

# Compte-rendu de la Réunion du bureau du Réseau Français de Chimie Théorique

12 novembre 2018 - IBPC, Paris 5 - 14 heures

Présent·e·s : Sophie Sacquin-Mora, Marc Baaden, David Lauvergnat, Peter Reinhardt, Aurélie Perrier, Éric Brémond

Visio ou tel : Philippe Carbonnière, Karine Costuas, Arnaud Fihey, Christophe Raynaud, Rémi Maurice, Élise Dumont

Excusé·e·s : Adèle Laurent, Vincent Robert, Franck Jolibois, Céline Houriez, Mario Barbatti

Démarrage en retard suite à des difficultés de connexion, on passe finalement par Renater/rendez-vous

## 1) Projet pour la Fédération de Recherche en Chimie Théorique :

On converge sur l'idée de 3 groupes de travail,

### - **Projet de recherche sur le multi-échelle/rencontres prospectives 2019**

(Rémi, Élise, Karine)

Rémi se propose pour organiser les rencontres prospectives à Nantes (si possible vers juin ?) on part sur un format resserré (30-50 participants max, 2 jours, 4 sessions, des tables rondes). Le projet de recherche pouvant justement s'appuyer sur les discussions qui auront lieu pendant les rencontres. Pour le soutien financier on peut aller voir du côté des CECAM Discussion Meetings, mais il faut identifier le noeud CECAM susceptible de soutenir l'évènement (IdF, Toulouse ou Lyon ?)

### - **Logithèque nationale**

(Sophie, Marc, David, Eric)

Suite à la visite de l'IDRIS/Maison de la Simulation faite le vendredi 9 novembre. Il faudra définir les missions de la logithèque et notamment un cahier des charges pour les chercheurs souhaitant bénéficier du service d'archivage et de valorisation (bonnes pratiques garantissant que le code peut être installé sur différentes architectures, engagement à proposer une formation au code dans l'année suivant son ajout à la logithèque...). Un poste d'IR associé à la logithèque va être ouvert en NOEMIE, les discussions pourront donc s'appuyer sur la fiche de poste publiée. Le serveur de distribution de la logithèque pourra être hébergé à l'IDRIS pour y stocker et mettre à disposition les différentes versions des codes concernés, après que celles-ci aient été testées et validées par les développeurs eux-mêmes ou par l'IR recruté, sur des plateformes locales et / ou nationales.

Un questionnaire visant à répertorier les codes de chimie théorique (en recherche ou formation) développés dans les laboratoires français est prêt à être diffusé sur la mailing-liste du RFCT.

De plus Karine propose de faire un état de lieu (aussi via questionnaire) de l'utilisation des logiciels commerciaux dans les laboratoires, afin de voir s'il ne serait pas possible de rationaliser les achats de licence au niveau national.

La logithèque devrait également permettre d'initier des collaborations entre laboratoires autour de projets multi-échelles. Dès 2019 on peut envisager un appel d'offre du GDR pour financer des visites de chercheur·se·s dans d'autres laboratoires afin de prendre en main le code qui y est développé.

#### - Formation

(Franck, Aurélie Rémi)

Le label de Chimie Théorique reste essentiel pour la vie de la communauté scientifique. Vont s'y ajouter les formations proposées par la logithèque pour la prise en main des codes qui y seront archivés. Au préalable on peut aussi envisager des formations pour acquérir des outils facilitant le développement de projets collaboratifs (Gitlab...)

Discussion sur le poids relatif des trois axes. Sans être parfaitement identiques (formation plus faible ?), les poids des trois axes sont plutôt équilibrés car chacun est indispensable au projet et il y a une forte interaction entre chaque axe (le développement du projet de recherche s'appuiera sur la logithèque et les formations proposées).

#### Aspects pratiques associés à une Fédération de Recherche :

- Il existe déjà des FR au niveau national associant un grand nombre de laboratoires (ex/ FR3098, ECCOREV, 18 tutelles et 33 laboratoires), mais il faudra définir des unités « porteuses » au coeur du projet et des unités « associées ». On va s'appuyer sur les pôles régionaux pour recenser et identifier les unités concernées et leur rôle potentiel dans le projet.

- Une unité peut appartenir à plusieurs FR (ex: toutes les unités de la FR3393, photovoltaïque, sont également membres de la FR3344, énergie solaire).

- Il reste des points à clarifier auprès de l'INC : Les chimistes théoricien·ne·s n'appartenant pas à des unités associées à la FR doivent tout de même bénéficier des services proposés par celle-ci (logithèque/formation)

C-M Pradier a été contactée pour discuter du projet et on attend son retour pour organiser une réunion à l'INC avec le comité de pilotage du projet (Sophie, Rémi, Karine, Philippe)

- Faut il garder le nom de « Chimie Théorique » ? On réfléchit à un nom plus fédérateur (vis à vis des physicien·ne·s) « Modélisations atomistiques » ?

**Mise en place d'un comité scientifique :** proposer 4 à 7 personnalités extérieures au GDR (et si possible connaissant un peu le système français)

Portage administratif du projet ? Si accord de l'INC Sophie porte le projet dans la continuité du GDR.

#### Vie du réseau :

Revoir les fonctions des différents chargés de mission dans le cadre de réunions spécifiques (ou via des échanges mail) + une réunion dédiée aux pôles nationaux.

- Céline Houriez/Industrie : Voir si l'on peut identifier des besoins en codes et donc valoriser des codes développés en laboratoires auprès des industriels ?
- Mario Barbatti/Relations internationales : Contacter des organisations soeurs en chimie théorique en Europe (rencontres prospectives potentielles en 2021 et après ?)
- Franck Jolibois/Formation, cf. groupe de travail associé
- Marc Baaden/Centres de calcul, idem, groupe de travail logithèque
- Aurélie Perrier et Éric Brémond/Communication, proposition d'une nouvelle version du site du RFCT au printemps (en s'appuyant sur le kit wordpress du CNRS)

## 2) Label de Chimie Théorique 2018-2019, mise en place

- Pôle ouest : 2 semaines prévues début février. 10 M2 et 10-15 extérieurs (doct. postdoc...) attendus. La journée scientifique du pôle ouest se tiendra le 20 décembre (50 participants).
- Pôle sud-ouest : Une première partie faite à distance, et une semaine de TP en présentiel en janvier, 6-7 M2 prévus
- Pôle sud-est : 8 jours (3 lundis et 5 jours en janvier) avec 6 M2 et 6 doctorants
- Pôle IdF-nord : 2 semaines fin janvier, au moins une vingtaine d'étudiant (Orsay envoie 12 M2, année exceptionnelle)

## 3) Comptabilité

Après un premier semestre difficile avec la DR2, la gestion des comptes du GDR a été transférée à Victoria Terziyan (aussi gestionnaire du Laboratoire de Biochimie Théorique) et toutes les subventions aux pôles et aux manifestations scientifiques ont finalement été versées.

Il reste environ 3000 € sur les fonds 2018 :

- Attribution d'une subvention de 1000 € au GGMM pour leur rencontre 2019 (celle-ci se tient à Nice la première semaine d'avril, ils ne pouvaient donc participer à l'appel d'offre de mars 2018)
- Utilisation du reste pour l'organisation des rencontres prospectives à Nantes, Remi va demander l'ouverture d'une ligne de compte au plus vite.

Prochaine réunion en février/mars avec retour des différents groupes de travail (les noms soulignés plus haut sont chargé d'initier la discussion par mail).