



Royaume du Maroc

Centre National pour la Recherche Scientifique et Technique

Vision Stratégique
pour la
Grille Marocaine
De calcul

MaGrid

CNRST — édition 2005

Avant Propos :

Dans le cadre de la politique nationale d'appui à la recherche scientifique et technique, le **CNRST** a été chargé par le gouvernement, à travers le plan 2000-2004, de mettre en place un "centre de calcul" et ce afin de répondre à la demande en besoins de calcul, exprimée par la communauté scientifique marocaine.

Les changements intervenus récemment dans les technologies de calcul ont amené le **CNRST** à opter pour la technologie dite de "Grid Computing" et d'envisager la réalisation de ce "centre de calcul" par la mise en place d'une grille nationale (**MaGrid**).

Après une présentation du concept de grille et un exposé des motivations du projet, le présent document propose une stratégie de déploiement, un plan d'action pour l'implémentation de MaGrid, ainsi que des critères d'évaluation, des mécanismes de suivi et une estimation des coûts financiers. Une liste, non exhaustive, de domaines scientifiques à qui **MaGrid** apporterait indéniablement un plus pour les chercheurs marocains, est donnée à la fin du document.

Nous estimons qu'il est important de souligner que plusieurs membres de la communauté des compétences marocaines installées à l'étranger, experts renommés en technologie de "Grid Computing" ont déjà exprimé au **CNRST** leurs volontés et leurs engagements de contribuer à la réalisation de **MaGrid** et de faire du lobbying international en sa faveur.

Le présent document a été élaboré par une commission ad-hoc constituée par le **CNRST** à cet effet et a bénéficié de l'expertise d'un membre de la communauté des compétences marocaines installées à l'étranger.

Pour la préparation de ce document, la commission a tenu, à l'initiative du **CNRST** et dans ses locaux, deux journées de travail les 8 et 9 décembre 2005.

Composition de la commission :

Les membres de la commission ad-hoc ayant élaborée le présent document sont :

Mr. Othmane Bouhali	Université libres de Bruxelles Chercheur, membre du comité de coordination et de gestion de la grille belge BeGrid,
Mr. Driss Benchekroun	Fac. Sci., Université Hassan II-Aïn-Chock, Chercheur en physique des hautes énergies.
Mme. Rajaâ Cherkaoui El Moursli	Fac. Sci., Université. Mohammed V-Agdal, Responsable du laboratoire de Physique nucléaire.
Mr. Chaker El Amrani	FST de Tanger, Université Abdelmalek Essaadi Chercheur en "Grid Computing".
Mr. Anass Kettani	Fac. Sci. Ben-M'sik, Université Hassan II- Mohammedia, Responsable de l'unité de modélisation moléculaire.
Mme. Najia Komiha	Fac. Sci., Université. Mohammed V-Agdal, Responsable du laboratoire de chimie théorique.
Mr. Redouane Merrouch	CNRST, Responsable de la division du réseau MARWAN.
Mr. Driss Ouazar	EMI, Université. Mohammed V-Agdal, Responsable du Laboratoire d'Analyse de Systèmes Hydrauliques
Mr. Abderrazzak Sersouri	CNRST, Responsable du service des relations avec la communauté des chercheurs marocains à l'étranger.

Table de Matières :

I- La grille et ses apports	p.1
II- Motivations	p.2
III- Déploiement	p.3
III-1. Encadrement	p.3
III-2. Communication	p.5
III-3. Ressources humaines	p.6
IV- Implémentation	p.6
V- Critères d'évaluation et mécanismes de suivi	p.8
VI- Domaines scientifiques concernés au Maroc	p.9
VI-1. Les Mathématiques	p.9
VI-2. Les sciences de l'ingénieur	p.10
VI-3. La physique des hautes énergies	p.11
VI-4. La chimie théorique	p.12
VI-5. La biologie	p.13

I- La grille et ses apports :

Les besoins en puissance de calcul pour la recherche scientifique ne cessent d'augmenter. De même, la maîtrise, le stockage et la disponibilité de très grandes bases d'informations réparties géographiquement représentent un enjeu majeur pour toutes les organisations.

