

ABC&T
33 rue Charles Nodier
25000 Besançon

ASSOCIATION DE BIOPHYSIQUE COMPUTATIONNELLE ET THEORIQUE (ABC&T)

ASSEMBLEE GENERALE ORDINAIRE DU

25 NOVEMBRE 2023

Procès Verbal

Le 25 novembre 2023 à 11h00, 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 6 sur un total de 10 composant l'association. Absents : Jean-Luc Mussard (excusé, pouvoir à Philippe Huetz), William Cornuez (excusé, pouvoir à Philippe Huetz), Stéphane Chrétien (non excusé), Marc Tuloup (non excusé).

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 à cette date (rapport moral)
- Bilan financier (2022, Dan) et approbation des comptes
- Budget de l'exercice 2023
- Aspects scientifiques
- Projets, idées, perspectives, divers

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

ABC&T comprend 10 membres actifs à ce jour.

Les cotisations sont à jour pour 2022.

Je rappelle que nous envoyons un rappel pour chaque membre en fonction de la date de son premier versement de cotisation. Les cotisations sont une part non négligeable pour nos prévisionnels et dans notre budget.

❖ Remerciements

Philippe :

Je remercie Dan, pour s'occuper toujours consciencieusement des comptes avec le logiciel CALEB Gestion, et de son soutien moral constant.

ABC&T est grandement reconnaissante à une personne qui a désiré rester anonyme, pour un don conséquent, à savoir 2000 €, en juillet 2022.

Nous remercions la Banque Populaire BFC Helvétie (Besançon) pour un don de 150 € en décembre 2022.

Merci également à Stéphane Chrétien pour un don de 100 € en décembre 2022.

Merci à Fabrizio Faedda pour son aide lors du montage de la machine de calcul (il a emprunté une voiture et a eu la patience d'attendre de longues heures).

Merci enfin à tous les membres d'ABC&T pour leur adhésion à cette association, qui sans eux n'existerait pas.

❖ Election des membres du CA/Bureau

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 notamment pour le poste de Secrétaire, ce qui allégerait Dan de certaines tâches.

Ce n'est pas le cas. Dan veut bien poursuivre ses fonctions de Secrétaire aussi longtemps que personne d'autre ne se propose.

Il n'y a pas lieu de reprocher à un vote, Dan, Trésorière, poursuit donc également ses fonctions de Secrétaire.

❖ Point sur les actions entreprises en 2022 (rapport moral)

Philippe :

- Montage assisté de la machine de calcul chez LDLC pro à École-Valentin (Besançon). Cela a été une histoire extrêmement périlleuse et je ne ferai honnêtement plus appel à LDLC pro, qui a bâclé certaines choses : câbles trop tendus qui tordaient les connecteurs, passant par-dessus les slots des cartes graphiques, l'ordinateur ramené chez moi ne bootait pas car le bios n'avait pas été mis à jour, et ils ont failli me faire perdre mon disque de données parce qu'ils l'avaient mal connecté (une double alimentation était nécessaire), et pensant donc que le disque dur ne pouvait plus démarrer le technicien m'a fait croire qu'il était mort... Heureusement que je l'ai remonté pour vérifier a posteriori qu'il était bien encore fonctionnel.

- Le poste des moyens de sauvegarde était insuffisant et il a pu être renforcé heureusement, car c'était une priorité absolue.

- J'ai partagé avec vous par une série de mails mon intérêt sur des sujets scientifiques, illustrés de vidéos et documents, toujours avec une partie que j'ai espérée abordable pour tout le monde et une partie plus poussée pour ceux qui voulaient approfondir. Il y a eu notamment sur le sujet de l'IA des retours intéressants.

❖ Bilan financier (2022, 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 01/01/22 au 31/12/22 (Dan Jin) :

Produits

- Cotisations : 299,43 € (un membre a payé avec PayPal)
- Dons : 2 360,00 €
- Produits financiers : 0,82 €

Total des produits : 2 660,25 €

Charges :

- Achats de matériel, équipements et travaux (LDLC Pro) : 644,70 €
- Fournitures d'entretien et de petit équipement : 1 801,29 €
- Fournitures administratives : 207,08 €
- Petits logiciels : 183,04 €
- Entretien et réparations PC : 59,00 €
- Frais postaux et de télécommunications : 93,83 €
- Services bancaires : 57,31 €
- Dotations aux amortissements immobilisations : 1 265,43 €

Total des charges : 4 311,68 €

Résultat de l'exercice : -1 651,43 €

Trésorerie (livret A + Compte courant + Caisse d'argent liquide) : 944,94 €

Dan :

Je vais vous présenter : Résultat financier, Dépenses, Recettes, situation sur notre trésorerie. À ce jour, j'ai clôturé les comptes de l'exercice comptable 2022.

