

Bilan de la réunion des responsables des pôles régionaux

18 décembre 2018 – en visio-conférence

Présents : Didier Bégué (*pôle Sud-Ouest*), Karine Costuas (*comité de pilotage*), Elise Dumont (*pôle Sud-Est*), Arnaud Fihey (*pôle Ouest*), David Lauvergnat (*pôle Nord et Ile de France*), Christophe Raynaud (*pôle Sud-Ouest*), Vincent Robert (*pôle Est – Nord-Est*)

Excusés : Adèle Laurent (*pôle Ouest*), Peter Reinhardt (*pôle Nord et Ile de France*)

1 - Formation – enseignement – label de chimie théorique

Les premiers travaux du groupe en charge de la formation pour le projet de fédération ont permis de constater que des informations étaient disponibles sur le site Internet du réseau mais en tant que sous-rubriques des onglets de chacun des pôles régionaux (information potentiellement difficile à trouver). Pour le pôle Sud-Ouest, l'accès à des fichiers .pdf ou des captures de cours se fait sur un autre site.

Un travail de recensement des cours donnés et des supports fournis dans chaque pôle sur plusieurs années est en cours par le groupe de travail ; les responsables de pôles vont être sollicités sur ce point. L'idée est d'une part, en ce qui concerne le label, de voir si des manques sur certains domaines existent, et d'autre part, d'égaliser les contenus (sur les fondamentaux notamment).

Une réflexion est également entamée sur la forme que pourrait prendre les formations et la mise à disposition des contenus. Les supports de cours sous forme .pdf pourraient être téléchargeables via des pages dédiées du site avec un accès libre (site web en refonte), moyennant une identification ou par inscription et mot de passe par exemple. L'accord des auteurs est indispensable. Des captures de cours sont aussi envisageables mais doivent être associées à des questions (en interactif ou a posteriori / guide de visionnage – questions/réponses), des séances de TP en présentiel ce qui demande un financement du GDR ou des écoles doctorales ou laboratoire d'accueil de stage M2. L'implication des enseignants devra être valorisée également auprès de chaque université (financement en local). La baisse des dotations aux pôles en 2018 a obligé à un fonctionnement différent et l'utilisation de cours enregistrés.

2 - Animation scientifique des pôles régionaux

Chaque pôle possède une organisation et une taille différentes avec une structuration de la recherche elle aussi différente.

Le pôle Nord et Ile de France ne gère pas d'animation scientifique en dehors de la formation puisque celle-ci existe sous la forme de journées scientifiques nationales ou locales comme

les Journées Théorie, Modélisation et Simulation (<https://jtms2018.sciencesconf.org>) organisées par la subdivision « Modélisation et Simulation » de la SCF sur la région parisienne, la Journée de Simulations Numériques en Chimie de Paris Saclay (<http://hebergement.u-psud.fr/simuchimie/?p=569>).

Le pôle Sud-Est dispose de rencontres régionales régulières (Journées de printemps de la SCF Rhône-Alpes, et journées Chimie et Avenir organisés par le club jeunes de la SCF Rhône-Alpes. Des journées thématiques (CP2Km Lammps...) sont également organisés au Centre Blaise Pascal (Lyon).

En ce qui concerne le pôle Sud-Ouest, une réunion annuelle regroupant l'ensemble des étudiants du réseau et les enseignants est organisée en fin d'année dans le but de permettre aux étudiants de présenter leurs travaux de recherche en master 2. Cette réunion annuelle permet également à l'équipe pédagogique d'organiser le programme pédagogique de l'année suivante. D'autres évènements structurants réguliers animent la communauté du pôle Sud-Ouest.

Les pôles Est – Nord-Est et Ouest fonctionnent de façon similaire avec une ou deux journées scientifiques annuelles ou bisannuelles organisées par les pôles :

- Les Rencontres des Chimistes Théoriciens du Grand-Est (RCTGE) sont des journées scientifiques organisées périodiquement (tous les deux ans environ). Elles réunissent les chimistes théoriciens du Pôle Est et Nord-Est du Réseau. Elles sont organisées à tour de rôle par les différents partenaires du Réseau du Grand-Est.
- Les rencontres annuelles sont l'occasion, sur une journée, de rassembler les différents acteurs de la modélisation de l'Ouest de la France. Elles se déroulent sur une journée et rassemblent les chercheurs et enseignants chercheurs du pôle ainsi que les étudiants et post-doctorants. La parole est donnée en priorité aux étudiants et jeunes chercheurs, et des personnalités de la chimie théorique extérieures au pôle sont invitées pour des conférences plénières.

3 - Accès des membres du RFCT des pôles régionaux aux moyens de calcul

Tout comme la formation et l'animation scientifique, les moyens de calculs à disposition sont très disparates selon les pôles et même au sein d'un même pôle en excluant les accès aux centres de calculs haute performance (HPC) nationaux (IDRIS, CINES, CCRT, TGCC – Tier 1) via le GENCI d'accès identique pour tous (moyennant un besoin HPC ce qui n'est pas forcément le cas pour toute la communauté. Le Tier 2 correspond aux mésocentres implantés et financés pour partie par les régions. Leur accès est règlementé et parfois dédié à un domaine de recherche et par conséquent ne couvre pas l'ensemble des chercheurs du RFCT du territoire français. Une liste est disponible sur : <http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique7>. Après une étude un peu plus approfondie, il semble que seul le territoire breton soit en reste (moyens dédiés à la recherche sur la mer et

la génétique). Un élément important à mentionner sur ces structures est que le budget de ces mésocentres n'est pas récurrent pour la plupart et provient d'une combinaison de ressources CNRS, Ministère, Région, ANR, Universités... Une réflexion est sans doute à mener sur les compétences, logiciels et moyens de manière général (dont l'achat de licence) présents sur ces méso-centres concernant les calculs atomistiques. Pour finir, beaucoup d'équipes possèdent des moyens de calculs locaux (appelé Tier 3) dont le financement n'est pas non plus pérenne. Le fonctionnement de ces machines est parfois assuré par des membres chercheurs ou enseignants-chercheurs de ces laboratoires au détriment de leur activité de recherche.

Une étape de recensement est certainement nécessaire et sera lancée dans le premier trimestre 2019. La fédération de recherche pourrait être un support pour tenter de ventiler des heures disponibles dans certains mésocentres à des laboratoires n'ayant pas les ressources nécessaires pour diverses raisons (moyennant un projet de recherche, une compensation financière ou autre chose à définir). Une organisation plus globalisante pourrait même être envisagée.