De plus en plus souvent, dans le cadre de grands projets, les utilisateurs doivent collaborer à partir de sites géographiquement distants. A titre d'exemple, on peut citer le cas de grandes expériences (accélérateurs de particules¹, observation de la terre) ou de grandes entreprises (automobile, aviation)...etc.

Ceci induit des besoins de puissance de calcul et de stockage inaccessibles pour un organisme seul. Le "**grid computing**" ou "**grille de calcul**" apporte une solution à cette demande en besoins de calcul.

Il s'agit d'une approche novatrice visant à fédérer des moyens informatiques géographiquement dispersés et de permettre l'utilisation partagée et optimisée des ressources ainsi fédérées. Elle a pour objet de fournir, de manière transparente et sécurisée, à des communautés partageant les mêmes objectifs (organisations virtuelles), l'accès aux ressources de calcul et de données.

De plus, à puissance de calcul égale, l'approche grille présente, en cas de panne, un grand avantage par rapport à un centre de calcul au sens classique. En effet, dans pareil cas, c'est toute la capacité de calcul qui est indisponible pour un centre classique, alors que cette capacité ne sera que partiellement affectée pour une grille.

Ce partage des ressources dans un environnement dynamique, hétérogène et multi-institutionnel est assuré par une couche logicielle appelée intergiciel (middleware en anglais) de telle manière que le système puisse être utilisé aussi facilement qu'un simple ordinateur.

Outre l'enjeu scientifique, cette technologie est au cœur de l'enjeu économique. Elle trouve un écho de plus en plus important dans

¹ Voir la partie sur la physique des hautes énergies (voir section VII-3)

plusieurs secteurs : automobile, biotechnologie, pharmacie, espace, finance (gestion des risques), énergie, etc.

Plusieurs pays ont déjà monté leur propre grille de calcul nationale. Dans ce contexte, il devient impératif de développer au Maroc une expertise en matière de déploiement, d'administration et d'utilisation des outils liés à cette nouvelle technologie.

Le Maroc ne pourra que bénéficier d'un tel projet, puisqu'il contribuera à diminuer la fracture numérique entre le Maroc et les pays développés, permettra une meilleure gestion et allocation des ressources informatiques à l'échelle nationale et dotera les institutions nationales d'un puissant outil de recherche.

II- Motivations :

Le recours à la simulation et à l'approche par le calcul est devenu chose courante et concerne actuellement toutes les disciplines scientifiques dites de "sciences dures". Et il n'est pas impensable que cette nouvelle approche de la découverte scientifique trouve prise dans les domaines des sciences humaines et sociales.

Le projet **MaGrid** ne doit pas être vu uniquement sous son angle académique. Plusieurs opérateurs non académiques peuvent être concernés sur un moyen terme. A titre d'exemple, nous citerons la météorologie nationale, l'office national de l'eau potable, l'administration de l'hydraulique. **MaGrid** peut également offrir des services au monde de l'entreprise pour l'exécution de calcul pouvant les concerner.

En outre, l'existence de **MaGrid** dotera le Maroc d'un atout supplémentaire susceptible d'attirer des industries internationales Hi-Tech qui désirent se délocaliser.

Au niveau de la recherche, les chercheurs des établissements marocains qui utilisent le calcul dans leurs travaux sont actuellement handicapés par le faible niveau des capacités de calcul qui sont à leurs dispositions, et recourent souvent à un appui logistique extérieur. Cet handicap conduisant soit à un ralentissement de l'activité de recherche,

soit purement et simplement à la non implication du chercheur dans certains domaines de recherche.

Le projet de réalisation de la grille marocaine de calcul **MaGrid** vise à pallier cet handicap et à mettre à la disposition de la communauté scientifique marocaine une plate-forme pour le calcul intensif et le traitement de grandes quantités de données.

