



(iii) Nous proposons une nouvelle approche, la « molecular density functional theory », MDFT, et son code associé. Développés exclusivement dans notre groupe, la théorie et les algorithmes haute performance MDFT permettent d'atteindre la précision des méthodes explicites pour le coup numérique des méthodes implicites.

Par exemple, pour calculer des énergies libres d'interaction protéine-ligand dans l'eau, ou pour calculer des solubilités en vue d'analyses ADME-TOX, des centaines d'heures de calcul sont nécessaires par simulations explicites et intégration thermodynamique. MDFT permet de calculer ces mêmes valeurs en quelques minutes seulement.

Durant son stage et selon ses goûts, l'étudiant(e) décidera d'un axe de travail :

- *applicatif*. Après quelques années de développements théoriques et numériques intensifs, MDFT rentre dans une étape passionnante de son existence puisque nous pouvons maintenant étudier des systèmes réalistes, les même qui seraient étudiés par dynamique moléculaire, mais 1000 à 10 000 fois plus vite. Selon les goûts de l'étudiant(e), nous avons, entre autres, des propositions d'applications pour l'industrie pharmaceutique ou pour l'Institut Français du Pétrole.
- *numérique*, si elle (s'il) aime coder : MDFT, que nous développons en interne, est un des flagships « haute performance » du projet européen EoCoE. Des ingénieurs CNRS et CEA « high performance computing » de la Maison de la Simulation seront nos points de contacts privilégiés. Fortran 2008, C++17, python ou Julia, Mathematica et MPI peuvent être au cœur du stage si l'étudiant(e) le souhaite.

## Références

[http://www.maisondelasimulation.fr/seminar/data/201606\\_slides\\_2.pdf](http://www.maisondelasimulation.fr/seminar/data/201606_slides_2.pdf)  
ou cherchez Daniel Borgis et Maximilien Levesque dans Google Scholar.

---

Retour par e-mail : [anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)