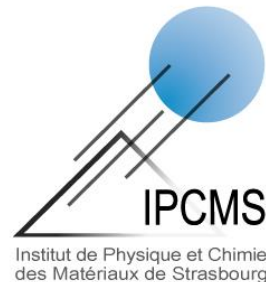


Défis d'un développeur logiciel dans une U.M.R. CNRS - Université de Strasbourg

Sébastien Le Roux

Meetup logiciels libres de recherche - 28 février 2023



- ▶ **Valoriser un logiciel est très compliqué ...**
- ▶ **... Logiciel = résultat de travaux de recherche ?**
 - Open Access Month 2022 du 17/10 au 18/11
- ▶ **Donner plus de visibilité aux développeurs ...**
- ▶ **... et aux logiciels !**

Open Access Month

1 mois d'échanges sur l'ouverture de la science

L'Open Access Month 2022 est terminé.

L'INSA Strasbourg et les universités de Haute-Alsace et de Strasbourg ont eu le plaisir de vous inviter à participer à l'Open Access Month 2022 du lundi 17 octobre au vendredi 18 novembre 2022. L'ouverture des données de recherche et des publications scientifiques ont été au coeur des nombreux rendez-vous.

Les interventions organisées à distance [sont désormais disponibles via POD](#).

L'équipe organisatrice remercie l'ensemble des participants et toutes les personnes qui ont accepté d'intervenir et d'aider à la tenue de chaque rendez-vous.

Tout retour est le bienvenu, n'hésitez pas à nous écrire à: [openaccessmonth\[at\]unistra.fr](mailto:openaccessmonth[at]unistra.fr)

Le programme en bref

1 inauguration sur l'ouverture des données de recherche [en replay sur POD](#)

5 webinaires [en replay sur POD](#)

6 formations délivrées par l'[URFIST](#) et la [Bibliothèque du Cardo](#) de Strasbourg

4 [dépôt parties](#) pour encourager le dépôt de vos publications dans [UnivOAK](#)

1 journal club [ReproducibiliTea](#)

1 [jeu présenté par l'INSA Strasbourg](#) sur la science ouverte

1 [café métier](#) sur le métier de data librarian

L'atelier [Software Carpentry](#) est reporté à février 2023 (Love Data Week 2023)

→ Formations

→ [Agenda des formations](#)

→ [L'Urfist](#)

→ [Le Service des bibliothèques](#)

→ [Les ateliers de la MISHA](#)

→ [Le Lab numérique](#)

→ [Le Pôle unique d'ingénierie](#)

▾ **Open Access Month**

→ [Dépôt party](#)

→ [Software Carpentry Workshop](#)

→ [Editions passées](#)

→ [Contact](#)

→ [Programme OAM](#)

→ [Actualités OAM](#)

✉ **Contacts**

→ Pour toute question à propos de l'**Open Access Month** organisée

- ▶ **Valoriser un logiciel est très compliqué ...**
- ▶ **... Logiciel = résultat de travaux de recherche ?**

- Open Access Month 2022 du 17/10 au 18/11
- Généralement pour annoncer le développement d'un logiciel à la communauté scientifique, l'auteur rédige un article publié dans un journal à comité de lecture, et demande aux utilisateurs du logiciel de citer cet article

- ▶ **Donner plus de visibilité aux développeurs ...**
- ▶ **... et aux logiciels !**

Développeur au CNRS: Sébastien Le Roux ?!

► DEA en chimie [informatique](#) et théorique - *Rennes*

C ~ 30h

► Doctorat en chimie et physicochimie des matériaux - *Montpellier*

« Etude par [dynamique moléculaire ab-initio](#) des verres de chalcogénures
 GeS_2 et $(\text{M}_2\text{S})_{0.33}(\text{GeS}_2)_{0.66}$ M=Na, Ag »

MPI (F90) ~ 30h

► Post-doc en science des matériaux (2009-2010) - *Central Michigan University*

« Etude par [Reverse Monte Carlo](#) de verres $(\text{Na}_2\text{S})_{0.35} [(\text{P}_2\text{O}_5)_{1-x} (\text{B}_2\text{O}_3)_x]_{0.65}$ »

► Post-doc en science des matériaux (2010-2011) - *IPCMS, Strasbourg*

« Etude par [dynamique moléculaire ab-initio](#) de verres de chalcogénures $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$ »

► Depuis janvier 2012: Ingénieur de recherche CNRS - *IPCMS, Strasbourg*

- Haute formation scientifique et technique ...
... mais pas en informatique: chimie et physique
- Quasi autodidacte pour l'informatique

