Calcul chimique efficace

Olivier Michel, Jean-Louis Giavitto

IBISC[1], Équipe LIS, FRE 2873 CNRS, Université d'Évry val d'Essonne, GENOPOLE
Tour Evry-2, 523 Place des terrasses de l'agora, 91000 Évry Cedex

30 janvier 2008

Mots-clés : Gamma, calcul chimique, grid computing, langage.
Public visé : TER de M1.

Contexte de l'étude

Ce sujet se place dans le cadre du projet `MGS` où nous développons des langages de programmation non-conventionnels dédiés à la modélisation et la simulation de systèmes dynamiques complexes (en particulier en biologie). On s'intéresse à la représentation d'organisations complexes entre des entités variables et hétérogènes, ainsi que leur transformation par des règles d'évolution locales (interactions). Ces travaux se fondent sur des notions de topologie et s'incarnent dans des modèles de calculs variés comme les L-systèmes, le calcul chimique, les automates cellulaires…

Sujet du stage

La métaphore de la réaction chimique permet de décrire des calculs en terme d'une solution chimique où les mollécules (représentant les données) interragissent librement suivant des règles de réaction. Formellement, un programme chimique peut être représenté comme de la réécriture associative-commutative de multi-ensembles.

Ce modèle de calcul est bien adapté à la spécification du calcul d'objects complexes comme les grans systèmes autonomes, les grilles de calcul et les système p2p. En particulier, l'interaction possible entre les éléments du calcul, totalement libre de contraintes, permet de rendre compte des propriétés que l'on trouve dans les grand systèmes parallèles ou ouverts etautonomes (auto-correction, auto-protection, auto-optimisation…). Bien que facilement expressible, l'implantation de ces problèmes, suivant la métaphore chimique, souffrent de deux défauts majeurs :

– une implantation directe et naïve de programmes chimiques produit généralement des codes peu performants,
– la structure de données de multi-ensemble, quoique très versatile, manque de structuration pour représenter des données complexes ; en particulier, la relation de voisinage (qui correspond à un graphe complet) ne permet pas de prendre en compte des informations cruciales représentant les contraintes physiques (distribution spatiale, localisation des ressources) ou logiques.

On se propose, dans ce sujet de stage, d'étudier des solutions pour résoudre ces problèmes. Les travaux pourront, selon le gout du candidat, se diriger vers plusieures directions : utilisation de types pour des expressions afin d'utiliser des structures de données plus adaptées ; utilisation des ressources fournies par le support effectif de calcul pour distribuer et ordonnancer les opérations de calcul et de filtrage ; utiliser les résultats de la *programmation par aspects* pour décrire les aspects d'un programme chimique, sa distribution… pour en fournir une implantation efficace, …

[1] *Contacts :* par courier électronique : `michel @ReMoVeMeFIRST.ibisc.univ-evry.fr`. Des informations supplémentaires sont disponibles à partir de la page : `http://mgs.ibisc.univ-evry.fr`