MaGrid permettra en outre à la communauté scientifique nationale, d'augmenter ses capacités de coopération tant au niveau national qu'international, et d'être plus apte à intégrer des projets de grande envergure².

De plus, une fois que **MaGrid** sera opérationnelle, elle pourra être connectée à d'autres grilles et permettre ainsi à la communauté scientifique nationale de partager d'autres ressources de calcul. Le projet EuMedGrid, qui est une initiative Euro-méditerranéenne, a parmi ses objectifs la réalisation de cette interconnexion.

III- Déploiement :

Vu la dimension nationale du projet **MaGrid**, nous estimons, aussi bien pour le projet que pour le présent document de stratégie, qu'il serait très important de les valider au plus haut niveau et de chercher à avoir l'adhésion du plus grand nombre de partenaires potentiels.

Après cette phase de validation, le déploiement proprement dit se fera sur 3 grands axes :

- encadrement ;
- communication ;
- ressources humaines.

III-1. Encadrement :

L'encadrement a deux principales composantes :

- un comité national de gestion ;
- une autorité de certification.

² Le Maroc est déjà impliqué dans le projet international ATLAS (voir section VII-3).

III-1-a.

Le comité national de gestion aura la mission de superviser et de gérer l'utilisation de **MaGrid**. Pour ce faire, il sera notamment appelé à :

- suivre les préparatifs de lancement de la phase pilote ;
- préparer une charte de bon usage ;
- élaborer un cahier de charge (normes) pour l'accès à la grille (matériels à utiliser, logiciels à déployer, mesures de sécurités, ressources humaines,)
- définir, à intervalle régulier, une politique de développement de la grille et de son exploitation ;
- élaborer des recommandations pour une meilleure utilisation de la grille ;
- élaborer des recommandations pour l'acquisition du matériel ;
- définir les choix technologiques.

Nous proposons que ce comité soit composé :

- d'un représentant du CNRST/MARWAN ;
- d'un représentant de chaque université ;
- d'un représentant des établissements de formation des cadres ;
- d'experts marocains résidents à l'étranger.

La création de ce comité devra être la première action à entreprendre pour l'implémentation de **MaGrid**.

III-1-b.

L'autorité de certification aura pour unique mission de délivrer les autorisations (numériques) d'accès à la grille. Avant la délivrance d'une autorisation, cette autorité aura l'obligation de s'assurer que le demandeur répond au cahier de charge arrêté par le comité national de gestion pour l'accès à **MaGrid**.

Dans la perspective de connecter **MaGrid** à d'autres grilles, cette autorité doit fonctionner selon des standards internationaux, puisque toute connexion est assujettie à la reconnaissance/homologation réciproque des autorités de certification des grilles concernées.

Cette autorité devra être créée dans les premières phases du projet, comme indiqué dans le tableau du plan d'implémentation de la phase pilote (voir section IV).

Nous recommandons fortement de domicilier l'autorité de certification de **MaGrid** au CNRST, vu notamment

- le caractère national du CNRST et les missions qui lui sont attribuées ;
- le remplacement par **MaGrid** du "centre de calcul" que le CNRST était chargé de réaliser et de domicilier ;
- l'administration par le CNRST du réseau MARWAN, qui sera le support de communication au sein de **MaGrid** ;
- la participation du CNRST au projet EumedGrid³ et son futur statut d'autorité de certification pour le Maroc dans le cadre du projet EumedGrid.

III-2. Communication :

La mise en place de **MaGrid** devra être accompagnée d'une politique de communication. Cette communication visera trois publics cibles :

- les décideurs, aussi bien au niveau politique qu'académique ;
- les utilisateurs ;
- les opérateurs du secteur économique.

Cette communication gagera à être supportée par un site Internet dédié à **MaGrid**. Site qui servirait à la fois d'espace d'échange et d'information et de vitrine pour exposer les réalisations et apports du projet.

Pour ce qui est des décideurs, la communication devra être axée principalement autour de la sensibilisation. La démarche de validation proposée plus haut, serait un très bon vecteur de communication.

