

Projet de Fédération de Recherche :

Théories, Modélisations et Simulations Atomistiques (ThéMoSiA)

Objet : Projet de Fédération ThéMoSiA – Accord de principe sur la participation des laboratoires et de leur(s) tutelle(s).

Ce courrier a pour objectif de présenter le projet d'évolution du groupement de recherche CNRS (GDR) 3333 « Réseau Français de Chimie Théorique »⁽¹⁾ en une Fédération de Recherche (FR) intitulée « Théories, modélisations et simulations atomistiques » (ThéMoSiA).

Contexte et objectifs :

La communauté des chercheurs travaillant dans le domaine des théories, modélisations et simulations atomistiques est répartie dans un grand nombre de laboratoires en chimie, physique et biologie, avec parfois une ou deux personnes seulement par site. Une telle configuration nécessite une structuration nationale dynamique et pérenne. Pour le mandat actuel du GDR 3333, 65 équipes de recherche sont signataires, affiliées à l'INC, l'INP, l'INSB, l'IN2P3 mais aussi au CEA et à l'INSERM.

Ce projet de FR est une action collective dont le but est de non seulement maintenir mais surtout renforcer le niveau de la recherche française couvrant théories, modélisations et simulations atomistiques. La communauté a été sollicitée à plusieurs reprises depuis le nouveau mandat, notamment lors des tables rondes des rencontres prospectives organisées à Nantes en juin 2019⁽⁴⁾, ainsi que lors de différentes réunions organisées en région avec des équipes de recherche. La construction concrète du projet implique les 20 personnes composant le bureau de l'actuel GDR⁽²⁾ et les personnes qui ont souhaité s'impliquer suite à l'appel fait via la liste de diffusion du réseau.⁽³⁾

Cette évolution est une réponse à la non adéquation de la structuration en GDR du réseau par rapport à son contour actuel et à ses objectifs de pérennisation de la discipline. La création d'une fédération plus globalisante et généraliste est aussi impulsée par l'évolution de la recherche actuelle vers des applications de plus en plus multi-disciplinaires et/ou à l'interface de plusieurs domaines, qui nécessite de nouveaux outils théoriques et des mutations méthodologiques.

Un des objectifs de la Fédération est de fortement soutenir les recherches à chaque échelle, de créer les passerelles qui permettront un partage de connaissances entre communautés sachant que la même théorie/méthodologie peut être utilisée pour plusieurs objets d'étude. Les actions seront mises en place pour initier des interfaces entre méthodes voire l'émergence de nouveaux concepts, notamment lors de changements d'échelle.

Un deuxième élément crucial est la conservation d'une structuration nationale pour maintenir la formation théorique nécessaire aux doctorants et aux futurs collègues sachant que très peu de Master dispensent des cours permettant d'acquérir les bagages scientifiques nécessaires. Il semble également important que la FR ouvre ces formations au secteur privé. La formation continue, couvrant le spectre le plus large possible de connaissances, est également un point clé de la FR. Le réseau y contribue depuis sa création par différentes actions régionales et nationales que la Fédération s'attèlera continuer de renforcer et améliorer.

Enfin, un volet logiciel est devenu nécessaire, sachant que nombreux codes et procédures de post-traitement ont été et sont développés en France, sans pour autant que ces efforts de

développement soient connus à l'échelle nationale. Dans ce cadre, un des volets de la fédération sera donc de développer une logithèque nationale répertoriant et mettant à disposition de la communauté les codes développés dans nos laboratoires. En effet, il est important de permettre aux équipes qui le souhaitent de les diffuser et d'avoir la possibilité de les pérenniser via une structure nationale, et de soutenir l'utilisation de ces logiciels par de nouveaux utilisateurs via l'organisation de formations. Afin de renforcer l'utilisation des codes à l'échelle nationale, la fédération soutiendra notamment la mise en place de collaborations inter-équipe concernant le développement logiciel et les applications.

Grandes lignes du projet :

Dans sa forme actuelle, ce projet de création de FR s'articule autour de trois axes principaux :

- **Axe recherche** : le projet couvrira l'ensemble des thématiques associées aux théories et modélisations atomistiques, avec une coloration vers les modélisations multi-échelles pour le premier mandat, dans le but de stimuler de nouvelles collaborations au sein de notre communauté. Les rencontres prospectives ont notamment permis de nourrir la réflexion autour de l'état de l'art, des verrous et des solutions que la fédération pourrait adopter.⁽⁴⁾
- **Axe logithèque** : cet axe concernera l'identification, mise en place d'un répertoire national et mise à disposition, sur la base du volontariat, des codes de calculs développés dans nos laboratoires.
- **Axe formation** : il s'agira ici de se focaliser sur la formation initiale d'étudiants de Master ou de thèse (label), la mise en place de cours et formation en ligne, la formation par les développeurs de codes aux utilisateurs le plus largement possible en ouvrant ces formations au secteur privé.

La FR permettra également d'avoir une visibilité et un poids face aux enjeux que sont les moyens de calculs (Tiers 0-3), la gestion des licences, la mise en place des formations universitaires, le positionnement international... Tous ces paramètres étant nécessaires au développement de la discipline couvrant de nombreux domaines d'application.

