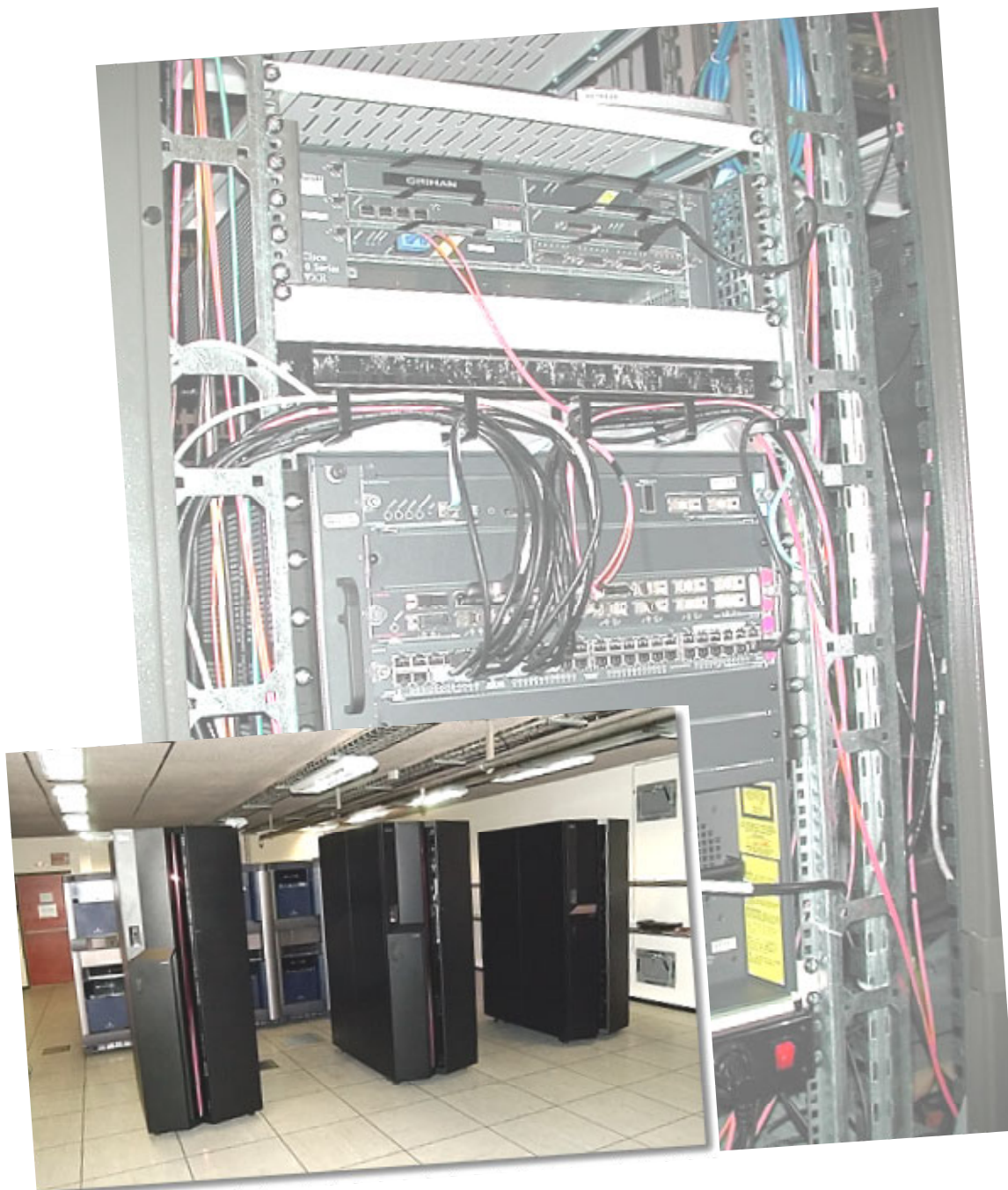




# **CRIHAN**



## **Rapport d'activités 2003**

**PANORAMA..... 4****1 ACTIVITES DE SOUTIEN AUX PROJETS INNOVANTS ..... 6**

<b>1.1 PROJETS SOUTENUS DANS LE DOMAINE DE LA SANTE .....</b>	<b>6</b>
1.1.1 LA PLATEFORME ADICAP .....	6
1.1.1.1 Bref rappel.....	6
1.1.1.2 Les échanges sur la plateforme ADICAP.....	6
Tableau 1 : Aire de rayonnement de la plateforme ADICAP .....	6
Tableau 2 : Vue d'ensemble des mouvements de dossiers sur le serveur .....	7
Tableau 3 : Répartition mensuelle des cas médicaux reçus par le serveur ADICAP.....	8
Tableau 4 : Volume de données reçu mensuellement par le serveur ADICAP.....	8
1.1.1.3 Applications médicales induites par la plateforme ADICAP.....	9
1.1.2 CRISAP : PROJET DE REGROUPEMENT STATISTIQUE POUR L'EPIDEMIOLOGIE .....	11
1.1.3 DOPAMINE : PROJET D'INITIATIVE REGIONALE POUR LE DOSSIER MEDICAL PARTAGE .....	12
<b>1.2 PROJETS SOUTENUS DANS LE DOMAINE CULTUREL .....</b>	<b>13</b>
1.2.1 SITE PORTAIL DES MUSEES DE HAUTE-NORMANDIE .....	13
1.2.1.1 Contexte .....	13
1.2.1.2 Première étape du projet.....	13
1.2.1.3 Prochaines étapes .....	14
1.2.2 FESTIVAL DU CINEMA NORDIQUE .....	15
<b>1.3 PROJETS SOUTENUS DANS LE DOMAINE SCIENTIFIQUE .....</b>	<b>16</b>
1.3.1 CYBERFORMATION .....	16
1.3.2 SCIENCE ACTION .....	16
1.3.2.1 Un studio d'enregistrement et de mise en ligne.....	16
1.3.2.2 L'atelier itinérant .....	16
1.3.2.3 La Science en Fête.....	16
1.3.3 LE PROJET EUROPEEN DAMIEN .....	18
1.3.3.4 Rapports.....	18
1.3.3.5 Contexte technique.....	18
1.3.3.6 Metacomputing et réseau .....	18
1.3.3.7 Rôle du CRIHAN .....	19
1.3.4 GLOBALISATION DES RESSOURCES REGIONALES : TRAVAUX PREPARATOIRES 2004-2006.....	19
1.3.4.1 Le traitement distribué .....	19
1.3.4.2 Vers un "CERTAM numérique" .....	20

**2 LE SERVICE DE CALCUL..... 21**

<b>2.1 FIN DE CARRIERE DU CALCULATEUR ILLIAC 8 : LE BILAN.....</b>	<b>21</b>
2.1.1 RAPPEL .....	21
2.1.2 ETATS DES TRAVAUX REALISES SUR ILLIAC 8.....	21
2.1.2.1 Niveau de charge du calculateur Illiac 8 .....	22
2.1.2.2 Comptabilité par thèmes de recherche .....	23
2.1.2.3 Les laboratoires utilisateurs.....	24
2.1.2.4 Récapitulatif graphique global .....	26
<b>2.2 LE NOUVEAU SUPERCALCULATEUR : UN CLUSTER IBM.....</b>	<b>29</b>
2.2.1 LE CONTEXTE DE CE RENOUVELLEMENT.....	29
2.2.2 RECEPTION, INSTALLATION ET REGLAGE DU CLUSTER .....	29
2.2.3 TRANSFERTS DES PROJETS EN COURS ET MISE EN PLACE DES NOUVEAUX.....	30
2.2.4 SUPPORT ET FORMATION AUX UTILISATEURS DU CLUSTER .....	31
2.2.4.5 Formation .....	31
2.2.4.6 Support aux utilisateurs.....	31
2.2.5 PREMIERS RESULTATS D'EXPLOITATION .....	32

<b>3</b>	<b><u>LE RESEAU DE MODELISATION MOLECULAIRE.....</u></b>	<b><u>35</u></b>
3.1	EVOLUTION DES MOYENS MIS A DISPOSITION.....	35
3.1.6	EVOLUTIONS MATERIELLES.....	35
3.1.7	EVOLUTIONS LOGICIELLES.....	35
<b>4</b>	<b><u>LE RESEAU REGIONAL MIS EN PLACE EN 2003 : SYRHANO VERSION 2.1.....</u></b>	<b><u>36</u></b>
4.2	EVOLUTIONS DU CŒUR DE RESEAU.....	36
4.3	ETAPES DE MISE EN PLACE DE LA CONFIGURATION SYRHANO 2.1.....	36
4.4	PRINCIPES RETENUS POUR LA CONSTRUCTION DE L'ARCHITECTURE .....	37
4.5	ARCHITECTURE REALISEE A FIN SEPTEMBRE 2003.....	38
4.6	METROLOGIE DU RESEAU .....	39
4.7	SERVICE DE COLLECTE XDSL.....	41
4.8	EVOLUTIONS D'INTERCAMPUS.....	44
4.8.8	VERS UN INTERCAMPUS HAVRAIS.....	46
4.9	LES TRAVAUX SUR IPV6.....	46
4.9.1	POURQUOI CES TRAVAUX.....	46
4.9.2	UN ENRICHISSEMENT DES SERVICES .....	46
4.9.3	DEVANCER UN BESOIN ENCORE MAL EXPRIME .....	47
4.10	LE DEPLOIEMENT D'IPV6 SUR SYRHANO .....	47
4.10.1	CONTRAINTES ET ECHEANCIER .....	47
4.10.2	MISE EN PLACE D'UN POINT DE PEERING V6 REGIONAL .....	48
4.10.3	COLLECTE V6 SUR XDSL POUR LES ETABLISSEMENTS SCOLAIRES .....	48
4.10.4	PROCHAINE ETAPE.....	49
4.10.5	QU'EN ATTENDRE ?.....	49
4.10.6	LES ACTEURS, ET LE CONTEXTE REGIONAL ET NATIONAL .....	50
4.10.7	FORMATION IPV6 .....	50
<b>ANNEXE A :</b>	<b><u>PLATEFORME DE COLLECTE CRISAP.....</u></b>	<b><u>52</u></b>
<b>ANNEXE B :</b>	<b><u>LISTES DES MUSEES DE HAUTE-NORMANDIE.....</u></b>	<b><u>53</u></b>
<b>ANNEXE C :</b>	<b><u>JOURNEES D'ETUDES "INTERNET ET LES MUSEES : SITE ET PORTAIL" .....</u></b>	<b><u>54</u></b>
<b>ANNEXE D :</b>	<b><u>PUBLICATIONS REALISEES DURANT L'EXPLOITATION DU SERVICE ILLIAC 8 .....</u></b>	<b><u>56</u></b>
<b>ANNEXE E :</b>	<b><u>LES TRAVAUX DU CRIHAN SUR IPV6.....</u></b>	<b><u>96</u></b>
<b>ANNEXE F :</b>	<b><u>ANNEXE TECHNIQUE SUR L'INSTALLATION DU CLUSTER IBM .....</u></b>	<b><u>106</u></b>
<b>ANNEXE G :</b>	<b><u>APPELS A PROJETS SCIENTIFIQUES.....</u></b>	<b><u>122</u></b>

## Panorama

Le précédent rapport d'activités présentait l'année 2002 comme "*une année d'appels d'offres*".

Les deux axes majeurs des activités du CRIHAN que sont le déploiement du réseau régional pour la recherche et le centre de calcul intensif, y faisaient en effet l'objet de renouvellements fondamentaux avec, pour l'un, la projection d'un réseau à vocation plus large (communauté d'utilisateurs élargie, extension territoriale), plus fédérateur et plus modulaire (brassage des techniques et des opérateurs), pour l'autre, la mise en place d'une architecture beaucoup plus puissante en capacité de traitement et en vitesse d'exécution.

Sur ces deux thématiques, l'année 2003 a été en grande partie consacrée aux traitements et aux mises en place opérationnelles des choix faits par les commissions à la suite de ces appels d'offres. Le présent rapport met l'accent sur ces travaux en soulignant qu'ils ont nécessité de longs mois de mise au point pour parvenir à un niveau de qualité de service stable et efficace. Les chapitres 2 (service de calcul) et 4 (SYRHANO 2.1) retracent le détail de ces opérations et sont complétés des annexes E (déploiement du service IPv6 sur SYRHANO) et F (installation du supercalculateur) pour les aspects plus techniques.

- Concernant le service de calcul, 2003 marque la fin du service du calculateur Silicon Graphics "Illiac 8" dont l'exploitation avait commencé au début de 1998. A cette occasion, un bilan global de son exploitation est présenté au début du chapitre 2. Plusieurs graphiques en traduisent l'activité, son niveau de charge, les thématiques scientifiques, son rayonnement géographique. Ce bilan sur cinq années est également l'occasion de mentionner son impact sur les publications scientifiques issues des travaux engagés par les laboratoires sur cette machine : un graphique de visualisation globale de ces recherches, présenté sur deux pages à la fin du chapitre 2.1 est complété par une imposante annexe d'une quarantaine de pages (annexe D) récapitulant, laboratoire par laboratoire, les "abstracts" de ces publications ou des thèses soutenues ou en cours.
- Le réseau SYRHANO, quant à lui, présente une architecture nouvelle, alliant les techniques et technologies les plus avancées, des opérateurs variés, des points de présence nombreux, des services d'accès enrichis, des services réseaux de pointe comme la disponibilité d'IPv6, des réseaux

privés virtuels, des services de visioconférence, le tout complété par les extensions du réseau d'agglomération Intercampus. La mise en service de l'ensemble des éléments de cette nouvelle architecture qui forme SYRHANO 2.1, s'est étalée de mars à septembre 2003.

- ✧ Ces avancées dans les domaines du calcul et des réseaux ont naturellement suscité la mise en place de nouvelles formations pour leurs utilisateurs : le service d'assistance scientifique a organisé plusieurs sessions de formation à la nouvelle architecture, le service réseau, de son côté, a mis l'accent sur les formations à l'usage du nouveau protocole de l'Internet, IPv6, qui est désormais proposé sur l'ensemble du réseau régional.
- ✧ Les activités de soutien aux projets innovants ne sont pas de reste en cette année 2003.
  - Le thème de la santé, déjà bien présent avec le service de télémedecine développé pour l'ADICAP depuis de nombreuses années, s'enrichit de divers projets axés sur le traitement avancé de l'image numérique, d'un projet de bases de données statistiques ou épidémiologiques (CRISAP) et d'un projet de dossier médical partagé en réseau (Dopamine).
  - Dans le domaine scientifique, on citera le projet "Cyberformation", qui est également soutenu par l'incubateur régional, ACCEVAL, l'achèvement du projet Européen de metacomputing Damien, les travaux préparatoires des services de "traitement distribué" et de "CERTAM numérique" et enfin les collaborations plus étroites avec Science Action Haute-Normandie qui exploite directement au CRIHAN les ressources nécessaires à son activité de diffusion des savoirs scientifiques.
  - Le domaine culturel apparaît plus nettement cette année avec le projet commun entre le CRIHAN et les conservateurs des Musées de Haute-Normandie de mise en place d'un véritable portail culturel régional : programmé sur deux ans, ce projet doit être la maquette opérationnelle pour l'accueil des données issues du vaste programme régional de numérisation des fonds culturels.

L'année a donc été fort dense et variée en activités, en même temps qu'elle a renforcé les ouvertures du CRIHAN dans d'autres domaines du service public comme la Culture et la Santé.

# 1 Activités de soutien aux projets innovants

Pour l'année écoulée, ce type de projets peut être subdivisé en trois catégories :

- les projets relatifs au monde de la santé,
- ceux du monde culturel
- ceux du monde scientifique

## 1.1 Projets soutenus dans le domaine de la Santé

### 1.1.1 La plateforme ADICAP

D'expérimentale, cette plateforme est devenue un outil utilisé de façon routinière par les pathologistes. Au-delà de cet usage désormais courant, elle suscite des développements originaux qui seront décrits plus loin.

#### 1.1.1.1 Bref rappel

Depuis 1996, le CRIHAN développe, héberge et gère une plateforme d'échange de dossiers d'images médicales couvrant les besoins des pathologistes sur tout le territoire et au-delà.

Le service entre dans le cadre d'une convention établie entre le CRIHAN et l'ADICAP (Association pour le Développement de l'Informatique en Cytologie et en Anatomie Pathologique) qui s'est donnée pour mission de favoriser le développement des techniques informatiques dans les laboratoires de leurs spécialités.

La plateforme permet le travail collaboratif autour de dossiers exploitant les images numérisées provenant des lames préparées dans les laboratoires par les anatomopathologistes, les hématologistes et les cytologistes. Les usages principaux concernent essentiellement la co-expertise mais également des utilisations à des fins pédagogiques ou de consensus sur une pathologie particulière menant à la définition d'un protocole thérapeutique.

#### 1.1.1.2 Les échanges sur la plateforme ADICAP

On ne reviendra pas sur les fonctionnalités de base qui ont été détaillées dans le précédent rapport d'activités (2002). Dans ce paragraphe, on s'attache d'avantage à la caractérisation de l'activité c'est-à-dire la comptabilisation des échanges dans le cadre de l'exploitation routinière du service. Le paragraphe suivant est consacré aux projets induits se greffant sur la plateforme.

Les quatre tableaux ci-après donnent une vue d'ensemble de l'activité en ce qui concerne les dépôts de dossiers sur le serveur. Rappelons qu'un dépôt de dossier correspond le plus souvent à un appel à co-expertise par un ou plusieurs destinataires.

Le service accueille actuellement 215 sites utilisateurs totalisant 630 membres ainsi répartis :

<b>Tableau 1 : Aire de rayonnement de la plateforme ADICAP</b>			
Allemagne	1	Italie	6
Belgique	6	Mali	1
Brésil	1	Royaume Uni	1
France métropolitaine	190	Suisse	3
France DOM TOM	6	<b>Total</b>	<b>215</b>

**Tableau 2 : Vue d'ensemble des mouvements de dossiers sur le serveur**

(pour la période de référence : janvier à août 2003)

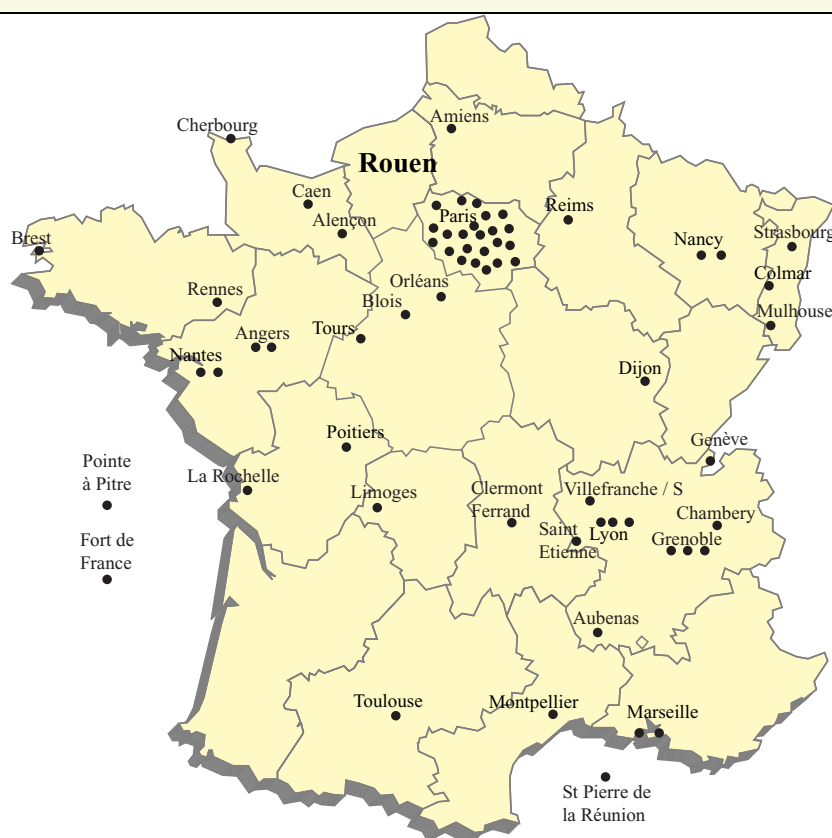
Nb d'images dans les dossiers. . Total . Nb moyen par dossier)	Volume reçu par le serveur. . Total . (taille moyenne d'un dossier)	Laboratoires émetteurs / récepteurs	Nombre de médecins émetteurs d'au moins un dossier.	Nombre de dossiers envoyés sur le serveur	Nombre de destinataires sollicités.	Nombre total d'expertises demandées
<b>2660</b> <b>(5,7)</b>	<b>1023,27 Mo</b> <b>(2,13 Mo)</b>	<b>49 / 68</b>	<b>60</b>	<b>454</b>	<b>186</b>	<b>605</b>

*Explication : 60 médecins de 49 laboratoires ont généré 454 dossiers adressés à 186 personnes dans 68 laboratoires.  
L'ensemble représente 605 demandes d'expertises.*

Ci-contre, cartographie des sites utilisateurs pour la période :

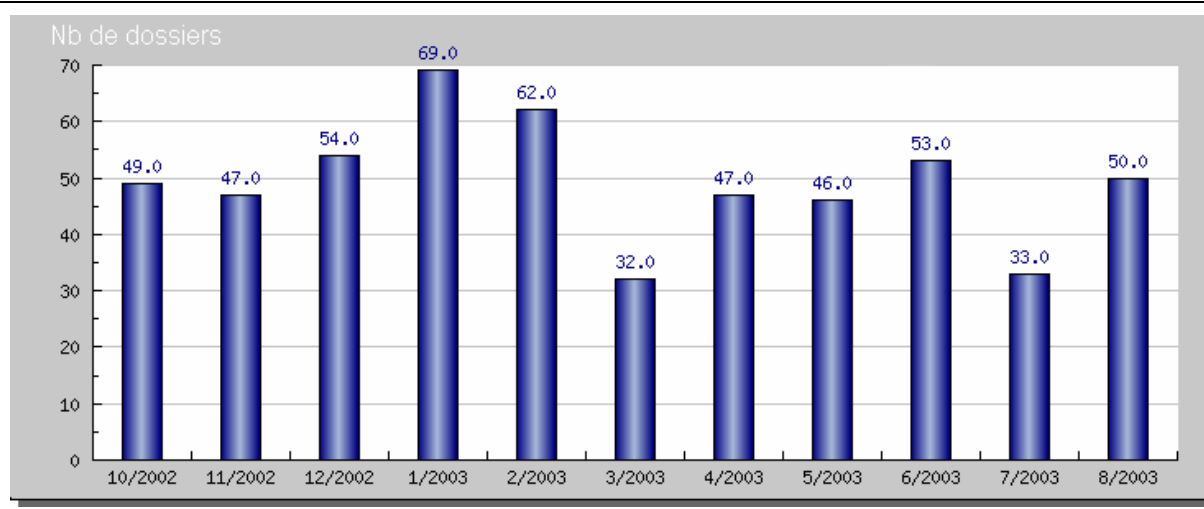
Un point noir représente un laboratoire actif sur la période

78 laboratoires actifs totalisant 210 médecins

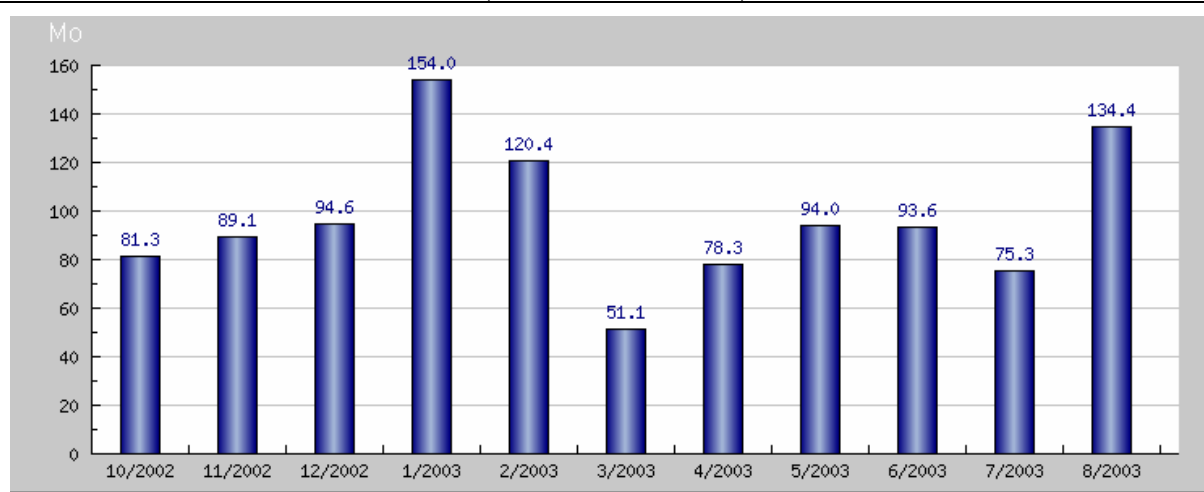


Les mouvements de circulation ne sont pas représentés sur la carte ci-dessus : un dossier pouvant faire appel à un ou plusieurs destinataires voire à une ou plusieurs listes d'experts, une représentation graphique serait complexe et peu lisible. Néanmoins, le serveur propose à ses utilisateurs des statistiques d'échanges, laboratoire par laboratoire (<http://www.adicap.asso.fr/stats/>). Des statistiques spécifiques et confidentielles sont également disponibles pour les échanges mettant en jeu un établissement du groupe de l'AP/HP (Assistance Publique / Hôpitaux de Paris), groupe qui pèse numériquement (voir carte ci-dessus) et qui réunit une part non négligeable des experts.

*Tableau 3 : Répartition mensuelle des cas médicaux reçus par le serveur ADICAP*  
(octobre 2002 à août 2003)



*Tableau 4 : Volume de données reçu mensuellement par le serveur ADICAP*  
(octobre 2002 à août 2003)





### 1.1.1.3 Applications médicales induites par la plateforme ADICAP

Deux types de développements émergent sur la base de cette plateforme d'imagerie médicale :

#### Les développements fondés sur les bases de données

« ADICAP » désigne également le code créé par l'association pour caractériser les lésions lors de l'étude des lames : ce code ADICAP, utilisé depuis de très nombreuses années, est devenu un "standard de fait" et s'impose dans les applications développées tant par les industriels pour les produits de gestion de laboratoires que pour les diverses expérimentations. On peut citer :

- GOELAM (Groupe d'Observations et d'Etudes Des Leucémies Aiguës Myéloïdes). Il s'agit d'un sous-groupe d'une quarantaine de personnes qui travaillent de façon coordonnée sur la relecture de lames d'hématologie de leucémies aiguës dans l'optique de définir des protocoles thérapeutiques consensuels. Le suivi des relectures est assuré par un serveur tiers, celui d'un des industriels participants, le tout sous le contrôle d'un administrateur désigné dans le groupe de pathologistes. Les fichiers à relire transitent naturellement par le serveur ADICAP mais y font l'objet de traitements particuliers. D'autres groupes d'études thématiques ont déjà manifesté leur intérêt pour bénéficier du même type de service.
- CYTO BIBLE. Toujours dans un esprit consensuel et statistique, le projet BIBLE développé par l'ADICAP avec le soutien du Ministère de la Santé, concerne la rédaction des comptes rendus d'examen assisté par ordinateur et en ligne. La DGS a demandé à l'ADICAP de rédiger cette bible pour inciter à l'emploi des mêmes mots et des mêmes codes pour les mêmes propositions diagnostiques afin de faciliter les enquêtes épidémiologiques. La réalisation et l'usage d'une bible d'interprétation sont liés à l'organisation et au recrutement d'un service mais surtout aux habitudes du pathologiste qui assure l'analyse et l'interprétation des prélèvements. De nombreuses initiatives ont eu lieu pour faciliter la gestion et guider la lecture des examens répétitifs mais leur diversité conduit à une certaine dispersion dans l'emploi des mots qui caractérisent les lésions et des codes qui les spécifient. Il s'agit donc là de proposer au pathologiste une assistance au compte rendu par la technique du QCM interactif (l'enchaînement des questions dépend des réponses choisies par l'utilisateur). Le choix d'un code lésion dans la « bible » ADICAP provoque la rédaction automatique d'une partie du compte rendu puis propose un choix plus restreint de codes annexes pour la description de la lésion et ainsi de suite. Même s'il est bien entendu prévu de permettre également une rédaction libre, le système a deux avantages : il présente un gain de temps notable pour une profession surchargée et génère des rapports codifiés dont l'exploitation ultérieure pour des études épidémiologiques est évidente. C'est ainsi que l'INVS envisage actuellement d'apporter son soutien au développement du projet. L'outil proposé étant disponible en ligne sur le serveur ADICAP, le médecin va pouvoir l'utiliser en tout lieu et avec tout terminal, fut-il un terminable de poche. Utilisable actuellement pour les examens cytologiques de frottis cervico-utérin, cette application est appelée à s'adapter à toutes les pathologies du domaine.
- CRISAP. Projet de base de données nationale en anatomopathologie pour les études statistiques et épidémiologiques. (Ce projet est développé dans le paragraphe page suivante).

## Les développements fondés sur la qualité de l'image numérique

- VideoCell. Projet visant à développer des fonctionnalités de visualisation spécifiques comme l'extension à la demande de la profondeur de champ pour les images diagnostiques à fort grossissement. Exigeant des moyens de calcul importants et des algorithmes évolués, ce projet est développé en partenariat avec l'INT et la société TRIBVN qui a obtenu le soutien du BIO CRITT Ile de France<sup>1</sup>. Le service d'assistance scientifique du CRIHAN a assuré la transposition des codes de calcul conçus par l'INT afin de permettre leur "portage" sur les calculateurs du centre de ressources. Un gain de puissance de facteur 8 a été d'ores et déjà obtenu. Une phase d'adaptation aux architectures parallèles est actuellement en cours pour améliorer encore le temps de restitution. Le but de VideoCell est en effet de permettre à un expert distant, d'examiner une lame virtuellement avec des fonctionnalités se rapprochant de l'examen direct dans lequel il maîtrise habituellement les paramètres de grossissement et de navigation sur le champ de la lame. Cela suppose que l'on ait généré au préalable une image numérique de très grande taille (en fait une trentaine d'images). Les fichiers obtenus, après avoir transité sur le réseau (le très haut débit est nécessaire en l'état actuel des techniques de compression utilisées) sont stockés sur des machines à forte capacité. Le praticien peut alors définir sa zone d'intérêt, son rapport de grossissement et même obtenir une image moyenne dans les profondeurs de champ représentant les parties les plus nettes dans chaque couche. Il reste ainsi maître de son analyse dans l'ensemble de la lame au lieu de n'avoir à sa disposition que les images fixes sélectionnées par l'auteur de l'analyse.
- MATCHSLIDE. Application de l'imagerie numérique à la relecture de lames en réseau dans le cadre de protocoles diagnostiques en hématologie. Projet associant la société TRIBVN, l'ARCHE<sup>2</sup> et l'INT<sup>3</sup> dans le cadre d'un projet RNTS<sup>4</sup> labellisé et soutenu par le Ministère de l'Industrie. S'appuyant sur la plateforme ADICAP au CRIHAN, il a pour but la relecture et l'interprétation, par un réseau d'experts répartis dans toute la France, de lames virtuelles (des lames de microscope sur support électronique) sur Internet et ainsi d'éviter l'échange physique des lames qui pouvait entraîner un retard de plusieurs années. Comme VideoCell, ce projet est soutenu par le BIO CRITT Ile de France.
- TRIDEM. Reposant sur MatchSlide, TRIDEM, entre également dans le cadre d'un projet RNTS labellisé et soutenu par le Ministère de la Recherche : il vise à l'étude sémantique de la variabilité diagnostique appliquée au cancer du sein.

<sup>1</sup> Centre Régional d'Innovation et de Transfert de Technologie : pour la promotion de l'innovation dans les entreprises du secteur biomédical par le transfert de technologie

<sup>2</sup> Association pour la Recherche en Cytologie Hématologique et l'Enseignement : composée de médecins qui définissent et évaluent les systèmes (Hôpital Necker)

<sup>3</sup> Institut National des Télécommunications à Evry

<sup>4</sup> Réseau National Technologies pour la Santé

### **1.1.2 CRISAP : projet de regroupement statistique pour l'épidémiologie**

La fédération des CRISAP (Centres de Regroupement Informatique et Statistique en Anatomie Pathologique) a sollicité le CRIHAN pour la création d'une base nationale de collecte des données pathologiques générées dans les laboratoires d'analyses. Tout comme pour l'ADICAP, il s'agit là d'une association de pathologistes qui a pour but de collecter des données quantitatives sur les lésions observées suite aux examens de lames. Ce sont les laboratoires (de grands centres hospitaliers ou de ville) qui possèdent ces données. Ils ont une obligation légale de produire une fiche patient : celle-ci se réfère à la codification ADICAP des lésions. Encadrant le travail d'un stagiaire du CESI en Master de Projet Industriel, d'avril à août 2003, le CRIHAN a établi le cahier des charges de l'application : elle consiste en la création de bases de données (plusieurs pour des raisons de sécurité et de confidentialité) et d'un outil de collecte des données qui garantit aux médecins une « anonymisation » des données reversées dans la base. Il faut en outre garantir au laboratoire (entendons l'individu dans le laboratoire) qu'il aura tout pouvoir sur les autorisations d'exploitation de "ses" données par les CRISAP en charge de les exploiter statistiquement dans le cadre d'enquêtes épidémiologiques commanditées par un ministère ou un grand organisme de santé publique. Le CRIHAN représente pour les CRISAP une garantie de neutralité quant à la possession informatique des données.

*(On trouvera en Annexe A : le schéma de présentation général des mécanismes de collecte)*

### **1.1.3 DOPAMINE : Projet d'initiative régionale pour le dossier médical partagé**

Le Groupe d'Etudes et de Recherche sur le Dossier Médical partagé (G.E.R.DOSS), association à but non lucratif présidée par le Docteur Christian Paoletti a conçu le principe d'une plateforme d'accueil pour le dossier médical partagé, baptisé DOPAMINE.

L'Union Régionale des Médecins Libéraux (URML) a participé à la définition du cahier des charges et DOPAMINE bénéficie du soutien financier de l'Union Régionale des Caisses d'Assurance Maladie (URCAM) de Haute-Normandie par l'intermédiaire du Fonds d'Aide à la Qualité des Soins de Ville (FAQSV).

L'appel d'offres a conduit à l'attribution de la réalisation du programme à la société Haut-Normande THETIS.

Une des premières étapes avant la mise en production du produit réalisé consiste en ce que l'on appelle une phase de vérification de service régulier (VSR) sur une année. Le CRIHAN apporte les installations nécessaires à cette phase ainsi que le support technique et le conseil en matière de mécanismes de sécurité en réseau, le tout formant un support performant pour la mise au point du projet.

Les services développés par THETIS sont des outils sur l'Internet destinés à permettre aux professionnels de santé de partager un dossier médical informatisé dont le centre est le patient concerné.

La partie serveur du système DOPAMINE comprend principalement :

- Le service d'application.
- Le service de profil vues métiers.
- Le service de documentation et thésaurus pour les articles médicaux.
- Le service de données médicales patient.
- Le service d'identité patient avec ses clés pour le contrôle des droits d'accès au système.
- Le service de messagerie sécurisée.
- Un module de gestion des identités des patients et des praticiens utilisateurs.
- Un module de gestion du dossier médical.
- Un module de gestion des droits d'accès aux éléments de dossier.
- Un module de gestion de documentation médicale.
- Un module de gestion des profils des usagers et des vues métiers.

Les différents niveaux de sécurité existant au CRIHAN (accès aux locaux contrôlés, sécurisation électrique et incendie des salles des machines, outils de sécurité en réseau) en font un lieu d'accueil idéal pour l'hébergement de la partie VSR du projet.

## 1.2 Projets soutenus dans le domaine culturel

### 1.2.1 Site Portail des musées de Haute-Normandie

#### 1.2.1.1 Contexte

Depuis 2000, la "Section Fédérée de Haute-Normandie de l'Association Générale des Conservateurs des Collections Publiques de France", en étroite liaison avec le Conseil Régional et la DRAC de Haute-Normandie et avec leur appui financier, a lancé une réflexion approfondie sur le potentiel des musées et la numérisation des collections. C'est ainsi qu'a été confiée à la Société "Grahal" une "Etude de faisabilité pour l'informatisation des collections et la mise en place d'un site Internet". Cette étude rendue en mars 2002, a été complétée en 2003 par diverses actions (formations, conseils personnalisés) qui ont permis de dresser un plan d'action et une synthèse précis de tous les besoins, dans la perspective d'une inscription au Contrat de Plan.

Il s'agit d'un projet d'envergure visant à réaliser dans un délai raisonnable, l'informatisation et la numérisation des collections des musées de Haute-Normandie dans leur exhaustivité<sup>5</sup>.

Le but à terme est la constitution d'une base de donnée régionale avec reversement d'une partie des données sur les bases nationales<sup>6</sup>. Cette base régionale sera l'un des volets d'un site portail des musées, qui permettra également à ces derniers de présenter leurs expériences et programmes d'activité.

Si cette expérience dans laquelle se lancent les musées de Haute-Normandie est novatrice en ce sens qu'elle envisage l'exhaustivité de ses collections, il s'agit d'un travail sur le long terme, engageant un investissement élevé en temps et en moyens et dont la visibilité n'est pas immédiate. D'où le souhait que soit amorcée dès maintenant, une préfiguration de ce que pourrait être un site régional des musées de Haute-Normandie.

L'appel d'offres lancé en mars 2002 par la DATAR pour la création de "Portails Culturels Territoriaux" s'inscrivait donc à un moment très opportun dans la démarche de la Région Haute-Normandie et de ses musées. La Section Fédérée de Haute Normandie (SFHN) a répondu à cet appel ; son projet a été retenu, avec une subvention à l'appui de 30.000 euros.

#### 1.2.1.2 Première étape du projet

De janvier à juillet 2003, une étudiante en DESS Responsabilité de Projets Culturels, au sein du Département de Sociologie, Psychologie et Sciences de l'Education à l'Université de Rouen a été chargée par la SFHN de travailler sur ce projet de site/portail des musées, dans le cadre d'un stage de treize semaines. Une première collaboration a alors été établie avec le CRIHAN qui a fourni un local d'accueil et une assistance technique pour son travail. Un triple objectif lui avait été fixé :

- Mise en place de deux journées de formation sur les portails Internet, destinées aux conservateurs et personnels concernés des musées de Haute-Normandie, avec l'aide de la Direction des Musées de France. Ces journées, préparées par la SFHN et le CRIHAN, ont eu lieu les 13 et 14 octobre 2003 au CRIHAN et au CORIA<sup>7</sup>. Elles ont permis de placer tous les personnels à un même niveau de réflexion, en prenant appui sur les expériences existantes.
- Enquête auprès des conservateurs pour rassembler leurs attentes.

<sup>5</sup> (cf. : Annexe B : "Listes des Musées de Haute-Normandie")

<sup>6</sup> Les bases nationales Joconde, Archéo et Ethno, sur le site du ministère de la culture. Chaque musée est sensé y verser des fiches pour alimenter ces bases qui tendent à l'exhaustivité pour les collections publiques françaises.

<sup>7</sup> (cf. : Annexe C : "Journées d'études "Internet et les musées : site et portail")

### ➤ Elaboration des grandes lignes de l'architecture du futur site/portail.

Le rapport de stage remis en août 2003 fournit une synthèse des souhaits des conservateurs et trace les grandes lignes de l'architecture du site. Nous disposons donc des bases nécessaires à la mise en œuvre du projet.

Il devient dès lors possible de mettre rapidement en chantier la maquette d'un site/portail des musées de Haute-Normandie, qui s'enrichira ensuite au fur et à mesure de l'avancement de l'informatisation et de la numérisation des collections.

Ce portail, élaboré en concertation avec l'ensemble des musées, sera un banc d'essai pour tester l'emploi des techniques les plus aptes à mettre en ligne les collections des musées, pour développer l'attractivité des musées, moderniser leur image et contribuer à l'augmentation de leur fréquentation. Il permettra :

- la mise à disposition d'un outil de recherche performant sur les collections, grâce à sa base de données régionale,
- la mise en œuvre de produits éducatifs et pédagogiques (des contacts sont en cours avec l'Education Nationale),
- la mise en valeur de l'image régionale, par la présentation de thèmes propres à la région,
- l'intégration et la cohésion sociale par le partage d'une culture territoriale accessible,
- l'attractivité et l'accompagnement au tourisme culturel français et étranger.

La particularité de la démarche, par rapport à d'autres sites portails déjà existants, sera l'importance accordée au caractère régional du projet. La SFHN souhaite en effet développer et proposer dans ses pages Web un contenu significatif, commun à tous les musées de Haute-Normandie.

Une telle initiative est d'autant plus importante que, à l'heure actuelle, les musées de la région sont loin de tous posséder un site Web en propre et qu'ils n'auront pas forcément la possibilité d'en ouvrir à court terme. C'est donc aussi une manière de les aider, notamment en matière de diffusion, en les rendant accessibles sur Internet de façon égalitaire. Une grande partie de la mission de la stagiaire a donc consisté à enquêter dans chaque musée pour recueillir les impressions et desiderata quant à l'architecture du futur site.

Le principal objectif d'un projet de ce type relève de la communication. Aujourd'hui, Internet est le moyen le plus efficace pour diffuser des informations et c'est grâce à cet outil que les conservateurs des musées vont chercher à toucher un large public afin d'accroître la notoriété des collections de la région.

D'autres régions ont déjà fait cette expérience en créant un site portail de leurs musées : le Nord-Pas-de-Calais avec Musenor<sup>8</sup>, le Poitou-Charentes avec Alienor<sup>8</sup>, ainsi que la région Centre<sup>8</sup>. En Bourgogne et en Midi-Pyrénées, de tels sites sont en cours de création.

Un autre objectif est de préparer le creuset dans lequel viendront s'ajouter au fur et à mesure les documents issus du programme de numérisation : ils constitueront une base documentaire régionale qui servira autant les besoins du grand public que ceux des scientifiques et, coté pédagogique, ceux des enseignants et des élèves ou étudiants.

#### 1.2.1.3 Prochaines étapes

Dans tous les projets régionaux de ce type, les sections fédérées régionales de l'Association Générale des Conservateurs des Collections Publiques de France ont été instigateurs et parfois maîtres d'ouvrage. Souvent, la structure porteuse a dû évoluer pour des raisons administratives et financières ;

<sup>8</sup> [www.musenor.org](http://www.musenor.org) [www.alienor.org](http://www.alienor.org) [www.musees.regioncentre.fr](http://www.musees.regioncentre.fr)

c'est ainsi qu'en Poitou-Charentes a été créé le Conseil des Musées de Poitou-Charentes (CMPC). En Haute-Normandie, la section fédérée est en pourparlers avec la DRAC et le Conseil Régional pour créer une structure qui pourrait être un établissement public de coopération culturelle (EPCC) adapté au portage d'un projet de cette envergure<sup>9</sup>.

D'ores et déjà, comme il a été dit plus haut, la SFHN s'est vue attribuer une subvention de 30 000 € en réponse au dossier présenté lors de l'appel d'offres de la DATAR (Délégation à l'aménagement du Territoire) sur les Portails Culturels Territoriaux. Des contraintes administratives l'obligent néanmoins à chercher une solution avec un autre partenaire pour débloquer cette somme et obtenir les financements complémentaires correspondant à l'ensemble du projet de portail. Etant donné que la mise en place du portail reposera sur l'utilisation des ressources et du support du CRIHAN, une convention entre les deux associations, conclue en octobre 2003, va permettre au CRIHAN d'assurer la maîtrise d'ouvrage du projet et sa maîtrise d'œuvre associée, la SFHN assurant la définition des objectifs et des fonctionnalités attendues du site portail. Le projet a vocation à trouver ensuite son prolongement dans le cadre de la structure mise en place au niveau régional.

### **1.2.2 Festival du Cinéma Nordique**

Le site Web du Festival du Cinéma Nordique<sup>10</sup> continue d'être soutenu par le CRIHAN. Il repose sur une base de données gérée au CRIHAN. Le festival de 2003 n'a pas vu de modification majeure. Il est cependant envisagé d'enrichir le site, notamment avec l'adjonction de mini bandes annonces qui seraient sélectionnées par le festival : une interface permettant de préparer, en ligne, tous les documents préparatoires et jusqu'à la plaquette finale est en cours de réflexion en ce moment même et pourrait être disponible pour la session de 2004.

<sup>9</sup> (Le projet dans son ensemble incluant la numérisation de fonds et donc l'équipement des musées, la formation du personnel etc., a fait l'objet d'une longue étude menée par le cabinet d'études GRAHAL).

<sup>10</sup> <http://www.crihan.fr/cinemanordique>

## 1.3 Projets soutenus dans le domaine scientifique

### 1.3.1 Cyberformation

Dans ses locaux du Technopôle du Madrillet, le CRIHAN a la possibilité d'accueillir des structures innovantes de sorte à leur apporter un soutien en conseil, assistance et en disponibilités matérielle et réseau.

L'Incubateur Régional, ACCEVAL, lorsqu'il apporte son aide à des projets innovants en rapport avec l'emploi des nouvelles technologies, souhaite pouvoir accéder à ces facilités. Durant cette année, des négociations ont été menées autour d'un projet présenté par l'Incubateur. Ce projet, intitulé "Cyberformation", vise la constitution d'une plateforme innovante d'e-learning répondant aux demandes des organismes de formation et aux centres de formation des groupes industriels. Sa finalisation est en cours.

### 1.3.2 Science Action

La coopération déjà ancienne entre le CRIHAN et le CCSTI Science Action Haute-Normandie s'accélère cette année avec l'accueil d'une partie des activités de l'association dans les locaux du CRIHAN au Madrillet.

#### 1.3.2.1 Un studio d'enregistrement et de mise en ligne

Afin de profiter en direct des installations, une salle a été réservée pour créer un studio d'enregistrement : Science Action l'utilise notamment en y recevant régulièrement un scientifique régional pour une conférence sur une thématique particulière. Au rythme d'une fois par mois environ, ces conférences sont immédiatement diffusées sur le réseau régional et en prolongement sur l'ensemble du réseau national RENATER.

Après montage, les conférences sont également disponibles sur le Serveur de Science Action hébergé au CRIHAN. On a ainsi pu assister depuis quelques mois aux conférences suivantes :

Jean COSTENTIN, Professeur à la Faculté de Médecine et de Pharmacie de l'Université de Rouen et Directeur de l'Unité de Pharmacologie du C.H.U. de Rouen	"Les effets du hashich sur notre cerveau"
Gérard BRETON, Directeur du Muséum du Havre	"Tricheurs, m'as-tu-vu et camouflés"
Marcel THOUIN et Jean-Pierre ASTOLFI	"Des idées, des ressources pour enseigner les sciences et la technologie à l'école primaire"
De nombreuses autres conférences précédemment enregistrées sont également disponibles sur ce serveur ( <a href="http://www.scienceaction.asso.fr">http://www.scienceaction.asso.fr</a> )	

#### 1.3.2.2 L'atelier itinérant

L'atelier mobile continue ses activités, essentiellement l'été, et reçoit le support du CRIHAN avec la gestion de forums de discussion, de courrier électronique et surtout en bénéficiant d'une connexion au réseau SYRHANO. Rappelons que cet atelier est constitué d'une dizaine d'ordinateurs portables reliés en technologie AirPort (WiFi).

#### 1.3.2.3 La Science en Fête

Manifestation annuelle, la Science en Fête qui a toujours été soutenue par le CRIHAN depuis plus de dix ans, voit cette année une extension originale. Outre les "villages" réunissant dans quelques villes de la région tous les exposants, un "Village des Sciences Région@l On Line" a été imaginé par Science Action avec l'appui technique du CRIHAN.



Résolument participatif, ce Village des Sciences expérimental permet au public de dialoguer avec la communauté scientifique régionale. Un programme d'animations de 7 jours comprenant :

- La participation à des conférences tout public données par des chercheurs de la région,
- Des questions en direct aux différents intervenants, par le biais de forums interactifs,
- Des films scientifiques, numérisés pour l'occasion,
- Des clips des séries « Un Objet, une Histoire » et « Osez la Recherche ! »,
- Des événements en direct tels que inaugurations, spectacle, conférences,
- La vision en temps réel, des images des différents Villages des Sciences de la région.

### 1.3.3 Le projet européen DAMIEN

#### 1.3.3.4 Rappels



DAMIEN (Distributed Applications and Middleware for Industrial use of European Networks) est l'un des projets européens initiés par le programme de recherche de l'IST (Information Society Technologies). Le projet s'inscrit dans l'émergence d'une nouvelle infrastructure de l'information, généralement décrite comme « la Grille ». Cette notion se base sur les réseaux hauts débits qui interconnectent les ressources informatiques européennes. Cette infrastructure donnera un accès simple et efficace aux informations et aux puissances de calcul. Ceci, à l'image des réseaux de distribution qui donnent accès à l'électricité, sans que l'utilisateur n'ait à se soucier de détails techniques. De nombreux sujets de recherche doivent être poursuivis, avant que cette nouvelle technologie de l'information devienne une réalité pour tous. C'est à l'un de ces sujets que s'intéresse le projet Damien, celui concernant l'usage d'une puissance de calcul distribuée, dans une grille de superordinateurs.

Ce projet a débuté en janvier 2001 et prend fin en octobre 2003. La contribution du CRIHAN repose sur ses ressources de calcul, la connexion régionale très haut débit SYRHANO vers le réseau national RENATER et enfin, sur sa capacité d'intégration des nouvelles technologies réseau, comme le nouveau protocole IPv6 et la Qualité de Service.

Participent à ce projet :

Structure	Sigle	Pays
Universität Stuttgart	USTUTT	Allemagne
EADS CCR	EADS CCR	France
European Center for Parallelism of Barcelona Universitat Politècnica de Catalunya	CEPBA-UPC	Espagne
Centre de Ressources Informatiques de Haute Normandie	CRIHAN	France
Pallas Gesellschaft fuer Parallele Anwendungen und System mbH	Pallas	Allemagne

#### 1.3.3.5 Contexte technique

Certaines applications scientifiques ou techniques nécessitent d'importants moyens de calcul, qui ne sont pas toujours disponibles sur un seul ordinateur ou supercalculateur. Ces besoins peuvent être satisfaits en regroupant les puissances de traitement de plusieurs supercalculateurs.

Ainsi par exemple, dans le cadre de ce projet, notre partenaire industriel EADS présente une application de vibro-acoustique dont le traitement requiert plusieurs de ses calculateurs parallèles répartis sur ses différents sites.

Les solutions logicielles qui sont développées dans ce projet, et qui ont pour but de permettre à une application parallèle d'utiliser les processeurs de plusieurs machines, forment le domaine du « Metacomputing ».

#### 1.3.3.6 Metacomputing et réseau

La parallélisation de l'application, sur un ensemble de machines, est réalisée par une extension du langage parallèle MPI (Message passing Interface). Cette extension est PACX-MPI, développée à Stuttgart.

PACX-MPI utilise le réseau pour assurer les échanges d'information entre les processeurs qui se situent sur des machines distantes. De fait, la qualité (bande passante, latence) du réseau influe considérablement sur les performances de l'application.

#### 1.3.3.7 Rôle du CRIHAN

Le module développé par le CRIHAN, assure les connexions réseau entre les différentes machines, avec les protocoles Ipv4 et Ipv6.

D'autre part, ce module modélise la performance de l'application en fonction de la bande passante et de la latence du réseau. Il assiste les utilisateurs dans l'optimisation de leur application et permet le dimensionnement de la bande passante du réseau. Ce dimensionnement peut ensuite être utilisé pour réserver de la bande passante entre les sites, grâce au nouveau service IP-Premium (<http://www.dante.net/nep>).

### 1.3.4 Globalisation des ressources régionales : travaux préparatoires 2004-2006

#### 1.3.4.1 Le traitement distribué

La nouvelle configuration du service de calcul (voir chapitre suivant) a également vocation à s'intégrer de façon plus naturelle dans les différents programmes de « grilles de calcul », qui sont en phase d'élaboration pour le 6<sup>ème</sup> PCRD (Programme Cadre de Recherche et Développement) de l'Union Européenne. Il confortera aussi la position de la région Haute -Normandie dans le schéma national de répartition des centres de "calcul distribué", qui a permis par ailleurs de bénéficier d'une participation du Ministère de la Recherche à l'investissement initial à hauteur de 150 000 €.

La notion de "calcul distribué " est la suivante :

Grâce à l'évolution des techniques réseau et de la performance des ordinateurs, le terme de "Traitement distribué" n'est plus un concept futuriste mais bel et bien une réalité qui a déjà permis la réalisation d'opérations intéressantes comme par exemple la mobilisation de plusieurs milliers de PC pour déchiffrer des clefs de cryptage, le projet SETI@Home ou les traitements répartis de données sismiques.

En parallèle à ces opérations qui restent ponctuelles et limitées dans leurs objectifs, les travaux pour développer des intergiciels de grilles destinés à banaliser des ressources informatiques avancent : des expérimentations ont déjà eu lieu avec un certain succès. Aujourd'hui essentiellement limitées au domaine du calcul numérique distribué, ces travaux couvrent potentiellement de nombreux domaines applicatifs, des portails Internet frontalisant des bases de données distribuées aux services réseau de demain sans lesquels les ordinateurs redeviendront des terminaux passifs.

Nous avons, en Haute-Normandie, l'environnement idéal pour imaginer et développer de nouveaux services distribués :

- le réseau régional SYRHANO offre des débits importants, un niveau de qualité élevé et un large éventail de services réseau ;
- le pôle de modélisation numérique, hébergé au CRIHAN et constitué aujourd'hui du nouveau cluster IBM (plus de 300GFlops de puissance crête) ;
- l'expérience du CRIHAN qui participe depuis plusieurs années à des projets de calcul ;
- le savoir-faire reconnu des Universités et des grandes écoles qui représentent un vivier important de chercheurs et d'étudiants susceptibles de participer à la définition et à la réalisation des applications de demain.

Avec l'opportunité que représente la définition de la seconde phase du Contrat de Plan Etat-Region, le CRIHAN travaille, en cette fin d'année, en tant que coordinateur technique potentiel, à la mise en œuvre d'un tel "service régional de traitement distribué" : celui-ci aura pour rôle de mutualiser une partie des ressources disponibles dans les établissements au profit de l'ensemble de la communauté Enseignement-Recherche de la région. Cette dernière y trouvera autant un outil de travail pour ses contrats de recherche qu'une plateforme d'expérimentation pour l'étude et le développement de nouveaux services applicatifs.

#### 1.3.4.2 Vers un "CERTAM numérique"

Pour aller encore plus loin et faire profiter un plus grand nombre de ces moyens importants, une démarche a été engagée cette année au CRIHAN pour créer un service permettant de rendre accessible des outils de haut niveau à un tissu industriel régional plus diffus, et ainsi concourir à l'amélioration du niveau d'excellence des PME/PMI régionales. Il s'agit de développer un service d'interface ayant une approche « métier » plus marquée vis-à-vis de ce type d'industriels.

Les PMI/PME, qui invoquent de gros besoins en modélisation numérique, ne disposent pas des outils (ni matériels puissants, ni logiciels applicatifs). Elles ont besoin d'aide, au départ, pour formuler leurs problèmes, puis de compétences spécifiques pour le résoudre, en général avec des outils logiciels du commerce qui ne sont pas disponibles ou utilisables au sein des laboratoires de recherche. Pour ces entreprises, la fourniture de moyens de calcul n'est pas prioritaire par rapport à la fourniture de compétence pour utiliser correctement des outils de modélisation commerciaux.

Le développement d'une telle activité de support en modélisation numérique correspond à un élargissement de l'activité du type CERTAM, dans les domaines de l'informatique appliquée à la modélisation et la simulation.

Outre les moyens informatiques, il s'agit de proposer également les logiciels d'applications dont ont besoin les entreprises, ainsi que l'analyse des problèmes posés et d'encadrer l'utilisation de ces logiciels.

Des premiers contacts, initiés grâce à l'action de l'Association du Technopôle du Madrillet, ont été pris en ce sens dans le domaine automobile : en effet, le CRIHAN apporte avec de tels moyens, un complément important au savoir-faire que représente dans ce domaine le Technopôle avec des laboratoires comme le CORIA, le CERTAM ou encore ceux de l'INSA.

## 2 Le service de calcul

### 2.1 Fin de carrière du calculateur Illiac 8 : le bilan

#### 2.1.1 Rappel



Acquis dans le cadre du Contrat de Plan Interrégional du Bassin Parisien, le supercalculateur "Illiac 8", une configuration Silicon Graphics "Origin 2000" équipée de 32 Go RAM, 270 Go disques, 25 Gflops, mettait le service de calcul du CRIHAN, en 1998, au troisième rang national après les calculateurs de l'IDRIS à Orsay et ceux du CNUSC de Montpellier et au dixième rang mondial des configurations SGI-Cray Origin2000.

L'utilisation principale de la machine concernait les besoins informatiques du Pôle de Modélisation Numérique dans le domaine des sciences pour l'ingénieur des laboratoires du Grand Bassin Parisien constitué de huit régions :

- Basse Normandie
- Bourgogne (Yonne)
- Centre
- Champagne-Ardenne
- Haute Normandie
- Ile de France
- Pays de Loire (Sarthe)
- Picardie.
- Ainsi que des équipes du-Nord-Pas-de-Calais.

Chaque projet de laboratoire demandeur fait l'objet d'un dossier scientifique évalué par des experts extérieurs avant attribution de quota de calcul.

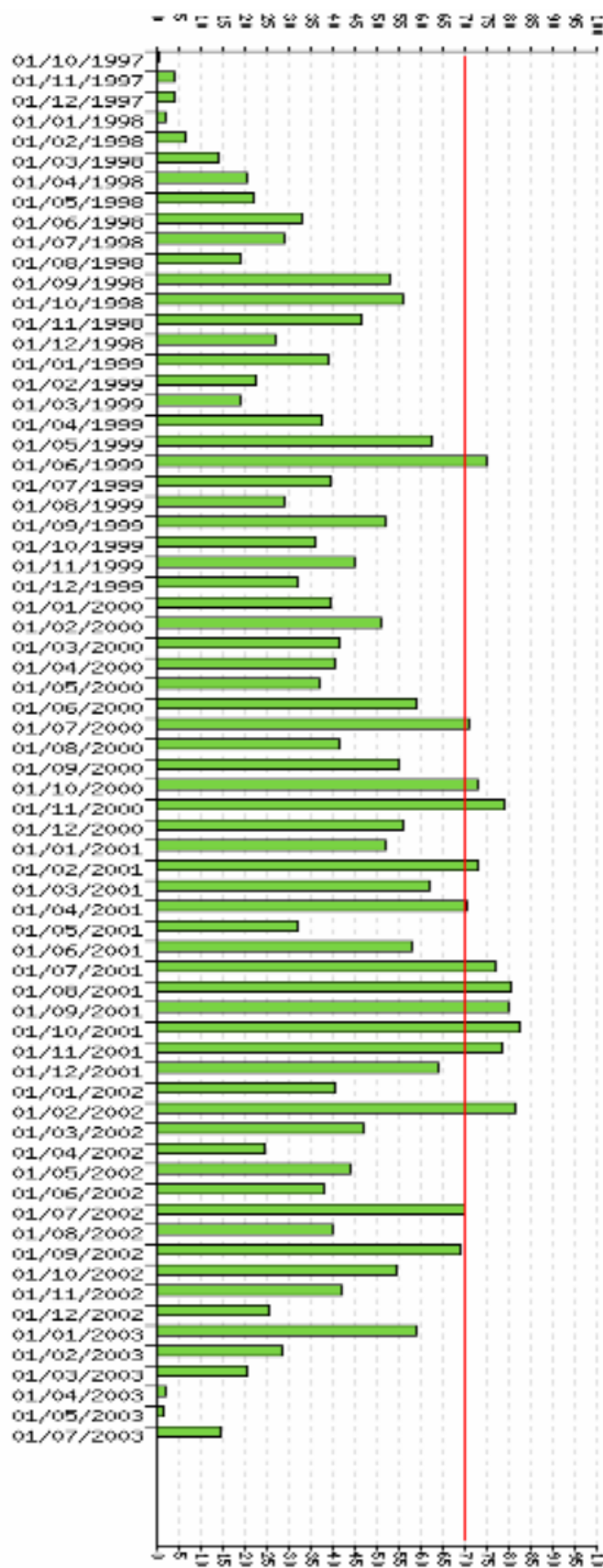
La machine a également été exploitée dans le cadre d'un contrat de partenariat avec le groupe SNECMA, de 1999 à 2002 ainsi que dans le projet européen MétoDis concernant les utilisations des calculateurs en réseau type metacomputing (calcul distribué).

#### 2.1.2 Etats des travaux réalisés sur Illiac 8

On peut aujourd'hui dresser un bilan des travaux réalisés sur Illiac 8. Les quelques graphiques ci-après illustrent le rayonnement de la machine exprimé au niveau géographique et au niveau des thématiques scientifiques utilisatrices.

Les laboratoires utilisateurs ont beaucoup publié suite aux travaux soumis au calculateur. De nombreuses thèses se sont appuyées également sur l'exploitation de la machine : on trouvera en *Annexe D : "Publications réalisées durant l'exploitation du service Illiac 8"*, une liste exhaustive des publications avec comité de lecture, des communications orales, des posters et des thèses.

## 2.1.2.1 Niveau de charge du calculateur Illiac 8

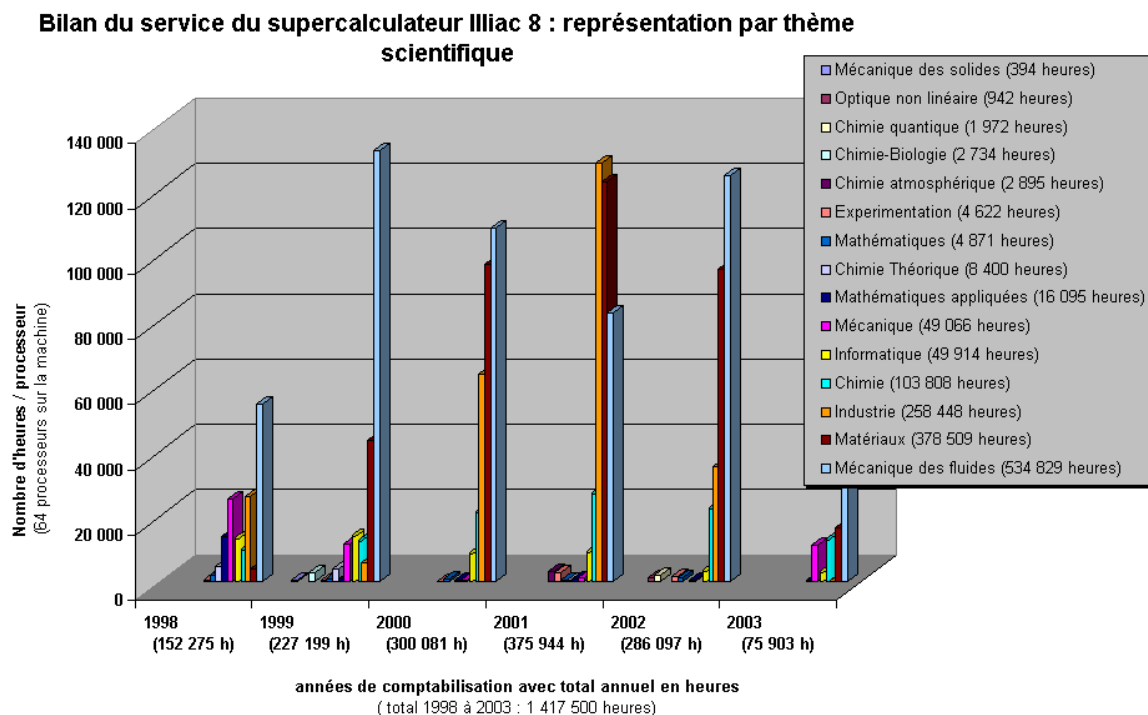


Le graphique ci-contre exprime le pourcentage d'occupation de la machine, mois par mois, durant toute la période de service.

La ligne rouge représente un pourcentage de 70% d'occupation des processeurs, c'est-à-dire le niveau maximum pour des performances optimales pour ce type de configuration et par rapport au protocole adopté pour la soumission des travaux : on entend par là le niveau de disponibilité de la machine par rapport aux exigences en ressources des travaux en attente.

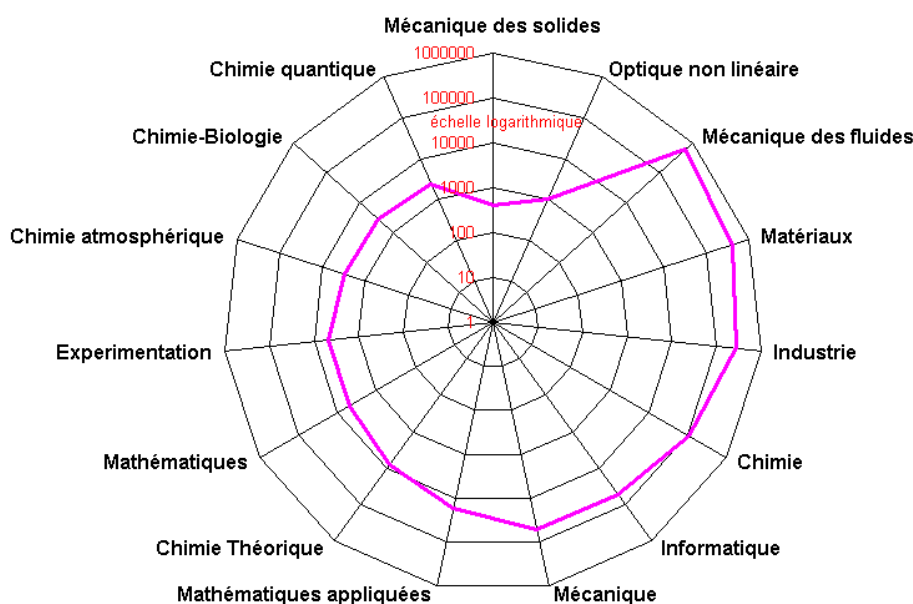
### 2.1.2.2 Comptabilité par thèmes de recherche

Concernant l'importance relative de chaque thématique scientifique, du moins en temps absolu de calcul, ce premier graphique utilise une représentation à l'année pour plus de clarté de lecture : on constate la prédominance de la Mécanique de Fluides (bleu clair), des Matériaux (carmin) et du secteur industriel (essentiellement SNECMA, en orange).



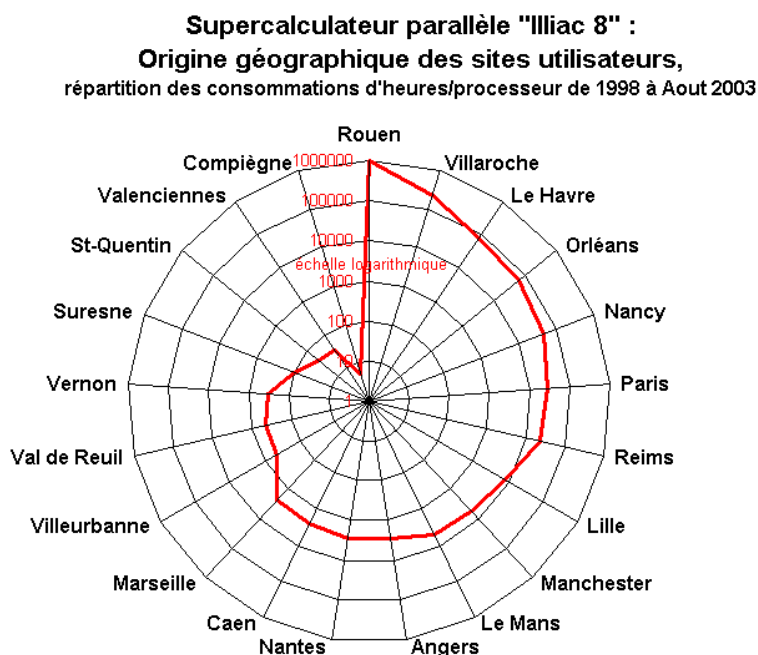
La deuxième représentation, ci-dessous, utilise cette fois une échelle logarithmique afin de permettre une lecture aisée des projets moins exigeants en temps absolu de calcul :

**Supercalculateur parallèle "Illiac 8" :  
consommations globale en heure/processeur,  
par thème scientifique de janvier 1998 à août 2003**



### 2.1.2.3 Les laboratoires utilisateurs

Quant au rayonnement géographique du calculateur, le graphique ci-après totalise, les heures consommées par l'ensemble des laboratoires d'une ville donnée : rappelons sa vocation principale qui concerne les laboratoires du grand bassin parisien.



Les structures utilisatrices durant la période de référence de ce bilan sont listées dans le tableau suivant : ce tableau indique, pour les 59 structures, le nombre de projets soumis (pour le secteur public, tout projet ayant fait l'objet d'une expertise scientifique avant attribution de quota d'heures), et le temps de calcul global consommé par cette structure pour l'ensemble de ses projets.

Ville	Structure	Nombre de projets	Heures consommées
Amiens	LaRIA - UPJV	4	242
Angers	POMA - UA	4	2627
Caen	GANIL	2	6
Caen	LCS - ISMRA	3	2290
Caen	LM-UC	2	<1
Compiègne	BIM - UMR CNRS 6600	2	5
Compiègne	LG2MS - UTC	13	<1
Le Havre	Hispano-Suiza	6	29630
Le Havre	ISEL	2	41
Le Havre	LACOS	2	<1
Le Havre	LIH	3	<1
Le Havre	LM - UH	9	46625
Le Mans	CPMP	1	757
Le Mans	LPEC	1	2281
Le Mans	LSO	2	1715
Lille	CRESIMM	2	4301
Lille	LML - USTL	5	20



Ville	Structure	Nombre de projets	Heures consommées
Manchester	UMIST	2	5053
Marnes la V.	MSNPT - UMLV	1	<1
Marseille	LMA	2	2201
Nancy	LPM	3	17659
Nancy	LPS - UMR CNRS 7556	2	25202
Nantes	LTi	5	2623
Orléans	CRMD - UMR CNRS 6619	1	884
Orléans	GREMI - UMR CNRS 6606	3	46808
Orléans	LA- UPR CNRS 9020	3	3043
Orléans	LCSR	6	5576
Orléans	LIFO	3	3044
Orléans	MAPMO	1	<1
Paris	DIM	4	8082
Paris	DSNA - ONERA	2	26
Paris	EM2C- UPR CNRS 288	1	201
Paris	IPSL	3	18
Paris	LIMHP - UPR CNRS 1311	2	394
Paris	PMS	7	15328
Paris	UMR CNRS 1772	1	2734
Reims	GSMA-EA CNRS 6089	8	12793
Reims	LAM - UReims	3	18
Reims	LSSBM EA 3305-URCA	1	<1
Reims	UMR CNRS 6519	6	10510
Rouen	CORIA - UMR CNRS 6614	8	4714
Rouen	CRIHAN	11	36271
Rouen	GMP	25	281973
Rouen	IUP	3	2
Rouen	LAME - CORIA	8	16237
Rouen	LESP - CORIA	3	29
Rouen	LFAOC - IRCOF	8	62345
Rouen	LIFAR	5	2
Rouen	LMFN - CORIA	30	513920
Rouen	LMI - INSAR	25	23668
Rouen	LMR - INSAR	2	240
Rouen	PSI - LA3I	2	2461
St Quentin	GRACSY - UPJV	1	41
Suresnes	Aérospatiale	1	97
Val de Reuil	Bassin d'Essais des Carènes	3	425
Valenciennes	LMFE	2	3646
Vernon	SEP	5	327
Villaroche	SNECMA	12	221411
Villeurbanne	CDCSP	2	431
<b>Totaux :</b>	<b>59</b>	<b>289</b>	<b>1420977</b>

#### 2.1.2.4 Récapitulatif graphique global

Le graphique déployé dans les deux pages suivantes reprend de façon synthétique la charge de travail d'Illiack 8 en apportant des indications supplémentaires en matière scientifique. Pour chaque projet on trouvera :

- le nombre de publications que les laboratoires ont pu faire à la suite des travaux soumis sur la machine (publications avec comité de lecture, communications orales, posters et thèses soutenues)
- la durée en années du projet (le nombre d'années où le projet a été actif sur la machine : cela sous-entend une reconduction avec validation de l'expert scientifique et réattribution de quota d'heures/processeur).

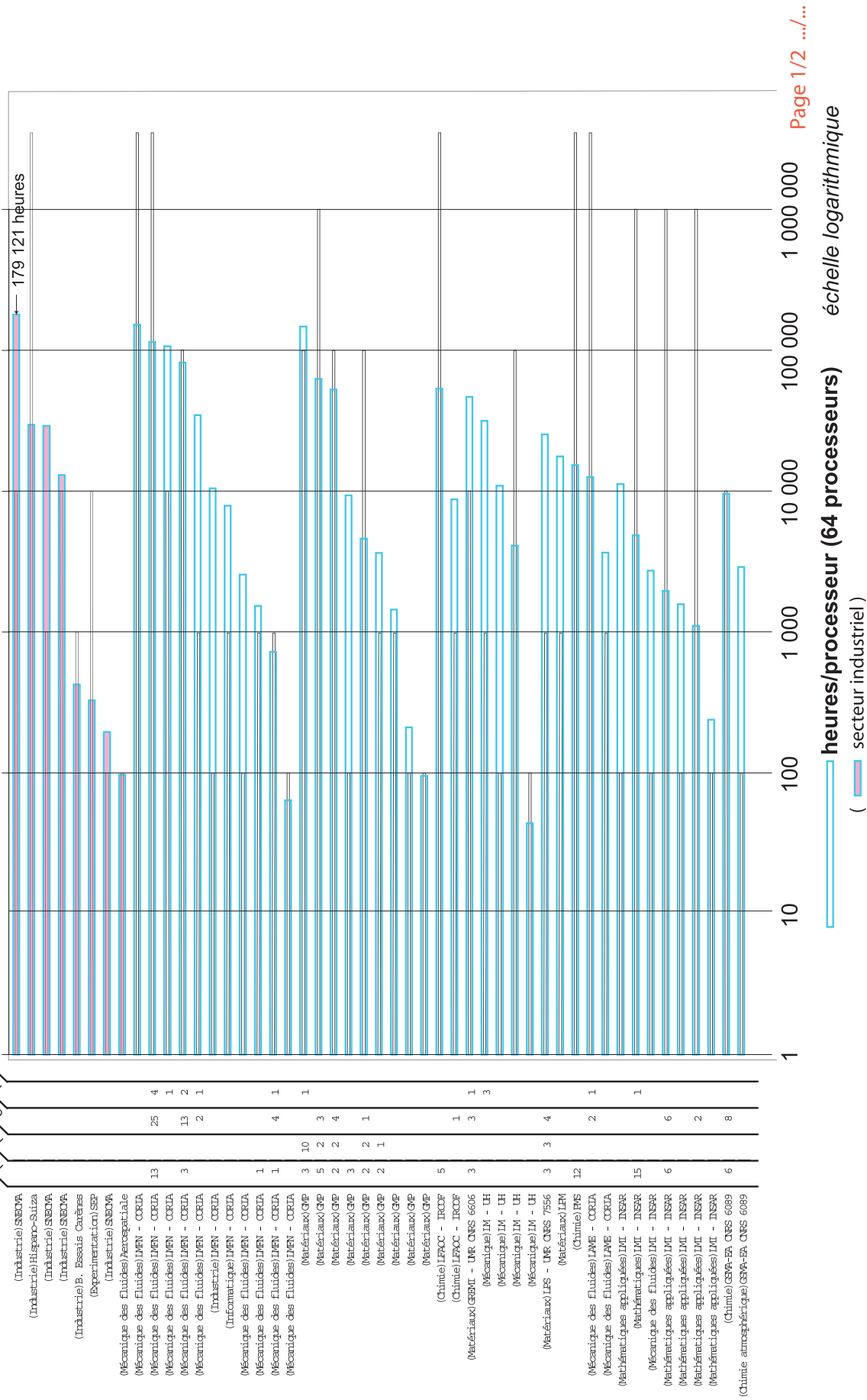
Pour des raisons de commodité de lecture, le graphique est présenté par moitiés, sur deux pages.

Bilan d'exploitation du service du supercalculateur "Illiad8" de 1998 à 2002 : classement par projets

(voir liste en annexe)

Publications avec Comité de lecture  
Posters  
Communications orales ou en cours  
Thèses soutenues ou en cours

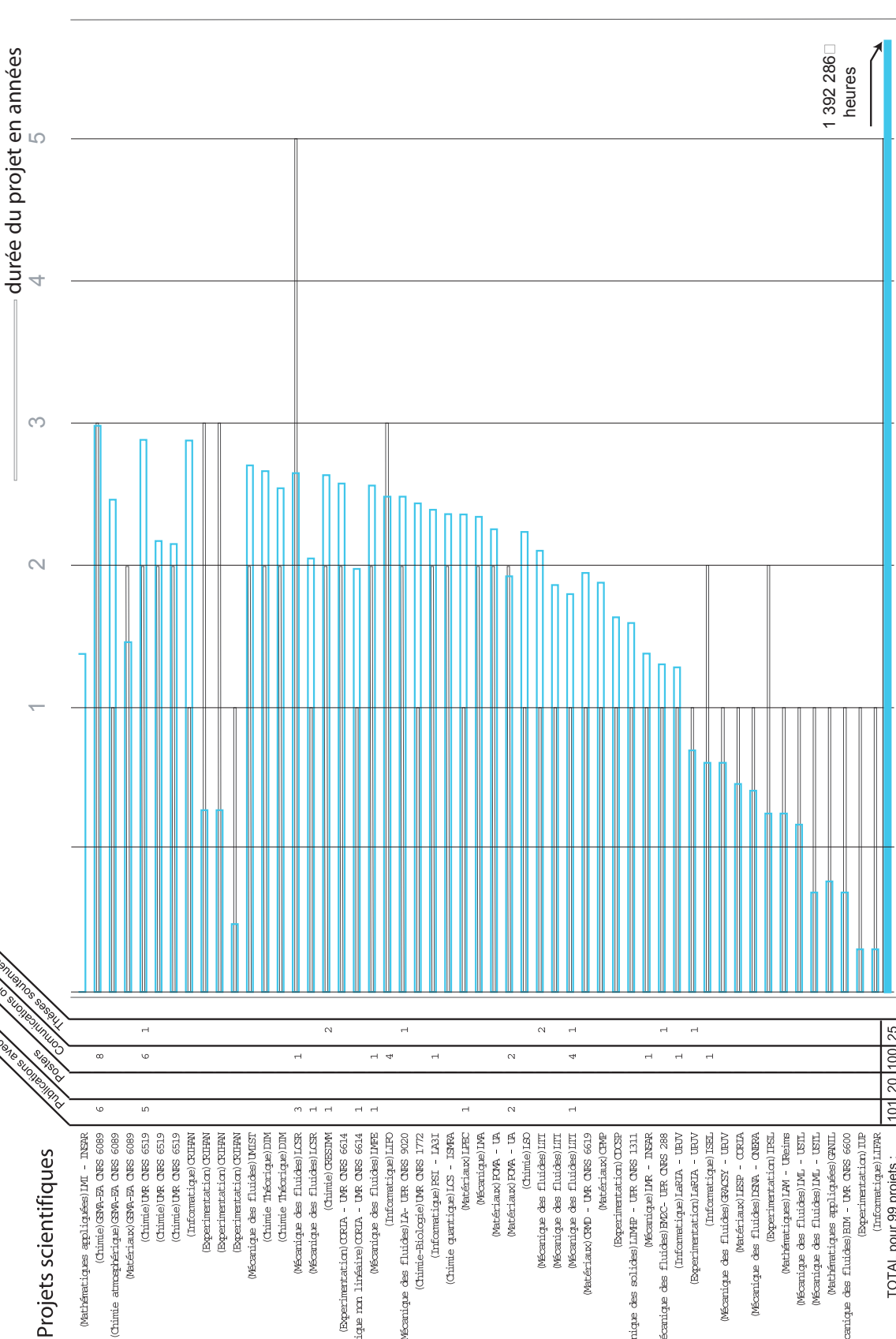
Projets scientifiques



Bilan d'exploitation du service du supercalculateur "Illiad8" de 1998 à 2002 : classement par projets (suite)

(voir liste en annexe)

- Projets scientifiques
- (Mathématiques appliquées)UMI - INRS
  - (Chimie)GSA-PA QNS 6089
  - (Chimie atmosphérique)GSA-PA QNS 6089
  - (Matériaux)GSA-PA QNS 6089
  - (Chimie)UMR QNS 6519
  - (Chimie)UMR QNS 6519
  - (Chimie)UMR QNS 6519
  - (Informatique)GUPN
  - (Expérimentation)GUPN
  - (Expérimentation)GUPN
  - (Expérimentation)GUPN
  - (Mécanique des fluides)UMST
  - (Chimie Théorique)DIM
  - (Chimie Théorique)DIM
  - (Mécanique des fluides)ICR
  - (Mécanique des fluides)ICR
  - (Chimie)GESSIM
  - (Expérimentation)CRIA - UMR QNS 6614
  - (Optique non linéaire)CRIA - UMR QNS 6614
  - (Mécanique des fluides)IME
  - (Informatique)LFO
  - (Mécanique des fluides)IA - UMR QNS 9020
  - (Chimie-Biologie)UMR QNS 1772
  - (Informatique)ESI - IAXI
  - (Chimie quantique)ICS - ISMA
  - (Matériaux)IPEC
  - (Mécanique)IMA
  - (Matériaux)FOA - UA
  - (Matériaux)FOA - UA
  - (Chimie)ISO
  - (Mécanique des fluides)IMI
  - (Mécanique des fluides)IMI
  - (Mécanique des fluides)IMI
  - (Matériaux)CWD - UMR QNS 6619
  - (Matériaux)CMP
  - (Expérimentation)CCSP
  - (Mécanique des solides)LMMP - UMR QNS 1311
  - (Mécanique)UMR - INRS
  - (Mécanique des fluides)BPC - UMR QNS 288
  - (Informatique)IACIA - URUV
  - (Expérimentation)IACIA - URUV
  - (Informatique)ISZL
  - (Mécanique des fluides)BPCS - URUV
  - (Matériaux)IESP - CRIA
  - (Mécanique des fluides)ISNA - ONERA
  - (Expérimentation)IESL
  - (Mécaniques)LM - Uelms
  - (Mécanique des fluides)IML - USIL
  - (Mécanique des fluides)IML - USIL
  - (Mathématiques appliquées)GNIL
  - (Mécanique des fluides)BM - UMR QNS 6600
  - (Expérimentation)IIP
  - (Informatique)LIER



TOTAL pour 99 projets :

## 2.2 Le nouveau supercalculateur : un cluster IBM

### 2.2.1 Le contexte de ce renouvellement



Suite à l'appel d'offres lancé en 2002 pour l'achat d'un supercalculateur dans le cadre du Pôle de modélisation numérique et moléculaire, IBM a été retenu pour la fourniture d'une solution de calcul IBM Cluster 1600. Le financement du renouvellement de cette machine s'inscrit dans le cadre du CPER (fiche 15 années 2001 et 2002) par une convention établie entre les services de l'Etat et du CRHN.

La commission d'appel d'offres du 28 juin 2002 a attribué le marché à la société ADEQUAT pour une solution « Cluster IBM 1600 » composée de deux serveurs de 32 processeurs. Les services liés au marché sont fournis conjointement par ADEQUAT et IBM. La nouvelle machine a été livrée le 22 juillet 2002. Elle a ensuite subi toutes les phases de validation et de recettage et a pu être mise en production début mars 2003.

La configuration retenue est un ensemble de toute dernière génération qui surclasse la précédente en affichant une puissance crête 13 fois plus élevée. Comme la précédente, elle s'adresse aux problèmes complexes de calcul numérique intensif pratiqués tant par les laboratoires de recherche, qu'ils soient régionaux ou non, que par les industriels déjà impliqués dans des partenariats avec des laboratoires publics.

Elle concerne les projets scientifiques de recherche utilisant des simulations numériques, les écoles doctorales et les formations des premier et deuxième cycles pour leurs projets d'enseignements : des partenariats directs sont en négociation avec de grands groupes industriels, à l'instar de celui passé il y a déjà quatre ans avec la SNECMA.

Le nouveau calculateur est un élément majeur de la garantie de maintien en condition opérationnelle de l'ensemble de l'architecture de modélisation. Il va autoriser le traitement de travaux beaucoup plus importants, avec des temps de retour de un à quelques jours au lieu de tâches qui "tournent" pendant un ou plusieurs mois. Ces contraintes de temps de retour deviennent aujourd'hui critiques pour des disciplines comme la chimie ou la biologie de même qu'elles l'étaient déjà pour celle des Sciences pour l'Ingénieur.

### 2.2.2 Réception, installation et réglage du cluster

La mise en production d'une machine comme le cluster 1600 IBM ne peut se faire qu'après plusieurs étapes, lesquelles exigent un certain nombre de choix dans la stratégie d'exploitation.

Pour la description des étapes techniques, qui se sont déroulées entre la livraison de fin juillet 2002 jusqu'à la fin de la phase de "VSR" (vérification de service régulier, c'est-à-dire un fonctionnement de la solution en mode de production pendant trois semaines sans incident) on se reportera à l'Annexe F : *Annexe technique sur l'installation du cluster IBM.*

Ces phases ont également nécessité, dès la fin 2002, l'installation de projets d'utilisateurs pilotes pour effectuer le portage et l'optimisation de leurs codes sur architecture Power 4. Cela s'est fait en coopération avec le support technique du CRIHAN et du constructeur, afin d'ajuster la configuration logicielle pour un traitement optimisé des principaux codes de modélisation de la communauté régionale (principalement la mécanique des fluides réactifs et la modélisation ab-initio pour la chimie quantique). Ces codes de calcul ont servi à constituer une charge de référence de la machine pour la vérification de ce service régulier. Prévue initialement fin janvier- début février 2003, elle a dû être reportée de 3 semaines en raison d'une panne logicielle complexe qui a entraîné le remplacement d'un des nœuds du calculateur et donc l'obligation d'y repasser toutes les phases précédentes de la recette.

### **2.2.3 Transferts des projets en cours et mise en place des nouveaux**

Il a été nécessaire de recopier intégralement les fichiers des utilisateurs des projets actifs sur Illiac8 en 2002 au travers de montages NFS entre les espaces disques des deux calculateurs.

Pour pouvoir exécuter ses programmes sur la nouvelle architecture, chaque utilisateur a dû les recompiler et employer les commandes et outils spécifiques IBM (compilateurs, soumission des "jobs", etc.).

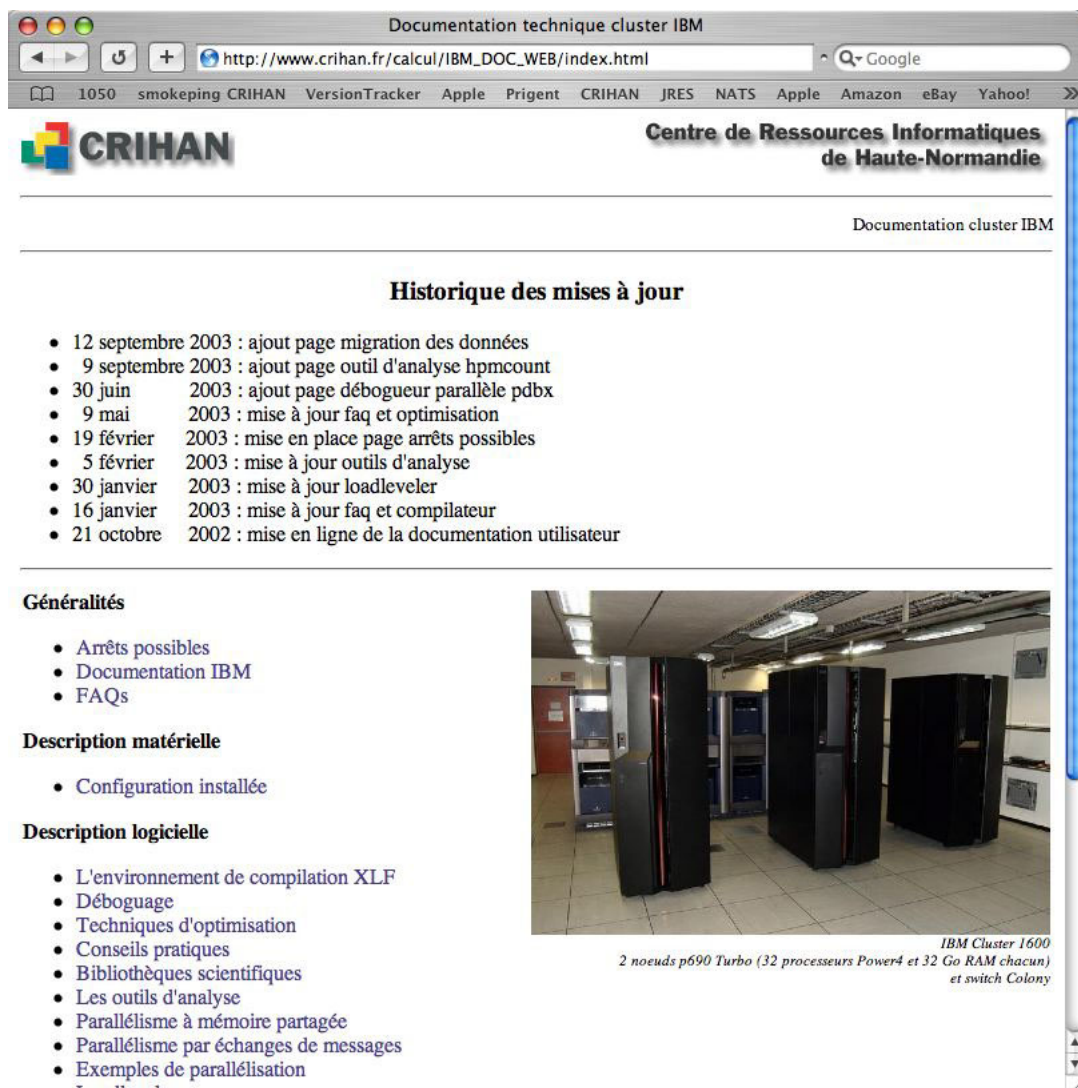
Simultanément à la gestion de la transition entre les deux serveurs de calcul, le CRIHAN a poursuivi sa campagne d'appel à projets et d'évaluation. Un premier appel a été ouvert le 21/10/2002, et les projets ont été réceptionnés jusqu'à la date du 20/11/2002. L'ensemble des dossiers a été envoyé aux experts, tous extérieurs à la région pour garantir une neutralité par rapport aux dossiers soumis. 10 nouvelles demandes se sont ajoutées aux 19 projets transférés d'Illiack8 et renouvelés en 2003.

Un second appel a eu lieu en mai 2003 à la suite duquel 3 nouveaux projets ont été retenus : le nombre total de projets actifs est donc de 32 pour l'année 2003.

*On trouvera en Annexe G : "Appels à projets scientifiques" la liste de ces projets.*

## 2.2.4 Support et formation aux utilisateurs du cluster

Une documentation complète sur l'environnement de travail sur le cluster IBM a été préparée puis mise en ligne pour qu'elle soit disponible lors de l'arrivée des utilisateurs. Aperçu ci-dessous :



Documentation technique cluster IBM

http://www.crihan.fr/calcul/IBM\_DOC\_WEB/index.html

1050 smokeping CRIHAN VersionTracker Apple Prigent CRIHAN JRES NATS Apple Amazon eBay Yahoo!

**CRIHAN** Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Documentation cluster IBM

### Historique des mises à jour

- 12 septembre 2003 : ajout page migration des données
- 9 septembre 2003 : ajout page outil d'analyse hpmcount
- 30 juin 2003 : ajout page débogueur parallèle pdbx
- 9 mai 2003 : mise à jour faq et optimisation
- 19 février 2003 : mise en place page arrêts possibles
- 5 février 2003 : mise à jour outils d'analyse
- 30 janvier 2003 : mise à jour loadleveler
- 16 janvier 2003 : mise à jour faq et compilateur
- 21 octobre 2002 : mise en ligne de la documentation utilisateur

### Généralités

- Arrêts possibles
- Documentation IBM
- FAQs

### Description matérielle

- Configuration installée

### Description logicielle

- L'environnement de compilation XLF
- Déboguage
- Techniques d'optimisation
- Conseils pratiques
- Bibliothèques scientifiques
- Les outils d'analyse
- Parallélisme à mémoire partagée
- Parallélisme par échanges de messages
- Exemples de parallélisation
- Loadleveler

IBM Cluster 1600  
2 noeuds p690 Turbo (32 processeurs Power4 et 32 Go RAM chacun)  
et switch Colony

### 2.2.4.5 Formation

Plusieurs sessions d'une journée de formation (gratuite) ont été dispensées aux utilisateurs. Environ 25 personnes ont suivi ces journées qui abordaient la description de l'architecture du cluster, des espaces utilisateurs, des compilateurs, la soumission des calculs, les outils d'aide au développement, puis l'optimisation scalaire et certaines techniques de parallélisation..

Les diapositives au format PDF de ces sessions de formation sont disponibles sur le serveur ftp du CRIHAN : [ftp://ftp.crihan.fr/crihan/calcul/IBM/Formation/formation\\_cluster.pdf](ftp://ftp.crihan.fr/crihan/calcul/IBM/Formation/formation_cluster.pdf).

### 2.2.4.6 Support aux utilisateurs

Les actions de support vers les utilisateurs concernent :

- la compilation et la correction des erreurs qui en découlent (les compilateurs IBM ayant quelques spécificités),
- le fonctionnement de la soumission des calculs.

La première période de comptabilisation des travaux, de mars à septembre 2003, peut être résumée par le graphique ci-après :

Ce graphique présente les 36 projets utilisateurs actifs sur la machine en septembre 2003. Il indique les "quotas" attribués après expertise en rapport avec les heures processeurs déjà consommées : on constate immédiatement que de nombreux projets ont, en l'espace de ces sept mois, consommé une très forte proportion du quota. Cela s'explique certainement par la puissance de la machine qui a permis



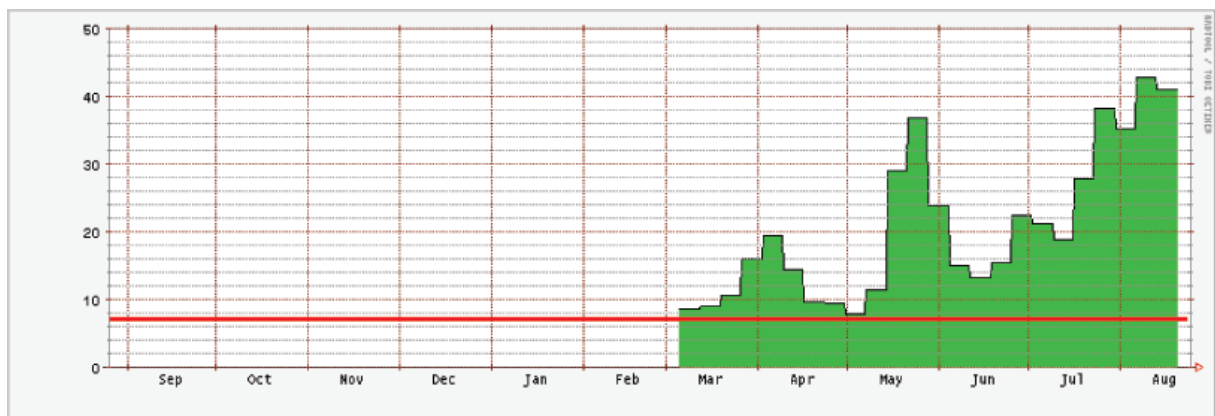
à ces projets, soit de s'achever dans un temps plus bref, soit (et) de s'autoriser des simulations plus nombreuses ou plus complexes.

Quant au graphique suivant, il a pour but de mettre en évidence le gain de productivité du nouveau calculateur par rapport à son prédécesseur. Le facteur de puissance crête théorique entre l'ancien et le nouveau calculateur est 13.

La ligne rouge (tracée à 7%) représente ce qu'aurait autorisé, dans le même temps, la puissance totale de l'ancien calculateur Illiac 8 (25 GFlops).

L'allure de la courbe est encourageante pour la suite ; les heures produites correspondent au triple de celles produites par Illiac8.

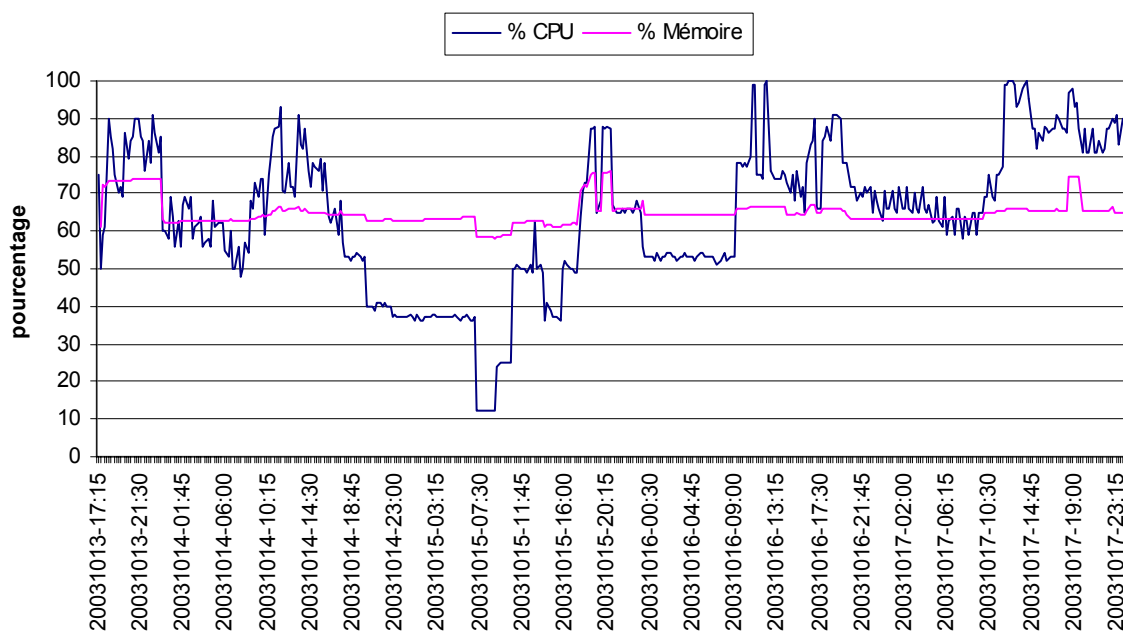
- En abscisses, la granularité de la mesure est la semaine.
- En ordonnées, le pourcentage de temps CPU utilisé par rapport à la puissance que peut produire le calculateur (64 processeurs \* jours d'activité). Depuis la mise en production effective du cluster, quelques arrêts sont intervenus pour des mises à jour logicielles ou matérielles : les temps correspondants sont déduits dans ce graphique.



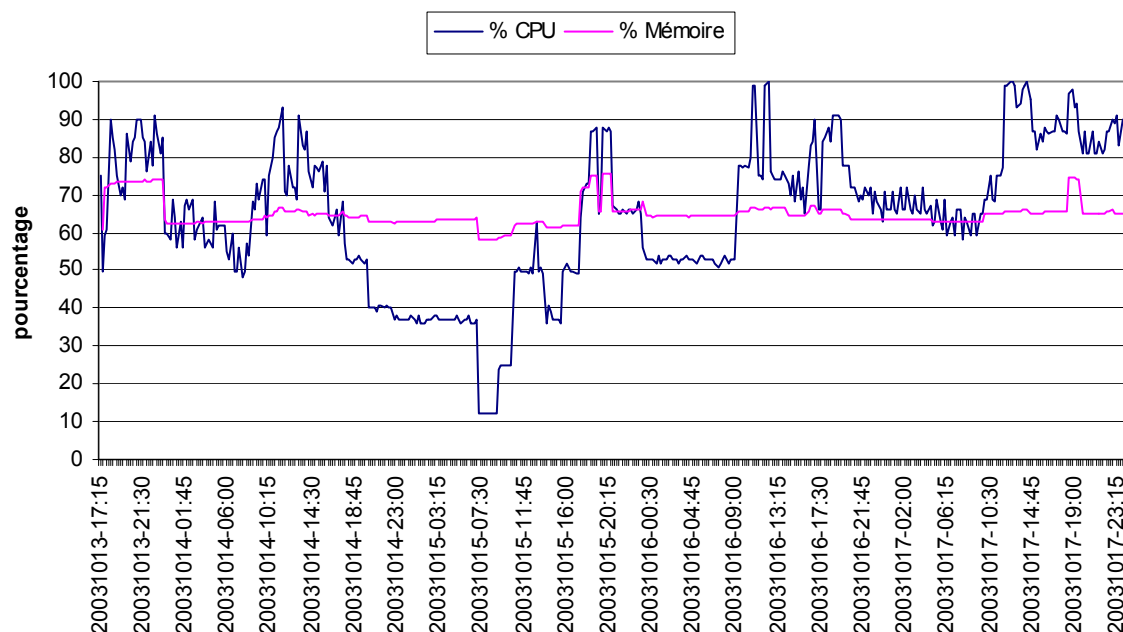
Page suivante, deux graphes de mesures instantanées sur les ressources utilisées.

Ces graphes expriment le pourcentage de ressources exploitées à l'instant T sur la machine (un graphe pour chaque nœud du cluster). Tous les quarts d'heure, durant cinq jours consécutifs (du 13 au 17 octobre 2003), une mesure est faite de la mémoire utilisée et des processeurs en activité. Les "pics" à 100% de la courbe CPU signifient bien entendu qu'aucun processeur n'est disponible : la mémoire "libre" ne peut donc pas être utilisée. Par ailleurs, un niveau d'activité important signifie également que des travaux exigeant de grosses ressources devront être placés en attente. On constate donc une activité générale déjà très importante.

**Pourcentage CPU et pourcentage Mémoire utilisés sur le nœud N°1 du cluster IBM**



**Pourcentage CPU et pourcentage mémoire utilisés sur le nœud N°2 du cluster IBM**



## 3 Le réseau de modélisation moléculaire

### 3.1 Evolution des moyens mis à disposition

Dans le cadre du CPER (fiche 15 année 2000), le CRIHAN a pu réaliser une mise à niveau matérielle et logicielle des moyens mis à disposition du Réseau Normand en Modélisation Moléculaire.

Par ailleurs, les calculs exigeants, en CPU ou en temps de calcul, utilisent désormais à la fois le serveur principal acquis dès le lancement du projet ("Yoda"), et le super ordinateur.

#### 3.1.6 Evolutions matérielles

Une mise à niveau des stations de travail de certains laboratoires a été réalisée. Une station de travail et une imprimante couleur ont été acquises en 2003 ainsi qu'une carte stéréoscopique destinée à équiper un poste de travail d'un laboratoire de chimie conformément aux besoins exprimés. Chaque station possède maintenant un disque externe supplémentaire de 18Go. La mémoire a été portée de 64 à 320Mo, le système d'exploitation mis à jour ainsi que l'ensemble des logiciels.

#### 3.1.7 Evolutions logicielles

Il a été procédé à l'achat des licences pour les logiciels Accelrys, Tripos, Gaussian et Schrödinger.

Récapitulatif des logiciels disponibles aujourd'hui dans le cadre du financement du CPER à mi-parcours	
<b>ACCELRYS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ InsightII v2000.1 + Felix 2000.1 et CNX 2002</li> <li>➤ Cerius2 v4.8.1</li> <li>➤ Catalyst v4.8</li> <li>➤ Material Studio Modeling v2.2.1 (pour WINDOWS et LINUX)</li> </ul>
	Licences exploitables jusqu'au 30 juin 2004. La comptabilité de l'utilisation des modules est assurée par le logiciel <i>FLEXreport</i> dont la licence est gratuite mais à renouveler chaque année : le serveur génère, pour l'équipe technique du CRIHAN, des bilans mensuels.
<b>TRIPOS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Sybyl v6.9</li> <li>➤ Unity v4.4</li> </ul>
	Licences exploitables jusqu'en décembre 2003 avec un complément de onze mois de compensation à titre commercial jusqu'à novembre 2004. <i>FlexX</i> et <i>Cscore</i> , licences exploitables jusqu'au 30 mars 2004.
<b>GAUSSIAN</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ g94,g98</li> </ul>
	Licence permanente pour ces logiciels distribués par ChemCAD. Ces logiciels ont été également installés sur Illiac8, principalement utilisés pour les calculs lourds puis réinstallés sur le nouveau superordinateur IBM <sup>11</sup> .
<b>JAGUAR</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Jaguar v5.0</li> </ul>
	Distribué par ChemCad. Licence pour 50 utilisations simultanées : maintenance valable jusqu'en 2003. Egalement utilisé sur "Illiac8", ce logiciel a été réinstallé sur le nouveau superordinateur IBM.

<sup>11</sup> Voir Annexe D : page 72 : projet 2002 004 IRCOF utilisant Gaussian98, et un programme développé par Pr. B. Silvi du Laboratoire de Chimie Théorique de Jussieu appelé Electron Localization Function (ELF) et installé sur "Yoda".

## 4 Le réseau régional mis en place en 2003 : SYRHANO version 2.1

SYRHANO (Système Réseau de HAute-Normandie) est le réseau régional pour l'Enseignement et la Recherche en Haute-Normandie.

### 4.2 Evolutions du cœur de réseau

année	Evolutions de l'épine dorsale	Ordre de grandeur
1993	Les principaux sites académiques sont interconnectés à 2Mbit/s sur un réseau régional (Le Havre-Rouen-Evreux) déployé par France Télécom	2 Mbits
1999	l'axe Le Havre-Rouen passe à 4Mbit/s	4 Mbits
2000	SYRHANO 2. Epine dorsale Le Havre-Rouen à 155 Mbits, Rouen-Evreux à 34 Mbits (appel d'offres attribué à France Télécom).	155 Mbits 34 Mbits
2003	<b>SYRHANO 2.1.</b> Epine dorsale sécurisée, Le Havre-Rouen-Evreux à 2,5 Gbits (appel d'offres attribué à Télécom Développement).	2,5 Gbits sécurisés

Le tableau ci-dessus représente un bref survol de l'évolution de SYRHANO en dix ans. L'année 2003 y apparaît clairement comme celle d'une évolution, en profondeur, du réseau régional.

Outre les changements de débit et de fournisseur de la boucle optique constituant l'épine dorsale, les différents services d'accès à plus bas débit ont également évolué (voir paragraphes et schémas ci-après).

Rappelons que le financement de ce nouveau réseau régional s'inscrit dans le cadre de la fiche 65 du CPER au titre de l'année 2001 par une convention établie entre les services de l'Etat et de la Région.

### 4.3 Etapes de mise en place de la configuration SYRHANO 2.1

- La procédure d'appel d'offres sur performances<sup>12</sup> a été préparée par les responsables informatiques du CRIHAN durant le premier semestre 2002. L'élaboration du cahier des charges technique a associé les responsables des sites et les utilisateurs du réseau. Les prestations demandées couvraient les liaisons et les services réseaux permettant la collecte et le transport des données sur le territoire régional ainsi que la gestion des interconnexions avec les autres réseaux connectés à SYRHANO.
- Août 2002, publication de l'appel d'offres : quatorze candidatures pour les trois groupes de lots ont été reçues puis examinées par la commission d'appel d'offres mi-septembre.
- Mi-octobre les dossiers de consultation étaient remis aux candidats.
- Début décembre, la commission procédait à l'ouverture des offres et à leur analyse. Elle a ensuite procédé aux consultations durant tout le second semestre 2002 et les premiers mois de l'année 2003, secondée dans cette démarche par une commission technique. Cette commission technique, composée d'utilisateurs du réseau et des ingénieurs du CRIHAN, a eu pour mission d'analyser les offres et les performances des solutions proposées par les opérateurs.
- Mi-janvier 2003 a eu lieu l'audition des candidats retenus, sur la base de questions préparées par la commission technique. Pour une meilleure comparaison des offres, des questions complémentaires ont été posées à ces candidats sur une même base de configuration matérielle, de calendrier de migration, de prix des matériels, des services et de la maintenance conformément au cahier des charges. Pour le groupe de lot 3, séparé initialement dans le

<sup>12</sup> Appel d'offres paru au BOAMP n°B/0130-244 du 14 août 2002 et au JOCE n°2002/S 158-126976 du 16/08/02

CCTP pour permettre d'avoir des réponses avec plusieurs équipementiers, l'attribution se fera en fonction du groupe de lots 2 (seul le matériel Cisco est proposé à prix semblables).

➤ Les trois groupes de lots que contenait le marché ont été attribués comme suit :

Lots			Attributions par la commission d'appel d'offres du 21 février 2003 (publication le 7 mars)
1 <sup>er</sup> Groupe	Transport de données (chaque liaison faisant l'objet d'un lot)	Liaisons primaires <sup>13</sup>	Télécom Développement
		Liaisons secondaires <sup>14</sup>	Altitude Télécom
2 <sup>ème</sup> Groupe	Service ATM ou/et IP, chaque service pouvant faire l'objet d'un lot		CSSI
3 <sup>ème</sup> Groupe	Fourniture de matériels actifs		CSSI

#### 4.4 Principes retenus pour la construction de l'architecture

Par rapport au précédent réseau SYRHANO 2, le réseau SYRHANO 2.1 est caractérisé par les éléments suivants :

- la conception et l'ingénierie technique du réseau sont assurées par le CRIHAN, éventuellement en partenariat avec l'exploitant.
- le périmètre du réseau est potentiellement élargi à toute la région.
- l'éventail des services est élargi.
- l'éventail technologique des liaisons entre les différents points de présence est élargi (intégration par exemple des offres de Boucles Locales Radio (BLR) et des faisceaux hertziens).

Deux impératifs définissent ce nouveau réseau :

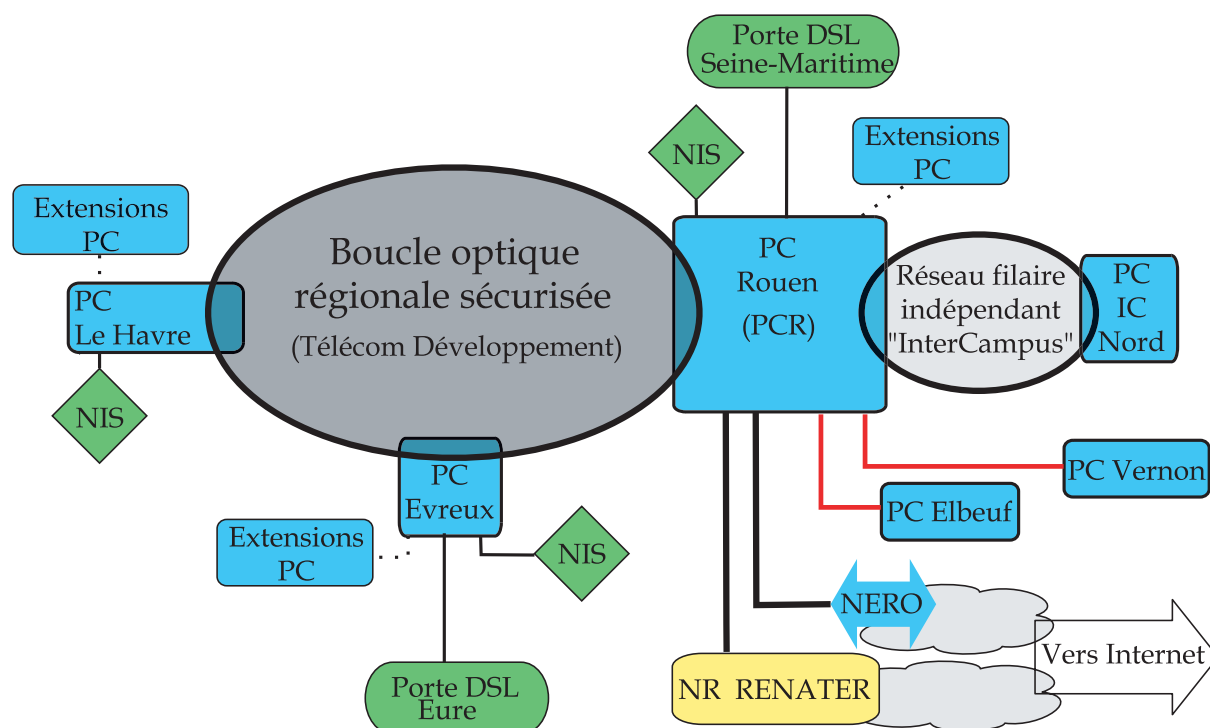
- le niveau de service et la disponibilité du réseau qui font l'objet de critères de qualité améliorés afin de satisfaire aux exigences de certains utilisateurs et de préparer l'ouverture de SYRHANO à d'autres communautés (en particulier les hôpitaux),
- l'élargissement des points de présence pour permettre la prise en compte des initiatives locales de création de réseaux communautaires.

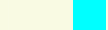

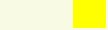

<sup>13</sup> Rouen-Le Havre et Rouen-Evreux

<sup>14</sup> Rouen-Vernon et Rouen-Elbeuf

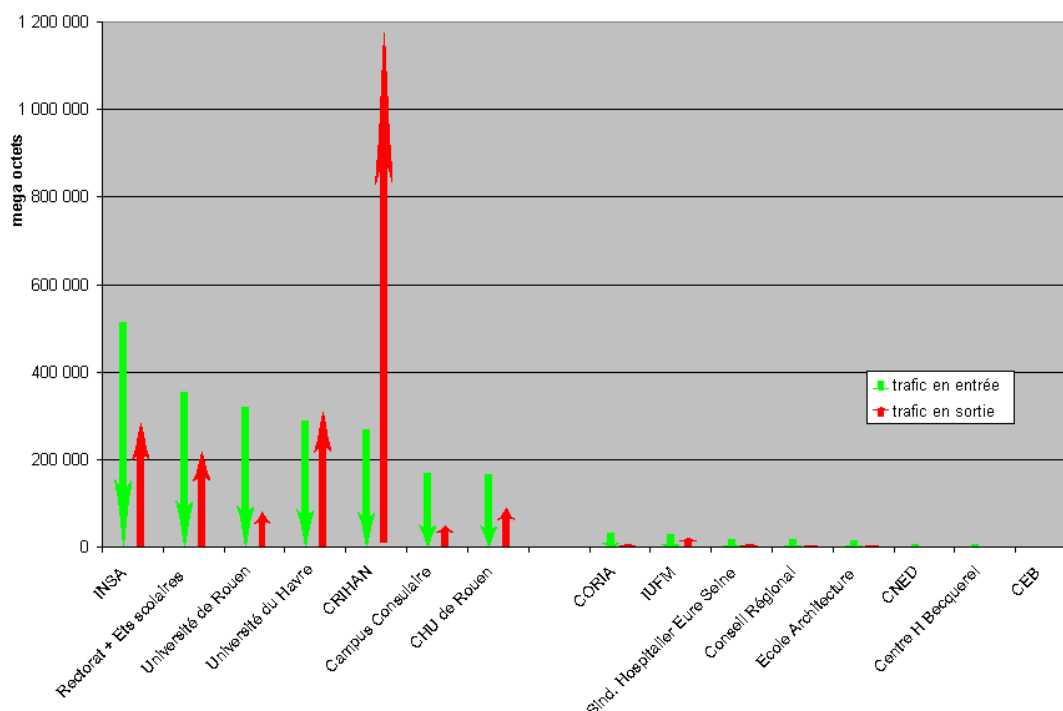
## 4.5 Architecture réalisée à fin septembre 2003

Après attribution des lots de l'appel d'offres, la mise en place opérationnelle des différents services s'est étalée, en 2003, de mi-juillet à fin septembre. Le schéma final est le suivant :



	Equipements exploités par CS
	Equipements exploités par le CRIHAN (services de transport France Télécom)
	Equipements exploités par RENATER
	Faisceaux Hertiens 10 Mbits (Altitude Télécom)
<b>PC</b>	Point de concentration (Le Havre, Rouen, Evreux, Vernon et Elbeuf)
<b>NIS</b>	Concentration RNIS (Le Havre, Rouen et Evreux)
<b>Porte DSL</b>	Service de collecte ADSL pour les établissements scolaires (une par département)
<b>NRD</b>	Point de présence RENATER
<b>NERO</b>	Nœud d'échanges avec les opérateurs (GIX régional)

## 4.6 Métrologie du réseau



### Métrologie moyenne mensuelle des sites SYRHANO

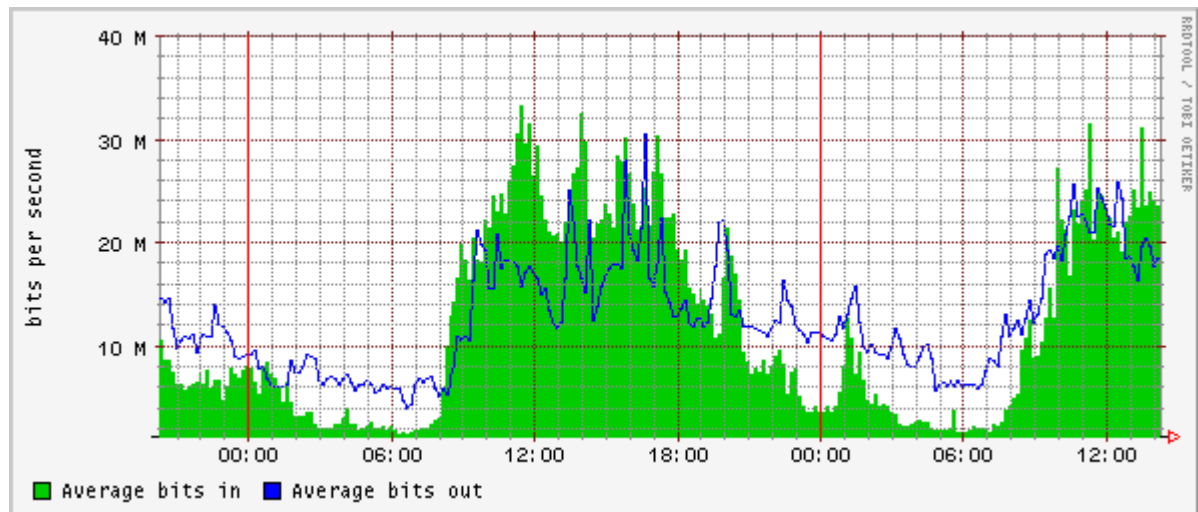
Ce graphe, établi d'après les données issues des outils de métrologie mis en place au CRIHAN, représente la moyenne mensuelle des trafics entrants (en vert) et sortants (en rouge) de chaque site utilisateur de SYRHANO. Il porte sur la période novembre 2002 à août 2003.

Les sites sont classés par ordre décroissant sur la base du trafic en entrée.

Le trafic en sortie du CRIHAN ressort nettement : il traduit les services concentrés par le CRIHAN sur ses serveurs et accédés régulièrement par les sites de l'Internet en général.

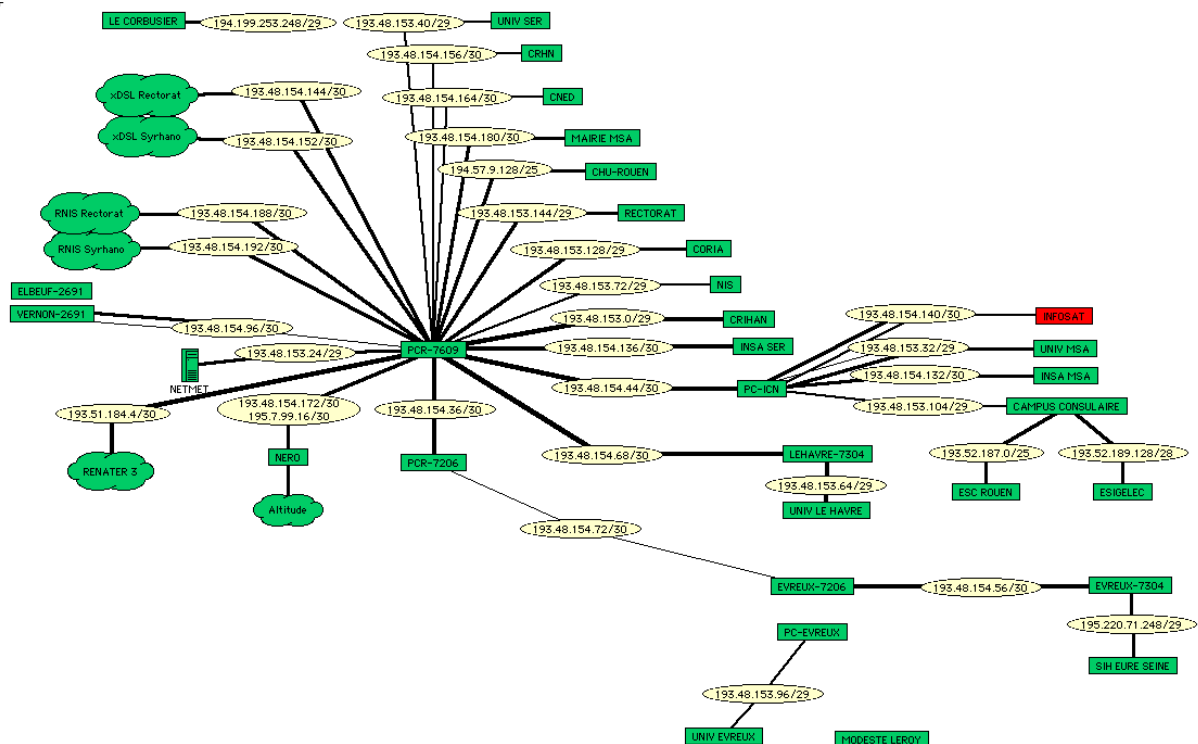
Pour une meilleure clarté du graphe, certains sites ont été regroupés :

- "Rectorat et Etablissements scolaires" rassemble
  - le Rectorat lui-même,
  - le circuit pédagogique RNIS des lycées et collèges des trois points de concentration (Le Havre, Rouen et Evreux),
  - le circuit administratif RNIS de ces mêmes lycées et collèges,
  - les collectes ADSL des lycées et collèges des deux départements
- "Université de Rouen" rassemble les sites de Mont Saint Aignan, Rouen et Saint Etienne du Rouvray ;
- "INSA" rassemble les sites de Mont Saint Aignan et Saint Etienne du Rouvray ;
- "Campus Consulaire" concerne les trafics cumulés de :
  - ECAL
  - ESC-ROUEN
  - ESIGELEC et Auditorium Campus
  - IFA-ROUEN
  - IFI



Trafic d'une journée sur le lien SYRHANO-RENATER (23 octobre 2003)

Ces données de métrologie sont issues du service mis en place par le CRIHAN et qui lui permet de contrôler en temps réel l'activité du réseau : ci-dessous, en exemple, une photographie instantanée de son bon fonctionnement et de l'activité de chaque lien.



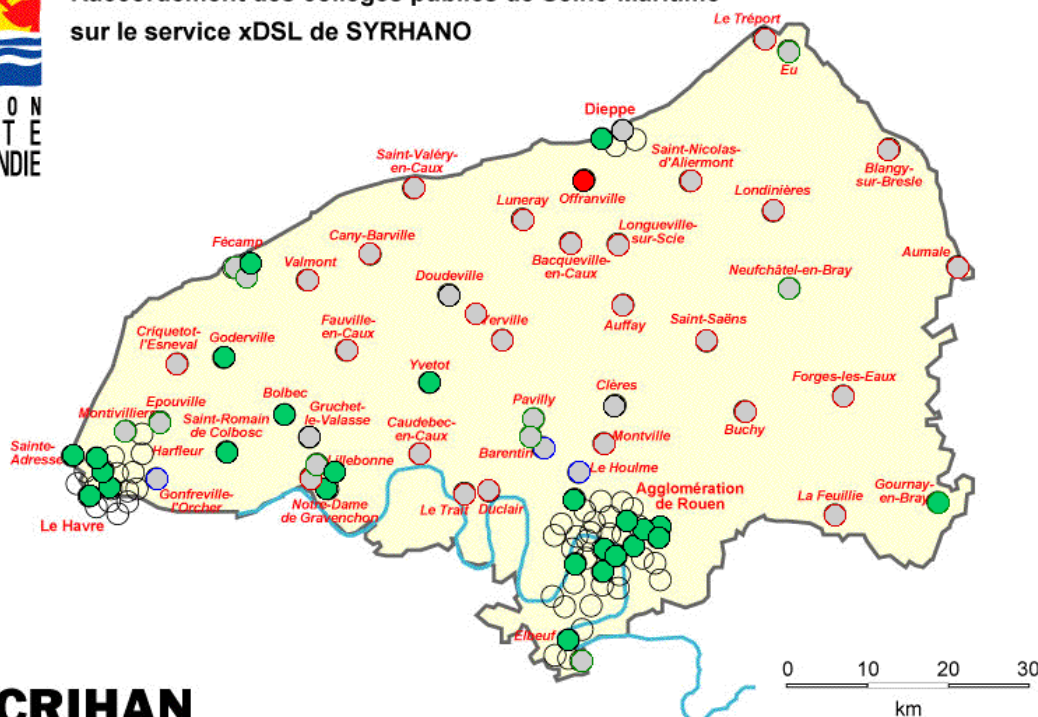


## 4.7 Service de collecte xDSL

Le service de collecte ADSL réalisé sur mesure par le CRIHAN et le Rectorat à destination des établissements scolaire continue à drainer les établissements au fur et à mesure de leur "éligibilité" ADSL. Quelques 130 d'entre eux sont désormais connectés c'est-à-dire environ la moitié : les 4 cartes qui suivent illustrent cette progression (un point vert par établissement).



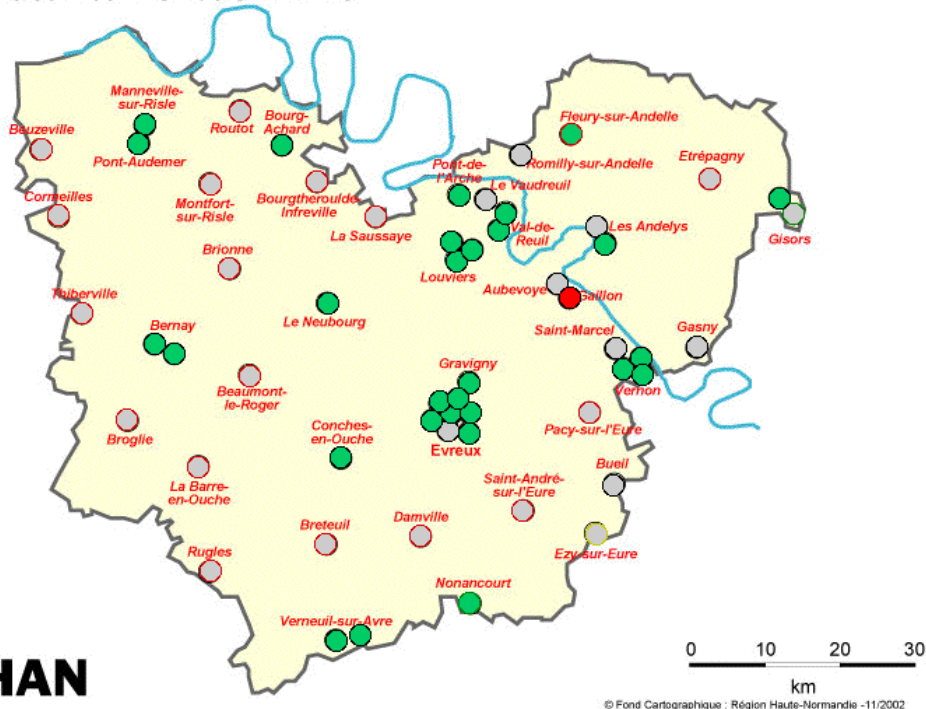
### Raccordement des collèges publics de Seine-Maritime sur le service xDSL de SYRHANO



**CRIHAN**



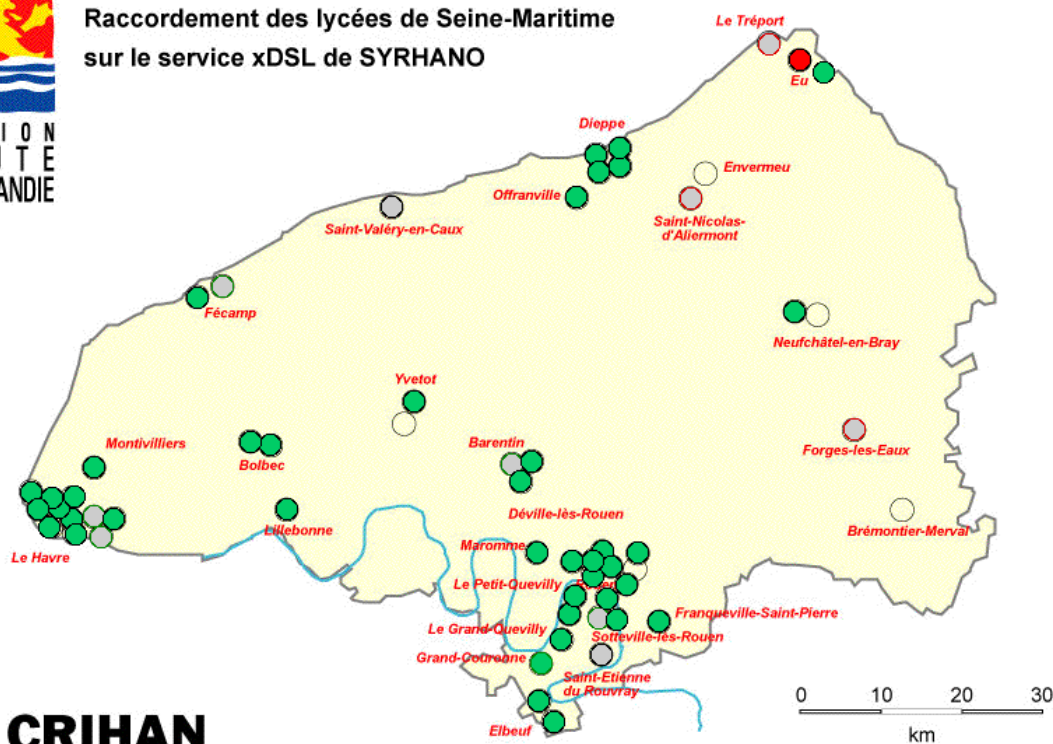
### Raccordement des collèges publics de l'Eure sur le service xDSL de SYRHANO



**CRIHAN**



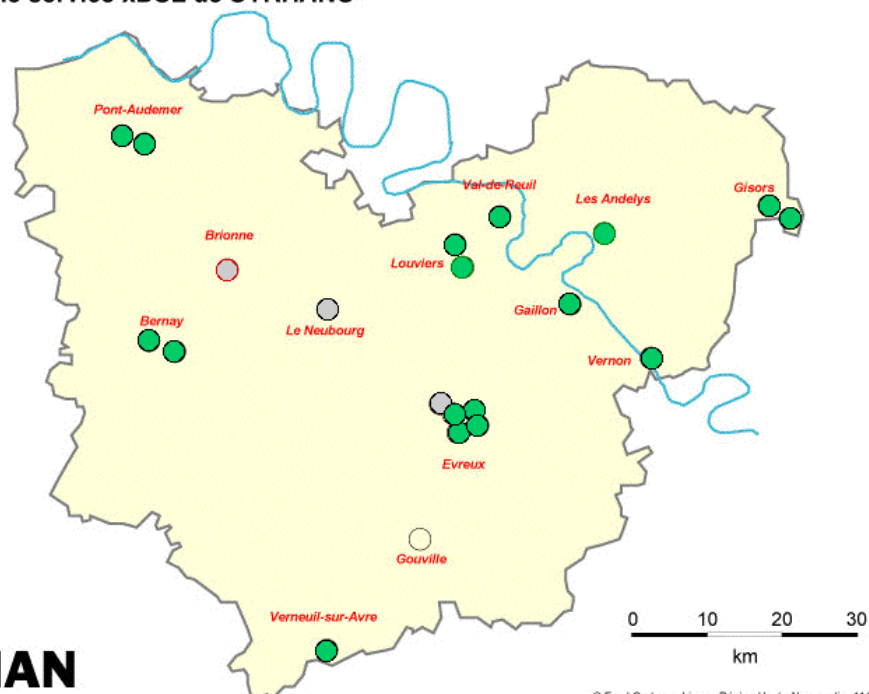
### Raccordement des lycées de Seine-Maritime sur le service xDSL de SYRHANO



© Fond Cartographique : Région Haute-Normandie - 11/2002



### Raccordement des lycées de l'Eure sur le service xDSL de SYRHANO

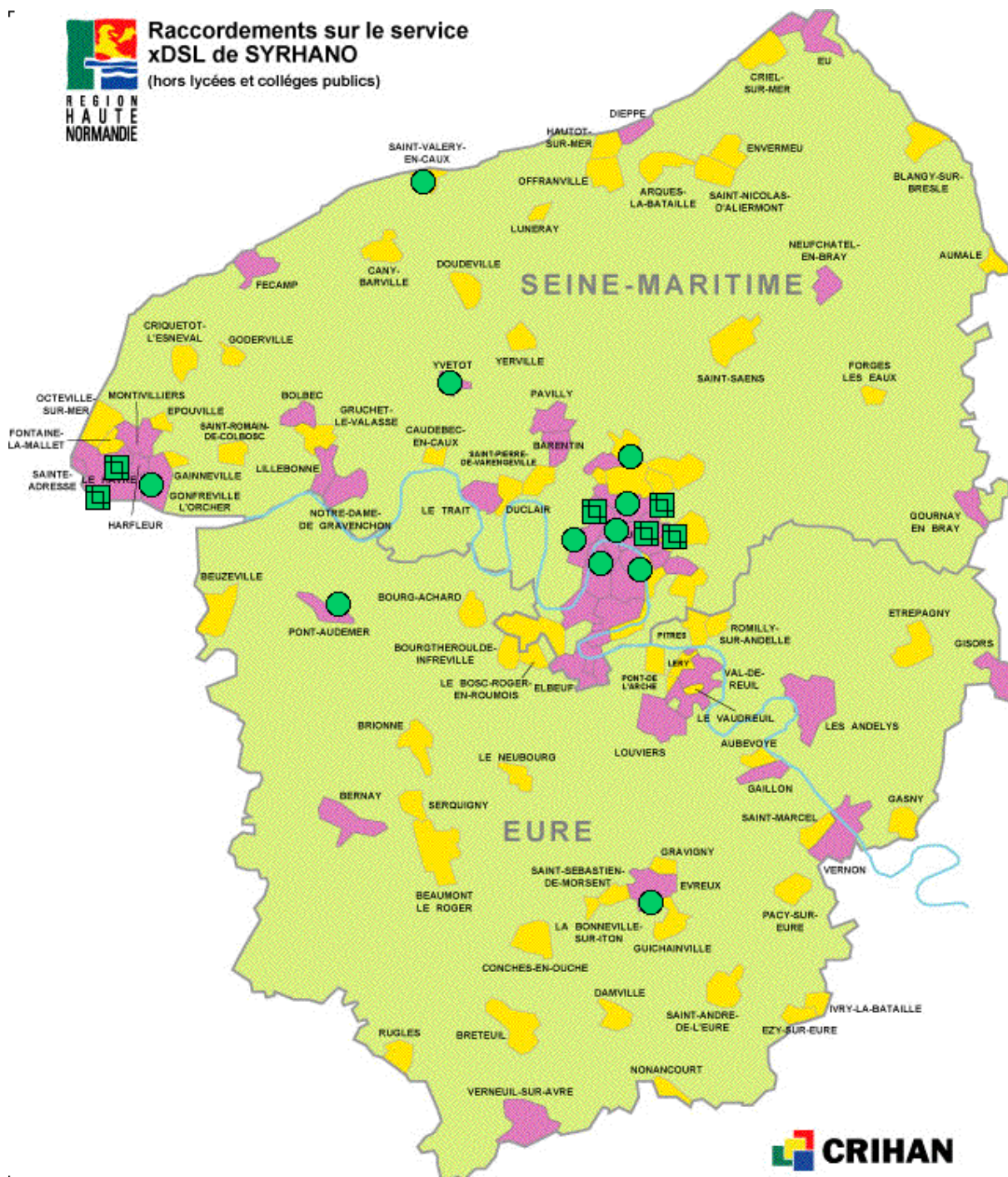


© Fond Cartographique : Région Haute-Normandie - 11/2002



Par ailleurs, d'autres sites ont choisi ce service de collecte ADSL comme les CRDP du Havre et de Mont Saint Aignan, l'Ecole d'Art du Havre, le Centre Hospitalier de Bernay, le CROUS, l'Inspection Académique, la DEFPAR, l'IFA, Science Action Haute-Normandie, le Centre Henri Becquerel, l'Ecole d'Architecture, ou le CDDP d'Evreux.

(Voir les points ou carrés verts sur la carte ci-dessous).



## 4.8 Evolutions d'InterCampus

Le réseau optique de l'agglomération rouennaise, qui fédère les membres du "GFU InterCampus" ne distribue pas encore tous les sites prévus lors de son déploiement initial en 2000.

Pour des raisons financières évidentes, les extensions sont prévues parallèlement à celles du réseau de transport de l'"Agglo", notamment avec le Métrobus et le TEOR.

- Ainsi, en 2001, la "multitubulaire" de fourreaux jouxtant la plupart du temps le parcours de TEOR a permis le raccordement du site Universitaire Pasteur en centre ville de Rouen. Le site universitaire du Madrillet a été raccordé dans le même temps.
- Pour la présente année, l'achèvement de TEOR sur Mont Saint Aignan a permis d'engager le programme de raccordement de l'IUFM : après une délicate préparation de la continuité de cheminement de fourreaux entre le point de concentration nord d'InterCampus (repéré "1" sur le schéma de la page suivante) et l'IUFM, les travaux de pose de fibres doivent débuter au moment de la rédaction de ce rapport.
- En septembre 2003, le raccordement en fibres optiques du Lycée Le Corbusier sur le site du Technopôle du Madrillet s'est achevé : les équipements actifs sont en cours d'approvisionnement et les travaux de câblage internes à l'établissement doivent permettre prochainement la mise en œuvre complète de ce raccordement.
- Des études préliminaires sont en cours pour procéder à une modification du tracé principal d'InterCampus : le tronçon situé entre les points "2" et "3" du schéma emprunte le domaine SNCF au prix d'une redevance jugée excessive car elle pèse à hauteur de 50% dans le budget d'exploitation et de maintenance du réseau. TEOR offre désormais la possibilité de contourner ce tronçon en reliant les points "8" et "1" de ce même schéma.

**1 à 2** 2 km

**Campus Nord <-> SNCF :**

- Voirie sur campus
  - Voirie rue Lavoisier
  - Traversée rue Lavoisier
  - Traversée Allée du Fond du Val
  - Emprunt d'un fourreau existant de la ville de Mont-Saint-Aignan
  - Traversée rue d'Estouteville
  - Traversée rue du Renard
- câble 36 brins K209**

**2 à 3** 2 km

**Ligne SNCF :**

- Fourreau longitudinal en tunnel et en bordure du ballast SNCF
- câble 36 brins CT 2242**

**4 à 8** 1,8 km (sept. 2001)

**Métrobus "Théâtre des Arts <-> PUST :**

- Emprunt des fourreaux et chemins de câbles existants sur le domaine propre de TEOR et de la ville de Rouen
- câble 36 brins K209**

**3 à 5** 4 km

**Gare SNCF <-> Sortie Fourche Europe :**

- Emprunt des fourreaux et chemins de câbles existants sur la ligne de métrobus
- câble 36 brins CT 2242**

**5 à 6** 6 km

**Sortie Fourche Europe <-> Terminus du Madrillet :**

- Emprunt des fourreaux et chemins de câbles existants sur la ligne de métrobus
- câble 36 brins K 209**

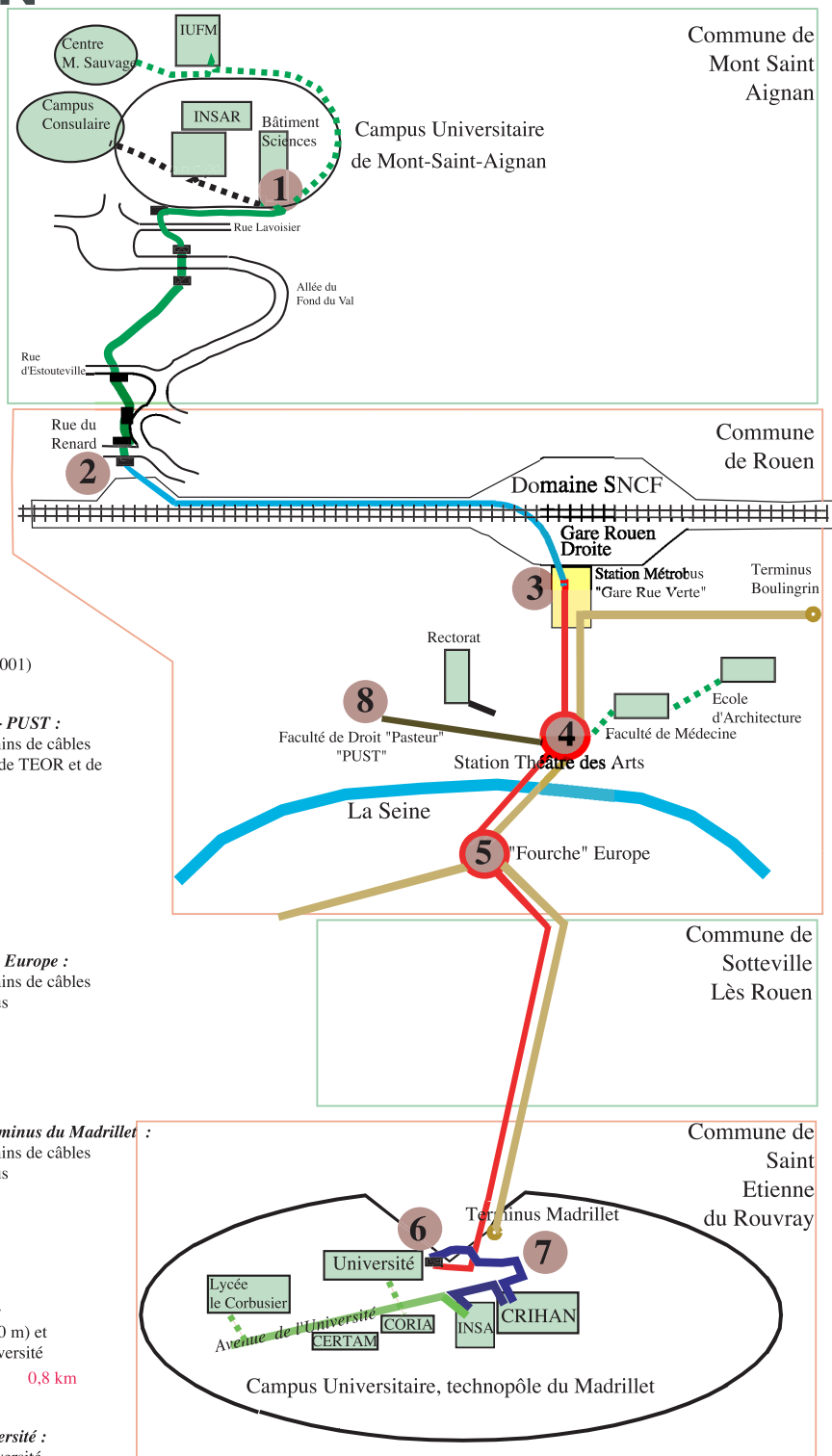
**6 à 7** 0,5 km

**Terminus Métro <-> CRIHAN :**

- Voirie sur terrain Université (20 m) et fourreaux du rond point de l'Université
- 0,8 km**

**CRIHAN <-> Avenue de l'Université :**

- Fourreaux de l'avenue de l'Université



— Trajet du Métrobus    — Fibre louée  
 ..... Extensions à venir    - - - Lien Hertzien

  Sites du "GFU"

**4 et 5** Armoires de brassage optique en station

Mise à jour Février 2003

#### 4.8.8 Vers un InterCampus Havrais

A la fin de l'été 2003 a été mise en place une liaison en fibres optiques entre les sites universitaires havrais : le site "Lebon", situé près de la gare SNCF et le site "Vauban" au sud du bassin du même nom, sont désormais interconnectés à très haut débit, permettant notamment au laboratoire de mécanique de mieux exploiter le service de calcul du CRIHAN. Cette liaison a été construite par Télécom Développement qui propose ainsi une mise à disposition de fibres pour un usage privé : une première pour un opérateur privé.

### 4.9 Les travaux sur IPV6

Une note complète sur les actions du CRIHAN pour le déploiement d'IPv6 est présentée en *Annexe E : "Les travaux du CRIHAN sur IPv6"*.

#### 4.9.1 Pourquoi ces travaux

C'est afin de devancer les besoins d'une communauté d'utilisateurs toujours plus grande et variée que le CRIHAN, maître d'œuvre du réseau SYRHANO, a fait de la mise en œuvre du protocole IPv6 et du déploiement de services associés un des axes importants de l'évolution du réseau régional, dans la lancée de RENATER et de GEANT. Cette action s'inscrit naturellement dans un éventail de services élargi et un niveau global de qualité de service encore amélioré.

#### 4.9.2 Un enrichissement des services

Dans la panoplie des services proprement "réseau" proposés sur SYRHANO, on peut citer :

- Des "classes de services" qui peuvent être mises en œuvre pour hiérarchiser les priorités des applicatifs.
- Des techniques de sécurité élaborées qui sont déployées sur le réseau sans dégradation de performances.
- Des réseaux privés virtuels qui peuvent être déployés sur l'ensemble du réseau, permettant ainsi aux établissements d'utiliser relativement simplement l'infrastructure réseau mutualisée pour réaliser une "interconnexion logique" de leurs sites distribués sur le territoire régional. Les "VPN" permettent également de rendre étanches plusieurs réseaux thématiques partageant la même épine dorsale de transport.

IPv6 vient s'ajouter à cette panoplie de services réseaux de haut niveau : il est envisagé de manière native sur l'ensemble des équipements de SYRHANO.

#### 4.9.3 Devancer un besoin encore mal exprimé

Le transport d'IPv6 n'est pas encore une demande exprimée des utilisateurs. Encore moins son transport natif. Son déploiement dès aujourd'hui vise à acquérir un savoir-faire et à préparer les administrateurs réseau des sites connectés sur SYRHANO aux évolutions annoncées de l'Internet. Or ces évolutions stratégiques sont parfois difficiles à expliquer face à une argumentation présentant IPv4 comme un protocole encore satisfaisant pour les besoins courants et surtout à la mesure des moyens disponibles dans les services réseau. On peut citer :

- Services évolués (sécurité, facilité de configuration des équipements, VPN, etc.) : tous ces services sont aujourd'hui proposés sur IPv4 et satisfont la plupart de nos utilisateurs. Il est certes parfois difficile de concilier plusieurs demandes mais une solution technique est presque toujours trouvée pour satisfaire leurs attentes.
- Disponibilité de plages d'adresses IPv4 : si l'expérience montre qu'il est de plus en plus difficile d'obtenir des adresses v4 sans justifier d'un plan de déploiement extrêmement détaillé (et donc très souvent impossible à remplir avec rigueur), cela reste inaperçu pour la majorité des utilisateurs d'autant que le problème peut aussi être contourné par la solution NAT.
- Ouverture, égalité de traitement et facilité de communication pair à pair, qui sont les valeurs fondatrices de l'Internet, sont maintenant considérées comme des failles de sécurité importantes quand on lit les magazines spécialisés et qu'on écoute les responsables techniques de sites : ceux-ci considèrent NAT comme une technique simple à mettre en œuvre et qui leur permet en outre de résoudre plusieurs problèmes simultanément :
  - le plan d'adressage de leur site peut se faire avec des adresses privées dont ils ont l'entière maîtrise ;
  - l'accès vers leur site est par défaut interdit ;
  - l'ouverture de services se fait au cas par cas et est limitée ;
  - les échanges pair à pair sont possibles en interne (parfois) mais pas avec le monde extérieur ;
  - associée à quelques adresses publiques cette technique permet aujourd'hui également d'accéder à un service de visioconférence ou tout simplement d'échanger quelques dossiers par ftp entre collègues.

Déployer IPv6 est cependant nécessaire pour assurer une migration douce (en tous cas la plus transparente possible) vers d'éventuelles nouvelles applications, pour intégrer les technologies nouvelles (intégration PDA/téléphonie mobile/ordinateurs portables, etc.) et pour préfigurer les services réseau de demain en prenant en compte les contraintes des utilisateurs (et en premier lieu la sécurité).

### 4.10 Le déploiement d'IPv6 sur SYRHANO

#### 4.10.1 Contraintes et échéancier

L'idée du déploiement d'IPv6 sur SYRHANO n'est pas neuve mais a dû attendre l'opportunité de l'arrivée de SYRHANO 2.1. En effet, deux types de contraintes en bloquaient le démarrage :

- Dans la période 2000-été 2003, le réseau SYRHANO est opéré et supervisé par un prestataire qui ne nous permet pas un déploiement natif d'IPv6.
- Tous les équipements ne supportent pas IPv6 et les fonctionnalités disponibles ainsi que la compatibilité des équipements entre eux doivent être vérifiées.

Dans un premier temps une infrastructure logique v6 est construite sur l'épine dorsale régionale v4 et gérée par le CRIHAN de manière indépendante au service v4. En particulier, le CRIHAN commence à déployer v6 sur le service de collecte xDSL (lycées et collèges) qu'il exploite déjà en v4.

Dans un deuxième temps, l'appel d'offres « SYRHANO 2.1 » impose v6 aux soumissionnaires sur l'ensemble du réseau.

SYRHANO est un des constituants du réseau français pour la recherche, et RENATER est son interlocuteur principal. C'est RENATER qui fournit les préfixes v4 et qui va également fournir un "préfixe v6".

Une plage d'adresse est réservée pour les réseaux d'interconnexion avec les sites, comme cela est fait en v4 aujourd'hui. Une seconde plage est réservée pour de futurs services réseau, sans que nous puissions réellement les détailler aujourd'hui...

Côté matériels les équipements réseau pour SYRHANO proviennent essentiellement de la gamme Cisco, avec l'exception d'un Juniper M5 pour la collecte ADSL. Des équipements 6WIND sont également acquis pour servir de concentration et de routeur d'accès pour des futurs sites utilisateurs. Ces équipements permettent d'élargir nos connaissances des implémentations v6 et de vérifier l'interopérabilité des logiciels avec nos routeurs existants.

#### **4.10.2 Mise en place d'un point de peering v6 régional**

Aujourd'hui encore, seul le transport d'IPv4 est proposé nativement sur l'épine dorsale du réseau SYRHANO. Un routeur de peering v6 géré par le CRIHAN est donc désormais installé sur cette épine dorsale ; il est connecté en IPv6 natif sur RENATER (PVC ATM). Les sites directement raccordés sur SYRHANO et souhaitant expérimenter un service v6 sont également connectés sur ce routeur (tunnel *6in4* pour l'Université du Havre et le CORIA, interconnexion IPv6 native pour le CRIHAN). Chacune de ces connexions nécessite pour les sites d'obtenir un préfixe v6 auprès de RENATER

Afin d'élargir le périmètre v6, il est proposé de maquetter son déploiement sur la plate-forme de collecte xDSL sur laquelle est raccordé un grand nombre d'utilisateurs...

#### **4.10.3 Collecte v6 sur xDSL pour les établissements scolaires**

Les quelques trois cents établissements scolaires du second degré de la Haute-Normandie sont raccordés depuis 1995-96 sur SYRHANO/RENATER par le CRIHAN via RNIS ; ce service bas débit évolue chaque fois que cela est possible, ainsi quelques uns sont maintenant reliés via satellite ou boucle locale radio et, depuis 2001, un service de collecte xDSL a été mis en place par le CRIHAN et le Rectorat de Rouen, permettant une migration progressive de RNIS à xDSL en fonction de l'éligibilité technique des sites.

Pour ces établissements, nombre de besoins communs liés à leur fonctionnement administratif et leurs objectifs pédagogiques ont du mal à être satisfaits du fait de certaines limitations du protocole IPv4 (malgré l'offre « sur mesure » faite par le CRIHAN et le Rectorat). Le protocole IPv6 est une solution tout à fait crédible pour répondre à leurs demandes et les nouvelles possibilités offertes par la connectivité de bout en bout feront également naître de nouveaux besoins. Au minimum, elles permettront d'envisager une utilisation aisée et généralisée des techniques de sécurité pour ces sites qui ont régulièrement besoin de faire des « remontées » d'informations sécurisées vers le Rectorat (via des tunnels VPN IPSec).

La connectivité globale et l'augmentation conséquentes des débits sur le réseau SYRHANO permettent également d'envisager la généralisation de la visioconférence et de la téléphonie. Dans l'avenir, les fonctionnalités dites de « mobilité » offertes par IPv6 pourront également être déployées dans les établissements et sur SYRHANO/RENATER.

Au chapitre de la visioconférence, dont une application simple et efficace est très attendue des utilisateurs et justement en particulier des établissements scolaires, un test nous est actuellement proposé par la société 6WIND : il s'agit du produit ISABEL (développé au DIT-UPM de Madrid et



commercialisé par la société AGORA). Plusieurs sites sont équipés de postes ISABEL (6WIND, RENATER Paris, Université de Caen, Université du Havre, CRIHAN), le poste du CRIHAN servant de "pont". L'intérêt d'ISABEL est de fonctionner en v4 et en v6. On a ainsi pu tester une visioconférence multipoints avec des postes v4 et des postes v6. Le poste de visioconférence, dédié, doit cependant être puissant.

#### **4.10.4 Prochaine étape**

Dans une étape ultime, il conviendra de généraliser le déploiement d'IPv6. Les sites fonctionneront alors en IPv6 natif et accèderont à l'Internet v4 grâce à des mécanismes de migration configurés sur le routeur. Dans cette configuration, l'accès à l'Internet v4 est considéré comme devant se réduire au fil du temps.

Une maquette « sur table » de cette dernière étape a déjà été réalisée : le réseau SYRHANO « 2.1 », en fonctionnement depuis la fin de l'été 2003, doit permettre le transport natif d'IPv6, mais la date de mise en production de v6 dépend de la disponibilité de versions logicielles compatibles avec les services déjà déployés sur l'infrastructure régionale.

#### **4.10.5 Qu'en attendre ?**

Déployer IPv6 devrait permettre une renaissance des valeurs fondatrices de l'Internet. Ce n'est pas seulement une question de nombre d'adresses IP disponibles : c'est l'occasion de se poser la question de savoir comment déployer des services nouveaux et de faire évoluer la technologie pour que chacun puisse se l'approprier avec le minimum de contraintes.

Les réseaux IP sont parfois aujourd'hui d'une complexité à la limite du raisonnable, leur exploitation étant très difficile, alors même que les services proposés aux utilisateurs sont pauvres et peu nombreux. Le caractère global d'IPv6 signifie aussi que toutes les machines de l'Internet seront potentiellement joignables (serveurs) et que les techniques de sécurisation des services devront évoluer pour devenir, d'une manière ou d'une autre, plus souples et faciles à mettre en œuvre, plus efficaces et moins gourmandes en main d'œuvre.

Pourtant IPv6 ne semble pas encore la priorité pour certains équipementiers, ni celle des ingénieurs réseaux, trop occupés à essayer de stabiliser leurs réseaux v4 en croissance souvent rapide.

Or les conséquences du déploiement d'IPv6 aujourd'hui sont principalement humaines car cela implique la construction d'une infrastructure logique IP supplémentaire et donc deux technologies réseau à configurer, maintenir, sécuriser, superviser et potentiellement deux fois plus de failles de sécurité et de sources de problèmes.

Il reste qu'il nous paraît nécessaire de rapidement mettre en œuvre v6, pour acquérir un savoir-faire et se confronter aux problèmes de manière à réfléchir le plus sereinement possible aux solutions à y apporter.

C'est en généralisant ainsi l'usage de v6 puis en activant des fonctionnalités innovantes (typiquement la mobilité, qui permettra entre autres une intégration aisée des ordinateurs portables, PDA et téléphones) que chacun prendra conscience que la page v4 est presque tournée.

#### **4.10.6 Les acteurs, et le contexte régional et national**

Les ingénieurs du CRIHAN participent activement et régulièrement aux travaux et aux réunions des différents groupes français liés à IPv6 : GN6, Task Force IPv6 France et G6.

Une conférence a eu lieu à l'Université de Caen en juin 2003 pour l'organisation de laquelle le CRIHAN a offert sa participation. Il s'agissait d'une réunion "multi sites" de la task force entre Paris et Caen afin de permettre à certains participants de suivre la réunion à distance et de pouvoir intervenir et poser des questions en direct. La réunion fut retransmise grâce à IPv6. Le CRIHAN a également exposé à cette occasion ses différentes actions dans le domaine.

Par ailleurs, un partenariat a été signé entre le CRIHAN et la société 6Wind, constructeur de routeurs spécialisé dans le protocole IPv6. Le partenariat consiste en une aide mutuelle. (Interopérabilité et tests des équipements, aide technique, mise en place de formations, etc.). D'autres accords de collaboration sont en gestation notamment entre les régions Haute- et Basse-Normandie (réseaux régionaux VIKMAN et SYRHANO).

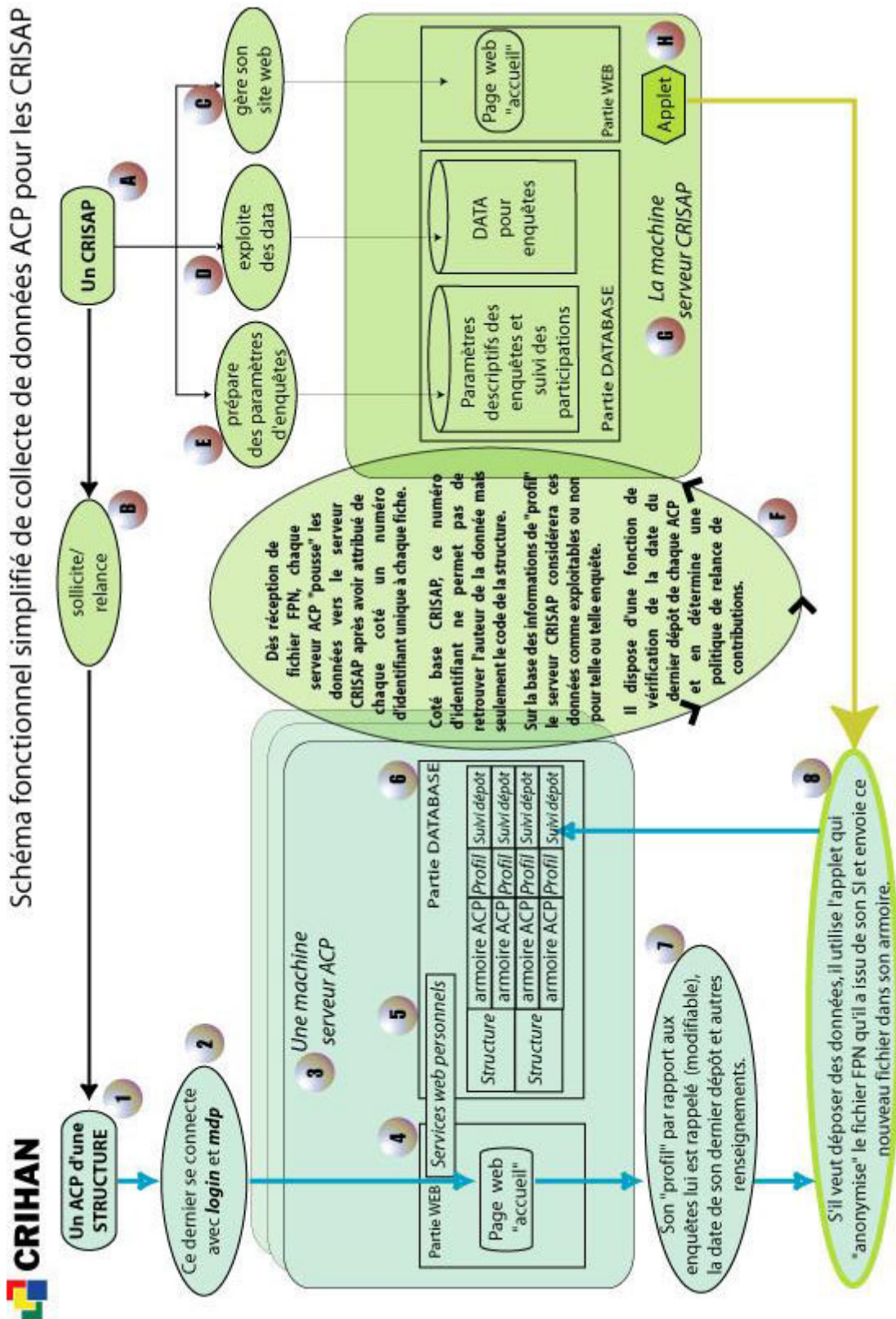
#### **4.10.7 Formation IPv6**

Le CRIHAN dispense, depuis la rentrée 2003, des formations autour du protocole IPv6. La première session, les 7 et 8 octobre, a réuni les ingénieurs réseaux des principaux sites de SYRHANO. Cette formation concourt aux efforts du CRIHAN pour inciter ses différents partenaires régionaux à migrer progressivement leurs réseaux vers IPv6. Ainsi, l'Université du Havre, le CORIA, le Rectorat de Rouen, l'INSA de Rouen, le CRIHAN bien sûr et SYRHANO sont déjà connectés ou disposent déjà d'une adresse IPv6.

# ANNEXES

## Annexe A : Plateforme de collecte CRISAP

Schéma fonctionnel simplifié de collecte de données ACP pour les CRISAP



**Annexe B : Listes des Musées de Haute-Normandie**

BERNAY (27)	Musée municipal des Beaux-Arts
DIEPPE (76)	Château-Musée
ELBEUF (76)	Musée municipal
EU (76)	Musée Louis-Philippe
EVREUX (27)	Musée d'Evreux, Ancien évêché
FECAMP (76)	Musée des Terre-Neuvas et de la pêche
FECAMP (76)	Musée centre des Arts
LE HAVRE (76)	Musée des Beaux-Arts A.Malraux
LE HAVRE (76)	Musée de l'ancien Havre
LE HAVRE (76)	Musée du Prieuré de Graville
LE HAVRE (76)	Muséum d'Histoire naturelle
LE HAVRE (76)	Espace maritime et portuaire des docks Vauban
LILLEBONNE (76)	Musée municipal Jean Rostand
LOUVIERS (27)	Musée municipal
MARTAINVILLE (76)	Musée des Traditions et Arts Normands
MONTVILLE (76)	Musée des Sapeurs-Pompiers
NOTRE DAME DE BLIQUETUIT (76)	Ecomusée de la Basse Seine
NOTRE DAME DE BONDEVILLE (76)	Musée industriel de la Corderie Valois
PETIT-COURONNE (76)	Musée départemental Pierre Corneille
PONT-AUDEMER (27)	Musée municipal Alfred Canel
ROUEN (76)	Musée des Antiquités
ROUEN (76)	Muséum d'Histoire naturelle
ROUEN (76)	Musée des Beaux-Arts
ROUEN (76)	Musée Secq des Tournelles
ROUEN (76)	Musée de la céramique
ROUEN (76)	Musée national de l'éducation
ROUEN (76)	Musée Flaubert et d'histoire de la médecine
ROUEN (76)	Musée Pierre Corneille (maison natale)
ROUEN/CANTELEU (76)	Pavillon Flaubert
VERNON (27)	Musée municipal Alphonse Georges Poulain
VILLEQUIER (76)	Musée Victor Hugo

## **Annexe C : Journées d'études "Internet et les musées : site et portail"**

### **LUNDI 13 OCTOBRE 2003**

#### **MATIN**

#### **AMPHITHEATRE DU CORIA**

**A partir de 9h Accueil dans le hall du CORIA**

**9h30 Réception des stagiaires et présentation de la formation par le Conseil Régional et la DRAC de Haute-Normandie à l'amphithéâtre du CORIA**

#### **En introduction**

**9h45 Rappel des conclusions des études de Grahall**  
Bruno Benoiste Pilloire, chargé des études de la société Grahall

**10h Notions fondamentales sur l'Internet et l'équipement nécessaire**  
Jean-Christian Cordier, responsable formation et relations extérieures au CRIHAN (Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie)

#### **Internet, les sites et les portails**

**11h Réflexions sur la notion de *site* et de *portail culturel***  
Florence Vielfaure, informatique et recherche, Direction des musées de France

**11h20 Présentation de quelques sites portails régionaux français**  
Modérateur : Philippe Guillet, OCIM  
Isabelle Klinka, musée des Beaux-Arts d'Orléans, région Centre  
Rémi Tanguy, musée Comtois, région Franche-Comté  
Pascal Vila, Conseil des Musées de Poitou-Charente

**13h-14h30 Déjeuner**

#### **APRES-MIDI**

#### **SALLES DU CORIA ET DU CRIHAN**

#### **Typologie et analyse de sites et de portails**

**14h30-17h30 Typologie et analyse de sites et de portails, sous forme de travaux pratiques en groupes devant des postes Internet**  
Florence Vielfaure, informatique et recherche, Direction des musées de France  
Aube Lebel, intervenant extérieur

Les groupes seront répartis entre le CORIA et le CRIHAN ; un poste informatique avec accès à Internet sera partagé entre 2 à 3 participants.

**MARDI 14 OCTOBRE 2003****MATIN****AMPHITHEATRE DU CORIA****Conception pour les publics, méthodologie de projet**

- 9h30**                    **Réflexions sur le type de conception du portail, la création de sites en vue du portail, la production de contenu, les partenariats, le cahier des charges**  
Gil Ferrand, CNRS / Mission de la recherche et de la technologie du Ministère de la culture et de la communication
- 12h**                    **Pratiques d'utilisateurs de musées en ligne : résultats d'études de publics**  
Bernadette Goldstein, département des publics, Direction des musées de France  
Nadège Dutardre, intervenant extérieur, auteur d'une étude " Publics des musées en ligne et publics des musées réels : quels liens ? ", janvier 2003
- 13h-14h30**           **Déjeuner**

**APRES-MIDI****AMPHITHEATRE DU CORIA****Sites en partenariat avec l'Éducation nationale, conception et pratiques**

- 14h30**                    **Les attentes de l'Education Nationale : les enseignants, les élèves, pour quelle discipline ?**  
Gérard Granier, IPR au rectorat de Rouen  
Philippe Thénod, délégué académique à l'action culturelle, rectorat de Rouen  
Claire Quenehen, responsable académique musée/patrimoine à l'action culturelle, rectorat de Rouen  
Jean Braunstein, professeur agrégé d'histoire-géographie, lycée Galilée, Franqueville-Saint-Pierre
- 15h30**                    **Site de l'Histoire par l'Image : conception du site et pratiques des utilisateurs**  
Bernadette Goldstein, département des publics, Direction des musées de France
- 15h50**                    **Du musée réel au musée virtuel : le projet pédagogique du futur site louvre.fr**  
Frédérique Leseur, chef de service adjointe, activités éducatives et culturelles, direction des publics, musée du Louvre
- 16h10**                    **Vers des projets de collaboration entre éducation nationale et musées en Haute-Normandie**  
Gérard Granier, IPR au rectorat de Rouen  
Marie-Anne Menant, directrice adjointe du CRDP de Seine-Maritime
- 17h00-17h30**           **Conclusion**  
Geneviève Sennequier, présidente de la Section Fédérée de Haute-Normandie, AGCCPF  
Pierre Ickowicz, vice-président de la Section Fédérée de Haute-Normandie, AGCCPF

***Annexe D : Publications réalisées durant l'exploitation  
du service Illiac 8***

Cette annexe  
contient la liste des publications  
réalisées par les laboratoires  
dans le cadre de leur utilisation  
du supercalculateur Illiac 8



# 1 Publications avec comité de lecture

## Laboratoire de Mathématiques et d'Informatique – INSA de Rouen

Projet 1998 007 : **Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique**

"Deflection of a vortex pair by an interface in easy-plane ferromagnets"	J.-G. Caputo, J. P. Zagorodny, Yu. Gaididei et F. G. Mertens <i>J. Phys. A, Math. and Gen.</i> , 36, 4259-4267, (2003)
"Extremely short electromagnetic pulses in a resonant medium with a permanent dipole moment"	A. Maimistov, J.G. Caputo <i>Opt. Spectroscopy</i> , 94 (2), 245-250, (2003)
"Bore formation, evolution and disintegration into solitons in shallow inhomogeneous channels"	J.G. Caputo et Y. Stepanyants accepté à <i>Nonlinear processes in geophysics</i> , Novembre 2002
"Resonances in the dynamics of the Bose-Einstein condensate with varying scattering length"	F. Abdullaev, J.G. Caputo, R. Kraenkel and B. Malomed <i>Phys. Rev. A</i> , 67, nb. 1, 013605, 2003
"Analysis of a semi-linear pde for modeling static solutions of Josephson junctions"	J. G. Caputo, N. Flytzanis, A. Tersenov and M. Vavalis accepté à <i>SIAM J. of Math. Analysis</i> , Août 2002.
"Influence of the passive region on Zero Field Steps for window Josephson junctions"	A. Benabdallah et J. G. Caputo <i>Journal of Applied Physics</i> , 92, nb. 7, (2002).
"Unidirectional Propagation of an Ultra-Short Electromagnetic Pulse in a Resonant Medium with High Frequency Stark Shift"	J. G. Caputo et A. Maimistov, <i>Physics Letters A</i> 296, 34-42, (2002)
"The window Josephson junction: a coupled linear nonlinear System"	A. Benabdallah, J. G. Caputo et N. Flytzanis <i>Physica D</i> 161, 79-101, (2002)
"Nonlinear energy transmission in the gap"	J. G. Caputo, J. Leon et A. Spire <i>Physics Letters A</i> , vol. 283, 129-135, (2001)
"Dynamics of fluxons in narrow window junctions"	N. Flytzanis, N. Lazarides, A. