

ATELIER MODMOL 2007-2008

Transversalité Modélisation Moléculaire et Supramoléculaire
[INRA](#) | [CEPIA](#) | [Olivier Vitrac](#)

Contexte

Trois Ecoles Chercheurs [MODMOL](#) ont permis d'introduire les principes de la modélisation moléculaire et supramoléculaire et de mettre en place un réseau de compétences et relations. L'accent est aujourd'hui mis sur l'utilisation de moyens collectifs disponibles notamment au sein de l'institut. Dans ce contexte, une collaboration avec la [plateforme MIGALE](#) (labellisée RIO) a été mise en place. Pour les applications (Sciences du Vivant et Sciences des Matériaux) intéressant notre département, deux applications parallélisées et sous licence [GPL](#) ont été retenues et sont installées sur le cluster de calcul :

- [GROMACS](#) (GROningen MACHine for Chemical Simulations, déjà installé sur la plate-forme)
- [LAMMPS](#) (Laboratoires SANDIA, USA; installé cet été sur la plate-forme)

Objectif pédagogique

L'objectif général de cette formation est d'**introduire l'utilisation distante des deux logiciels mentionnés ci-dessus**. Après cette formation, les utilisateurs auront les rudiments pour concevoir un projet, lancer une dynamique ou minimisation et traiter des données (énergies, conformations, trajectoires).

Contenu prévisionnel de la formation

- Procédure de connexion au cluster MIGALE
- Rappels de modélisation moléculaire : champs de force, minimisation, dynamique, analyse de trajectoire
- Présentation des interfaces des deux logiciels (plus riche sur GROMACS)
- Outils pour la définition d'objets moléculaires et le post-traitement

Modalités

Formation de **deux jours** sur le site de Jouy-en-Josas lors de la **semaine du 21 au 25 janvier 2008**. Les dates définitives sont à préciser.

Public visé

Cette formation s'adresse préférentiellement aux participants des précédentes écoles MODMOL. Parce que cette formation n'a jamais été réalisée, la première session est préparée « artisanalement » et sera offerte à un public maximum d'une douzaine de personnes. L'entraide entre utilisateurs sera notamment mise en avant.

Merci de prendre contact avec olivier.vitrac@agroparistech.fr pour toute **réservation, suggestion, intervention**.