



CAHIER D'ACTEUR SUR LE DÉVELOPPEMENT ET LA RÉGULATION DES NANOTECHNOLOGIES

INRIA – Institut National de recherche en informatique et automatique
Établissement public à caractère scientifique et technologique, sous tutelle des ministères chargés de la Recherche et de l'Industrie

L'INRIA est un institut de recherche public dédié aux sciences numériques – réseaux & télécoms, systèmes et logiciels complexes, perception et interaction, modélisation, simulation, visualisation. Il accueille 4 000 personnes, dont 2 900 scientifiques dont plus de 1 000 doctorants, travaillant dans plus de 170 équipes-projets pour la plupart communes avec d'autres organismes, des grandes écoles, des universités. Avec un budget de 200 M€ – dont 21 % de ressources propres – l'INRIA est un leader européen tant au niveau de la recherche (4 300 publications) que du transfert de technologie (plus de 800 contrats de collaboration en cours ; 80 équipes associées dans le monde; plus de 100 entreprises créées depuis 1984). Ses recherches trouvent des applications dans tous les secteurs d'activité : santé, transport, énergie, environnement, télécommunications, commerce...

COORDONNÉES

INRIA
Domaine de Voluceau
Rocquencourt – B.P. 105
78153 Le Chesnay Cedex
Tél. : +33 1 39 63 55 11
Fax : +33 1 39 63 53 30
www.inria.fr

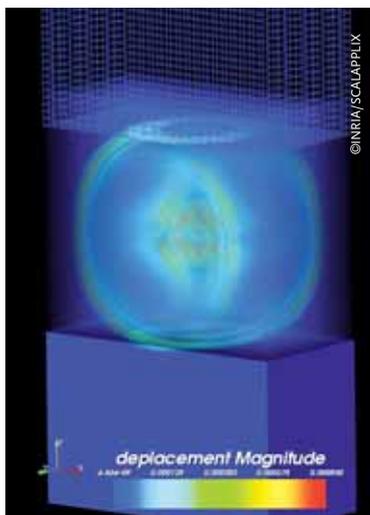
Nanotechnologies et Sciences numériques Comprendre et concevoir à l'échelle nanométrique : quels défis, quelles promesses, quelles limites ?

Les sciences numériques – mathématiques appliquées, informatique, automatique – interviennent aujourd'hui dans l'ensemble des autres sciences et participent à leur convergence. Les nanotechnologies illustrent cette convergence et s'appuient sur la capacité qu'offrent les sciences numériques de modéliser, visualiser et simuler. La conception des nanotechnologies requiert des modèles ; leur fonctionnement et leur exploitation ressort de l'ingénierie numérique et des sciences qui s'y rapportent. L'intelligence à l'échelle nanométrique est donc indissolublement liée à l'état de l'art dans les sciences et technologies numériques : une double promesse de progrès ?

En physique ou en chimie, l'entrée dans la nano-dimension a rimé avec redécouverte des propriétés de la matière... Pour les sciences numériques – au cœur d'un processus de plus en plus interdisciplinaire associant biologie, médecine, météorologie, agronomie, géologie – elle s'est traduite par une extrême densification de l'information à recueillir et à traiter. Avec un changement d'échelle radical des problématiques classiques d'architecture, de capacité de calcul, de stockage, de communication, de recherche d'information et de programmation.

Aujourd'hui, une partie de l'essor des nanosciences et nanotechnologies est conditionnée par celui des sciences numériques... qui en retour se nourrissent de la multiplication des données rendues disponibles par la maîtrise de l'échelle nanométrique, la multiplication des capacités d'observation, de communication et de traitement. À cette nano-échelle, science et technologie se conjuguent pour comprendre les propriétés de la matière et leur attribuer des fonctions (capteurs, actionneurs, effecteurs). Les sciences numériques permettent ainsi dans le même temps de comprendre et d'agir.

MODÈLES ET SIMULATIONS DANS L'INFINIMENT PETIT : UN EXEMPLE, LIBMULTISCALE



> *Simulation de la propagation d'une onde mécanique dans une tranche de cuivre (approche couplée : dynamique moléculaire/éléments finis).*

En science des matériaux, des progrès importants ont pu être réalisés en combinant la simulation numérique à plusieurs échelles et les expérimentations. L'équipe SCALAPPLIX (INRIA Bordeaux - Sud Ouest) a collaboré avec le CEA pour concevoir « LibMultiScale », un environnement de simulation informatique pour scruter le comportement de matériaux à l'échelle atomique. La simulation numérique permet d'intégrer des données variées (microscopes électroniques, sondes à balayage) à des échelles variées. Elle lie indissociablement les deux approches théorique et expérimentale et combine différents types de modèles (dynamique moléculaire et mécanique classique). On peut alors connaître, visualiser et prédire le comportement de groupes d'atomes (résistance à la pression ou à la température, formation de microfissures...). Et plus loin, concevoir des matériaux répondant à certaines caractéristiques définies comme la conductivité (nanotubes de carbone).

