



7. LES HÉLICES ALPHA sont des motifs fréquents dans les protéines. Elles se déroulent plus facilement dans l'eau, car les molécules d'eau remplacent les liaisons hydrogène (lignes vertes) qui maintiennent normalement l'hélice. Une molécule d'eau (verte) relie ici un atome d'oxygène (rouge) à un groupe azote-hydrogène (bleu), qui habituellement forment à eux seuls une liaison hydrogène dans l'hélice repliée.

souvent dans des sillons (voir la figure 2). D'autre part, comme la disposition des molécules d'eau dans un site actif vide reproduit souvent la géométrie et la structure du substrat de l'enzyme, on utilise parfois les simulations pour concevoir des médicaments.

Biologie réelle

Faute de techniques expérimentales adaptées et précises, on apprécie mal la fidélité des simulations de molécules biologiques en milieu aqueux : on compare des résultats expérimentaux aux seules valeurs moyennes et globales obtenues par simulations.

La diffraction des neutrons et la diffraction des rayons X sont parmi les techniques le plus souvent utilisées pour la vérification des structures obtenues par simulation des molécules biologiques en milieu aqueux. Dans une expérience de diffraction des neutrons, un faisceau de neutrons est dirigé sur un petit échantillon cristallisé ; on enregistre la manière dont les neutrons sont dispersés par les molécules de l'échantillon. Chaque espace entre les molécules agit comme une petite fente qui produit un motif de diffraction caractéristique. L'analyse de ces motifs détermine l'espace-ment des molécules. Les résultats obtenus par la diffraction des neutrons sont proches des résultats moyens des simulations par ordinateur ; les distances coïncident.

On compare également la dynamique et le comportement prévus par les simulations moléculaires aux propriétés observées en laboratoire. Par exemple, la plupart des protéines contiennent au moins une «hélice alpha», une structure due à l'enroulement de la chaîne d'acides aminés en

raison de liaisons hydrogène entre des atomes de cette même chaîne. Grâce à des expériences, nous savons aujourd'hui que le chauffage des protéines déroule ces hélices alpha. Cependant, lors des premières tentatives de simulation du comportement d'une seule hélice alpha dans le vide à des températures élevées, l'hélice demeurerait intacte. En «ajoutant» de l'eau à la simulation, M. Levitt et Valerie Daggett, de l'Université de Washington, ont réussi à modéliser le comportement réel de l'hélice alpha (voir la figure 7).

Ces simulations par ordinateur fournissent de plus en plus d'informations sur la forme de diverses molécules biologiques et sur leur fonctionnement dans les organismes vivants. Cependant, les capacités de l'informatique et le coût d'utilisation des superordinateurs limitent en permanence les simulations de molécules biologiques en milieu aqueux. Quand les chimistes et les biologistes publient des modèles de molécules biologiques dans des revues, ils dessinent en général leurs modèles avec des couleurs vives sur un fond noir. Nous savons aujourd'hui que ce fond est aussi important que les molécules elles-mêmes et qu'il devrait avoir la couleur de l'eau.

Mark GERSTEIN est professeur adjoint à l'Université Yale. Michael LEVITT est professeur à l'Université de Stanford.

Michael LEVITT et Britt H. PARK, *Water: New You See It, New You Don't*, in *Structure*, vol. 1, n° 4, pp. 223-226, 15 décembre 1993.

Mark GERSTEIN et Cyrus CHOTHIA, *Packing at the Protein-Water Interface*, in *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*, vol. 93, n° 19, pp. 10167-10172, 17 septembre 1996.

L'UNIVERS DES SCIENCES

L'UNIVERS DES SCIENCES

LES ÉTOILES

Vie et mort des soleils lointains

JAMES KALER



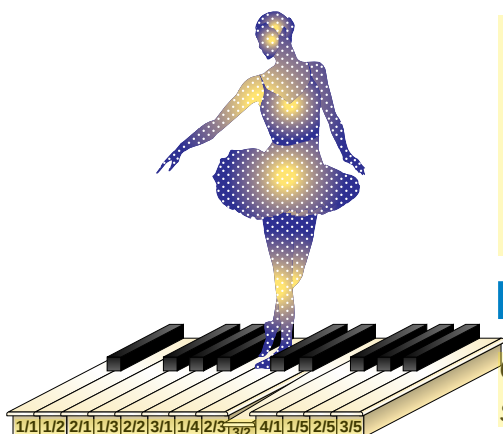
LES ÉTOILES

Ce livre expose l'origine et la nature de nos connaissances sur les étoiles, avant de les décrire dans leur dynamique et leur devenir. Les objets célestes les plus insolites, géantes rouges, supernovae, pulsars et trous noirs, s'insèrent alors naturellement dans le récit de l'évolution stellaire.

272 pages - 220 F
code 1892

**POUR LA
SCIENCE**
DIFFUSION BELIN

Bon de commande en p.98



Négligeable, mais troublant

JEAN-PAUL DELAHAYE

Certains ensembles infinis et partout denses sont négligeables... et ce n'est pas un paradoxe.

Le point n'a pas d'épaisseur : en enlevant successivement des points à une droite, nous ne la vidons jamais. Nous pouvons même en enlever 1 000 milliards sans y créer de trou véritable : un être se déplaçant dans ce qui reste, en faisant des pas aussi petits que l'on veut, pourra toujours aller de n'importe quel point à n'importe quel autre (voir la figure 1).

C'est seulement quand nous enlevons un intervalle complet à une droite que le déplacement des êtres aux trop petites jambes est impossible. En ôtant par exemple l'intervalle $[-1, +1]$ (tous les nombres compris entre -1 et $+1$), nous interdisons le passage de la partie positive à la partie négative à un marcheur dont les pas sont de longueur inférieure à 2, car il ne peut franchir le trou central, trop large.