Concernant les utilisateurs, la priorité devrait être donnée à la diffusion de l'information et à la vulgarisation. Le premier contact avec l'ensemble de la communauté scientifique nationale sera l'enquête visant à identifier les besoins (voir le tableau à la fin de la section VI). Il est donc très important de réussir ce premier contact.

La communication ciblant les opérateurs économiques devrait s'inscrire davantage dans une approche marketing et offre de service.

³ EumedGrid est un projet initié par l'UE. A travers la réalisation d'études et des offres de formations, ce projet vise l'encouragement de la mise en place de grilles nationales destinées à la recherche dans la région du pourtour méditerranéen. Son démarrage est prévu pour janvier 2006.

III-3. Ressources humaines :

Le succès du projet **MaGrid** est conditionné par l'existence d'un personnel d'appui logistique minimum : 1 ingénieur et 2 techniciens par "cluster" (nœud). Il est vivement recommandé de tendre vers un encadrement double de l'encadrement minimum.

Il s'agit également d'avoir une politique de formation et de formation continue à l'intention des gestionnaires du système et une politique de formation à l'intention des utilisateurs.

Des programmes de formations sont prévus dans la phase pilote et s'appuient sur la contribution d'experts de l'étranger. Le recours aux experts de l'étranger n'étant pas une approche viable à long terme, il conviendrait donc de constituer au Maroc un panel d'experts nationaux en vue de pouvoir assurer les besoins qui se feraient sentir en matière de formation.

IV- Implémentation :

Après la validation du projet **MaGrid** et du présent document de stratégie, l'implémentation de **MaGrid** se fera en deux temps : une phase pilote suivie d'une phase d'extension ou phase opérationnelle.

Avant son lancement, la phase pilote nécessite un certain nombre de préparatifs dont le calendrier indicatif est décliné ci après. Le comité de gestion devra le réajuster au besoin.

La phase pilote doit servir essentiellement à :

- roder le système de gestion et d'administration,
- identifier les problèmes et tester les solutions qui seraient apportées,
- acquérir le savoir faire nécessaire.

Sur la base d'expériences antérieures en la matière, la durée nécessaire à la réalisation des objectifs de la phase pilote est de 18 mois environ.

La phase pilote concernera trois établissements au maximum. Elle pourra également cibler un certain nombre de thèmes scientifiques. Les établissements et éventuellement les thèmes scientifiques devront être sélectionnés par appels d'offres. L'idéal serait de pouvoir faire coïncider les deux approches.

Il devra également être envisagé de permettre à des équipes jugées opérationnelles (pouvant intégrer la grille sans efforts supplémentaires) de participer à la phase pilote. Le comité de coordination devra se prononcer sur l'opportunité de cette ouverture.

La phase d'extension commencera une fois que le comité de gestion estimera que la phase pilote a atteint les objectifs escomptés.

L'extension se fera de façon progressive. Elle devra répondre aux besoins exprimés et tenir compte des contraintes du moment.

Préparatifs pour la phase pilote Calendrier

Semaine 1	(1)		<ol style="list-style-type: none"> 1. Mise en place du comité de gestion 2. Elaboration du questionnaire d'identification des besoins 3. diffusion du questionnaire et retour 4. Mise en place d'une autorité de certification CA 5. Rédaction de la charte de l'utilisateur 6. Elaboration d'une politique de sécurité 7. traitement questionnaire 8. termes de référence de l'appel d'offre institutionnel et critères de sélection 9. termes de référence de l'appel d'offre thématique et critères de sélection 10. diffusion des A.O. et retour 11. Règlement intérieur 12. Programme de formation (pré requis,.....) 13. traitement des A.O. 14. termes de référence du site web 15. réalisation du site 16. Architecture générale pour la grille nationale (pilote inclus, connectique,
	(2)		
		(4)	
Semaine 5	(3)	(5)	
		(6)	
	(7)		
	(8)		
Semaine 10	+		
	(9)		
		(11)	
	(10)	(12)	
Semaine 15	(13)		
	(14)		
		(16)	
	(15)		
Semaine 20			

V- Critères d'évaluation et mécanismes de suivi :

Une fois que la grille nationale est en phase opérationnelle, il est indispensable :

- qu'elle continue à se développer et à se consolider ;
- de pouvoir répartir, sur l'ensemble des partenaires, le coût des efforts supplémentaires nécessaires à ce développement.