Concernant notre résultat comptable 2022, les recettes de l'association ne couvrent pas nos dépenses, donc on a eu une perte de 1651,43 euros.

Les principales charges de notre association ont été pour le matériel informatique, le montage PC, les dotations aux amortissements, les fournitures administratives et les logiciels. Parmi lesquelles les dépenses de matériel informatique étaient les plus importantes, soit environ 42% en 2022.

En 2022, nous n'avons pas eu la chance d'obtenir une subvention FDVA, donc l'essentiel de nos recettes provient des cotisations et des dons. La somme totale des cotisations en 2022 n'a pas beaucoup varié par rapport à 2021. Par contre nous avons reçu 2360 euros de dons l'année dernière, contre 431 euros en 2021.

Concernant notre trésorerie, au 31 décembre 2022, banque et caisse réunies, elle s'élevait à 944,94 euros.

Philippe :

Nous 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 demande était pour l'achat d'un écran, d'un SSD externe, d'un onduleur, d'un disque dur et de divers logiciels. Malheureusement cette subvention ne nous a pas été renouvelée pour une 3^{ème} année consécutive. Voici la réponse de Stéphane Cabley du FDVA : « Voici la motivation de la décision prise : aucun co-financement local identifié ou précisé. L'association a déjà été soutenue en 2020 et 2021. Les objectifs de l'association sont trop flou ou imprécis et le bilan 2021 présenté est trop succinct. Effectivement nous sommes obligés de faire des choix. Vous aurez la possibilité de redéposer une demande l'année prochaine. »

Comme il y a eu un problème avec le CER (Contrat d'Engagement Républicain), une option obligatoire pour la finalisation de ce dossier, une méthode déloyale de forcing on peut le dire, il valait finalement mieux que cela soit refusé. Nous avons par la suite décidé de ne plus faire de demande FDVA, ou de demande quelconque à l'Etat. En effet ce CER, et nous avons eu un échange à ce sujet qui a fait l'adhésion des membres, pose énormément de questions de fond. C'est pourquoi nous nous sommes également désengagés de tout lien avec la Ville de Besançon.

Il est procédé au vote à main levée.

Approbation des comptes 2022 : POUR : 8 CONTRE : 0 ABSTENTIONS : 0

Les comptes 2022 sont approuvés à l'unanimité des voix des membres présents ou ayant donné procuration.

❖ Budget de l'exercice 2023 (prévisionnel)

Dan présente ensuite le budget 2023 dans ses grandes lignes.

Au 1^{er} janvier 2023, il nous restait environ 945 euros en trésorerie. Nous avons obtenu pour 1700 euros de dons en 2023 jusque là, ce qui nous a permis d'acheter deux cartes graphiques (Nvidia Tesla P100 avec un refroidissement adapté) et un onduleur (onduleur puissant capable de gérer la charge de 3 cartes de calcul / graphiques). Au jour d'aujourd'hui, il nous reste environ 315 euros en trésorerie (à prévoir encore : ExpressVPN une centaine d'euros et l'abonnement IONOS pour les mois restant de l'année).

❖ Aspects scientifiques

Philippe :

