

### 3 mars 2015 : 14h30-16h30

Réunion du bureau dans une salle de visioconférence à l'UPMC, avec 5 sites distants.

Présents : C. Léonard, S. Sacquin Mora, A. Boutin, P. Reinhardt

Non-présents : D. Hagebaum-Reignier, N. Ferré, E. Dumont, I. Demachy, C. Adamo

Visioconf : Ph. Carbonnière, D. Bégué, Ch. Raynaud, V. Robert, X. Rocquefelte, K. Costuas

#### 1. Responsable enseignement : [Xavier Rocquefelte <xavier.rocquefelte@univ-rennes1.fr>](mailto:xavier.rocquefelte@univ-rennes1.fr)

Xavier a été chargé de répertorier ce qui existe en termes de cours en ligne dans le domaine de la chimie théorique de façon à en informer les membres du réseau et de voir si le réseau doit se mettre dans la construction d'un moodle (Moodle = <https://moodle.org/> Open-Source learning platform). Il a préparé une présentation qui recense les sites existants. Au niveau français, il existe des cours en ligne au niveau licence via « Unisciel » (<http://www.unisciel.fr/>). Il existe quelques sites en anglais pour le niveau supérieur, mais très peu étoffés. Xavier déplore un manque de cours PostHF en ligne, car Unisciel reste au niveau licence. Les sites trouvés par Xavier seront mis en ligne sur le site web du réseau.

Il est souligné qu'une page explicite "enseignement" existe dans le site du RFCT, cependant peu utilisée et consultée. Ce serait à développer.

Des initiatives ont été menées dans certains pôles autour des cours du label (Est, IdF-Nord) ou de la mise en place d'un master régional (Sud-Ouest). Il a été demandé aux responsables de pôles de pouvoir mettre les liens vers ces cours sur le site du réseau avec l'accord des responsables de cours.

Dans le cas de cours enregistrés, il faudrait les retravailler pour les mettre au format 12 min dans la mesure du possible. Ces cours en ligne pourraient servir pour que les étudiants puissent travailler les cours et/ou les pré-requis avant le début des cours du label.

La mise en place d'un moodle pourrait permettre de restreindre l'accès à ces ressources. A voir, si trop peu de volontaires souhaitent mettre l'accès à leurs cours sur le site du réseau.

#### 2. Bilan des enseignements du label :

Pôle ouest : 1 semaine avant les départs en stage (pas possible de faire plus). 22 participants de Rennes dont 7 M2.

Pôle sud-ouest : soutenance de stage fin juin - début juillet, pour décider de l'obtention du label.

2 semaines de cours : 1 automne, 1 avant stage fin janv. Cette année, des cours du Master européen à Toulouse en septembre ont été mutualisés avec les cours du label.

8 participants dont 6 M2 : 3 Toulouse, 1 Montpellier et 2 de Pau, plus 2 doctorants de Toulouse.

Pôle est : 2 semaines à Nancy ou Strasbourg : 1 autour de la Toussaint + 1 tout début janvier. 7 participants dont 3 M2. Les cours sont accessibles à travers les sites web des différents intervenants.

Pôle IDF-nord : 2 semaines en janvier, la deuxième a été découpée en deux sous-thèmes.

22 enseignants ont participé, dont 3 de Lille. 34 participants dont 1 de Lille (voir doc attachés).

Bilan actuel des participants pour 2014-2015 :

Pôle	M2	Doctorant	Post-doctorant	MCF	autre

IDF-nord	16	16		2	
Ouest	7	15 ?			
Sud-Ouest	6	2			
Sud-Est	13	8			2
Est	3	3	1		

**Il est demandé de chaque pôle de fournir, dès qu'elle est disponible, une liste nominative indiquant :**

- les personnes qui ont juste suivi le label (80% des enseignements au minimum)
- des doctorants ayant réussi le label
- des M2 ayant validé le label (enseignement + stage en chimie théorique)

pour pouvoir éditer les diplômes.

Organisation financière des pôles :

Ouest : label (frais de déplacement et hébergement des intervenants et des éventuels étudiants de M2 de Limoges) + organisation d'une journée du pôle.

Sud-ouest : label (déplacement et hébergement des M2, les intervenants sont pris en charge par les labos) + organisation d'une journée du pôle ?