I. Nouveau potentiel technologique, nouveaux défis scientifiques : aux limites du modèle

Les sciences numériques sont indispensables à la compréhension des phénomènes nanométriques :

> Pour comprendre le très petit

Les sciences numériques sont indispensables à l'intégration de données hétérogènes, à la modélisation et à la simulation, exigées par l'étude du comportement atomique. Elles permettent de rendre observable les phénomènes, d'analyser, puis d'intervenir à l'échelle nanométrique.

> Pour comprendre les phénomènes complexes

Les sciences numériques, au cœur des autres sciences, aident à construire de nouveaux modèles de compréhension des phénomènes. Intégrateurs et non-réducteurs, ces modèles ont pour objectif d'appréhender

les phénomènes complexes (climatiques, biologiques, sociologiques...) dans toutes leurs dimensions, y compris nanométriques, de les expliquer et d'anticiper des évolutions possibles de ces systèmes.

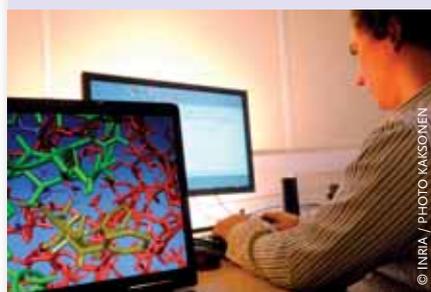
En biologie, les sciences numériques cherchent à rendre compte de façon globale de la complexité-même de certains phénomènes : synthèse de protéines mettant en jeu un très grand nombre d'atomes, phénomènes expliqués par des modèles physiques complexes (intégrant des règles de mécanique quantique), ou modèle intégratifs (modèle multi-physique et multi-échelle de « cellule numérique »).

En médecine ou en agronomie, les modèles se nourrissent de données fournies par des foules de nano-instruments de mesure (puces ou marqueurs biologiques, nanocapteurs...). Les sciences numériques assurent alors la possibilité de collecter, coordonner, intégrer, agréger, traiter, analyser, diffuser l'information recueillie par ces nano-objets communicants, afin d'en tirer les données les plus pertinentes.

> Pour agir en toute sécurité à l'échelle infinitésimale

Les sciences numériques sont indispensables à la conception de nano-systèmes, à l'élaboration de nano-réponses, au contrôle des nano-effecteurs en temps réel. Les sciences et technologies numériques peuvent contribuer à la fiabilité, la sécurité de fonctionnement de ces nano-objets, nano-outils de mesure. Elles peuvent garantir la fiabilité des protocoles de communication de ces nano-systèmes organisés en « flottes » ou en réseaux de communication. Elles sont impliquées dans la surveillance et à la vérification de nano-systèmes conçus comme des réseaux d'objets minuscules et hétérogènes, nano-systèmes de systèmes.

L'équipe de recherche **NANO-D** cherche à concevoir des méthodes algorithmiques efficaces pour la modélisation et la simulation de nano-systèmes complexes naturels (moteur ATPase) ou artificiels. Afin de réduire la durée et le volume des calculs nécessaires, les chercheurs mettent au point une approche adaptative (concentrant les moyens de calculs sur les parties les plus pertinentes des nano-systèmes).



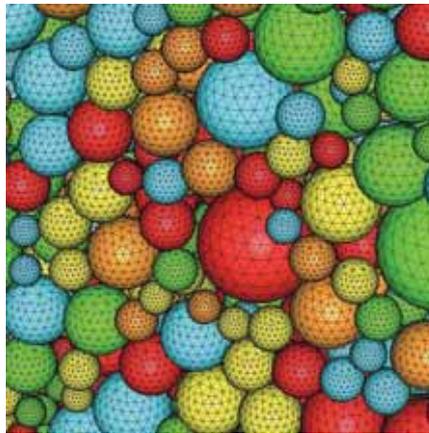
> *Étude de la protéase du VIH avec le logiciel SAMSON.*

II. Nano-systèmes et méga-défis pour les sciences numériques

> Nouveaux défis pour les sciences numériques

Naturels ou artificiels (protéines ou NEMS, Nano Electro-Mechanical Systems), les nano-systèmes complexes imposent en retour de nouveaux défis aux sciences numériques. Ils remettent à l'épreuve les méthodes, les règles, les architectures des machines de calcul, les méthodes de programmation et jusqu'aux fondements mêmes de la science informatique. Ces défis occupent aujourd'hui les chercheurs en sciences numériques :

