistiques classiques. Les interactions entre les billes sont modélisées par des potentiels effectifs, ajustés pour reproduire les propriétés physiques globales du système réel. Ce type de simulation est particulièrement utilisé pour étudier les macromolécules

biologiques comme les protéines où les détails atomiques ne sont pas systématiquement indispensables. La MD gros grain constitue donc un compromis entre réalisme structurel et efficacité numérique. Dans notre cas nous étudions différentes conformation d'un ARN grâce à diverses structures cristallisées (PDB). L'objectif final étant de trouver la conformation la plus stable de l'ARN. Cette recherche dépendra du mapping (regroupement de groupes d'atomes en beads pour obtenir une simulation gros grain) que nous choisirons, d'un champ de force spécifique à notre problème. Une fois les étapes précédentes accomplies nous utiliserons alors une méthode de Monte Carlo pour explorer les diverses conformations jusqu'à obtenir la conformation la plus stable, donc la plus basse en énergie.

MD simulation is a numerical method for tracking particle motion by solving Newton's equations based on forces derived from interaction potentials. In coarse-grain modeling, several atoms are grouped together into a single entity called “beads” in order to simplify the description of the system. This approach significantly reduces the number of degrees of freedom and therefore the computational cost. It thus allows access to larger time and space scales than those achievable by classical atomistic simulations. The interactions between the beads are modeled by effective potentials, adjusted to reproduce the overall physical properties of the real system. This type of simulation is particularly used to study biological

macromolecules such as proteins, where atomic details are not always essential. Coarse-grained MD therefore represents a compromise between structural realism and numerical efficiency. In our case, we are studying different conformations of RNA using various crystallized structures (PDB). The ultimate goal is to find the most stable conformation of the RNA. This research will depend on the mapping (grouping of atoms into beads to obtain a coarse-grained simulation) that we choose, and on a force field specific to our problem. Once the previous steps have been completed, we will then use a Monte Carlo method to explore the various conformations until we obtain the most stable conformation, the one with the lowest energy.

# 2 Fonctions

## 2.0.1 `get_arguments`

Cette fonction a pour objectif de récupérer l'argument '`-mapping`' qui peut être placé dans ligne d'exécution du code afin de réaliser le mapping de tous les fichiers PDB d'un dossier. Si '`-mapping`' n'est pas présent alors le mapping ne sera pas effectué. Le nouveau mapping remplace le précédent.

## 2.1 Fonctions utilisées pour le Mapping

### 2.1.1 `check_purine`

Cette fonction sert à vérifier si la sous-structure observée dans l'ARN correspond à une purine ou à une pirimidine. En effet, le mapping implique des atomes des bases azotées ainsi il est important de faire la différence entre les deux.

### 2.1.2 `centre_de_masse`

Cette fonction a pour objectif de récupérer les coordonnées d'un groupe d'atomes que l'on veut regrouper en une seule bead afin de déterminer la position de cette bead en calculant le centre de masse du groupe d'atomes.

### 2.1.3 `mapping_RIA`

### 2.1.4 `formatage`

### 2.1.5 `MAPPING`

## 2.2 Fonctions utilisées pour le Champ de force

### 2.2.1 `distance`

### 2.2.2 `E_Lennard_Jones`

### 2.2.3 `E_elastique`

### 2.2.4 `compute_energy`

## 2.3 Fonctions pour la méthode de Monte Carlo

### 2.3.1 `MMC`

## 2.4 Fonctions de plot et d'analyse diverses

### 2.4.1 `analyse_T_pas`

### 2.4.2 `analyse_profil`

### **3 Le Mapping**

En effet, un ARN se constitue d'une chaîne très similaire à l'ADN. L'ADN est une double hélice constituée de deux chaînes en opposition composé chacune d'un phosphore, d'un déoxiribose et d'une base azotée

## 4 Le champ de Force

### 4.1 Les différents potentiels

### 4.2 Les paramètres associés

## 5 Résultats

## 6 Discussion