

Compte-rendu de la réunion du bureau du RFCT

Paris le 04/11/2013 de 10h à 12h

Bibliothèque du LCT, Jussieu

Présents : Mesdames Gilberte Chambaud, Isabelle Demachy, Costuas Karine, Anne Boutin (invitée), Céline Léonard. Messieurs Gérald Monard, Roberto Marquardt (invité), Paul Fleurat-Lessard, Alexis Markovitz, Xavier Assfeld

Excusés : Messieurs Romuald Poteau, Stéphane Humbel, Serge Antonczak, Carlo Adamo, Régis Gauthier

0) Information.

Karine Costuas remplace Marie-Bernadette Lepetit pour le pôle Nord-Ouest, cette dernière ayant muté sur Grenoble.

1) Prévisionnel enseignements 2013/2014 dans les différents pôles (mise à jour du site web !).

- Nord-Ouest : 2 M2 + doctorants, semaines planifiées en février. En partenariat avec ED.

Mise en place d'un module d'info.

- IdF : quelques M2 en prévision ; Nb de doctorants inconnu. Le label IDF est intégré à l'ED de chimie PARIS Sud mais aussi en tant qu'UE créditée d'ECTS au M2 Chimie et Physicochimie : des molécules aux biosystèmes cohabilité PARIS-Sud et ENS Cachan.

- Nord-Est : A peu près 25 personnes doctorants inclus. 2 semaines consécutives en janvier (Nancy et Strasbourg).

- Sud-Est : 8 M2 + doctorants. Petits modules de 2 jours répartis sur plusieurs semaines.

L'année prochaine un module d'informatique (Unix + Python) sera proposé.

- Sud-Ouest : Données fournies par e-mail à Xavier Assfeld par Romuald Poteau. Il y a cette année 9 étudiants inscrits (2 Toulouse, 1 Pau, 3 Bordeaux et 3 Montpellier). Les cours sont organisés depuis la rentrée et se font via internet.

2) Bilan du workshop franco-chinois à Nanjing.

Renouvellement important des conférenciers, tant Français que Chinois. Une session poster a été créée. Roberto se charge de préparer un compte-rendu général de tous les Workshops pour diffusion. Le prochain Workshop serait organisé à Strasbourg au printemps 2015.

3) Finances.

Clôture du PPS et du GDR 3333 en décembre 2013 !!! Il reste 3 800 €. Normalement il reste 1000 € de subvention pour l'ENS (Journées de Modélisation à Paris). Les 2 800€ restant seront versés à la RCTF car l'UPCM s'est gavé de presque 2 000€ sur la subvention initiale de 10 000€ !!!

4) Renouvellement du GDR 3333 RFCT.

Officieusement renouvelé mais on ne sait pas à quelle hauteur.

- 5) Nouvelles du GDRI (invitation de Roberto Marquardt),
Officieusement créée, mais on ne connaît pas la hauteur du financement. Il s'intitule : Réseau Franco-Chinois de Chimie Théorique (RFCCT). Wokshop Franco-Chinois au printemps 2015 en Alsace (Strasbourg). Actions à prévoir en 2014 (signature, invitation d'un Chinois à la RCTF, échange d'étudiants...).
- 6) Numéro spécial Actualité Chimique.
Quasi bouclé ! Numéro de février-mars 2014 ! 18 articles. Gilberte a rédigé un « reader digest » de la modélisation moléculaire à partir des articles, dans l'ouvrage « Modélisation et Simulation ». C'est un ouvrage général, pas uniquement chimique.
- 7) Structures de Chimie théorique au sein de la SCF.
Anciennement à la SCF il y avait un groupe Chimie informatique (infochimie ?).
Précédemment notre collègue A. Varnek s'en occupait. Maintenant c'est Stefano Evangelisti. C'est en relation avec la chimiothèque nationale (Montpellier) et sûrement d'autres instances. Voir s'il est possible d'effectuer un rapprochement avec la sous-division « Théorie et Modélisation » de la DCP ?
- 8) Lancement du prix Gaston Berthier (selon les finances).
Oui, mais ça va être compliqué. On applique les mêmes règles que précédemment. On va essayer de passer par la sous-division « Théorie et Modélisation » de la DCP de la SCF+SFP.
- 9) Appel à manifestations 2014 ? (selon les finances),
Tout dépendra des subventions du GDR 3333. En attente.
- 10) Relations avec les CFCAM (CECAM en général).
Ce point est reporté à la prochaine réunion.
- 11) Lancement de la sous-division "Modélisation-Simulation" de la DCP de la SCF/SFP (invitée Anne Boutin).
Volonté de la DCP de se réorganiser en sous-divisions (en raison partielle due à la fusion avec la division de Chimie analytique) : chimie analytique, magnétisme, photochimie, ..., Modélisation-Simulation. Présidente : Anne Boutin. VP : Xavier Assfeld. Trésorière : Céline Léonard. Secrétaire : Paul Fleurat-Lessard.
Les sous-divisions doivent à termes être autonomes (organisation d'écoles payantes, soutien, etc.). Le bureau se réunira juste après la réunion du RFCT.
- 12) Point sur la RCTF 2014.
Tout va bien. Tous les conférenciers invités ont accepté. Il reste à régler le problème des logements. Affaire à suivre.
- 13) Questions diverses.

- Karine Costuas, Paul Fleurat-Lessard et Gérald Monard soulèvent le problème de l'évolution des codes par rapport à l'architecture des machines. Il faut semer la graine et travailler avec les informaticiens, les mathématiciens etc. afin de pouvoir utiliser les architectures massivement parallèles. Ils ont souligné l'importance de garder des machines comme Ada ou Yoda qui sont mieux adaptés à la chimie quantique que les BlueGene.
- Site web : vérifier l'unicité du site !

14) Fin de mandats.

Les mandats actuels du bureau du RFCT arriveront à terme lors de la RCTF de juillet 2014. Les règles imposent qu'il y ait des changements de tous les postes. Cela ne concerne pas nos collègues ayant pris leurs fonctions récemment (Paul Fleurat-Lessard pour le pôle Sud-Est et Karine Costuas pour le pôle Nord-Ouest). Les autres postes seront à pourvoir lors de l'AG du RFCT durant la RCTF. Les membres actuels pourront s'ils le désirent et s'ils sont adoubés par l'AG occuper d'autres fonctions au sein du bureau que celles qui s'exercent actuellement. Il est demandé aux responsables de pôles de faire une prospective au sein de leur pôle pour trouver un successeur si nécessaire. Il sera in fine désigné lors de l'AG. Après deux coordinateurs nationaux masculins, il serait peut-être bon qu'une coordinatrice soit désignée...

La réunion est close à 12h15.