



Communiqué de presse

Le code de simulation moléculaire Gibbs 20 ans au service de la recherche et de l'industrie

Rueil-Malmaison, le 23 juin 2016 - **Le CNRS, l'Université Paris-Sud, IFP Energies nouvelles (IFPEN) et la société Materials Design fêtent les 20 ans du code de simulation moléculaire Gibbs. Une pérennité et une vitalité qui permettent au code Gibbs de devenir un outil à part entière pour les laboratoires de recherche et les entreprises.**

Le code Gibbs est un code de modélisation moléculaire développé depuis maintenant 20 ans par des chercheurs du CNRS, d'IFPEN et de l'Université Paris-Sud. Cet ensemble logiciel permet d'étudier les propriétés thermodynamiques de fluides organiques, de polymères ou de métaux, libres, adsorbés ou encore en contact avec des solides. Au fil des ans et des collaborations, le code Gibbs s'est enrichi pour devenir un code généraliste parmi les plus performants utilisés dans les milieux académiques et industriels. Les propriétaires ont notamment le souci d'assurer une gestion pérenne du code, dans des normes équivalentes à celles des grands logiciels commerciaux.

Cette stratégie a conduit à l'attribution d'une licence de commercialisation à la société Materials Design. Cette dernière a développé une interface graphique pour Gibbs et standardisé la préparation des protocoles de modélisation, permettant la diffusion de Gibbs dans de nombreux secteurs industriels (pétrole, chimie, transports, batteries, semi-conducteurs, nucléaire). La caractérisation expérimentale ayant des coûts élevés, les industriels s'orientent en effet de plus en plus vers la modélisation pour comprendre des processus à une échelle nanométrique, voire prédire certaines propriétés difficiles à mesurer, et *in fine* piloter le design de leurs matériaux.

Philippe Maître (directeur du Laboratoire de chimie physique¹, laboratoire du CNRS et de l'Université Paris-Sud) : *"au LCP, nous utilisons quotidiennement Gibbs dans nos activités de recherche pour la prédiction de propriétés thermophysiques. Nous contribuons fortement à son développement et à son utilisation en combinaison avec d'autres logiciels de modélisation, classiques et quantiques, ouvrant ainsi de nouvelles perspectives méthodologiques. Le code est construit de manière modulaire, ce qui lui assure une bonne lisibilité. L'ensemble de ces travaux contribue grandement à la fiabilité croissante et à l'enrichissement du code Gibbs. En conclusion, Gibbs est un outil indispensable à notre activité scientifique. L'interaction avec nos partenaires lui a permis d'exister et de prospérer depuis plus de 20 ans !"*

Pascal Mougin (chef du département thermodynamique, IFPEN) : *"au fil des ans, le logiciel Gibbs est devenu pour IFPEN un outil standard utilisé pour la compréhension et la modélisation thermodynamique des procédés que nous mettons au point. Avec le LCP, nous continuons à contribuer à son développement et à son enrichissement. Gibbs est maintenant couramment utilisé dans des contextes appliqués en complément de l'acquisition de données expérimentales ; il permet notamment d'examiner le comportement de fluides dans des gammes de fonctionnement difficilement atteignables au laboratoire, ou en présence de composés toxiques. Les résultats de simulations moléculaires servent à définir et à alimenter des modèles macroscopiques qui sont disponibles dans les simulateurs de procédés industriels. L'universalité de l'approche nous a également permis*

¹ **Laboratoire de chimie physique (LCP), Orsay.** Le LCP est un laboratoire de recherche de l'Université Paris-Sud et du CNRS, localisé sur le campus de la faculté des Sciences d'Orsay. Le LCP rassemble environ 130 membres, dont 1/3 de chercheurs/enseignants-chercheurs et 1/4 de personnels techniques. Les thématiques de recherche du LCP sont variées, visant notamment à répondre à des questions relevant de la santé, de l'environnement et de l'énergie. Ses approches combinent souvent expérimentation et modélisation, et ses objectifs suscitent des développements instrumentaux et méthodologiques.

de traiter de nombreux problèmes industriels : traitement de gaz acides, captage de CO₂, propriétés d'usage des polymères, transformation de la biomasse, etc."