Cette consolidation et la répartition des coûts doivent se faire et se justifier sur la base d'un ensemble d'indicateurs qu'il convient d'élaborer puis de définir la manière de les mesurer et suivre leurs valeurs.

Les indicateurs cités ci dessous sont à titre simplement indicatif. C'est au comité de **MaGrid** qu'il reviendra de les préciser et de les compléter.

Un premier groupe d'indicateurs est destiné à mesurer l'apport (la valeur ajoutée) scientifique de **MaGrid** :

- le nombre de publications scientifiques et le nombre de doctorats réalisés en s'appuyant sur la structure de calcul **MaGrid** (base annuelle) ;
- le nombre de publications scientifiques et le nombre de doctorats concernant la technologie de "Grid Computing". Les travaux ayant un impact direct sur **MaGrid** devraient faire l'objet d'une mention particulière ;
- les activités liées à la grille (séminaires, réunions, conférences, formations ciblées, collaborations).

Un second groupe d'indicateurs est destiné à mesurer le niveau d'utilisation de **MaGrid** :

- le nombre mensuel d'utilisateurs et sa ventilation par partenaire,
- le nombre mensuel de jobs soumis et sa ventilation par partenaire ;
- le taux mensuel d'utilisation (ratio : capacité utilisée / capacité disponible) et sa ventilation par partenaire.

Un troisième groupe d'indicateurs est destiné à mesurer le niveau de performance de **MaGrid** :

- le temps moyen d'attente des jobs ;
- le nombre de processeurs impliqués par job (statistiques) ;

- le nombre et le type de pannes critiques et les délais d'interventions et de rétablissement ;
- les courbes du taux d'utilisation.

Ces indications prendraient la forme d'un rapport d'activité mensuel, avec un récapitulatif annuel, à publier sur le site de **MaGrid**. La collecte des valeurs des indicateurs du second et troisième groupe devrait être automatisée.

VI- Domaines scientifiques concernés au Maroc :

Introduction :

Les paragraphes qui suivent traiteront des domaines où l'approche par la simulation et le calcul est utilisée par les chercheurs dans les établissements marocains de recherche. La liste n'est certainement pas exhaustive. Elle sera complétée suite à l'enquête "*identification et évaluation des besoins en capacité de calcul et de stockage*" proposée dans le cadre de ce document de stratégie.

VI-1. Les mathématiques :

Les mathématiques constituent un continuum de recherche commençant avec les mathématiques dites fondamentales et finissant avec des mathématiques dites appliquées.

Pour les mathématiques fondamentales, le recours intensif au calcul a été utilisé pour "démontrer" deux grands théorèmes : le théorème dit des quatre couleurs, resté ouvert (conjecturé mais non démontré) pendant plus de 200 ans et le théorème sur la classification des groupes finis. Ces "démonstrations", vu leur caractère très excentrique, ont été largement reprises par la presse spécialisée et grand public.

Vu que la démonstration mathématique est "traditionnellement perçue" comme une démarche de "pur esprit", l'aboutissement réussi des deux "démonstrations" sus citées et le recours de plus en plus

fréquent à l'utilisation du calcul symbolique (calcul algébrique sur ordinaire) pour faire des bouts de démonstrations, ont soulevé un grand débat philosophique sur le statut à donner à ce genre de "démonstrations" et au type de mathématiques auquel il pourrait donner naissance.

Pour les mathématiques à fort potentiel d'applications et consommatrices de grands calculs, nous citerons à titre d'exemples les domaines de la théorie des graphes, de la cryptographie et les recherches sur le nombre pi (π).

