



DETAILS PRATIQUES DE L'ATELIER MODMOL 2008

Version du 21 décembre 2007 – mise à jour 06/02/08

L'atelier MODMOL a présenté plusieurs difficultés d'organisation qui sont aujourd'hui résolues. Après enquête (<http://www.doodle.ch/participation.html?pollId=5wcqgkqvss8n4nm>), les dates du **lundi 25 au mercredi 27 février sont finalement arrêtées**. La transversalité MODMOL emploiera Stéphane Teletchea (il a réalisé son post-doc sur le cluster MIGALE) pendant le mois de février pour aider à la construction et à l'organisation de cet atelier. Je remercie par avance Karim Mazeau et Hendrik Meyer qui aideront la réalisation de cet atelier par la fourniture de modèles moléculaires ou de problèmes de simulation pédagogiques.

Lieu de l'atelier : INRA, Centre de Jouy-en-Josas – Salle de formation de l'Equipe MIG.

Merci d'envoyer vos questions, commentaires et suggestions à

Thème	Correspondant INRA
GROMACS	stephane.teletchea@jouy.inra.fr
LAMMPS, organisation de l'atelier	olivier.vitrac@agroparistech.fr

Les documents pédagogiques, scripts ... seront utilisables librement après l'atelier. Les participants auront par ailleurs un compte fonctionnel sur le cluster MIGALE.

PROGRAMME

Le programme est riche et diversifié. Il s'agira essentiellement d'obtenir les rudiments pour être en partie autonome sur des outils de calculs « classiques ». Parce que les outils « libres » ne sont pas intégrés et normalisés que les outils commerciaux, certaines fonctionnalités, dont vous auriez besoin, ne seront peut-être pas disponibles. Il s'agit collectivement d'identifier ce qui est possible, ce qui doit être adapté, ce qui doit éventuellement être validé...

Lundi 25 février – 10 h30 à 12h30

Prise en main de Linux : introduction des commandes utiles pour le reste de l'atelier, accès au cluster de l'extérieur via SSH.

Formateur : Christophe Caron (Administrateur du Cluster)

Lundi 25 février – 14 h à 15 h

Principe du cluster : test, lancement d'un job et récupération des travaux

Formateur : Christophe Caron (Administrateur du Cluster), Stéphane Teletchea

Lundi 25 février – 15 h15 à 17h45

Introduction à Gromacs et première prise en main: ce qui est possible, ce qui doit être adapté

Formateur : Stéphane Teletchea

Mardi 26 février – 8h30 à 12h30

Travaux dirigés sur GROMACS : les travaux viseront à assembler une protéine dans une membrane de phospholipides en présence d'eau. Les tâches (construction, simulation, post-traitement) seront partagées entre différents sous-groupes de 2 personnes.

Formateur : Stephane Teletchea

Mardi 26 février – 14h00 à 17h30 / 2 ateliers en parallèle

ATELIER 1. Travaux d'adaptation des potentialités de GROMACS aux cas des participants. Il s'agit de particulier d'identifier les difficultés et les possibilités offertes par GROMACS pour l'application aux polyphénols et polysaccharides.

Formateur : Stephane Teletchea, Karim Mazeau (absent)

ATELIER 2. Paramétrages des champs de force. Exportation des champs de force Amber vers GROMACS et LAMMPS. Présentation des possibilités et des verrous déjà identifiés.

Formateur : Olivier Vitrac, Hendrik Meyer (à confirmer), Karim Mazeau (absent)

PS : Pour LAMMPS, il existe un utilitaire MSI2LAM qui permet de convertir tout projet existant (de la société Accelrys : Cerius, Materials Studio...) en un projet pour LAMMPS. Des démonstrations seront réalisées.

Mercredi 27 février – 08h30 à 12h30

Introduction à LAMMPS et travaux pratiques : détermination d'une température de transition vitreuse d'un système polymère monodisperse

Formateur : Hendrik Meyer (à confirmer), Olivier Benzerara (à confirmer)

Mercredi 27 février – 14h00 à 15h30

Compilation de Gromacs et Lammps 32 ou 64 bits pour la distribution libre Linux CentOS 4/5 (équivalent libre de la distribution RedHat Entreprise 4/5)

PARTICIPANTS

Il reste encore des places

<i>Alain Barot</i>	<i>INRA Rennes</i>
<i>Anne Tromelin</i>	<i>INRA Dijon</i>
<i>Claire Fargues</i>	<i>Univ. Orsay /AgroParisTech</i>
<i>Hendrik Meyer</i>	<i>CNRS, Institut Charles Sadron (Strasbourg)</i>
<i>Jean-François Gibrai</i>	<i>INRA Jouy</i>
<i>Jean-Michel Le Quéré</i>	<i>INRA Rennes</i>
<i>Karim Mazeau</i>	<i>CNRS, CERMAV (Grenoble), N'est pas disponible</i>
<i>Manuel Durano</i>	<i>CNRS+INRA</i>
<i>Marie-Madel Delage</i>	<i>INRA Rennes</i>
<i>Olivier Benzerara</i>	<i>CNRS, Institut Charles Sadron (Strasbourg), Non confirmé</i>
<i>Olivier Vitrac</i>	<i>INRA Jouy/AgroParisTech</i>
<i>Stéphane Pezenec</i>	<i>INRA Rennes</i>
<i>Stéphane Teletchea</i>	<i>INRA Jouy</i>
<i>Véronique Cheynier</i>	<i>INRA Montpellier</i>



Xavier Franck

INRA Nancy/ENGREF

INFORMATIONS PRATIQUES

Ce qui sera pris en charge

J'ai demandé un budget supplémentaire à la formation permanente INRA nationale pour prendre en charge les frais d'hébergement des agents INRA. Si cela est possible nous l'élargirons à nos collègues CNRS.

Les frais de transport restent dans tous les cas à la charge des unités.

Plan interactif de Jouy-en-Josas : http://www.jouy-en-josas.fr/iso_album/planv19.swf

Hôtels sur Jouy-en-Josas : <http://www.jouy-en-josas.fr/hebergement.php>

Hôtels proches de l'INRA de Jouy-en-Josas (petits prix)

<i>Adresse</i>	<i>téléphone / fax</i>	<i>Tarif approx.</i>
<i>BIEVRES : Auberge du Val de Bièvres 16 avenue de la Gare, 91570 Bièvres</i>	<i>Tél : 01 69 41 04 00 Fax : 01 60 19 01 77</i>	<i>39 euros petit déjeuner compris</i>
<i>VELIZY : Etap Hôtel 1 rue Petit Clamart, 78140 Vélizy</i>	<i>Tél : 08 92 68 30 67</i>	<i>40 euros</i>
<i>MASSY : Les Frères Castilho 9 rue Division Leclerc, 91300 Massy</i>	<i>Tél : 01 60 11 36 47 Fax : 01 69 53 01 77</i>	<i>30 euros</i>
<i>VERSAILLES : Hôtel le Richaud 16 rue Richaud, 78000 Versailles</i>	<i>Tél : 01 39 50 10 42</i>	<i>39.50 euros</i>

J'assurerai une navette entre Massy et Jouy. Nous pourrions également assurer des transferts en provenance de la gare TGV de Massy ou d'Orly (à condition que nous soyons prévenus suffisamment en avance).



portion de la ligne C qui joint Versailles-Chantiers à Massy-Palaiseau