Domaine d'expertise

Physique

Phosphorus

Z= 15 M= 30.974 g/mol
Electronic structure: [Ne] 3s² 3p³

Chimie

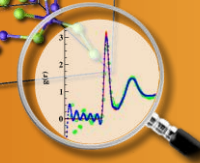
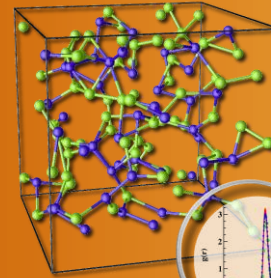
Carbon

Z= 6 M= 12.012 g/mol
Electronic structure: [He] 2s² 2p²

Informatique

Iodine

Z= 53 M= 126.904 g/mol
Electronic structure: [Kr] 4d¹⁰ 5s² 5p⁵



```
#include <glib.h>

int main (int argc, char *argv[])
{
    g_print ("Hello world !\n");
    return 0;
}
```

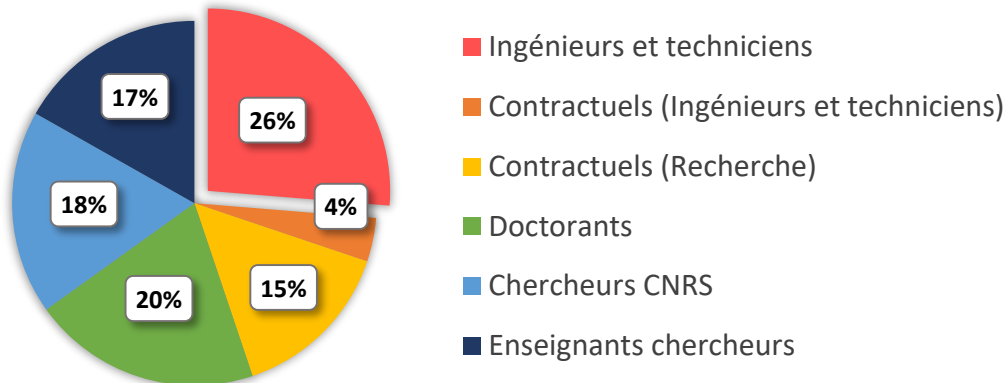
Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg

Institut pluridisciplinaire

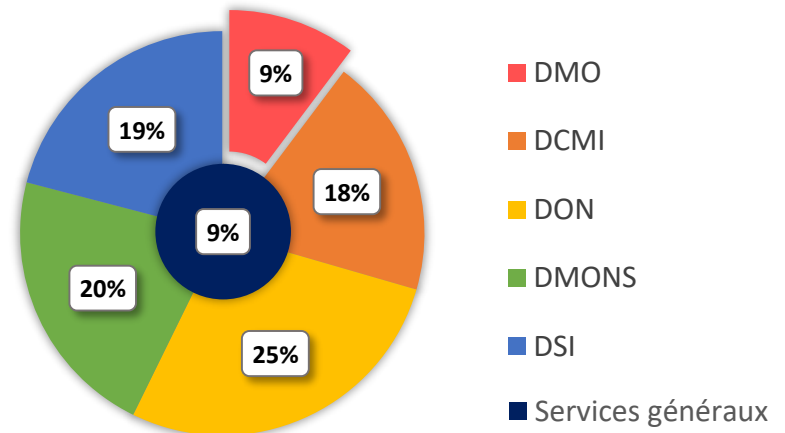


Directeur: Pierre Rabu

Environ 240 personnes

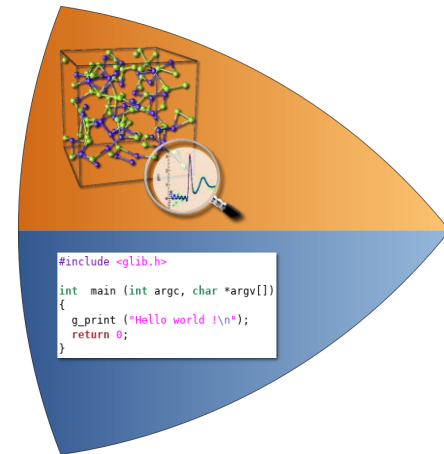


Structuré en 5 (+1) départements



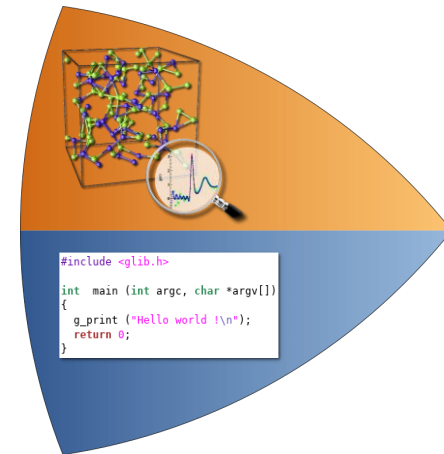
Développeur à l'IPCMS ?

- ▶ **Modélisateur:** scientifique utilisant des techniques de simulations numériques, qui réalise des expériences numériques
- ▶ **Développeur:** scientifique qui publie le résultat de ses travaux de recherche sous forme de logiciels destinés à l'ensemble de la communauté



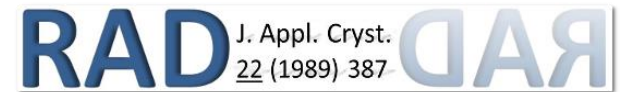
Développeur à l'IPCMS ?

- ▶ **Modélisateur:** scientifique utilisant des techniques de simulations numériques, qui réalise des expériences numériques
- ▶ **Développeur:** scientifique qui publie le résultat de ses travaux de recherche sous forme de logiciels destinés à l'ensemble de la communauté
- ▶ Département des **Matériaux Organiques** à l'IPCMS
 - 16 permanents
 - Dont 1 modélisateur / développeur: **Sébastien Le Roux**
- ▶ En physico-chimie des matériaux la structuration des unités de recherche complexifie la visibilité des développeurs et de leurs travaux de recherche les logiciels



Activité de développeur logiciel

- ▶ **RAD (GUI GTK, C+F90, PC)**



Analyse d'expérience de diffraction RX sur les matériaux désordonnés

- ▶ **RINGS (code, F90, MPI, supercalculateur)**



- ▶ **ISAACS (GUI GTK, C+F90, PC)**



Analyse de modèle atomiques obtenu par simulations numériques

+ de **20 000** téléchargements

+ de **90** pays différents

+ de **250** citations par des journaux scientifiques

- ▶ **Atomes ...**

Atomes: détails techniques

Langages

- C
- Fortran 90
- GLSL (shaders OpenGL)

Bibliothèques utilisées

- GTK : interface graphique (v3 et v4)
- FFmpeg: encodage de vidéo de l'espace de travail
- Epoxy: gestion des pointeurs OpenGL
- OpenMP: parallélisation des calculs sur les cœurs CPU

IDE: Code::Blocks

<https://www.codeblocks.org/>

Distribution

<https://atomes.ipcms.fr/>

- Sources: <https://github.com/Slookeur/Atomes/>
- Linux (RPM, DEB, FLATPAK) : **bientôt dans les RPM officiels Fedora**
- Windows
- OSX en phase de test
- Documentation: <https://slookeur.github.io/Atomes-doc/>

Licence: Affero GPL v3



Atomes: valorisation

- ▶ **01 / 2012:** Début du développement d'Atomes
- ▶ **09 / 2019:** 1^{er} contact avec le SPV du CNRS
- ▶ **03 / 2020:** 1^{er} contact avec la SATT Conectus
- ▶ **10 / 2020:** Prématuration SATT de 30 000 euros
- ▶ **04 / 2021:** 1^{er} contact avec le SPV logiciel de l'INP
- ▶ **08 / 2021:** Conectus arrête la valorisation
- ▶ **09 / 2021:** CNRS Innovation reprend la valorisation
- ▶ **02 / 2022:** Plus de contact avec CNRS Innovation
- ▶ **09 / 2022:** Atomes est sur internet

Atomes

Boîte à outils pour la modélisation à l'échelle atomique

The image displays the ATOMES software interface, which is a tool for 3D atomistic modeling. The interface features a central video player showing a YouTube video titled "#SUPERTECH : découvrez ATOMES, un programme puissant p...". The video player includes a progress bar and a "Regarder sur YouTube" button. Below the video player, there are three main sections: "ANALYZE" (g(r), S(k), bonding, angles, rings, MSD ...), "VISUALIZE" (Clones, color maps, styles, environments ...), and "CREATE" (Crystal builder, surface creation and molecular library ...). Each section has a "Read more ..." link. The background of the interface shows various 3D molecular models and a "Download" button. The top of the interface has a navigation bar with links: "DOWNLOAD", "EXAMPLES", "DOCUMENTATION", "ABOUT", and "REPORT A BUG".

ATOMES

Latest version: 1.1.10

Download

ANALYZE
g(r), S(k), bonding, angles, rings, MSD ...
Read more ...

VISUALIZE
Clones, color maps, styles, environments ...
Read more ...

CREATE
Crystal builder, surface creation and molecular library ...
Read more ...

<https://www.youtube.com/watch?v=cnXyrSLEFFE>