Au niveau national, c'est le calcul symbolique qui est la principale implication du calcul dans les activités des chercheurs marocains en mathématiques.

L'existence de la grille permettra aux chercheurs nationaux de s'impliquer davantage dans certains domaines de recherche. Nous citerons plus particulièrement le domaine sensible et stratégique de la cryptographie, et dans lequel le Maroc dispose de plusieurs compétences.

VI-2. Les sciences de l'ingénieur :

Parmi les domaines d'intérêt national qui sont concernés par ces sciences, nous citerons à titre non exhaustif, l'océanographie, la météorologie, les séismes, la pollution et l'environnement, les grandes structures (barrages et ponts), etc.

Les sciences de l'ingénieur procèdent généralement en deux phases : une phase de modélisation/mise en équation du problème suivie d'une phase de résolution numérique, approximative, des équations en question. La seconde phase étant préparée par des recherches en mathématiques appliquées (conditions d'existence et/ou d'unicité de solution, méthodes d'approximations, estimations d'erreurs, algorithmique, vitesse de convergence, stabilité, robustesse, etc.).

Il est clair que la qualité de l'approximation numérique des solutions aux problèmes traités, ainsi que le temps nécessaire à l'obtention des dites solutions, sont intimement liés à la capacité de calcul disponible.

La nécessité d'une grande capacité de calcul devient encore plus pressante quand le problème traité requiert la gestion et/ou l'accès à de

grandes bases de données et/ou quand il y a un volume important de calcul symbolique (calcul algébrique sur ordinateur) à exécuter.

L'existence de **MaGrid** permettra aux chercheurs marocains, qui sont très nombreux dans cette discipline, de faire et de traiter des modèles plus proches de la réalité complexe des problèmes traités, d'en obtenir des solutions numériques plus fines et également de pouvoir considérer des problèmes plus complexes. Cet outil stimulera en outre des recherches en algorithmique, notamment en programmation parallèle.

VI-3. La physique des hautes énergies :

L'objectif principal de la physique des hautes énergies est la compréhension de l'origine de la matière en étudiant les particules les plus infimes qui la composent ainsi que les forces qui les unissent. Cette discipline est caractérisée, depuis trois décennies environ, par une très forte imbrication entre la théorie et l'expérience.

Cette discipline très théorique en apparence, a des applications en biologie, en physique des matériaux et en médecine.

Le siècle dernier a vu cette discipline faire un bond phénoménal grâce à l'élaboration de modèles théoriques très sophistiqués et à l'utilisation de moyens expérimentaux très développés, dont notamment les grands accélérateurs qui génèrent de très grandes quantités de données.

Le futur accélérateur (LHC⁴), qui sera mis en service en 2007 au CERN⁵, sera le plus grand générateur de données de la planète, avec plus de 1.500 mégaoctets de données par seconde pendant plus d'une décennie. Le traitement de ces données sera fait à l'aide de la grille de calcul LCG⁶ développée spécifiquement au CERN pour les expériences du LHC.

Le Maroc a été officiellement admis en septembre 1996, à participer à l'expérience ATLAS ; l'une des deux principales expériences qui seront menées autour du LHC et qui implique actuellement environ 1700 physiciens des 5 continents.

⁴ LHC : Linear Hadron Collider, est un collisionneur proton-proton.

⁵ CERN : Centre Européen de Recherche Nucléaire, est la plus grande structure de recherche dans le monde de la discipline.

⁶ LCG : LHC Computing Grid.

Les physiciens marocains participent activement aux phases préparatoires de cette expérience notamment dans la conception et installation des détecteurs. Ils sont regroupés au sein du pôle de compétence RUPHE⁷, qui rassemble actuellement des chercheurs de cinq universités nationales : Rabat, Casablanca, Oujda, Marrakech et Settat.

