

Contexte

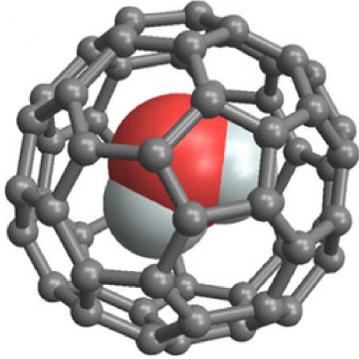


Figure 1 – Cage moléculaire pour le substrat H_2O

Cage Moléculaire : Molécule capable de capturer une autre molécule appelée *substrat*.

Utilisation : Capture de CO_2 , de méthane ; transport de médicaments ; ...

Critères : *Compatibilité* et *spécificité* de la cage moléculaire envers un substrat.

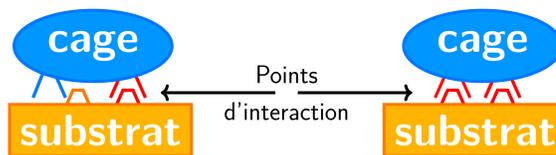


Figure 2 – Compatibilité : capacité d'interaction avec le substrat



Figure 3 – Spécificité : interaction avec un unique substrat

Objectif : Construction d'une **cage moléculaire** à partir d'un substrat cible

1. Génération des points d'interaction [1]

Modélisation :

- Graphe moléculaire :
 - Sommet = Atome (position spatiale 3D + contrainte de degré)
 - Arête = liaison forte (distance + contrainte d'angles)
- Motif : Graphe moléculaire représentant une structure moléculaire précise.

Réalisation : Ajout de motifs liants permettant d'interagir avec le substrat par des liaisons faibles.

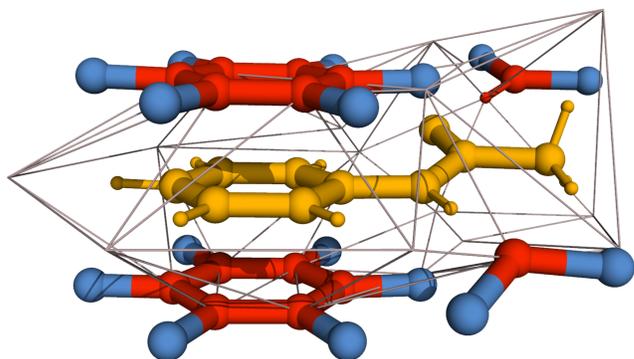


Figure 4 – Substrat : orange, Motifs liants : rouge et bleu

2. Génération de chemin entre les motifs liants

Objectif : Relier les motifs liants pour former des cages moléculaires.

Méthode : Ajout progressif de motifs non liants, afin de créer des chemins entre les motifs liants en évitant les collisions avec le substrat.

Défis :

- Trouver une solution (explosion combinatoire).
- Générer des solutions variées
- Générer des enveloppes rigides.
- Générer des enveloppes faciles à synthétiser.

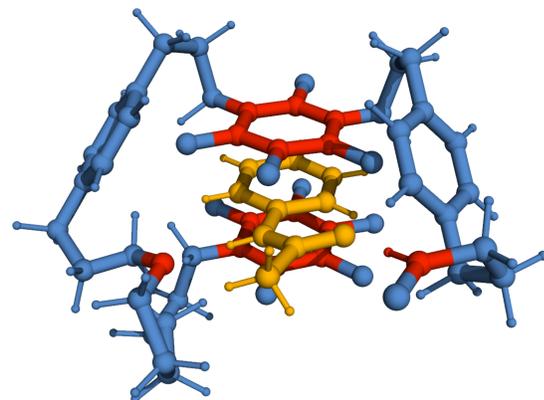


Figure 5 – Substrat : orange, Motifs liants : rouge, Motifs non liants : bleu

Problème de recherche d'une collision [2]

But : Vérifier, lors de l'ajout des motifs non liants, qu'ils n'entrent pas en collision avec le substrat ou entre eux.

Méthode : Stocker dans une grille l'ensemble des points du substrat et de la cage pouvant être en collision avec un point dans cette case.

Complexité :

- Génération de la grille : $\mathcal{O}(n)$
- Recherche d'une collision entre un point et la grille : $\mathcal{O}(1)$

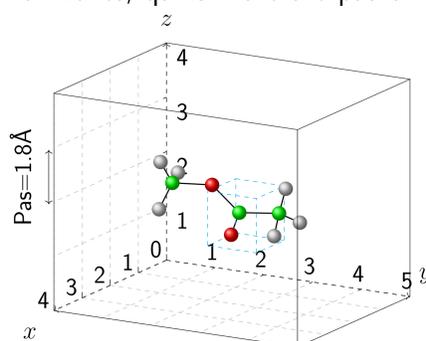


Figure 6 – Exemple de grille

Comparaison expérimentale : 100 millions de tests de collision pour un substrat de 2542 atomes avec 3 structures de données.

Algorithme	Tableau	Arbre k-d	Grille
Temps en seconde	343.08	45.93	11.39

Énumération des arbres d'interconnexion

But : Énumérer, une et une seule fois, tous les arbres d'interconnexion permettant de relier les motifs liants.

Modélisation :

- **Partition** : Une partie est l'ensemble des sommets libres d'un motif liant.
- **Arbre d'interconnexion** : Ensemble de paires de sommets de parties différentes formant un arbre couvrant des parties.

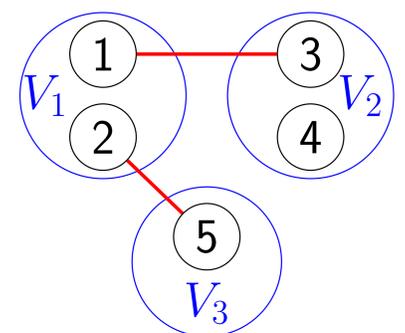


Figure 7 – Exemple d'arbre d'interconnexion

Complexité : Délai entre deux solutions : $\mathcal{O}(n^2)$, n = nombre de sommets libres.

References

- [1] Marie Bricage. *Modélisation et Algorithmique de graphes pour la construction de structures moléculaires*. phdthesis, Université Paris Saclay (COMUE), July 2018.
[2] Jon L Bentley. A survey of techniques for fixed radius near neighbor searching. Technical report, Stanford, CA, USA, 1975.