

Valorisation et diffusion des logiciels de chimie quantique

Anthony Scemama, le groupe GMO, et le reste du laboratoire

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques / IRSAMC,
Toulouse (France)
scemama@irsamc.ups-tlse.fr

16 Décembre 2009



- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation



- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation



- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation

- Codes développés en collaboration avec d'autres laboratoires :
 - Full-CI : **CASTORE**
 - Relativité : **EPCISO**, **DIRAC**
 - DFTB (groupe MAD) : **DeMon**
 - DFT/CI : Contribution à **Molpro**
- Codes développés exclusivement au laboratoire :
 - MR-CI : **CASDI**
 - MR-CI en orbitales localisées : **EXSCI**, **DOLO**, **LocCASSCF**
 - QMC : **QMC=Chem**
 - Localisation de paires d'électrons : **EPLF**
 - Environnement de développement Fortran : **IRPF90**
 - Nos codes sont utilisés à l'extérieur : ENS Lyon, CEMES, Seville, Strasbourg, Barcelone, Tarragone, Bologne, Caen, Paris VI, Rennes, Lille, Ferrare, Valence, Cuernavaca $\Rightarrow$ Valorisation



- Optimisation des programmes (accélération, réduction de mémoire, ...)
- Parallélisation (éventuellement massive)
- Portabilité
- Adaptation aux grilles de calcul
- Simplification des inputs, outils graphiques, etc.
- Interopérabilité (communication des codes avec les grands programmes de chimie quantique)
- Diffusion des programmes (sites web, réunions (Nov 2008), TPs)

Il faut que tous ces logiciels puissent interagir

- entre eux
- avec d'autres logiciels (Dalton, GAMESS, Molcas, Columbus, ...)

⇒ **Q5Cost** : Projet européen COST-D37

- un format standard pour les données des calculs post-HF
 - Géométrie
 - Base Atomique
 - Orbitales atomiques/moléculaires
 - Intégrales atomiques/moléculaires
 - Expansion en déterminants
- version 1.0 de la bibliothèque I/O Fortran publiée en Juillet 2008

Il faut que tous ces logiciels puissent interagir

- entre eux
- avec d'autres logiciels (Dalton, GAMESS, Molcas, Columbus, ...)

⇒ **Q5Cost** : Projet européen COST-D37

- un format standard pour les données des calculs post-HF
 - Géométrie
 - Base Atomique
 - Orbitales atomiques/moléculaires
 - Intégrales atomiques/moléculaires
 - Expansion en déterminants

- version 1.0 de la bibliothèque I/O Fortran publiée en Juillet 2008

Il faut que tous ces logiciels puissent interagir

- entre eux
- avec d'autres logiciels (Dalton, GAMESS, Molcas, Columbus, ...)

⇒ **Q5Cost** : Projet européen COST-D37

- un format standard pour les données des calculs post-HF
 - Géométrie
 - Base Atomique
 - Orbitales atomiques/moléculaires
 - Intégrales atomiques/moléculaires
 - Expansion en déterminants
- version 1.0 de la bibliothèque I/O Fortran publiée en Juillet 2008

Construction pas à pas d'orbitales locales :

Terminal

```
dataok T
nn
AA7 8 9 10 A_C1C2.PI A_C1C2.PI A_C1C2.PI A_C1C2.PI
nnn
7 8 9 10
A_C1C2.PI A_C1C2.PI A_C1C2.PI A_C1C2.PI
7 8 9 10
```

	7	8	9	10
O_C1C2	O_C1C2	O_C1C2	O_C1C2	O_C1C2
.PI	.PI	.PI	.PI	.PI
D 3	D 3	D 3	D 3	D 3
SY 3	SY 4	SY 3	SY 4	SY 4
OCC	OCC	VIR	VIR	VIR
	1.9287	1.8590	0.1416	0.0707

23 C1 2pz	0.8089	0.0000	-0.5880	0.0000
24 C2 2pz	0.5880	0.0000	0.8089	0.0000
25 C1 2pz	0.0000	0.5838	0.0000	0.8119
26 C2 2pz	0.0000	0.8119	0.0000	-0.5838

Overlap :

```
( 4 Orbitals)
Old label O_C1C2.PI O_C1C2.PI O_C1C2.PI O_C1C2.PI
Enter new label(s) (X to exit)
Old labels
O_C1C2.PI O_C1C2.PI O_C1C2.PI O_C1C2.PI
New labels
A_C1C2.PI A_C1C2.PI A_C1C2.PI A_C1C2.PI
```

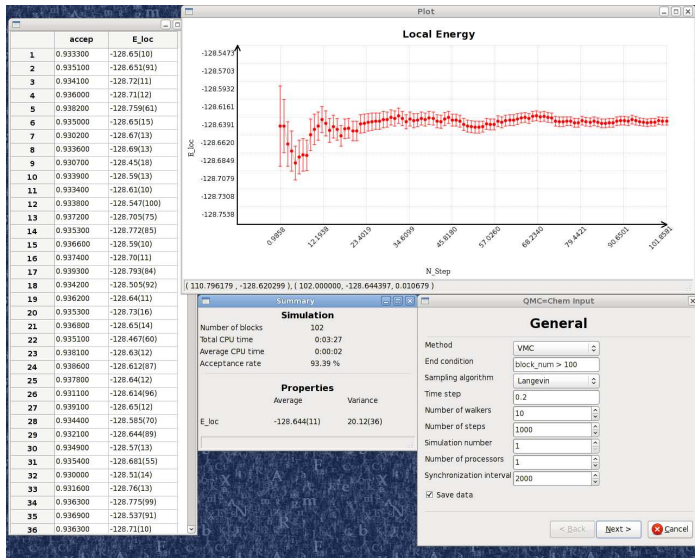
DOL0/>>>>> Enter a Data
DOL0/>>>>> ...or...
DOL0/>>>>> "X": End of Program, Exit
DOL0/>>>>> "P": Verify/Modify Preceeding data, Manipulate LO's

