

RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ
LBT - Laboratoire de biochimie théorique

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET
ORGANISMES :

Université Paris Cité

Centre national de la recherche scientifique -
CNRS

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2023-2024
VAGUE D

Rapport publié le 16/04/2024



Au nom du comité d'experts :

Anne Imberty, présidente du comité

Pour le Hcéres :

Stéphane Le Bouler, président par intérim

En application des articles R. 114-15 et R. 114-10 du code de la recherche, les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts sont signés par les présidents de ces comités et contresignés par le président du Hcéres.

Pour faciliter la lecture du document, les noms employés dans ce rapport pour désigner des fonctions, des métiers ou des responsabilités (expert, chercheur, enseignant-chercheur, professeur, maître de conférences, ingénieur, technicien, directeur, doctorant, etc.) le sont au sens générique et ont une valeur neutre.

Ce rapport est le résultat de l'évaluation du comité d'experts dont la composition est précisée ci-dessous. Les appréciations qu'il contient sont l'expression de la délibération indépendante et collégiale de ce comité. Les données chiffrées de ce rapport sont les données certifiées exactes extraites des fichiers déposés par la tutelle au nom de l'unité.

MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

Présidente : Mme Anne Imberty, CNRS Grenoble

Experts : Mme Stéphanie Baud, université de Reims Champagne-Ardenne - URCA
M. Johann Hendrickx, CNRS Nantes (personnel d'appui à la recherche)
Mme Nathalie Reuter, university of Bergen, Norvège
M. Stéphane Téletchéa, université de Nantes (représentant du CNU)

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. François Guillaume

REPRÉSENTANTS DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES TUTELLES DE L'UNITÉ DE RECHERCHE

Mme Émilie Boutin, université Paris Cité
M. Christophe Giraud, CNRS
M. Mehran Mostafavi, CNRS
M. Laurent Royon, université Paris Cité

CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : Laboratoire de biochimie théorique
- Acronyme : LBT
- Label et numéro : UPR 9080
- Composition de l'équipe de direction : M. Marc Baaden (directeur) / Mme Chantal Prévost (directrice adjointe) / Mme Victoria Terziyan (administratrice)

PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies
ST4 Chimie

THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

Le LBT est une unité de recherche structurée en une seule équipe, axée sur le développement d'algorithmes de simulation et de visualisation des biomolécules appliqués à la compréhension des fonctions biologiques au niveau moléculaire. Le domaine de recherche est fortement interdisciplinaire, à la frontière des sciences de l'informatique, de la biologie, de la chimie et de la physique. Les développements technologiques visent à étendre les échelles spatiales et temporelles des simulations et à intégrer les nouvelles approches d'intelligence artificielle. Les applications sont dans le domaine fondamental, telles que l'encombrement macromoléculaire ou les origines de la vie, mais elles visent également des questions sociétales actuelles dans le domaine de la santé ou de l'énergie.

HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

Le LBT a 65 ans d'existence, d'abord créé par M. Bernard Pullman comme Service de biochimie théorique au sein de l'institut de Biologie physico-chimique (IBPC) puis comme unité propre de recherche (UPR) du CNRS rattaché à CNRS-Chimie (12 chercheurs et 4 personnels d'appui à la recherche en décembre 2022). L'unité a été dirigée successivement par Mme Alberte Pullman, M. Richard Lavery et M. Philippe Derreumaux. Le directeur actuel, M. Marc Baaden, a pris la succession en 2016 et a donc assuré un mandat et demi.

ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

L'unité occupe quatre étages d'un bâtiment de l'IBPC. Cet institut, qui regroupe plus de 200 chercheurs, est une fédération de recherche soutenue par les instituts CNRS Chimie et CNRS Biologie. L'IBPC rassemble le LBT et quatre unités mixtes de recherche dans le domaine de la biologie en relation avec l'université Paris Cité (UPCité) et Sorbonne université (SU). Le LBT participe aux plateformes techniques de l'IBPC à travers le mur de visualisation. La fédération permet de mutualiser ses outils de calculs, qui sont hébergés au LBT, ainsi que l'activité d'un ingénieur.

Le LBT était dans le passé rattaché par une convention de site à l'université Paris-Diderot. Il maintient des liens forts avec la nouvelle structure UPCité et il est en attente d'un conventionnement avec UPCité et l'Idex.

L'unité est un membre actif des deux projets du Programme d'investissements d'avenir (PIA). Le labex Dynamo qui regroupe l'IBPC, l'école Normale Supérieure et le Collège de France sur les thématiques des membranes transductrices d'énergie apporte un soutien fort, en particulier au travers du succès d'un projet européen Cofund. L'équipex Centre d'analyse de systèmes complexes dans les environnements complexes (Cacsice), porté par l'institut Pasteur, contribue au financement des équipements de calcul qui servent à cette communauté.

Les membres de l'unité sont très impliqués dans des réseaux nationaux structurants pour la recherche, tels que le Groupe de Graphisme et de Modélisation Moléculaire (GGMM), le Réseau français de chimie théorique (RFCT) puis fédération ThéMoSia depuis 2022).

