Application BASTRI

Fiches Equipes

NANO-D (SR0640RR)

Algorithmes pour la Modélisation et la Simulation de Nanosystèmes
NANO-D (SR0407UR) NANO-D NANO-D (SR0849TR)

Statut: Terminée

Responsable : Stephane Redon

Mots-clés de "A - Thèmes de recherche en Sciences du numérique - 2024" : *Aucun mot-clé.*

Mots-clés de "B - Autres sciences et domaines d'application - 2024" : *Aucun mot-clé.*

Domaine : Mathématiques appliquées, calcul et simulation
Thème : Schémas et simulations numériques

Période : 01/07/2014 -> 30/09/2018
Dates d'évaluation : 15/03/2017

Etablissement(s) de rattachement : CNRS
Laboratoire(s) partenaire(s) : LJK (UMR5224)

CRI : Centre Inria de l'Université Grenoble Alpes
Localisation : Antenne Inria Grenoble - MINATEC
Code structure Inria : 071073-1

Numéro RNSR : 200820953V
N° de structure Inria: SR0640RR

Présentation

Au cours du vingtième siècle, le développement de l'ingénierie macroscopique a été grandement stimulé par les progrès des méthodes de conception assistée par ordinateur : les voitures, les avions, les bateaux, et de nombreux autres objets manufacturés sont désormais conçus et testés sur ordinateur. Les maquettes virtuelles ont progressivement remplacé les maquettes réelles, et les outils d'ingénierie numérique ont permis de réduire les coûts et les délais de production de ces systèmes macroscopiques.

Le vingt-et-unième siècle verra vraisemblablement un développement semblable *à l'échelle atomique*. En effet, les **nanotechnologies** connaissent des progrès rapides - en particulier dans la possibilité de contrôler la matière à l'échelle de l'atome. Comme pour l'ingénierie macroscopique, des outils informatiques sophistiqués seront nécessaires pour **modéliser** et **simuler** des nanosystèmes complexes, et accompagner les progrès des nanosciences.

La modélisation et la simulation de nanosystèmes naturels ou artificiels reste cependant un problème difficile, pour au moins trois raisons : (a) le nombre d'atomes en jeu peut être extrêmement grand (liposomes, protéines, ADN, membrane, etc.) ; (b) certains phénomènes chimiques, physiques ou biologiques peuvent durer longtemps (par exemple, le repliement de certaines protéines) ; et (c) certains phénomènes ne peuvent être décrits que par des modèles physiques complexes (par exemple les réactions chimiques, les atomes métalliques, etc., dont le comportement doit être décrit par les règles de la mécanique quantique). Le coût important de la modélisation et de la simulation constitue un frein majeur au développement des nanotechnologies.

L'équipe NANO-D a pour but de concevoir des méthodes algorithmiques efficaces pour la modélisation et la simulation de nanosystèmes complexes, qu'ils soient naturels (e.g. le moteur ATPase, et d'autres mécanismes moléculaires complexes du vivant) ou artificiels (par exemple les NEMS - Nano Electro-Mechanical Systems).

En particulier, l'équipe développe de nouvelles approches multi-échelles *adaptatives*, qui concentrent automatiquement les moyens de calculs sur les parties les plus pertinentes des nanosystèmes étudiés.

Axes de recherche

Relations industrielles et internationales

Contact

- **Responsable :** Stephane Redon
- **Tél :** 04.38.78.16.92
- **Secrétariat Tél :** 04.38.78.16.90

En savoir plus

- Site de l'équipe
- Site sur inria.fr
- Site du responsable
- Derniers Rapports d'Activité : 2016 , 2017 , 2018 , 2019

Documents sur la structure

- Intranet
- Privés

Décisions

- 10057 (19/05/2014) : création
- 12548 (11/12/2017) : prolongation
- 12997 (24/07/2018) : fermeture

Localisation

- **Adresse postale :** Antenne Inria Grenoble Giant Bâtiment 50C 1er et 2ème étage Minatec Campus 17 rue des Martyrs 38054 Grenoble Cedex France
- **Coordonnées GPS :** 45.200963, 5.705463