



Prof. Carlo Adamo

Equipe de Modélisation des Systèmes Complexes
LECA - UMR CNRS7575

Tél. : (33) 01 44 27 67 28
Fax : (33) 01 44 27 67 50
e-mail :carlo-adamo@enscp.fr

Pré-projet

Grille de production Modélisation de la Matière Moléculaire (Grid M³)

Ce pré-projet a pour but de créer une structure de type grille de calculs de production dans le domaine chimique de la Modélisation de la Matière Moléculaire. Cette proposition répond à une nécessité avancée par un noyau promoteur de quatre équipes de chimistes théoriciens. Il repose sur le constat suivant: la nécessité de structurer la recherche en Chimie Théorique en termes de partage de moyens (grille d'ordinateurs) et d'expertises (grille de compétences).

Dans le domaine du calcul scientifique, il est aujourd'hui reconnu que les grilles informatiques possèdent un intérêt majeur pour l'accès à des ressources distribuées hétérogènes. Celles-ci ne se substituent en rien ni aux ressources locales ni à celles des centres nationaux, mais viennent en renforcement de celles-ci. Les grilles informatiques donnent accès à des architectures plus adaptées (par exemple en termes de mémoire, type de processeur, espace disque) aux problèmes scientifiques à résoudre, en plus d'une plus grande flexibilité des temps d'exécution de travaux, comparativement à celles disponibles au niveau local et/ou national. Ce partage permet de plus une meilleure exploitation des ressources locales. Il permet également d'envisager de nouvelles études en chimie théorique qui dépassent en termes matériels et conceptuels les limites et contraintes imposées par des ressources uniquement basées sur des équipements locaux.

Au niveau informatique, cette idée de grille est déjà bien implantée dans certains centres de calculs nationaux ou européens (voir IDRIS et le réseau DEISA). Plus récemment, différentes communautés scientifiques, telles que la communauté des physiciens et celle des météorologistes, ont ressenti le besoin de ce type d'approches au niveau d'utilisateurs scientifiques (équipes de recherche/laboratoires). La Chimie Théorique Française est étonnamment absente dans ce domaine, alors que les besoins en calculs intensifs sont évidents.

Partant de ce constat, nous souhaitons créer un groupe de plusieurs équipes afin d'établir une grille de production. Celle-ci doit se développer autour d'un projet scientifique comportant à la fois un partage de compétences théoriques (modèles, algorithmes) mais également informatiques (codes de calculs).

Nous proposons donc la constitution d'une grille de production dans le domaine chimique de la **Modélisation de la Matière Moléculaire (Grid M³)**. Les objectifs de cette grille sont les suivants:

- 1) Identification des moyens informatiques (hardware et software) pour la mise au point d'une grille de production dans ce domaine scientifique.
- 2) Déploiement sur la grille des codes de calculs (quantiques ou non) gratuits (Gamess, NWChem) et commerciaux (Gaussian, ADF, AMBER) (cette liste n'est pas exhaustive).
- 3) Constitution d'une communauté autour de cette thématique scientifique

Pour mettre en œuvre ce projet, nous prévoyons :

- 1) de prendre contact avec des experts dans le domaine des grilles. En tant que chimistes théoriciens, nous possédons une longue pratique de l'outil informatique, acquise après des années d'utilisation et de développement des codes de calcul. Nous sommes malgré tout conscients de la nécessité d'interagir avec des informaticiens. A cette fin, nous avons entamé une discussion avec des experts du CINES, qui nous ont assuré de leur disponibilité en termes d'assistances logiciels et humaine.
- 2) Des contacts ont d'ores et déjà été établis avec d'autres laboratoires et grilles d'utilisateurs européens afin de partager leurs connaissances et compétences dans le domaine.
- 3) La grille sera ouverte à toutes les équipes/laboratoires français intéressés à la fois par la démarche scientifique et informatique

Les promoteurs

Carlo Adamo *Equipe Modélisation Systèmes Complexes, UMR CNRS-ENSCP 7575*

Xavier Assfeld *Equipe de Chimie et Biochimie Théoriques, UMR CNRS-UHP 7565*

Dorothee Berthomieu *UMR CNRS 5253*

Nicolas Ferré *Equipe Chimie Théorique, UMR CNRS 6264*