



Du modèle à l'algorithme : résoudre les défis des sciences

L'objectif du labex CalsimLab est de modéliser et de simuler numériquement les grands défis de la biologie et la chimie. Il réunit des chercheurs en mathématiques, en informatique, en biologie, en chimie, en géosciences, en mécanique et en physique. Les modèles développés permettront de concevoir par exemple de nouvelles molécules, de nouveaux matériaux ou de nouveaux médicaments. Entretien avec Pascal Frey.



École d'été "calcul aux interfaces", Roscoff 2016

Quels sont les objectifs et les ambitions du labex ?

CalsimLab se focalise en premier lieu sur deux domaines de recherche, la biologie et la chimie computationnelles. L'objectif du labex est de construire un cadre théorique cohérent permettant de concevoir de nouvelles méthodes numériques performantes

Objectif : mieux soigner avec la médecine personnalisée

L'idée d'une médecine personnalisée qui s'attache à traiter chaque patient ou groupe de patients de façon individualisée en fonction de ses spécificités génétiques et environnementales, est omniprésente. Avec des algorithmes de fouille de données et des modèles de prédiction, il est désormais possible d'analyser l'ensemble des données relatives au patient. Ceci va permettre de prévenir l'irruption de certaines maladies ou encore de prescrire un traitement personnalisé, pour une population jugée à risque, voire un individu isolé. Le couplage des modèles et des algorithmes pour analyser les données et parvenir à une meilleure compréhension des symptômes est l'une des clés de la médecine personnalisée. Mieux prescrire est synonyme de personnaliser, c'est-à-dire d'adapter, le traitement au patient.

et développer des algorithmes efficaces pour relever principalement quatre grands défis scientifiques relatifs :

- au passage à l'échelle (scalabilité) et à l'approximation de l'énergie moléculaire en chimie computationnelle. Ceux-ci nécessitent de revisiter les modèles quantiques pour développer des algorithmes performants en vue d'optimiser des systèmes moléculaires de complexité croissante ;
- à la conception de nouveaux algorithmes d'analyse en biologie computationnelle adaptés aux supercalculateurs massivement parallèles et au couplage de modèles multivariés avec des algorithmes d'inférence en génomique intégrative.

Qui participe à la dynamique de CalsimLab ?

Comme l'ensemble des disciplines à l'UPMC est potentiellement concerné par le calcul scientifique et la simulation numérique, le projet a bénéficié d'emblée d'un environnement scientifique exceptionnellement propice aux échanges. Notre proposition s'est construite autour d'un noyau initial formé de neuf laboratoires de recherche (1). Cette dynamique repose sur l'organisation et la participation à des actions telles que séminaires, groupes de travail, conférences, écoles d'été, etc. qui rassemblent des experts issus de toutes ces disciplines. Il faut toutefois noter qu'une étape cruciale a été de développer dès le départ un langage commun.

comprendre les problèmes pour computationnelles à l'UPMC



Salle de visualisation immersive

Quels sont les apports du labex ?

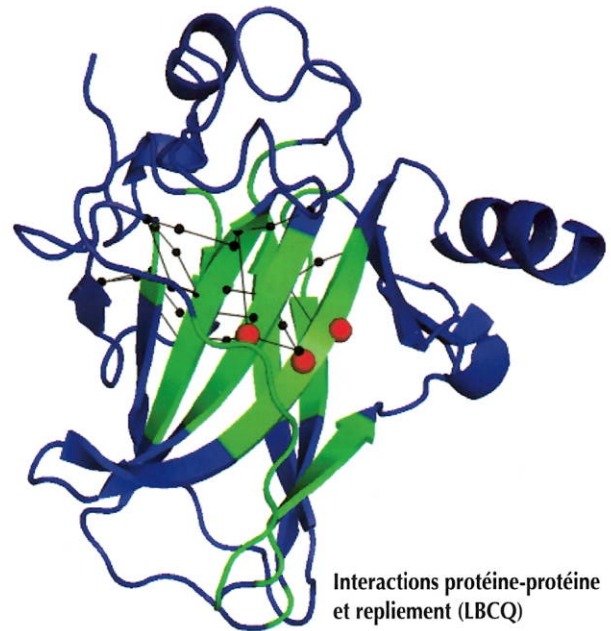
En recherche, les apports sont essentiellement liés aux avancées des quatre grands défis mentionnés. En formation, le labex a initié plus d'une vingtaine de doctorats et de post-doctorats à l'interface entre deux disciplines, permettant ainsi aux jeunes chercheurs d'acquérir une double compétence. Ces profils sont actuellement particulièrement prisés dans le milieu de la recherche académique et industrielle. Enfin, CalsimLab a permis le développement d'outils logiciels utilisés par les chercheurs du projet et mis plus largement à la disposition de la communauté scientifique en mode Open Source. Ces outils très performants devraient participer à la réduction des coûts de R&D et accélérer la mise sur le marché de nouveaux produits.

