



Vos enseignants



MODELISATION :

CATHERINE POTHIER

CHRISTOPHE RIGOTTI

Objectifs

Questions visées

Quelle est la dynamique de la dégradation de l'amidon par l'amylase ?

Comment évolue la distribution de la taille des polymères en cours de réaction ?

Quels sont les effets de la spatialisation des composés (dissouts, solides, co-localisés, à points de coupure préférentiels) ?

Modélisation - Simulation

Modélisation au niveau intermoléculaire de la dégradation de l'amidon par l'amylase

Identification des principes physico-chimiques mis en œuvre

Développement de programmes de simulation

Livrable : outils de simulation avec fiche explicative

Compétences

transversales

appréhender et analyser un problème

conduire une démarche scientifique

thématiques

simulation centrée agents

discrétisation de l'espace et du temps



simulation centrée agents

- ▶ Simulation où l'on va représenter les comportements individuels dans le temps et/ou l'espace des éléments considérés (ici chaque élément est une molécule, on simule leurs interactions et on observe à un niveau plus macroscopique l'effet résultant). (dans le sens agent-based model (ABM))

Discrétisation de l'espace et du temps

- ▶ Simulations où l'on découpe le temps et/ou l'espace. L'évolution de l'état du système n'est alors pas continue dans le temps, mais elle est simulée avec un certain pas de temps. Pour l'espace ça correspond à des localisations/déplacements des éléments se faisant par sauts sur un espace de type "grille".