Plot MO

- G COR.C1.1
- G COR.C1.1
- G COR.C2.1
- G COR.C2.1
- O_C1C2.SG
- O_C1C2.SG
- O_C1C2.PI
- O_C1C2.PI
- O_C1C2.PI
- O_C1C2.PI

Plot
Update
Close

Interface utilisateur simple pour QMC=Chem



IRPF90 et EPLF sur SourceForge

SourceForge.net: EPLF - eplf - Mozilla Firefox

File Edit View History Bookmarks Tools Help

http://sourceforge.net/apps/mediawiki/eplf/index.php?title=Main_Page

Gmail - Boîte de ré... Google Agenda /usr/share/doc lpsv11 Wiki_Info QMC SourceForge.net: A... TaskFreak! Google Scholar

wx.PyWindow lpsv9 - Edit - Word... [Laboratoire de Chimie... SourceForge.net: EP... Codes-loc ups-tlse.fr...

page discussion view source history

EPLF
(Redirected from Main Page)

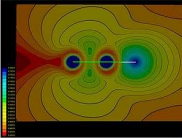
What is EPLF?

The Electron Pair Localization Function is a function defined in the three-dimensional space. It measures the degree of pairing of electrons in a molecule, with an increasing value as the electron pairing increases. Therefore chemical bonds, core domains and lone pairs can be visualized.

- Quantum Monte Carlo Formulation
- Analytical Formulation

If you use EPLF, please cite these papers.

- Electron pair localization function, a practical tool to visualize electron localization in molecules from quantum Monte Carlo data**
A. Scemama, P. Chaquin, M. Caffarel
J. Chem. Phys., vol 121, pp. 1725-1735 (2004)
- Structural and optical properties of a neutral Nickel bisdithiolenic complex. Density Functional versus ab-initio methods.**
F. Alary, J.-L. Heully, A. Scemama, B. Garreau-de-Bonneval, K. I. Chane-Ching, M. Caffarel
Theoretical Chemistry Accounts, in press



EPLF of the C-C-H radical in the molecular plane.

Download

Packages have been prepared for unix-like operating systems. You can download them on [SourceForge](#)

The source files are available using the [git repository](#).

```
git://eplf.git.sourceforge.net/gitroot/eplf/eplf
```

[About the author](#)

Done

navigation

- EPLF
- QMC formulation
- Analytical formulation
- download
- About the author

institutions

- CNRS
- Univ. Paul Sabatier
- Labo. Chimie et Physique
- Quantiques
- IRSAMC

search

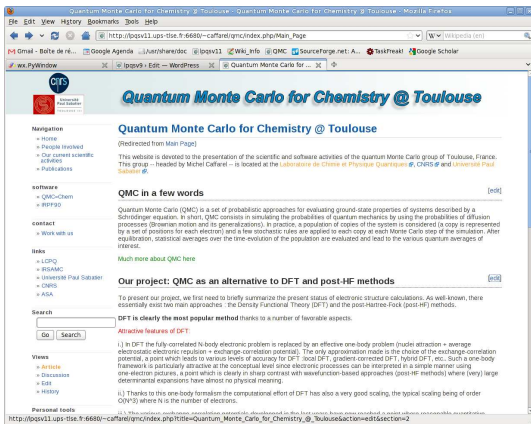
Go Search

toolbox

- What links here
- Related changes
- Special pages
- Printable version
- Permanent link

Universit  Paul Sabatier TOULOUSE III

- Préparation d'un serveur web pour la diffusion des logiciels.



- Partenariat industriel (ASA, jeune entreprise innovante) pour la partie interface graphique, packaging et "QMC on demand"



3 Projets européens soumis à EU-FP7 :

- ROSCOE : Construction d'un *specialized service center* pour la chimie théorique sur la grille EGEE-EGI (CERN)
 - Assistance aux utilisateurs
 - Développement logiciel et architecture
 - Diffusion de la culture de grille
 - Applications scientifiques
- HIPEG :
 - Adaptation de logiciels à la grille
 - Développement d'outils informatiques pour la grille
- SCHEMA :
 - Standardisation Q5Cost
 - Extension de Q5Cost à la dynamique quantique
 - Extension de Q5Cost à la DFT
 - Lieu de discussion entre développeurs

3 Projets européens soumis à EU-FP7 :

- ROSCOE : Construction d'un *specialized service center* pour la chimie théorique sur la grille EGEE-EGI (CERN)
 - Assistance aux utilisateurs
 - Développement logiciel et architecture
 - Diffusion de la culture de grille
 - Applications scientifiques
- HIPEG :
 - Adaptation de logiciels à la grille
 - Développement d'outils informatiques pour la grille
- SCHEMA :
 - Standardisation Q5Cost
 - Extension de Q5Cost à la dynamique quantique
 - Extension de Q5Cost à la DFT
 - Lieu de discussion entre développeurs

3 Projets européens soumis à EU-FP7 :

- ROSCOE : Construction d'un *specialized service center* pour la chimie théorique sur la grille EGEE-EGI (CERN)
 - Assistance aux utilisateurs
 - Développement logiciel et architecture
 - Diffusion de la culture de grille
 - Applications scientifiques
- HIPEG :
 - Adaptation de logiciels à la grille
 - Développement d'outils informatiques pour la grille
- SCHEMA :
 - Standardisation Q5Cost
 - Extension de Q5Cost à la dynamique quantique
 - Extension de Q5Cost à la DFT
 - Lieu de discussion entre développeurs