Quel est l'avenir de CalsimLab ?

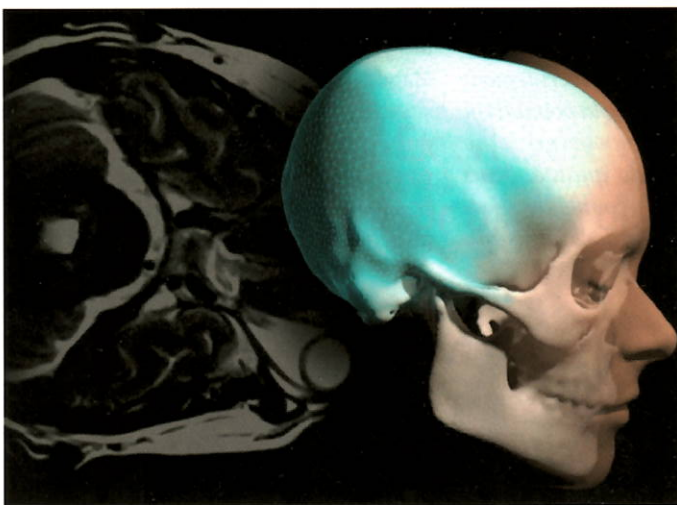
Pour mener à bien sa mission, le labex s'appuie sur les autres ressources de l'institut porteur du projet. En particulier, sur les moyens de calcul (>3000 cœurs, 80Tflops) et de visualisation haute performance cofinancés par l'equipex Equip@Meso et les projets FEDER et Sésame IdF, et hébergés à l'UPMC. Pour prolonger les actions du labex, de nouveaux axes de recherche identifiés pourront se développer au sein d'équipes-projets de l'institut des sciences du calcul et des données. Le tremplin Carnot Smiles (2) et le programme Simseo vont également contribuer au renforcement des liens avec l'industrie. ■

ger les actions du labex, de nouveaux axes de recherche identifiés pourront se développer au sein d'équipes-projets de l'institut des sciences du calcul et des données. Le tremplin Carnot Smiles (2) et le programme Simseo vont également contribuer au renforcement des liens avec l'industrie. ■

1. ISCD-Institut des sciences du calcul et des données, 2-LCT-Laboratoire de chimie théorique, 3-LQCB-Laboratoire de biologie computationnelle et quantitative, 4-LPTM-Laboratoire de physique théorique de la matière condensée, 5-LIP6-Laboratoire d'Informatique de Paris 6, 6-LJLL-Laboratoire Jacques Louis Lions, 7-D'Alembert-Institut Jean Le Rond d'Alembert, 8-LOMIC-Laboratoire d'océanographie microbienne, 9-ISTEP-Institut des sciences de la Terre de Paris.
2. Sciences Mathématiques pour l'Innovation : Labex d'Excellence Stratégique.



Interactions protéine-protéine
et repliement (LBCQ)



Facile : reconstruction faciale par ordinateur

Ce projet, né il y a deux ans dans l'une des équipes-projets de l'institut, a pour objectif de concevoir un modèle mathématique pour reconstituer virtuellement en 3D le visage d'une personne à partir d'un crâne. Cette approche originale permet d'éliminer la part de subjectivité inhérente à certaines techniques de reconstruction et trouve des applications inédites en paléontologie, histoire, criminologie, médecine légale, chirurgie, muséographie, etc. Les approches statistiques, communément employées, se fondent sur l'estimation de l'épaisseur moyenne des tissus mous du visage, à l'aide de tables fournissant cette information en fonction de divers critères (âge, sexe, origine, mode de vie, etc.). Mais la réalité est plus complexe que cela... En effet, d'importants écarts à cette moyenne sont

souvent constatés, qui rendent le processus de reconstruction délicat et pénalisent l'identification éventuelle de la personne. D'où l'idée d'introduire des connaissances fonctionnelles (muscles masticateurs) dans le modèle. En proposant une galerie de portraits 3D, qui sont autant de variations morphologiques d'une même personne, l'identification de celle-ci sera peut-être facilitée. Et fera sans doute progresser le processus de compréhension des mécanismes de la reconnaissance faciale...