Erich Wimmer (chef de la direction scientifique, Materials Design) : *"le savoir-faire de Materials Design en modélisation moléculaire est aujourd'hui reconnu à l'échelle internationale. Son expertise résulte d'une boucle vertueuse entre recherche et industrie qui s'inscrit sur le long terme. Materials Design identifie les attentes des industriels, et y répond par son offre de logiciels, d'équipements informatiques de calculs, de formation et support, mais aussi de recherches et de prestations de services. En étendant son offre à Gibbs, Materials Design a par exemple pu aider Total à améliorer sa compréhension des interactions entre fluides et solides inorganiques et organiques dans des conditions difficiles à mettre en œuvre expérimentalement, ou l'Agence de l'énergie atomique japonaise (JAEA) à identifier des matériaux pour la décontamination du césium. De plus, Gibbs est intégré dans son environnement logiciel MedeA, ce qui permet son interopérabilité avec les autres méthodes disponibles dans la suite."*

Le code Gibbs : les dates clés

1996 : des théoriciens du futur - LCP, laboratoire CNRS-Université Paris-Sud et le département de Thermodynamique d'IFPEN - unissent leurs expériences en modélisation moléculaire et développent le code Gibbs.

1999 : création de Materials Design SARL qui développe un environnement logiciel, MedeA®, permettant d'utiliser des méthodes de modélisation moléculaire et des bases de données de matériaux solides.

2003 : Materials Design devient le licencié exclusif de Gibbs et étend ainsi son offre au calcul des propriétés thermodynamiques des fluides.

2016 : sortie de la v.9.6 de Gibbs.

Contact presse :

IFPEN – Anne-Laure de Maignan – Tel. : 01 47 52 67 21 – anne-laure.de-maignan@ifpen.fr

CNRS, Centre national de la recherche scientifique est le principal organisme public de recherche en France et en Europe. Il produit du savoir et met ce savoir au service de la société. Avec près de 33 000 personnes, un budget pour 2014 de 3,3 milliards d'euros dont 701 million d'euros de ressources propres, et une implantation sur l'ensemble du territoire national, le CNRS exerce son activité dans tous les champs de la connaissance, en s'appuyant sur plus de 1100 laboratoires. Avec 20 lauréats du prix Nobel et 12 de la Médaille Fields, le CNRS a une longue tradition d'excellence. Le CNRS mène des recherches dans l'ensemble des domaines scientifiques, technologiques et sociétaux : mathématiques, physique, sciences et technologies de l'information et de la communication, physique nucléaire et des hautes énergies, sciences de la planète et de l'Univers, chimie, sciences du vivant, sciences humaines et sociales, environnement et ingénierie.

L'Université Paris-Sud est un acteur majeur de la Comue Université Paris-Saclay. Pluridisciplinaire et à forte dominante scientifique et de santé, l'excellence de sa recherche est marquée par de nombreux prix internationaux, notamment dans le domaine des mathématiques (quatre médailles Fields entre 1994 et 2010) et de la physique (trois prix Nobel). L'Université Paris-Sud est l'une des plus prestigieuses universités en Europe sur le plan de la recherche, elle est classée parmi les premiers établissements d'enseignement supérieur français et 41^e mondial au classement de Shanghai 2015. L'Université Paris-Sud rassemble plus de 75 laboratoires reconnus internationalement, accueille 30 200 étudiants dont 2 400 doctorants et 4 800 étudiants étrangers, compte 4300 enseignants-chercheurs et chercheurs, et 3100 personnels ingénieurs, techniques et administratifs.

IFP Energies nouvelles (IFPEN) est un acteur-clé de la recherche publique et de la formation. Son champ d'action est international et couvre les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. De la recherche à l'industrie, l'innovation technologique est au cœur de son action. IFPEN allie une recherche fondamentale tournée vers l'excellence à un modèle économique performant assurant le transfert technologique à l'industrie des résultats de ses travaux. IFPEN soutient le développement économique des PME en leur donnant accès à ses moyens techniques, ses compétences scientifiques et son savoir-faire dans l'industrialisation de produits ou de procédés innovants, dans le cadre de contrats de partenariat R&D équilibrés. A travers son école IFP School, IFPEN est également une référence mondiale de la formation dans le domaine de l'énergie, contribuant ainsi au rayonnement de la France à l'international.

Materials Design (MD) est une société internationale (Materials Design, Inc. aux E.U., Materials Design S.A.R.L. en France, avec des partenaires au Japon, Corée, Chine, Inde, Taiwan et Inde). MD est créatrice de logiciels, et commercialise des services et des équipements informatiques. Elle est un leader de la simulation des matériaux à l'échelle atomique. Ses solutions couvrent les besoins des utilisateurs dans des groupes industriels et académiques dans des domaines tels que la chimie et pétrochimie, l'électronique, l'énergie et les transports terrestres, aériens et spatiaux.