

Liste des exposés pour la M2 PCMA Modélisation Multi-Echelle

1 personne qui fait l'exposée (groupe 1), 1 personne qui corrige/pose des questions (groupe 2)

Groupe 1 :

Travail à rendre : un fichier powerpoint ou pdf avec les diapositives pour la classe

Un fichier avec les commentaires (explications qui vont avec les slides)

A rendre par email avant le dimanche 5 octobre.

Groupe 2 :

Entre le 5 octobre et le 12 octobre.

Lire les fichiers assignés du groupe 1. Remplir la feuille d'évaluation pour la partie contenue/écrit.

Avoir en tête 3 questions sur le cours dont on a peut-être la réponse.

Exposé : entre 5 et 10 minutes

Introduction, conclusion, bibliographie

Objectif : expliquer aux autres étudiants une notion précise, remise dans son contexte.

Le jour de la présentation : lundi 12 octobre. Le groupe 2 évalue son binôme du groupe 1 pour la partie orale.

Deuxième session : changement de groupe, dates de rendu le dimanche 25 octobre, présentation le 2 novembre.

Sujets :

1. Modélisation des protéines, de la structure X-ray au modèle protoné
2. Coordonnées cartésiennes, internes, gros grain « coarse grained methods »
3. Champs de force
4. Champs de force pour l'eau
5. Algorithmes de minimisation
6. Algorithmes de Verlet et Verlet aux vitesses
7. Choix du pas d'intégration pour l'algorithme de MD
8. Ensembles thermodynamiques
9. Modèle de l'eau implicite
10. Conditions périodiques
11. Traitement des interactions non liées (cut-off et liste de voisins)
12. Sommation d'Ewald
13. Thermostat
14. Barostat
15. RMSD (root mean square deviation)
16. Diagrammes de Ramachandran
17. Analyse de l'Ec, Ep, T, P à partir d'une trajectoire
18. Distribution radiale
19. Simulation Monté Carlo
20. QM/MM
21. Umbrella Sampling
22. Replica Exchange MD