

L'ordinateur remplace l'éprouvette

Comment simuler un liquide

L'ordinateur peut simuler le mouvement des molécules dans un liquide et permet ainsi d'étudier, à partir d'un calcul durant de nombreuses heures, des réactions chimiques se produisant en une fraction de seconde.

Lorsque Mike Klein entreprend une expérience sur de l'ammoniaque, blouse blanche et éprouvettes sont inutiles car il lui suffit d'introduire quelques nombres dans un ordinateur et d'attendre les résultats.

Depuis dix ans, le Dr Klein ne se sert que de l'ordinateur pour ses expériences. Chimiste à la Division de chimie du CNRC, il considère que l'ordinateur est devenu le troisième élément de la recherche scientifique. «En effet», dit-il, «la Science ne disposait jusqu'ici que de deux outils de base: la théorie et l'expérience, mais maintenant, elle peut aussi s'attaquer aux problèmes chimiques par la simulation informatique».

La simulation informatique est devenue précieuse dans le domaine technique, pour la planification des systèmes et la prise de décisions. On s'en sert pour entraîner les astronautes, pour étudier de nouveaux carrefours à l'aide de modèles de circulation urbaine et, de plus en plus, pour apprendre aux étudiants en médecine à poser leurs premiers diagnostics sur des modèles représentant des malades. Leur aptitude à prendre des millions de décisions très rapidement permet aux ordinateurs de simuler un grand nombre de problèmes complexes de la vie moderne. Pour les chimistes, les physiologistes et les biologistes, la simulation

informatique est également entrée dans le laboratoire, imitant le comportement des solides, des liquides, des réactions chimiques et même de systèmes biologiques simples.

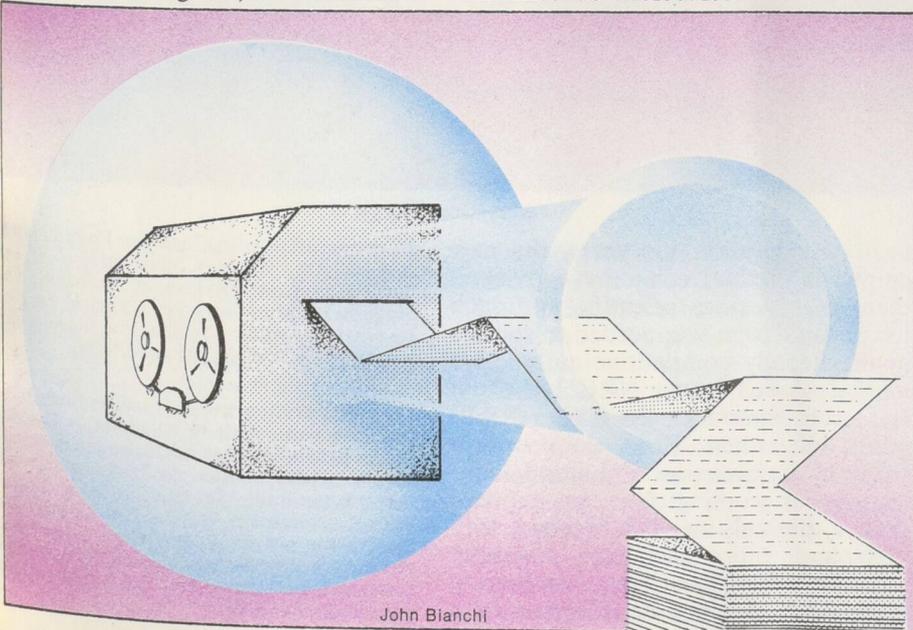
Mais pourquoi donc simuler un liquide à l'aide d'un ordinateur? Le Dr Klein nous répond: «Les systèmes auxquels je m'intéresse sont non seulement très importants mais aussi très complexes. Aucune théorie ne les explique de façon satisfaisante. Lorsqu'on étudie un système relativement simple, on peut bâtir une théorie et la vérifier expérimentalement. Mais supposons que le système soit très compliqué et que la théorie ne suffise pas à expliquer l'abondance des phénomènes réellement observés. Comment, alors, parfaire cette théorie? Tout simplement par la simulation informatique du système en question ou, à tout le moins, d'une importante partie de son comportement par une comparaison détaillée et rationnelle entre les hypothèses et le modèle informatique. Qui plus est, le modèle informatique nous fournit sur le système des données que nous n'aurions jamais pu obtenir autrement.»

Comment donc simuler des liquides à l'aide d'un ordinateur? Prenons l'ammoniaque. «Nous commençons par 'dire' à l'ordinateur ce qu'est une molécule d'ammoniaque», explique le Dr Klein, «le renseignant sur ses mouvements possibles si elle en heurtait une autre et sur les interactions qui en résulteraient. On considère de même les interactions et les collisions de centaines de molécules.»

Cette tâche extrêmement difficile exige des heures de travail, même avec un ordinateur très perfectionné. Pour un liquide réel, la simulation semble grossière étant donné qu'un verre de liquide contient plus d'un quadrillion (10^{24}) de molécules au lieu de quelques centaines. Mais avec l'aide d'un artifice mathématique ingénieux faisant intervenir «les conditions aux limites périodiques», on peut surmonter certaines des limitations imposées par l'utilisation d'un petit nombre de «molécules» dans la simulation informatique. (Pour en expliquer le principe, considérons deux miroirs parallèles entre lesquels on aurait placé un objet. Un nombre apparemment infini d'images apparaissent sur chaque miroir et semblent se fondre dans l'arrière-plan lointain. D'une façon similaire, des conditions aux limites périodiques reflètent continuellement les mouvements des molécules au cours de la simulation.)

L'ordinateur peut suivre le mouvement de plusieurs centaines de «molécules» au cours de milliers de collisions, notant au passage la constitution et le démantèlement de ces structures, qualifiées d'«orientées», au sein du «liquide». Par rapport à ce qui se passe effectivement dans un liquide, dans la simulation le déroulement des événements est ralenti. Quel aurait été en réalité le temps nécessaire à la manifestation de ceci? «Environ un milliardième de seconde», de nous répondre le Dr Klein, qui ajoute: «Cette durée infime est suffisamment longue au niveau moléculaire pour que nous puissions nous faire une idée de la structure du liquide et comprendre certains aspects de son comportement. Il y a cependant certains changements importants que l'on ne peut simuler avec un ordinateur parce que cela prendrait trop de temps. C'est ainsi, par exemple, que nous commençons seulement à étudier le processus de la congélation d'un liquide. Même avec des ordinateurs considérablement plus rapides et une diminution des coûts d'utilisation, beaucoup de temps s'écoulera avant que nous puissions suivre de tels changements dans des systèmes moléculaires. Il nous faut une meilleure méthode de simulation des mouvements et des interactions moléculaires.» □

Texte français: **Claude Devismes**



John Bianchi