Gouvernance :

Sous l'impulsion de l'Institut de Chimie du CNRS, un Comité Scientifique a été mis en place pour guider l'évolution de notre structuration vers une fédération, il comprend :

Thierry Deutsch (L_Sim, CEA Grenoble), Georg Jansen (University of Duisburg-Essen), Lucie Delemotte (KTH Royal Institute of Technology, Stockholm), Fabien Gatti (ISMO, Orsay), Ilaria Ciofini (LECIME, Paris), Jean-François Dufrêche (ICSM/LMCT, Marcoule).

Le CS s'est réuni une première fois en juin dernier lors des Rencontres Prospectives de Nantes et se réunira ensuite à mi-mandat pour discuter de la politique scientifique de la Fédération.

En plus du Comité de Pilotage actuel, la Fédération comprendra également un Conseil de Laboratoire, comprenant notamment des représentants des unités membres.

Fonctionnement et précisions :

La Fédération sera intégralement financée par l'Institut de Chimie (INC) du CNRS, qui soutient également le projet de logithèque nationale auquel sera affecté un poste d'Ingénieur de Recherche CNRS ; ainsi, **aucune contribution financière n'est requise de la part des tutelles des unités membres.**

Les chercheurs travaillant dans les unités membres conserveront bien entendu leurs affiliations pour les signatures des publications. Le soutien apporté par la FR aux projets de recherche (notamment par le financement de collaborations inter-laboratoires) pourra apparaître sous la forme de remerciement à la fin des publications scientifiques associées.

Par ailleurs, la FR n'a pas non plus vocation à se substituer aux tutelles (organisme de recherche, Universités...) pour le portage de projets dans le cadre d'appels d'offre (ANR, ERC...). **Les projets déposés dans le cadre de la FR seront donc toujours portés par la tutelle de leur coordinateur.**

Enfin, nous rappelons que tous les services et activités proposées par la FR (soutien aux manifestations scientifiques, financement de projets collaboratifs, stockage de code et formation dans le cadre de la logithèque nationale) seront **ouverts à l'ensemble des chercheurs et chercheuses théoriciennes travaillant en France**, que leur unité d'appartenance soit membre de la FR ThéMoSiA ou non.

Calendrier et actions :

Le projet de FR ThéMoSiA une fois finalisé sera présenté devant les sections appropriées du Comité National de la Recherche Scientifique (CoNRS) lors de la session de printemps 2020, pour une mise en place attendue dans le courant de l'année 2020.

Afin de préparer au mieux ce projet, **nous souhaiterions recueillir l'accord de principe des laboratoires souhaitant devenir membres porteurs de la FR et de leur(s) tutelle(s)**, en amont du dépôt de dossier auprès des sections du CoNRS. Cet accord peut être transmis directement par email auprès du comité de pilotage, suivant le modèle joint en dernière page ou en format libre.

Compte tenu de l'importance de ce projet pour notre communauté scientifique, nous espérons pouvoir compter sur votre soutien dans la mise en place de celui-ci. Cette FR qui n'existera que par le dynamisme et l'implication de tous. Les suggestions et propositions qui permettront de construire ce projet venant de tous sont nécessaires pour que la FR remplisse ses objectifs

En espérant votre retour sur l'ensemble des éléments abordés et le cas échéant le souhait de votre laboratoire et de sa(ses) tutelle(s) d'être partie prenante dans ce projet, très cordialement,

Le comité de pilotage

Philippe Carbonnière, Karine Costuas, Rémi Maurice, Sophie Sacquin Mora

⁽¹⁾ <http://www.chimie-theorique.cnrs.fr>
<http://www.chimie-theorique.cnrs.fr/spip.php?article553>

⁽²⁾ <http://www.chimie-theorique.cnrs.fr/spip.php?rubrique1>

⁽³⁾ Hazar Guesmi, Jean-Sébastien Filhol et Thibaud Etienne (ICGM, Montpellier), Benjamin Rotenberg (PHENIX, Paris), Fabienne Ribeiro (IRSN, Cadarache), Pascal Boulet (Madirel, Marseille), Dominique Guillaumont (CEA, Marcoule), Maylis Orio (ISM2, Marseille), Dominique Costa (IRCP, Paris), Antonio Monari (LPCT, Nancy), Aurélien Moncomble (LASIR, Lille), Rachel Schurhammer (CMC, Strasbourg), Jean-Philip Piquemal (LCT, Paris) et Stephan Steinmann (ENS, Lyon).

⁽⁴⁾ <http://www.chimie-theorique.cnrs.fr/spip.php?article612>

Accord de principe - Laboratoire

Je soussigné, directeur.trice du laboratoire, atteste avoir pris connaissance du projet de création de la Fédération de Recherche (FR) ThéMoSiA et donner mon accord de principe pour que le laboratoire que je dirige devienne membre de la FR ThéMoSiA, une fois celle-ci créée. Je prends note du fait qu'une convention régissant les objectifs et le fonctionnement de la FR sera mise en place par l'INC lors de cette création, et que l'accord formel des tutelles sera demandé à ce moment-là.

Date et lieu :

Cachet/signature :

Accord de principe - Tutelle

Je soussigné, de la tutelle
..... du laboratoire, atteste
avoir pris connaissance du projet de création de la Fédération de Recherche (FR) ThéMoSiA. Sur la base
des informations qui m'ont été communiquées, je donne un accord de principe pour que le laboratoire
susmentionné puisse devenir membre de la FR ThéMoSiA, une fois celle-ci créée. Je prends note du
fait qu'une convention régissant les objectifs et le fonctionnement de la FR sera mise en place par l'INC
lors de cette création, et que l'accord formel des tutelles sera demandé à ce moment-là.

Date et lieu

Cachet/signature :