Il devient de ce fait très important que les chercheurs marocains puissent disposer de moyens de calcul performants pour pouvoir traiter et tirer profit des données distribuées du LHC et continuer à contribuer pleinement à l'expérience ATLAS. La grille nationale, qui pourra être connectée ultérieurement à la grille du CERN, constitue une prompte réponse à cette exigence.

Les logiciels nécessaires sont pour la plupart libres.

VI-4. La chimie théorique :

Le but de cette discipline est de décrire les systèmes chimiques à partir de modèles fondés sur la chimie quantique et la mécanique moléculaire.

A condition de disposer de moyens de calcul adéquats (grande puissance de calcul et importante capacité de stockage), cette discipline peut aborder plusieurs domaines : chimie organique, spectroscopie, biochimie, matériaux.

L'approche par le calcul fournit un moyen d'analyse supplémentaire beaucoup moins coûteux que les méthodes spectroscopiques et autres qui nécessitent des appareils dispendieux.

Au niveau international, le recours à la modélisation et à l'utilisation du calcul en chimie est en plein essor. En effet, 30 à 40% des publications actuelles en chimie contiennent des résultats de nature théorique, obtenus par calcul sur ordinateur.

Au niveau national, des laboratoires de chimie théorique existent dans la plupart de nos universités : Rabat, Casablanca, Kenitra, Meknès, Fès, Tétouan, Marrakech, Errachidia, Agadir et Settat. Chaque laboratoire regroupant une dizaine de chercheurs (5 enseignants et 5 étudiants

⁷ RUPHE : Réseau Universitaire de Physique des Hautes Energies

environ). Et certains des travaux de synthèse chimique qui ont été réalisés dans nos universités n'ont pu être publiés qu'après la détermination des structures par le recourt au calcul. (pour le seul laboratoire de Rabat : 2 publications avec le laboratoire de chimie organique et 2 avec le laboratoire de chimie physique).

L'existence de la grille de calcul permettra à tous les laboratoires marocains d'augmenter leur puissance de calcul et de pouvoir ainsi s'intéresser à des systèmes de taille plus importante plus proches des réalités marocaines (biologie, matériaux, substances naturelles) et de collaborer ainsi de manière plus active avec les expérimentateurs et les industriels.

A titre d'exemple, le laboratoire de chimie théorique de Rabat reçoit des expérimentateurs de plus en plus de demandes de confirmations théoriques.

Côté logiciels, la tendance actuelle est à l'utilisation de programmes regroupant les principales méthodes de calcul moléculaires. Deux logiciels GAUSSIAN (pour l'étude des gros systèmes) et MOLPRO (pour les phénomènes spectroscopiques plus fins) peuvent traiter des principaux domaines abordés dans nos universités par les chercheurs en chimie théorique. Le coût des licences grid-computing pour ces deux logiciels ne dépasse pas 50.000 Dh.

VI-5. La biologie :

En biologie, il existe deux sous-disciplines qui ont d'importants besoins de calcul : la modélisation moléculaire et la génomique.

La première s'intéresse à la détermination de la structure spatiale (géométrique) des macromolécules biologiques (ADN et Protéines) à partir de leurs séquences primaires et des études aux Rayons X et/ou RMN, la seconde à la détermination de la séquence ADN et a donné naissance à une nouvelle science : la bio-informatique. Le programme génome humain est LE programme international en la matière.

La modélisation moléculaire a d'importantes applications notamment en matière de fabrication de médicaments et de nano-moteurs biologiques. Dans les études de pathologies génétiques, elle permet de

faire de grandes économies de temps et de coûts, notamment en réduisant voire en remplaçant les études de mutagenèse in vitro.

Au Maroc, au moins une unité fait des recherches en modélisation moléculaire.

CHARMM est l'un des logiciels utilisés pour ces calculs. Il permet de faire des calculs de dynamique moléculaire sur des macromolécules biologique de plus de 10.000 atomes. Il existe des logiciels plus performants, mais plus coûteux, (développés par Accelrys) qui pourront être acquis dans le cadre de la grille **MaGrid**.