Est : label (déplacement et hébergement des M2, les intervenants sont pris en charge par les labos)

IDF-nord : (frais de déplacement et hébergement des intervenants et des étudiants de M2 de Lille)  
+ ?

**3. Bilan financier : GDR3333. Le CNRS a alloué 14000 euros.**

Répartition prévisionnelle

9200 Euros = 4 x 2000 + 1200 IdF/Nord

pour le fonctionnement des pôles

4000 Euros manifestations déjà promises en 2014 suite à l'appel à subventions

Restent 800 Euros

Une demande de financement pour la réunion du GDRCorrel a été déposée. Cette demande pose soucis, car elle ne répond pas à un appel d'offre et le financement entre GDR peut ne pas être bien perçue. Le RFCT a déjà financé la réunion du GDRCorrel en 2013, suite l'appel à subvention. Ce financement avait également soulevé des discussions, mais le RFCT était alors dans une situation financière avantageuse.

Si ce n'est pas vital pour l'organisation de la réunion du GdRCorrel (voir demande envoyée le 28.02.15), cette somme sera utilisée pour permettre à 1 ou 2 doctorants ou post-doctorants méritants de partir en congrès.

Si il reste ensuite un reliquat, il sera versé ensuite au pôle qui en a le plus besoin.

Aucune décision définitive n'a été prise à cette date concernant la dépense de cette somme. Les pôles doivent aussi vérifier si leur attribution prévisionnelle est bien calibrée.

**4. interactions avec les centres de calcul :**

- Le CFCAM-IDF a invité le RFCT à participer au discussion meeting « Développement de codes de chimie théorique dans un environnement HPC (voir doc joint)» les 12 et 13 Mars 2015, à l'IDRIS. Peter nous représentera et nous fera un petit CR.

- Liens avec les grands centres de calcul : plusieurs demandes d'heures ont été retoquées car GAUSSIAN n'a pas été installé sur toutes les machines des centres nationaux (ce code n'est pas jugé assez parallèle pour les grands centres de calcul). L'information a déjà été remontée au comité d'utilisateurs via MB Lepetit, mais il faudrait peut-être apporter du poids à cette remontée.

Se pose aussi la question de la compilation des codes sur ces machines, car il y a parfois des pertes de performance.

Les méso-centres régionaux semblent plus adaptés pour les calculs moléculaires et les responsables de pôle doivent voir si des chercheurs extérieurs à la région peuvent déposer une demande d'heures dans leur méso-centre régional. Ces infos seront à mettre en ligne.

### **5. Relations avec industrie :**

La liste de nos anciens étudiants qui ont trouvé un poste dans l'industrie est en cours de mise ne place par Anne. On a une quinzaine de noms et demande à être étoffée. Pour des raisons de sécurité, elle sera mise en ligne sans donner l'adresse mail de l'ex-étudiant. Le nom de cette personne sera donné ainsi que son contact dans le bureau dont l'email est déjà accessible via le site.

La prise de contact avec nos anciens doit être aussi l'occasion de leur faire savoir que le réseau existe et qu'il peut leur être utile : faire passer des annonces de stage, d'offres d'emplois, etc ...

**6. Gestion du site web :** les différents points mentionnés plus hauts seront intégrés au plus vite sur le site web par les responsables de pôle et par Sophie.

**Gestion de la liste de diffusion :** la liste est gérée actuellement à Nancy. Elle contient des infos obsolètes. Gérald Monard sera contacté pour lui demander s'il veut être responsable officiellement de la maintenance de cette liste.

### **Remarque finale :**

Vincent nous interpelle sur le fait que l'information concernant l'Ecole (International summer School in electronic structure Theory: electron correlation in Physics and Chemistry (ISTPC) <http://quantique.u-strasbg.fr/ISTPC2015/>) qu'il co-organise à Aussois du 14 au 27 juin 2015 ne semble pas diffuser beaucoup. L'inscription 750 euros pour 15 jours. A ce jour, seuls 8 étudiants sont inscrits alors que 50 sont attendus.

Cette école est organisée dans l'esprit des écoles scandinaves et doit donc être fortement soutenue par le réseau. Les membres du bureau sont invités à faire une propagande appuyée autour d'eux.

Prochaine prévue réunion en octobre 2015, le format de visioconférence s'est montré performant pour ce type de réunion. Cependant, il est souhaitable que le nombre exact de postes distants soit connu à l'avance.