- Mon ancien système (Windows 10) a pu être cloné sur la nouvelle machine mais pas mal de bugs à régler ensuite et de fine tuning (installs, réinstalls). Cela n'a pas été clé en mains du tout, mais m'a fait néanmoins économiser beaucoup de temps quand même, car s'il avait fallu tout réinstaller de zéro... J'ai ensuite pu faire évoluer le système vers Windows 11. Il me reste aujourd'hui à réinstaller une machine virtuelle Debian et ensuite la cloner pour avoir un environnement (sur le plan logiciel) de calcul optimal. J'espère ensuite pouvoir m'en sortir pour faire ce que je veux faire avec des logiciels libres (type GAMESS). J'ai commencé à regarder comment utiliser par ex. la bibliothèque VeloxChem sous Python, qui inclut les différents basis sets, la DFT etc. mais c'est ardu. Il en existe d'autres comme Psi4, PyQante, PySCF, à découvrir

et à tester. Il y a par ex. une Maple Quantum Chemistry Toolbox qui a l'air vraiment bien, mais il faudrait pour cela avoir une licence Maple et acheter ce module en plus... Idem pour Mathematica ou Matlab. On ne peut rien publier sans les licences. Malheureusement ChemShell de Warshel (j'en avais parlé) n'est pas au point pour les gros systèmes macromoléculaires : il n'y a pas de mises à jour et je suppose de nombreux bugs, et j'ai vu qu'ils cherchent des développeurs... Gaussian 16 avec Gaussview est cher également. Pécuniairement pour l'instant la priorité est la carte graphique manquante en tête de pont de la configuration matérielle.

- Sur ce qui concerne l'approche CASP14 nous avons tout de même pas mal échangé avec Stéphane, mais à un moment il n'a plus dû avoir le temps et les choses se sont un peu arrêtées là. C'est compliqué de partir sur un tel sujet seul alors que c'est Stéphane le spécialiste de ces choses. Je précise que j'ai matériellement essayé d'adapter la conception de la machine de calcul en ce sens (RAM, SSD système de grande capacité...), donc ce n'est pas rien, l'effort pécunier pour l'association a été conséquent. Je ne lâche pas le sujet néanmoins parce qu'il est important (rétroengineering de la black box aboutissant à la prédiction des structures 3D des protéines), mais j'ai des choses à essayer de comprendre par moi-même (machine learning), et ce n'est pas un effort trivial. Je rappelle également que je travaille toujours de façon totalement bénévole, et que par ailleurs je vis aux minima sociaux.

- J'ai renfloué un peu la partie « base de connaissances » de notre site web : markdown et système Zettelkasten, j'ai totalement refait et mis à jour la carte mentale sur les virus oncogènes chez l'Homme (avec diagrams.net), et, mais cela concerne 2023, j'ai rédigé un article sur les centrales au thorium avec Jim Prenel.

❖ Projets, idées, perspectives, divers...

Philippe :

- Reprendre les travaux sur le lien résine de pin maritime/cancer, mes données expérimentales sur le repliement des protéines, le papier alu dans l'eau/Alzheimer, le lien flore intestinale/SARS-CoV-2. Encore une fois tout cela est bien sûr très compliqué pour moi à mener dans une situation sans salaire, bien qu'une optique semble peut-être s'ouvrir pour une solution partielle sur laquelle je suis en train de travailler.

- Les deux anciens PCs remis à jour restent à vendre (je les ai mis sur le boncoin).

- Achat d'une carte neuve en remplacement de la K6000, par ex. la Quadro GP100, équivalente de la P100 en FP64. Ceci en attendant de pouvoir réunir 12 à 13000 euros pour une Quadro GV100 ou une RTX 6000 ADA récente qui est env. au même prix, par le biais d'un financement participatif. J'ai essayé de négocier longuement avec Nvidia pour qu'ils m'offrent une carte, ils venaient d'annoncer des milliards de bénéfice, mais cela a été peine perdue.

- Pour la base de connaissances, j'ai d'autres choses en réserve à venir, par ex. une carte mentale sur les virus oncogènes chez les animaux. Pour la mise en ligne de cours je n'ai pas eu le temps de voir mais c'est un prochain objectif. De même intégrer une synthèse des sujets que j'ai partagés avec vous par mail serait intéressant, cela soulignera de plus la communication régulière entre nous sur des sujets scientifiques.

- Il faudrait aussi refaire tout le site internet, avec une interface un peu moderne, et j'aurais tendance à opter pour HUGO, qui est sur une base Markdown, avec des templates intégrés (gohugo.io).

- Propositions pour une sortie, des moyens à trouver ? Une discussion s'en suit sur ces sujets avec les membres.

LA SÉANCE EST LEVÉE À 12h00.

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

À Besançon, le 30 novembre 2023 :

La Secrétaire/Trésorière,

Dan JIN

Le Président,

Philippe HUETZ