

**ABC&T**  
**33 rue Charles Nodier**  
**25000 Besançon**

**ASSOCIATION DE BIOPHYSIQUE COMPUTATIONNELLE ET THEORIQUE (ABC&T)**  
**ASSEMBLEE GENERALE ORDINAIRE DU 11 JUIN 2022**  
**Procès Verbal**

Le 11 juin 2022 à 11h30, les membres de l'association ABC&T se sont réunis en mode visioconférence (Skype) en assemblée générale ordinaire, sur convocation du Président.

L'assemblée désigne comme président de séance, M. Philippe Huetz et comme secrétaire de cette session, Mme Dan Jin.

Les membres de l'assemblée émargent la feuille de présence en entrant en séance (apposition de leurs signatures numérisées).

Les membres présents sont au nombre de 5 sur un total de 9 composant l'association. Absents : Marc Tuloup (excusé, pouvoir à Philippe Huetz), Jean-Luc Mussard (excusé, pouvoir à Philippe Huetz), William Cornuez (excusé, pouvoir à Philippe Huetz), Stéphane Chrétien (non excusé, pas de pouvoir transmis).

Le Président rappelle l'ordre du jour :

- Point sur les membres et les cotisations
- Remerciements
- Election des membres du CA/Bureau
- Point sur les actions entreprises en 2021 (rapport moral)
- Bilan financier (2021, Dan JIN) et approbation des comptes
- Budget de l'exercice 2022 (prévisionnel)
- Aspects scientifiques
- Projets, idées, perspectives, divers..

❖ **Point sur les membres et les cotisations**

ABC&T comprend 9 membres actifs à ce jour.

Deux cotisations restent à régulariser.

❖ **Remerciements**

Philippe :

Je remercie Dan, notamment pour son suivi sans faille de la comptabilité et son implication pour les demandes FDVA.

Merci à Suzanne et Joseph Huetz pour un don l'an dernier.

Grand merci aussi à Stéphane Chrétien, pour un don de 270 €.

Merci à la Banque Populaire BFC Helvétie (Besançon) pour un don de 150 €.

Je remercie le Département du Doubs, pour l'attribution en 2021 de 2000 € du Fonds pour le Développement de la Vie Associative (FDVA), attribués pour notre fonctionnement et pour notre projet de constitution d'une machine de calcul.

### ❖ Election des membres du CA/Bureau

Philippe Huetz se représente pour la fonction de Président.

Dan JIN poursuit ses fonctions de Secrétaire/Trésorière.

Personne ne s'est signalé pour se proposer pour entrer dans le Bureau avant cette AG, nous reposons donc la question, à savoir si quelqu'un serait intéressé pour le poste de Secrétaire, ce qui allégerait Dan de certaines tâches, ou pour le poste de Président.

**Personne d'autre ne se propose pour ces postes.**

Il est donc procédé au vote, pour maintenir Philippe HUETZ dans sa fonction de Président, ce qui vaudra pour une durée de 4 ans.

Le quorum est atteint, Philippe ayant les pouvoirs de Jean-Luc, William et Marc, ceci donnant avec les membres présents au nombre de 5 une participation de 8 personnes sur les 9 composant l'association.

**En respect avec nos Statuts, il est procédé au vote à scrutin secret pour réélire Philippe Huetz dans sa fonction de Président (le nombre de voix inclut les absents avec procuration).**

**RESULTAT :    POUR : 8            CONTRE : 0            ABSTENTIONS : 0**

**Philippe HUETZ est reconduit à l'unanimité des voix des membres présents ou ayant donné procuration sur le poste de Président.**

### ❖ Point sur les actions entreprises en 2021 (rapport moral)

Philippe :

- Constitution du dossier FDVA 2021.

- Beaucoup de recherches et de vérifications de compatibilité par rapport au matériel à commander pour constituer la machine de calcul, et pour trouver les meilleurs prix.

- Travail de communication autour de connaissances scientifiques sur divers sujets, avec beaucoup de recherche de littérature dans chaque domaine.

- Lectures et échanges sur CASP14 avec Stéphane (à poursuivre).

## ❖ Bilan financier (2021, Dan JIN) et approbation des comptes

Philippe passe la main à Dan pour cette présentation (projection d'un PowerPoint préparé par Dan).

### **Présentation du bilan financier du 01/01/21 au 31/12/21 (Dan Jin) :**

#### **Produits**

- Subvention FDVA : 2000,00 €
- Cotisations : 270,00 €
- Dons: 431,00 €
- Produits financiers : 10,47 €

**Total des produits : 2711,47 €**

#### **Charges :**

- Fournitures d'entretien et de petit équipement : 2796,19 €
- Fournitures administratives : 0,59 €
- Petits logiciels : 191,43 €
- Assurances matériels : 39,12 €
- Frais postaux et de télécommunications : 86,87 €
- Services bancaires : 56,50 €

**Total des charges : 3170,70 €**

**Résultat de l'exercice : - 459,23 €**

**Trésorerie : 1330,94 €**

Dan :

Je vais vous présenter le résultat financier, dépenses, recettes, la situation sur notre trésorerie, ainsi que le budget 2022 dans ses grandes lignes.

A ce jour, j'ai clôturé les comptes de l'exercice comptable 2021.

Concernant notre résultat comptable 2021, les recettes de l'association ne couvrent pas nos dépenses, donc on a eu une perte de 459,23 euros.

Les principales dépenses de notre association ont été pour le matériel informatique, les logiciels, le site internet et les frais bancaires. Parmi lesquelles les dépenses de matériel informatique étaient les plus importantes, soit environ 88% en 2021.

Depuis 2020, l'essentiel de nos recettes provient des subventions FDVA : 1500 € en 2020 et 2000 € en 2021, ce qui a représenté environ 75-80% de nos ressources. La somme totale des cotisations en 2021 n'a pas beaucoup varié par rapport à 2020. Par contre nous avons reçu 431 € de dons l'année dernière, contre 111 € en 2020.

Concernant notre trésorerie, au 31 décembre 2021, banque et caisse réunies, elle s'élevait à 1330,94 € après dépense des 2000 € du FDVA. Nous n'avons pas d'immobilisations à considérer, celles-ci ne prendront effet qu'en 2022 à partir de la mise en service de la nouvelle machine.

Philippe :

En 2021, contrairement à 2020, le budget FDVA a été versé très rapidement sur le compte de l'association, ce qui pouvait nous permettre de mieux anticiper les commandes de matériel.

Concernant les charges, je précise que l'essentiel de l'attribution FDVA 2021 a consisté en l'achat de modules de RAM (Kingston DDR4 ECC Registered 3200 MHz), soit 8 barrettes de 32 Go à 239,90 € par barrette, pour un total de 1919,20 €. Malheureusement il a été très compliqué d'obtenir 8 barrettes de cette nature, mais j'ai fini par trouver les modules compatibles avec la carte mère. D'où un achat plutôt en fin d'année (mi-décembre). Cette mémoire RAM est une pièce maîtresse dans la configuration de la machine de calcul. Dans notre prévisionnel, nous avons estimé le prix par module à 210 € environ, malheureusement le prix de la RAM a très vite fortement augmenté par la suite et 239,90 € a été le meilleur prix trouvable dans cette opportunité d'un achat groupé.

**Il est procédé au vote à main levée.**

**Approbation des comptes 2021 : POUR : 8 CONTRE : 0 ABSTENTIONS : 0**

**Les comptes 2021 sont approuvés à l'unanimité des voix des membres présents ou ayant donné procuration.**

#### ❖ Budget de l'exercice 2022 (prévisionnel)

Dan présente ensuite le budget 2022 dans ses grandes lignes.

Dan :

Au 1<sup>er</sup> janvier 2022, il nous restait environ 1331 € en trésorerie. Au jour d'aujourd'hui, il nous reste environ 460 € après achat de divers composants et montage de la machine chez LDLC.

Philippe et moi avons refait en avril une demande de subvention de fonctionnement FDVA (*Fonds pour le développement de la vie associative*) pour ABC&T pour un montant de 3230 €. Cette subvention est prévue pour l'achat d'un écran, d'un SSD externe, d'un onduleur, d'un disque dur et de logiciels essentiels pour le fonctionnement de notre association.

Philippe :

On en reparlera en 2023, mais la base d'une machine de calcul est à présent montée, selon tous les critères requis, pour l'accueil d'une ou plusieurs cartes graphiques.

Nous avons refait une demande FDVA pour notre fonctionnement global et, comme Dan l'a évoqué, ce qui nous reste sur le compte avec nous l'espérons une réponse positive du FDVA nous permettra d'envisager ce prévisionnel d'achats, très importants pour le fonctionnement. Nous espérons également pouvoir obtenir au minimum 500 € de dons. Je referai une demande à la BP BFC Helvétie. Tout cela n'inclut pas la partie cartes graphiques, qui est le cœur de ce qui m'est nécessaire pour réaliser les calculs de chimie quantique, de dynamique moléculaire ou autres. Pour l'instant j'utilise une carte Nvidia procurée d'occasion (Nvidia Quadro K6000), qui n'a pas montré de signe de faiblesse jusque là mais qui reste néanmoins pas toute récente. Pour l'achat d'une ou deux cartes graphiques récentes pour compléter la configuration actuelle pour la mettre au niveau d'un petit supercalculateur

raisonnable, je préconise un financement participatif, type HelloAsso. Nous ne pouvions en effet pas inclure ces cartes dans notre nouvelle demande de fonctionnement FDVA 2022, chaque élément ne pouvant dépasser 500 € HT. Je suis en train de voir quel type de cartes serait le plus approprié, soit deux cartes AMD (type AMD Radeon Pro VII) qui vaudraient a priori aux alentours de 2000 € chacune ou un peu plus, soit une carte Nvidia, dont l'avantage serait un montage possible en association avec la K6000 (le temps qu'elle tient encore). Problème : le prix d'une carte Nvidia adaptée, A100 par ex. (40 ou 80 Gb) se situe entre 10500 et 15500 € au prix actuel. L'autre avantage d'une carte Nvidia est la possibilité d'utiliser CUDA, là où une AMD se restreint à OpenCL, moins standard notamment pour les logiciels de chimie computationnelle en général. Je n'envisageais pas de carte à base Nvidia l'an dernier, mais il va falloir peser le pour et le contre et bien choisir la stratégie, puis trouver les financements.

### ❖ Aspects scientifiques

Philippe :