- > défis méthodologiques : recherche de nouvelles méthodes algorithmiques et informatiques (programmation, optimisation de codes) pour intégrer les données fournies par les nouvelles technologies nanométriques.
- > défis pour l'élaboration d'architectures matérielles, logicielles et de protocoles
- > défis en matière de sûreté, de fiabilité logicielle (preuves et cryptographie à l'échelle nano) et de sécurité (interactions, échanges de données)
- > défis en matière de modélisation (volume de données hétérogènes fortement accru par la dissémination de nano-capteurs et de nano-effecteurs)
- > défis en matière de capacité de calcul (rapidité d'exécution, mobilisation de processeurs)
- > défis pour l'élaboration de modèles moins coûteux (temps, énergie, argent)



> *Modélisation géométrique et maillage d'un matériau nanostructuré.*

> L'informatique à l'heure des nano-données

En retour, les sciences numériques bénéficient d'une puissance de calcul inégalée (miniaturisation croissante des processeurs, augmentation de la puissance des supercalculateurs). Cette nouvelle puissance de calcul permet de traiter l'énorme quantité de données nanométriques fournies par des nano-capteurs, nano-objets intelligents.

Et la dynamique en marche voit même son prolongement dans l'exploitation programmée des potentialités des nanotechnologies dans une « nano-informatique » à base de nano-tubes de carbone, d'ADN-processeurs, de systèmes d'information quantiques et autres nano-composants intelligents...

Le champ des nanotechnologies intègre ainsi les résultats d'une recherche logicielle allant du fondamental à l'appliqué : nanotechnologies et sciences numériques se développent ensemble dans un commun souci de modélisation, de caractérisation et de prise en compte des exigences sociétales et environnementales.

III. Nanotechnologies et sciences numériques face aux nouveaux enjeux (santé, environnement)

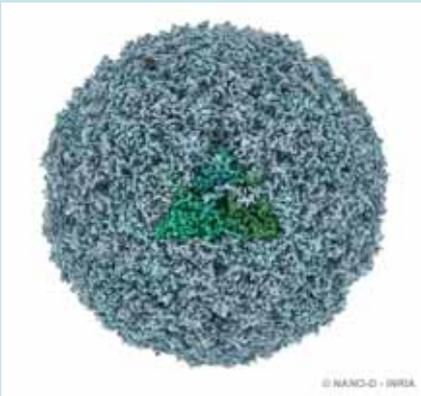
> Dans la santé : des nanos pour comprendre et prescrire

Dans le domaine bio-médical, les modèles permettent de rendre observable le fonctionnement du vivant, et notamment le fonctionnement d'organes complexes comme le cœur ou le cerveau. Il s'agit alors de mieux diagnostiquer, pour mieux prescrire en intégrant les données nanoscopiques (échanges moléculaires, fonctionnement cellulaire) fournies par la nano-imagerie, les nano-capteurs voire des laboratoires miniatures.

Les travaux en cours, nécessairement pluridisciplinaires, permettent d'envisager de nouveaux outils thérapeutiques : médicaments intelligents et traitements nano-localisés (molécules vecteurs identifiant des cellules malades) ; nano-implants et nano-stimulation neuronale.

> Nanotechnologies et sciences numériques dans l'environnement : l'avenir du couple modèle et capteur

Même à l'échelle macroscopique, les phénomènes naturels et les enjeux environnementaux réclament la prise en compte de masses de données hétérogènes et complexes, fournies au besoin par des colonies de nano-capteurs communicants (puces, bio-capteurs). Agronomie, lutte contre les pollutions ou contre les bio-agresseurs, recherche de carburants nouveaux : les pistes de recherche actuelles font appel à une capacité d'intégration d'information (visualisation, modélisation, simulation) qui fait appel à de nombreux aspects des sciences numériques (traitement de l'information en temps réel, communication, sémantique, systèmes d'apprentissage...).



© INRIA / NANO/D

> Modélisation de l'enveloppe du virus de la fièvre aphteuse avec le logiciel SAMSON.

SYNTHÈSE

Nanotechnologies et sciences numériques progressent ensemble. Ensemble elles sont impliquées dans l'intelligence de l'infiniment petit. Cette plus grande capacité à agir à une échelle nanométrique donne également plus de responsabilités : quelle manipulation peut-on faire sans risque à l'échelle du nanomètre ? Quelle qualité de la matière peut-on introduire, reproduire ou supprimer de façon systématique et industrielle, en continuant de la maîtriser ? La densification de l'information, la multiplication de nano-objets communicants requièrent une vigilance accrue : vigilance scientifique dans le recueil, la trans-

mission, le contrôle de la qualité et le traitement de ces données ; vigilance éthique dans l'utilisation de ces données (biologiques, médicales, sociétales). Il revient aux chercheurs en sciences numériques d'assurer la plus grande exigence scientifique sur les questions transdisciplinaires liées aux nanotechnologies et d'informer sur la teneur de leurs résultats. Les citoyens sauront rappeler les préoccupations sociétales à prendre en compte et les défis prioritaires à relever scientifiquement, ainsi que les exigences de rigueur et de précaution face aux risques potentiels des technologies développées.