EFFECTIFS DE L'UNITÉ : en personnes physiques au 31/12/2022

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	0
Directeurs de recherche et assimilés	4
Chargés de recherche et assimilés	7
Personnels d'appui à la recherche	4
Sous-total personnels permanents en activité	16
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	7
Doctorants	12
Sous-total personnels non permanents en activité	19
Total personnels	36

RÉPARTITION DES PERMANENTS DE L'UNITÉ PAR EMPLOYEUR : en personnes physiques au 31/12/2022. Les employeurs non tutelles sont regroupés sous l'intitulé « autres ».

Nom de l'employeur	EC	C	PAR
CNRS	0	11	4
Université Paris Cité	1	0	0
Total personnels	1	11	4

AVIS GLOBAL

Créé en 1958, ce qui en fait l'une des unités les plus anciennes du CNRS, le LBT est pionnier dans le domaine de la biochimie théorique. C'est une UPR dont les objectifs scientifiques sont ambitieux et bien équilibrés entre développements d'algorithmes de simulation et de visualisation des biomolécules et simulations de systèmes biologiques complexes visant la compréhension des fonctions biologiques au niveau moléculaire. Le domaine de recherche est fortement interdisciplinaire, à la frontière des sciences de l'informatique, de la biologie, de la chimie et de la physique. Les développements technologiques visent à étendre les échelles spatiales et temporelles des simulations et à intégrer de nouvelles approches d'intelligence artificielle. Les applications sont dans le domaine fondamental, telles que l'encombrement macromoléculaire ou les origines de la vie, mais visent également des questions sociétales actuelles dans les domaines de la santé et de l'énergie. Le choix de cibler les domaines de la santé et de la biotechnologie a permis à l'unité de mettre en place des collaborations de qualité avec des expérimentateurs des milieux académiques et des entreprises.

L'unité bénéficie d'un environnement unique et stimulant au sein de l'IBPC. Les chercheurs participent aux enseignements de plusieurs universités parisiennes. Le projet actuel de contractualisation avec UP Cité reflète bien les liens établis au niveau des masters et de l'école doctorale. La petite taille de l'unité et l'excellent travail de la direction apportent une organisation horizontale efficace, des prises de décision consensuelle, une bonne animation scientifique et un accompagnement des jeunes chercheurs contractuels de haute qualité. L'unité bénéficie des moyens de calcul nécessaires à son activité, ainsi que d'équipements de visualisation uniques en France dans ce domaine. Les recrutements récents de PAR très motivés permettent un fonctionnement et une utilisation optimale des équipements.

Le LBT a bâti son rayonnement international sur ses thématiques de prédilection (protéines membranaires, acides nucléiques/ADN/ARN, visualisation) et a aussi su orienter son activité pour répondre à des thématiques émergentes et développer des méthodes innovantes comme l'apprentissage profond (deep learning) pour répondre aux questions sur les origines de la vie (J. Phys. Chem. B octobre 2022), l'inclusion de la polarisation dans les champs de force de mécanique classique (J. Phys. Chem. B mai 2022) et les simulations multi-échelles (J. Chem. Theory Comput. 2022).

La production scientifique de l'unité est excellente avec 210 articles dans des revues généralistes et à haut retentissement comme Proceedings of the National Academy of Science, Nature Communications et des revues de chimie comme Journal of the American Chemical Society, Journal of Physical Chemistry Letters ainsi que dans les meilleures revues en modélisation et biologie computationnelle comme Journal of Chemical Theory and Computation et PLoS Computational Biology. L'unité a aussi produit treize logiciels dont UnityMol, ColVars, PTool.

La qualité des recherches menées au LBT se traduit par une reconnaissance visible à travers les communications orales dans des conférences internationales (62 conférences invitées) et l'organisation d'événements scientifiques (32), notamment pour des congrès internationaux comme Understanding protein interactions : from molecules to organisms en 2017 et Gordon research seminar on water and aqueous solutions à Holderness (USA) en 2022. Comme autres indices de reconnaissance et d'attractivité, on peut aussi mentionner le prix Cozzarelli for outstanding contribution in biological sciences en 2021, un membre senior nommé à l'IUF en 2021 et le taux de succès aux AAP compétitifs (en particulier 1 ERC Starting Grant et 14 ANR dont 3 en coordination) totalisant 4,8 M€ de ressources propres.

Le LBT est expert dans le développement de logiciels de réalité virtuelle appliqués à la manipulation de biomolécules et de visualisation 3D accessibles en source ouverte et concrétisées dans la plateforme de visualisation (mur d'écrans stéréoscopiques). Il produit du contenu à destination du grand public et du milieu de l'éducation mettant en avant des aspects clés de ses travaux sous forme de cours en ligne (Mooc, accessibles sur la plateforme YouTube), de produits de vulgarisation dont le blog Top of the Prots, d'entretiens télévisuels et radiophoniques (Télématin, Europe 1, France culture), de participation à des débats publics (échappées inattendues du CNRS, Cité des sciences de Paris) et d'interventions dans la grande presse généraliste (Elle, Le Monde, Libération).

Le prochain contrat verra le renouvellement de l'équipe de direction par un processus mis en place de manière collégiale. Le départ d'une fraction importante des chercheurs représente un risque pour l'activité et l'unité développe dès à présent des stratégies pour attirer et recruter de nouveaux talents.

ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

A - PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Les recommandations du précédent rapport visaient principalement à maintenir la cohésion de l'unité au point de vue scientifique et humain ainsi qu'à poursuivre les efforts pour une ouverture vers les applications en biologie et en santé humaine. Ces deux objectifs sont pleinement atteints. Une recommandation plus technique était émise pour assurer la sauvegarde des données dans un lieu physiquement extérieur à l'unité. Ce point a été considéré avec soin par le LBT, mais en prenant en compte les besoins en volume de stockage et débit de transmission, aucune solution globale n'a pu être identifiée pour une sauvegarde extérieure des données brutes des simulations. À défaut, l'unité recommande à chaque chercheur d'utiliser les espaces de données ouvertes (open data) pour la sauvegarde des données finales associées aux projets individuels.

B - DOMAINES D'ÉVALUATION

DOMAINE 1 : PROFIL, RESSOURCES ET ORGANISATION DE L'UNITÉ

Appréciation sur les objectifs scientifiques de l'unité

L'unité montre une volonté claire de se fixer des objectifs scientifiques ambitieux, tant sur le plan du développement méthodologique que sur celui de la complexité des systèmes biologiques à étudier.

Appréciation sur les ressources de l'unité

Le LBT a su construire un environnement apportant la puissance de calcul nécessaire aux objectifs affichés et a également su recruter des personnels de support à la recherche avec l'expertise nécessaire pour un fonctionnement fluide. Le niveau de financement est excellent et en augmentation grâce aux succès aux appels à projets (AAP) nationaux et européens. Les collaborations avec les expérimentateurs ont permis d'aborder des problèmes biologiques (agrégation de protéines, allostérie, adaptation thermique des enzymes, etc.) ou biotechnologiques (biopiles, cavitation créée par des ultrasons, etc.) de première importance.

Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

La petite taille de l'unité permet une organisation collégiale efficace et productive. Les risques sanitaires liés aux tâches réalisées exclusivement sur écran sont pris en compte. Les PAR sont associés aux projets de recherche dans les volets technologique et scientifique. Les séminaires hebdomadaires rassemblent tous les personnels autour de présentations scientifiques auxquelles tous les membres du LBT contribuent.

1/ L'unité s'est assigné des objectifs scientifiques pertinents.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'activité de recherche de l'unité est reconnue nationalement et internationalement grâce à une expertise unique dans le domaine de la chimie et de la biologie computationnelle.

L'unité a su choisir des objectifs scientifiques ambitieux, en s'attachant au plus haut niveau de l'état de l'art en simulation et en visualisation moléculaire, en explorant de nouvelles frontières dans le domaine de la complexité des simulations à des échelles extrêmes, en passant de la réactivité chimique au niveau atomique jusqu'à la modélisation de membranes ou d'organelles. Un bon équilibre de ces objectifs est proposé entre développement méthodologique, recherche fondamentale sur les mécanismes du vivant et applications en santé humaine et en biotechnologie. Les recherches de l'unité répondent à des attentes sociétales importantes,

non seulement pour des applications thérapeutiques, mais également dans les domaines de la science ouverte et de la vulgarisation scientifique.

Les objectifs scientifiques sont pertinents vis-à-vis de l'environnement scientifique local et le tournant engagé vers l'utilisation de l'intelligence artificielle correspond bien à la politique scientifique actuelle du CNRS.

Points faibles et risques liés au contexte

Le contexte international est en évolution très rapide avec : (i) l'avènement des méthodes par apprentissage massif ; (ii) le développement d'algorithmes originaux et (iii) l'arrivée de matériels très performants. La forte spécialisation actuelle de l'unité peut présenter un frein à ces évolutions.

2/ L'unité dispose de ressources adaptées à son profil d'activités et à son environnement de recherche et les mobilise.

Points forts et possibilités liées au contexte

La taille de l'unité (12 chercheurs, 1 enseignant-chercheur et 4 personnels d'appui à la recherche) permet une organisation horizontale dynamique avec un réseau fort d'interactions en interne et un grand nombre de collaborations extérieures portées par chaque chercheur. Un seul personnel administratif gère une lourde charge de gestion financière et des ressources humaines de manière très efficace.

L'unité a su se doter des moyens de calculs nécessaires à ses activités de recherche, tant localement que nationalement ou à l'échelle européenne. L'intégration du cluster de calcul local et des serveurs dans la plateforme de visualisation de l'IBPC est tout à fait positive. Ces activités de l'unité bénéficient de PAR très motivés, dont l'activité est absolument nécessaire au fonctionnement des équipements informatiques et au déploiement des algorithmes mis au point par les chercheurs.

L'unité démontre un excellent dynamisme dans l'obtention de contrats permettant le recrutement d'un grand nombre de doctorants (22) et de post-doctorants (20) au cours de la période évaluée. L'unité a une très forte présence au niveau européen, avec l'obtention d'une subvention ERC Starting Grant et de deux contrats postdoctoraux individuels (actions Marie Skłodowska-Curie). Le labex Dynamo apporte un soutien important pour le financement des équipements et également des contrats postdoctoraux (3) au travers d'un projet européen Co-fund Dynamo.

L'intégration au sein de l'IBPC est aussi un avantage fort du fait du soutien de la fondation Edmond de Rothschild sous forme de mise à disposition des locaux et de la prise en charge des frais d'électricité.

L'unité a également su mettre en place des collaborations avec des équipes d'expérimentateurs qui donnent une envergure supplémentaire aux recherches en biochimie théorique.