- Installation/réinstallation propre d'une ou plusieurs machines virtuelles Linux Debian (différents environnements spécifiques) pour essayer d'optimiser au mieux les calculs en parallèle et aussi pour tester. C'est l'avantage d'un processeur multi-cœur à grand nombre de cœurs.
- Amélioration de la partie 'Base de connaissances' de notre site web (meilleure présentation des connaissances sous forme de cartes mentales par ex., mise en ligne de cours).
- Le projet résine de pin maritime/cancer peut à présent être repris (les calculs ne devraient pas être trop demandeurs dans un premier temps en fonction du niveau de théorie appliqué).
- Tester l'approche CASP14 avec la nouvelle configuration.
- Travail sur mes données postdoc (repliement des protéines) à Groningue.
- Poursuivre sur les sujets évoqués l'an dernier (alu dans l'eau/Alzheimer, flore intestinale/SARS-CoV-2).
- Découverte et révisions de divers domaines et outils logiciels : Python, R, le markdown, VS Code, le langage Wolfram, ChemShell (Warshel), Autodock, GAMESS, chimie quantique, physique mathématique...
- Dans la continuité de l'article dont j'ai parlé lors de notre dernière AG (*[Reverse-transcribed SARS-CoV-2 RNA can integrate into the genome of cultured human cells and can be expressed in patient-derived tissues, Liguó Zhang, Alexsia Richards, M. Inmaculada Barrasa, Stephen H. Hughes, Richard A. Young, and Rudolf Jaenisch, PNAS (2021)]*), un autre article très important sur ce sujet est sorti récemment, publié par une équipe suédoise de l'université de Lund qui a étudié la rétrotranscription de l'ARNm du vaccin Pfizer BioNTech : [Aldén, M.; Olofsson Falla, F.; Yang, D.; Barghouth, M.; Luan, C.; Rasmussen, M.; De Marinis, Y. Intracellular Reverse Transcription of Pfizer BioNTech COVID-19 mRNA Vaccine BNT162b2 In Vitro in Human Liver Cell Line. *Curr. Issues Mol. Biol.* 2022, 44, 1115–1126.]. Le professeur Didier Raoult le décrit très bien (vidéo youtube du 1<sup>er</sup> mars 2022 : *COVID : échange de gènes entre virus et avec l'homme*) : quand on met le vaccin sur des cellules humaines de foie, il est capable d'être rétrotranscrit, du fait de la rétrotranscriptase endogène LINE-1 des cellules humaines. Les PCR vont alors détecter de l'ADN, ce qui n'est pas normal pour un vaccin. (Il y a cependant aussi apparemment, plus ou moins et dépendant des lots, de l'ADN dans le vaccin Pfizer). Les auteurs trouvent dans l'ADN génomique de ces cellules une séquence d'ADN unique qui correspond au vaccin. La génotoxicité du vaccin Pfizer n'a jamais été analysée (il faudrait pouvoir le faire dans la durée). Difficile d'évaluer la fréquence de ce

phénomène, qui est peut-être rarissime, mais il n'y a pas de barrière biologique à ce que cela se produise, les outils sont là. Il est donc possible que des morceaux de virus ou de vaccin soient intégrés à des endroits divers, lié au hasard, et la probabilité est bien sûr augmentée sur des cellules qui se multiplient beaucoup (ex. les cellules germinales, les sujets jeunes étant donc d'autant plus à risque). La rétrotranscription intracellulaire de l'ARNm du vaccin Pfizer sur les cellules du foie qui y sont exposées est effective en 6 heures à peine. Cela pose le problème de façon plus générale pour toutes les approches à technologie ARNm qui sont en train de se mettre en place. Cette découverte est donc une avancée importante. Elle vient confirmer l'article de Zhang et al., PNAS 2021.

#### ❖ Projets, idées, perspectives, divers...

- Discussion sur le Contrat d'Engagement Républicain (obligatoire pour obtenir une subvention de l'Etat, dl 30 juin 2022 pour la Ville).
- Améliorer la sécurisation des données informatiques.
- Essayer de revendre les deux anciens PC de l'association qui ont été réparés et/ou améliorés.
- Organiser une sortie au Muséum d'Histoire Naturelle à Paris et une visite d'un laboratoire de recherche (nous n'avons pas encore pu organiser cela).
- Quelqu'un serait-il intéressé pour animer un peu l'association ? Organiser des sorties, des repas, créer un club... Aussi quelqu'un pour prospecter des financements (Yanie)... Quelques idées ont été évoquées : soirées organisées dans un restaurant avec animation et présentation de l'association. Stand de présentation de l'association à l'occasion d'un événement culturel. Petites loteries si possibles à organiser.
- Trouver une solution pour un salaire pour Philippe (exemple de la mathématicienne engagée par le physicien JP Petit sur un an grâce à un financement participatif).

**LA SÉANCE EST LEVÉE À 13h00.**

**Signature, après lecture, par le Président et la Secrétaire/Trésorière,**

**À Besançon, le 14 juin 2022 :**

La Secrétaire/Trésorière,

Dan JIN

Le Président,

Philippe HUETZ