Même la suppression d'un ensemble infini, comme l'ensemble des nombres rationnels (quotients de deux entiers), ne gêne pas la démarche à petits pas des êtres minuscules. Aussi n'est-ce pas la finitude ou l'infinitude qui permet d'élucider le problème : d'autres notions sont nécessaires pour étudier quels sont les trous négligeables de l'ensemble des nombres réels. Quelles sont ces notions ? Pouvons-nous examiner ce qui reste des ensembles « quand on leur a presque tout enlevé » ?

Le domaine des mathématiques, dénommé topologie de la droite réelle ou théorie du continu, s'est constitué pour traiter ce sujet. Cette théorie est troublante : alors que tout s'y développe de manière parfaitement rationnelle, le visiteur s'y trouve vite confronté à des situations presque paradoxales où l'intuition hésite et vacille.

La crainte de tomber sur des contradictions et l'idée préconçue que la compréhension de l'infini pris comme un tout (ce qu'on appelle l'infini actuel) était réservée à Dieu, ont longtemps paralysé les mathématiciens. Ce n'est qu'au XIX^e siècle que Bernhard Bolzano (1781-1848), Karl Weierstrass (1815-1897), Richard

Dedekind (1831-1916) et Georg Cantor (1845-1918) ont découvert que l'on peut classer et comparer les sous-ensembles infinis de l'ensemble des nombres réels sans rencontrer de contradictions. Ce fut

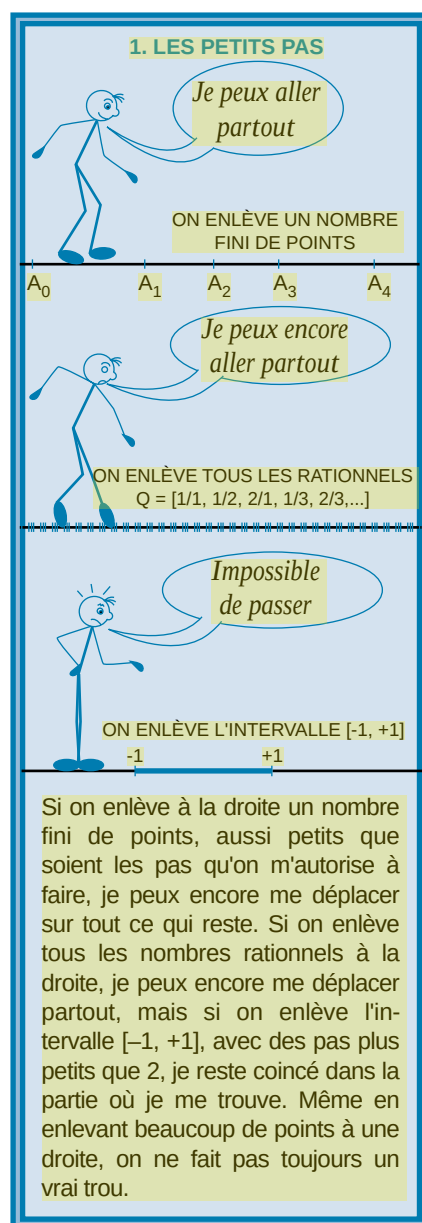
un émerveillement qui bouleversa les mathématiciens et en troubla gravement certains (Cantor est mort fou). Cela fait déjà un siècle que nous avons pénétré cet univers dangereux, et nous n'avons pas rencontré de paradoxes fatals. Après une période d'instabilité et de doute au début du XX^e siècle – période appelée « crise des fondements » –, les mathématiciens ont mis au point une théorie des ensembles qui apparaît inébranlable et sert de support à la topologie.

Est-il néanmoins si sûr que tout soit bien résolu ? Certains logiciens et philosophes soutiennent que nous sommes toujours au bord du précipice. L'heuristique de Borel que nous allons présenter et que les résultats récents de mathématiques expérimentales rendent vraisemblable est une des marques flagrantes de cette étrangeté du monde de la topologie.

LE NÉGLIGEABLE

L'heuristique de Borel se fonde sur la notion d'ensemble négligeable (ou ensemble de mesure nulle). Par définition, un sous-ensemble de l'ensemble des nombres réels est négligeable si on peut l'enfermer dans une suite – finie ou infinie – d'intervalles dont la longueur totale est aussi petite qu'on veut. Cette définition a été formulée pour la première fois en 1881 par A. Harnack dans un travail sur l'intégrale de Riemann, mais c'est Borel, en 1894, qui établira la théorie complète des ensembles mesurables.

Un point A à lui seul est un ensemble négligeable, car on peut l'enfermer dans l'intervalle $[A - 1/100, A + 1/100]$ qui a pour longueur $1/50$ (la longueur de l'intervalle $[a, b]$ des nombres compris entre a et b est $b - a$). En prenant $1/1\,000$ à la place de $1/100$, on enfermerait A dans un intervalle de longueur $1/500$, et finalement, quelle que soit la longueur L positive qu'on se donne, A peut être enfermé dans un intervalle de longueur L : $[A - L/2, A + L/2]$. Un ensemble fini de points, par exemple



Si on enlève à la droite un nombre fini de points, aussi petits que soient les pas qu'on m'autorise à faire, je peux encore me déplacer sur tout ce qui reste. Si on enlève tous les nombres rationnels à la droite, je peux encore me déplacer partout, mais si on enlève l'intervalle $[-1, +1]$, avec des pas plus petits que 2, je reste coincé dans la partie où je me trouve. Même en enlevant beaucoup de points à une droite, on ne fait pas toujours un vrai trou.