

# Fiche logiciel n° 2

## MAD

Auteurs et/ou diffuseurs : **CRPF et Aquitaine Systèmes**

### RESSOURCES

MAD est opérationnel sur :

- IBM PS/2 - Système : UNIX
- IBM 30XX, 43XX et 93XX - Système : S/370 VM ou MVS
- IBM 6150 et RISC 6000 - Système : UNIX
- Silicon Graphics toute gamme et HP 9000, 300, 800 - Système : UNIX

Logiciels nécessaires : compilateur Fortran, librairie graphique PHIGS

Périphériques : écran graphique haute définition, souris, tablette, rotateur.

### RÉALISATION

Auteurs :

Dr R. Lahana (Centre de recherche Pierre Fabre - Castres), Pr G. Grassy (UPS, faculté de pharmacie - université de Toulouse), Dr J.M. Lefour (École polytechnique - Palaiseau), Dr B. Maigret (CNRS, Strasbourg), Pr J.L. Rivail (LCT - université de Nancy), Pr B. Roux (UCB, université de Lyon).

Langage utilisé : Fortran

Volume des instructions : supérieur à 200 000 lignes

Org. ayant participé au financement : CNRS, IBM, CR Pierre Fabre + Aquitaine Systèmes

Date de la dernière version : janvier 1991

Etat du logiciel : progiciel

Version de démonstration : version bridée

Dév. prévus : dynamique moléculaire (interfaçage Amber), macromolécules, cristallographie.

### DIFFUSION

Contacteur Christophe Chamfeuil à la société Aquitaine Systèmes. Tél. : (1) 47.44.40.80

Nature de la diffusion : commerciale

Support de diff. : disquette ou cartouche magnétique

Format : binaire

Suivi du produit : assistance, maintenance et formation assurées. Une version par an. Collaborations envisageables

Conditions financières : les prix sont fonctions de la puissance de la machine. Prix spécial pour les universitaires

Obligations de l'acquéreur : licence d'utilisation, usage à but non lucratif.

Particularités techniques d'installation : installation assurée par la société ou l'utilisateur.

Réf. d'installation : - France : Servier, Delagrangé, CNET, Guerbet, universités...

- Etranger : Rotta Pharma, Lepetit, Himont, IQB, IQS, universités...

Nombre d'installations : supérieur à 60.

### DOCUMENTATION

Guide utilisateur, vidéo de démonstration, plaquette de présentation, jeux de tests.

Accueil possible des personnes intéressées au Centre de recherche Pierre Fabre.

### ADRESSES

Centre de recherche Pierre Fabre, 17, avenue Jean Moulin, 81106 Castres, tél. : 63.71.42.41

Aquitaine Systèmes, Département scientifique, Tour Elf, 2, place de la Coupole, Cedex 45, 92078 Paris la Défense. Tél. : (1) 46.14.16.00

# Fiche logiciel n° 2 - suite

## MAD

### MOTS CLÉS

Modélisation moléculaire  
Graphique moléculaire  
Chimie quantique  
Propriétés physico-chimiques

### DÉFINITION

Développé à partir de collaborations impliquant des laboratoires privés et universitaires, MAD est un outil modulaire de modélisation moléculaire. Le module de base permet la construction et la manipulation de molécules, ainsi que des outils permettant la réalisation d'analyses conformationnelles, et le calcul de propriétés telles que la lipophilie, la répartition de charges.

Le module :

MAD Tsar traite des relations structure/activité,  
MAD Chimiste concerne les calculs de chimie quantique,  
MAD Macro permet la prédiction des structures secondaires (protéines)

### DESCRIPTION

Les différents modules du logiciel fonctionnent dans un environnement "multifenêtrage" de type X-Windows, ce qui confère au produit un niveau de convivialité appréciable.

#### Description des modules

*MAD module de base :*

- construction et manipulation de molécules (organiques, protéines, polynucléotides)
- analyse conformationnelle (mécanique moléculaire), la fonction MCA permet l'exploitation aisée des résultats
- calcul de grandeurs physico-chimiques (lipophilie, potentiels électrostatiques)

*MAD chimiste :*

- calculs de chimie quantique à partir de pré- et postprocesseurs graphiques
  - méthodes semi-empiriques améliorées à partir des méthodes CNDO/2, MNDO, MINDO, AM1, PM3
- Il permet, entre autres, la simulation de spectres Raman et infrarouge, l'analyse des modes normaux de vibration et la visualisation des niveaux d'énergie ainsi que des orbitales

*MAD Tsar (tools for structure-activity relationships) :* relations structure/activité :

gènère et analyse des données à partir d'un jeu de molécules dont on essaye d'expliquer le comportement

L'information créée automatiquement contient les indices de Kier, l'analyse topologique, la reconnaissance de forme, la négentropie et la flexibilité, ainsi que diverses propriétés moléculaires (LogP, charges, RM, inertie, volume, etc.)

Toutes ces données sont ensuite transmises à un ensemble de méthodes statistiques multivariées pour extraire des modèles efficaces et prédictifs (ACP, analyse discriminante, analyse factorielle, autocorrelogrammes, classification automatique, régressions)

*MAD macro :*

Ensemble de méthodes d'analyse théorique de protéines comprenant aussi bien les diverses prédictions de structure secondaire avec évaluation de leur score que des chromatogrammes simulés

*MAD* est également un logiciel ouvert :

- une version de développement est disponible pour interfacer tout logiciel externe avec MAD
- des touches spéciales sont utilisées pour personnaliser MAD sans avoir recours au code source.

Catalogue ANL (Agence Nationale du Logiciel), BP 239, 54506 Vandœuvre Cedex.  
Tél. : 83.91.21.58 (télécopie : 83.27.76.43).