

**Modélisation Multi-échelle:
Modélisation des Macromolécules biologiques
Séance 8**

Cours de Master M2

Isabelle Navizet

Isabelle.navizet@u-pem.fr

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Echelle
(MSME)

Type de dynamique plus poussées

- Umbrella sampling:
- [www.amber.utah.edu/AMBER-workshop/
Talk_11_practical_umbrella.pptx](http://www.amber.utah.edu/AMBER-workshop/Talk_11_practical_umbrella.pptx)
- Replica exchange MD (REMD):
- www.amber.utah.edu/AMBER-workshop/m-remd.pptx
- Constant pH MD
- Steered MD
- metadynamics method