Points faibles et risques liés au contexte

L'organisation en une seule équipe fonctionne de manière très efficace mais elle peut représenter une contrainte pour faire évoluer la taille de l'unité. D'une part, cette structure limite les possibilités d'expansion pour un fonctionnement optimal, d'autre part, la décroissance du nombre de permanents engendre un risque pour maintenir le nombre et la diversité des projets en cours. L'organisation relativement informelle peut représenter un frein pour élaborer des trajectoires tant scientifiques que personnelles.

Un autre risque, inhérent à la recherche sur contrat, est la variabilité dans les financements.

3/ Les pratiques de l'unité sont conformes aux règles et aux directives définies par ses tutelles en matière de gestion des ressources humaines, de sécurité, d'environnement, de protocoles éthiques et de protection des données ainsi que du patrimoine scientifique.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe de direction est bien structurée avec un partage de responsabilités entre le directeur, le directeur adjoint et l'administrateur. La petite taille de l'unité permet une participation de tous les permanents aux réunions importantes engendrant chez les personnels un fort sentiment d'appartenance.

La sécurité est bien prise en compte dans un contexte de travail sur écran. Des formations et des sensibilisations à la sécurité, à la sûreté et aux conditions de travail sont régulièrement dispensées.

L'unité est sensibilisée aux impacts environnementaux. Un effort spécifique a été engagé pour améliorer l'empreinte carbone de ses activités en s'appuyant notamment sur les recommandations du projet labo1.5. Des mesures sont prises telles que le recyclage et l'extension de la durée de vie des équipements. Une réflexion sur les déplacements aériens est en cours avec une incitation à réduire l'impact environnemental associé.

Points faibles et risques liés au contexte

Un déficit de femmes parmi les personnels permanents est observé, mais les chiffres (4 femmes pour 12 hommes) ne sont pas pleinement significatifs en raison de la petite taille de l'unité. Le risque est cependant reconnu par la direction.

L'environnement essentiellement bureautique induit des risques classiques bien connus comme les troubles musculo-squelettiques (TMS) et l'isolement social.

Il est vertueux d'utiliser les outils du CNRS pour évaluer le bilan carbone des activités (achats, déplacements), mais ces outils ne sont actuellement pas paramétrés pour prendre en compte l'impact environnemental de la grappe de calcul.

DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

Appréciation sur l'attractivité de l'unité

L'unité est attractive aux niveaux national, européen et international de par sa localisation dans le centre de Paris et dans un quartier riche de ses institutions et laboratoires. Cet environnement est donc favorable à de multiples échanges scientifiques. Son attractivité est due aussi et surtout à son excellente production scientifique, à l'attention portée dans l'accompagnement des étudiants et des posts-doctorants, à ses succès aux AAP compétitifs, à la qualité des équipements informatiques et de l'environnement de travail.

- 1/ *L'unité est attractive par son rayonnement scientifique et s'insère dans l'espace européen de la recherche.*
- 2/ *L'unité est attractive par la qualité de sa politique d'accompagnement des personnels.*
- 3/ *L'unité est attractive par la reconnaissance de ses succès à des appels à projets compétitifs.*
- 4/ *L'unité est attractive par la qualité de ses équipements et de ses compétences techniques.*

Points forts et possibilités liées au contexte pour les quatre références ci-dessus

L'unité bénéficie d'une excellente localisation géographique en plein cœur de Paris et à proximité de laboratoires pertinents en matière de collaborations scientifiques. L'unité est aussi un acteur clé dans des structures de recherches tels que le labex Dynamo et le consortium Cascise équipex. Le rayonnement de l'unité s'étend bien au-delà de Paris et ses membres collaborent avec des laboratoires situés dans au moins onze pays dans le monde.

La forte attractivité de l'unité est démontrée par l'excellente production scientifique et surtout par les communications fréquentes de ses membres lors de conférences internationales (37 communications orales dans des conférences internationales dont 20 conférences invitées plénières et 80 présentations par posters). Les membres de l'unité sont aussi très actifs dans l'organisation d'événements scientifiques avec plus de 35 participations à des comités d'organisation, notamment plusieurs ateliers du Centre européen de calcul atomique et moléculaire (Cecam), des rencontres de réseaux nationaux (RFCT, Groupe de graphisme et

modélisation moléculaire [GGMM]) et des congrès internationaux (par exemple Understanding Protein Interactions : from molecules to organisms en 2017 à Lyon avec 100 participants). L'unité a aussi participé à l'organisation de l'école thématique Algorithms in Structural Bioinformatics (AlgoSB).

Les membres de l'unité sont également présents dans la communauté scientifique en tant que membres de comités éditoriaux de revues scientifiques (entre autres ACS Chemical Neuroscience et Frontiers in Molecular Biosciences). Ils participent à la délégation scientifique du CNRS pour la mission Calcul et données et pour la section 13 du CoNRS, à des réseaux et comités de coordination des ressources de calculs à haute performance comme le réseau Partnership for Advanced Computing in Europe (Prace).

La qualité de la politique d'accompagnement des personnels rend l'unité attractive pour les jeunes chercheurs en particulier, mais aussi pour les autres catégories de personnels. L'unité est fortement impliquée dans la formation et la diffusion du savoir, en étant associée avec deux écoles doctorales, Chimie Physique et Chimie Analytique de SU (ED388) et Médicament, toxicologie, chimie, imageries de l'université Paris Cité. L'unité est maintenant rattachée uniquement à l'ED388, onze thèses ont été soutenues en six ans. Les conditions de travail et d'encadrement sont excellentes. Les doctorants et les post-doctorants en fin de contrat sont tous associés à des publications et sont insérés avec un emploi dans le secteur académique ou industriel.

L'unité participe aux programmes du master Systèmes biologiques et concepts physiques de UPCité et SU ainsi qu'à l'enseignement de bio-informatique à UPCité. L'unité accueille régulièrement des post-doctorants et des scientifiques étrangers originaires d'Europe et d'autres continents.

L'unité est attractive par la reconnaissance issue de ses succès à des AAP compétitifs. En effet, les membres de l'unité ont su remporter plusieurs financements hautement compétitifs totalisant 4,8 M€, incluant celui d'une ERC Starting Grant ABIotic Synthesis of RNA : an investigation on how life started before biology existed, de quatorze ANR et de deux PIA. La majorité des contractuels recrutés par le LBT sont financés par des projets. Des prix remarquables ont été également obtenus, notamment le Young Talent award du programme Women in Science de la fondation L'Oréal-Unesco.

L'unité est attractive par la qualité de ses équipements et de ses compétences techniques, notamment celles des PAR. L'unité est dotée de matériels de pointe, tels qu'un serveur puissant mixte CPU/GPU et une salle de réalité virtuelle avec un mur de visualisation immersive. En outre, l'unité a su renforcer les effectifs en PAR en recrutant deux ingénieurs hautement qualifiés. Les compétences techniques nécessaires au bon fonctionnement des infrastructures informatiques sont excellentes.

Points faibles et risques liés au contexte pour les quatre références ci-dessus

Les départs programmés à la retraite de trois à quatre membres permanents de l'unité nécessitent une réflexion approfondie sur les profils des futurs collaborateurs à recruter.

L'absence de relation contractuelle avec UPCité induit des problèmes d'éligibilité dans les AAP et de visibilité de l'unité pour les étudiants. Des inégalités de traitement des contractuels (paiement des heures d'enseignement, accès à la cantine, etc.) sont constatées en fonction de leur employeur.

DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

Appréciation sur la production scientifique de l'unité

La production scientifique du LBT est d'excellente qualité. Les résultats du laboratoire sont publiés dans des revues internationales d'excellente réputation que l'on peut classer dans deux catégories : les travaux rapportant des développements méthodologiques et ceux rapportant les résultats d'applications à des questions pertinentes en biologie ou en médecine. Dans cette dernière catégorie, les travaux sont souvent réalisés en collaboration, illustrant la pertinence des méthodes développées au laboratoire et l'attractivité du LBT dans les collaborations interdisciplinaires.

1/ La production scientifique de l'unité satisfait à des critères de qualité.

2/ La production scientifique de l'unité est proportionnée à son potentiel de recherche et correctement répartie entre ses personnels.

3/ La production scientifique de l'unité respecte les principes de l'intégrité scientifique, de l'éthique et de la science ouverte. Elle est conforme aux directives applicables dans ce domaine.

Points forts et possibilités liées au contexte pour les trois références ci-dessus

La production scientifique de l'unité reflète une activité innovante, originale et de grande qualité. On remarquera entre autres la publication de 210 articles dans des revues plutôt généralistes et à haut retentissement (par exemple, Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, Nature Communications), des revues de chimie, biologie moléculaire ou biophysique (par exemple, Journal of the American Chemical Society, Journal of Physical Chemistry Letters, Biochemistry) ainsi que dans les meilleures revues en modélisation et biologie computationnelle (Journal of Chemical Theory and Computation, PLOS Computational Biology).

L'unité a aussi produit treize logiciels dont UnityMol, ColVars, PTool, deux bases de données dont DynBench et 35 produits de vulgarisation dont le blog Top of the Prots et les deux livres associés qui ont eu un retentissement médiatique notable.

Les activités de recherche sont réparties entre quatre thèmes dont deux sont plutôt consacrés à des développements méthodologiques (thèmes 1 et 4) alors que les deux autres peuvent être décrits comme plus appliqués (thèmes 2 et 3). L'expertise théorique du LBT est mise à profit dans des applications pertinentes en biologie et en biotechnologie, démontrant la pertinence et l'impact pour les sciences de la vie des méthodes développées au LBT qui sont aussi reprises par d'autres unités de recherche. La présence de PAR (trois ingénieurs) est certainement déterminante pour le partage de ces méthodes.

La production et les thèmes de recherche montrent que les travaux du LBT sont ancrés dans le contexte temporel et géographique. Le LBT a une longue tradition de recherche dans le domaine de la modélisation moléculaire, mais il a su non seulement bâtir sur ses thématiques de prédilection (protéines membranaires, acides nucléiques/ADN/ARN, visualisation) mais aussi orienter son activité pour rapidement répondre à des problèmes émergents ou adopter des méthodes modernes (deep learning, inclusion de la polarisation dans les champs de force de mécanique classique, simulations multi- et méso-échelles).

La production scientifique reflète l'existence de collaborations entre les membres du LBT, même si chacun garde une expertise distincte. Le laboratoire tire donc avantage de la colocalisation de plusieurs personnes expertes dans leurs domaines respectifs, colocalisation qui génère une synergie bénéfique à la production scientifique.

La production de l'unité respecte les principes de l'intégrité scientifique, de l'éthique et de la science ouverte. Le laboratoire suit les recommandations du CNRS pour le stockage des données, la protection des données sensibles, la standardisation des formats. L'unité encourage la publication ouverte (open access publications) et la plupart (78 %) sont déposées sur HAL. Le LBT encourage le partage de codes de calcul et de données suivant les standards open source sur les plateformes dédiées (Zenodo, FigShare, github, etc.).

Points faibles et risques liés au contexte pour les trois références ci-dessus

Le cycle de vie des données et des logiciels n'est pas suffisamment planifié.

Les dépenses sur les projets obtenus semblent être dirigées principalement vers les capacités de calcul au détriment des investissements dans la sécurité des données.

DOMAINE 4 : INSCRIPTION DES ACTIVITÉS DE RECHERCHE DANS LA SOCIÉTÉ

Appréciation sur l'inscription des activités de recherche de l'unité dans la société

Le comité tient à souligner la qualité de l'implication des membres de l'unité dans les interactions non académiques. Plusieurs membres sont très actifs avec l'obtention de contrats industriels, la participation à des événements à destination du grand public, la création de sites dédiés à la diffusion au grand public, et la publication d'ouvrages de vulgarisation et de productions audiovisuelles de qualité.

- 1/ *L'unité se distingue par la qualité et la quantité de ses interactions avec le monde non-académique.*
- 2/ *L'unité développe des produits à destination du monde culturel, économique et social.*
- 3/ *L'unité partage ses connaissances avec le grand public et intervient dans des débats de société.*

Points forts et possibilités liées au contexte pour les trois références ci-dessus

Les membres de l'unité produisent du contenu de très grande qualité à destination de plusieurs publics, qu'ils soient dans la sphère de l'éducation ou dans celle du grand public. Ces riches contenus mettent en avant des aspects clés de leurs travaux et les principes sous-jacents qui y mènent sous forme de Mooc, de livres illustrés, de vidéos, ou encore de cours en ligne accessibles sur la plateforme YouTube. Cette diffusion du savoir s'accompagne d'entretiens radiophoniques (Télématin, Europe 1, France culture), de participation à des débats publics comme les échappées inattendues du CNRS, d'interventions dans la presse généraliste (Elle, Le Monde, Libération) et à la participation à la fête de la science. Au-delà de leur sphère naturelle institutionnelle, les membres de l'unité interviennent aussi dans des lieux emblématiques comme la Cité des sciences et de l'industrie ou le Palais de La découverte. Le mur de visualisation dont ils disposent sert aussi régulièrement pour la présentation de leurs travaux à un large public. De manière remarquable, ces contributions sont aussi réalisées dans d'autres pays européens, en Italie par exemple.

L'unité a développé des contrats industriels avec au moins huit partenaires du monde économique, soit dans le domaine biotechnologique en lien avec leur recherche (Servier, Air Liquide, UCB Biopharma), soit avec des entreprises en lien avec leurs développements méthodologiques liés à la visualisation moléculaire et à l'interaction avec les macromolécules biologiques (Dragon Box, Idom, Immersive Factory, Lexma-Technology). Ces activités ont été réalisées lors d'appels à projets ou continuent sur le plus long terme. Ces partenariats ont donné lieu à la publication d'articles scientifiques, au développement de logiciels spécifiques des problématiques rencontrées et à des valorisations industrielles avec la société Invirtualis sous forme de licence logicielle spécifique.

Points faibles et risques liés au contexte pour les trois références ci-dessus

Le référencement de ces participations est peu visible, sur le site de l'unité et sur les sites institutionnels en général (actualités du CNRS, thématique de la science ouverte).

ANALYSE DE LA TRAJECTOIRE DE L'UNITÉ

Le directeur de l'unité a pris ses fonctions au cours de la période d'évaluation précédente. L'équipe de direction actuelle, qui inclut une directrice adjointe et une administratrice, est équilibrée. Le passage de témoin à un nouveau directeur identifié parmi les chercheurs se fera dans les premières années du prochain mandat, dans une procédure qui a été validée par les personnels. Historiquement, le LBT est une UPR du CNRS mais elle est proche de UPCité à travers l'école doctorale et les enseignements. Le souhait de l'unité, validé par les tutelles, est de s'engager dans la transformation du statut UPR vers celui d'une UMR qui permettrait de clarifier les interactions.

La trajectoire en ressources humaines est dans une phase optimale avec une trentaine de personnels dont seize permanents. Dans un passé récent, l'unité a vécu une période de stabilité avec un recrutement et le départ d'un CR. Dans un avenir proche, quatre départs sont prévus (1 PR et 3 CR) et un enseignant-chercheur de UPCité rejoint l'unité en janvier 2024. L'unité réfléchit à une stratégie de recrutement pour conserver un nombre suffisant de chercheurs permanents.

L'unité a atteint un excellent niveau scientifique et son évolution vers la modélisation de systèmes biologiques plus complexes démontre son ambition scientifique. Un très bon équilibre entre développements méthodologiques et applications à des systèmes biologiques d'intérêt a été obtenu et devrait être maintenu dans les prochaines années. L'unité est consciente que les nouvelles méthodologies liées au deep learning devront être intégrées dans ses thématiques de recherche. Un travail en ce sens est déjà initié à travers la mise en place d'un groupe de travail, et les recrutements à venir intégreront ce besoin.

L'unité s'est dotée de moyens de calculs et d'équipements de visualisation au cours des dernières années et poursuivra son utilisation des grands moyens de calculs nationaux et européens. Le soutien à la recherche par les financements est important et en augmentation. L'arrêt programmé des financements par le labex Dynamo a été anticipé et ne sera pas une source de risque important.

RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

Recommandations concernant le domaine 1 : Profil, ressources et organisation de l'unité

Le LBT a développé de nombreuses relations avec UPCité et une contractualisation est souhaitée pour faciliter les recrutements, la participation aux appels à projets ou la gestion RH des étudiants. La discussion sur le processus de labellisation UMR est en cours avec les tutelles. Le comité encourage fortement cette évolution et note qu'il faudra être vigilant à conserver un équilibre dans les contributions des tutelles, tant en ce qui concerne le budget qu'en ce qui concerne les personnels. L'identité forte de modélisation des biomolécules de l'unité doit être préservée.

La pyramide des âges va entraîner une baisse du nombre de personnels permanents dans les prochaines années. L'unité souhaite recruter de jeunes chercheurs. Le comité approuve cette volonté et recommande d'afficher ces recrutements dans différents réseaux, profils et pays pour attirer les meilleurs candidats, susceptibles de développer des thématiques très complémentaires de celles des permanents déjà présents.

Le LBT maintient une animation scientifique régulière. Il est recommandé d'organiser également des journées orientées vers la prospective scientifique permettant d'avoir une vue commune d'ensemble sur la trajectoire scientifique.

La recommandation du comité précédent pour une sauvegarde externe des données a été étudiée mais pas mise en place. Le comité réitère cette recommandation. Une des pistes à étudier serait de s'appuyer sur les stratégies de sauvegarde de données brutes mises en place par d'autres équipes de modélisateurs en France et en Europe.

Recommandations concernant le domaine 2 : Attractivité

Le comité recommande de maintenir le haut niveau d'échange et d'animation scientifique au moyen de conférences invitées et de l'accueil de scientifiques étrangers, niveau qui a pu être affecté par la pandémie de Covid.

L'attractivité de l'unité pourrait être améliorée par une meilleure structuration de l'offre logicielle. Cela peut se faire en hiérarchisant les logiciels développés par thématique et antériorité, en uniformisant les résumés de présentation des logiciels et en indiquant les services encore actifs et ceux conservés pour leur valeur historique.

Le comité recommande une implication plus importante des membres du LBT dans les réseaux européens fédérateurs et structurants dans le domaine de la modélisation moléculaire (par exemple, BioExcel ou Elixir). Cela pourrait se faire par l'intégration des logiciels du LBT dans les infrastructures européennes.

Recommandations concernant le domaine 3 : Production scientifique

Le LBT a une production scientifique excellente, diverse et de qualité. Pour atteindre un niveau exceptionnel, le comité recommande d'augmenter la portée et la visibilité de ces travaux en s'appuyant sur les stratégies ci-dessous.

1/ Réfléchir sur les stratégies scientifiques pour organiser les travaux en fonction des problèmes à résoudre. Se confronter à la compétition internationale sur certains sujets.

2/ Définir un sujet transversal ambitieux autour de la biologie pour lequel le laboratoire, grâce à ses compétences de pointe et son envergure, pourra devenir une référence mondiale.

3/ Prendre le virage des nouvelles technologies (intelligence artificielle, deep learning) en entrant dans un domaine moins dominé par les approches basées sur la physique et en élargissant ainsi l'expertise de l'unité. Une telle réflexion permettrait d'associer chercheurs et PAR sur un projet à moyen terme autour des développements méthodologiques et des équipements pertinents.

Recommandations concernant le domaine 4 : Inscription des activités de recherche dans la société

Les membres du LBT sont engagés dans la production de contenus scientifiques vulgarisés sous forme de livres, de vidéos et d'interventions dans des lieux emblématiques. Le comité suggère que l'unité encourage un plus grand nombre de ses membres dans ces activités tournées vers la société. Une des possibilités pourrait être de regrouper une partie des savoir-faire et méthodes disponibles et à les intégrer dans une interface commune ayant par exemple en son cœur le logiciel de visualisation UnityMol.

Les membres de l'unité ont été et seront sollicités pour des partenariats ponctuels ou de plus long terme sous forme de contrats, d'activités de conseil ou encore de développements méthodologiques. La réflexion en cours sur la définition des licences d'exploitation des logiciels doit être poursuivie pour consolider les partenariats en cours ou à venir.

DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

DATES

Début : 30 novembre 2023 à 9h00

Fin : 1^{er} décembre 2023 à 11h00

Entretiens réalisés en distanciel

PROGRAMME DES ENTRETIENS

Jeudi 30 novembre 2023

09h00	Présentation du comité d'experts Hcéres
09h15	Bilan et trajectoire de l'unité
09h35	Discussions
10h15	Huis clos du comité
10h30	Bilan et trajectoire du thème 1 : Cutting-edge methodology : Multi-scaling, Reactivity, Machine learning / Artificial intelligence
10h40	Discussions
11h00	Bilan et trajectoire du thème 2 : Computer simulations to decipher key biological processes
11h10	Discussions
11h30	Bilan et trajectoire du thème 3 : Application-driven design for Human Health and Biotechnology
11h40	Discussions
12h00	Huis clos du comité et pause méridienne
14h00	Bilan et trajectoire du thème 4 : Application-driven design for Human Health and Biotechnology
14h10	Discussions
14h30	Présentation des services communs et des plateformes
14h40	Discussions
15h00	Huis clos du comité
15h30	Huis clos avec les C/EC
16h00	Huis clos avec les doctorants et les post-doctorants
16h30	Huis clos du comité

Vendredi 1^{er} décembre 2023

09h00	Huis clos avec les PAR
09h30	Huis clos du comité
10h00	Huis clos avec les tutelles
10h40	Huis clos avec la direction
11h00	Huis clos du comité

OBSERVATIONS GÉNÉRALES DES TUTELLES

Le Président

Paris, le 5 avril 2024

HCERES
2 rue Albert Einstein
75013 Paris

Objet : Rapport d'évaluation de l'unité DER-PUR250024235 - LBT - Laboratoire de biochimie théorique.

Madame, Monsieur,

L'université Paris Cité (UPCité) a pris connaissance du rapport d'évaluation de l'Unité de Recherche LBT - Laboratoire de biochimie théorique.

Présidence

Ce rapport a été lu avec attention par la direction de l'unité (de la part de laquelle vous trouverez deux courriers joints), par la vice-doyenne Recherche et le doyen de la Faculté des Sciences d'UPCité (cf courrier du doyen Cazayous), par la vice-présidente Recherche d'UPCité et par moi-même.

Référence

Pr/DGDRIVE/2023

Affaire suivie par

Christine Debydeal -
DGDRIVE

Je remercie le comité pour son travail d'évaluation, et vous indique ne pas avoir d'observations d'ordre général complémentaires à porter.

Adresse

85 boulevard St-Germain
75006 - Paris

Je vous prie d'agréer, Madame, Monsieur, l'expression de ma considération distinguée.

www.u-paris.fr

Édouard Kaminski



Référence
MC/NE/EB/2024-027

Faculté des Sciences
Université Paris Cité
5 rue Thomas Mann
75013 Paris

Objet : DER-PUR250024235 - Évaluation HCERES de l'UPR 9080 LBT- Retour Tutelle Université Paris Cité

Chères et Chers Collègues,

Nous souhaitons par ce courrier remercier les membres du comité de visite pour le temps qu'ils ont consacré à l'évaluation de LBT, ainsi que pour leur écoute et le travail considérable qu'ils ont accompli.

La Faculté des Sciences est fière de compter LBT parmi ses unités de recherche et rappelle la grande qualité de la recherche menée par tous les membres du laboratoire.

Après lecture du rapport provisoire d'évaluation de l'UPR 9080 LBT, la Faculté des Sciences souhaite ajouter l'observation générale suivante :

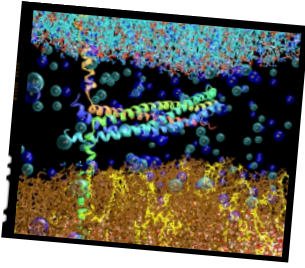
Effectivement le projet qui fera de LBT une UMR d'Université Paris Cité est en cours mais l'Université n'a pas attendu que ce projet soit finalisé pour soutenir LBT financièrement en lui permettant de répondre à ses AAP internes.

En vous priant, chères et chers collègues, d'accepter nos chaleureuses salutations.

Maximilien CAZAYOUS
Doyen
Faculté des Sciences
Université Paris Cité

Nathalie EISENBAUM
Vice-Doyenne recherche Faculté
des Sciences
Université Paris Cité





Marc Baaden

BUREAU

Laboratoire de Biochimie Théorique
CNRS - UPR 9080
13, rue Pierre et Marie Curie
F-75005 Paris
France

TÉLÉPHONE

+33 1 58 41 51 76

FAX

+33 1 58 41 50 26

ADRESSE ÉLECTRONIQUE

baaden@smplinux.de

WEB

www.baaden.ibpc.fr

Paris, le 2 avril 2024

Observations générales

Rapport HCERES DER-PUR250024235 / LBT / CNRS UPR 9080

Madame, Monsieur,

Après avoir reçu et examiné attentivement le projet de rapport d'évaluation concernant mon laboratoire, je n'ai pas de remarques générales particulières à formuler. Au nom de l'ensemble des membres du laboratoire, je tiens à remercier sincèrement le comité d'experts HCERES, ainsi que son personnel administratif, pour la rigueur et le professionnalisme dont ils ont fait preuve tout au long de ce processus d'évaluation. Mes remerciements s'adressent également aux tutelles et à toutes les parties prenantes qui ont contribué au bon déroulement de cette procédure importante pour notre structure.

Bien sincèrement,

Dr Marc Baaden

Directeur de Recherche au CNRS

Directeur de l'unité CNRS UPR 9080



Les rapports d'évaluation du Hcéres
sont consultables en ligne : www.hceres.fr

Évaluation des universités et des écoles

Évaluation des unités de recherche

Évaluation des formations

Évaluation des organismes nationaux de recherche

Évaluation et accréditation internationales



2 rue Albert Einstein
75013 Paris, France
T.33 (0)1 55 55 60 10

hceres.fr

[@Hceres_](https://twitter.com/Hceres_)

[Hcéres](https://www.youtube.com/Hceres)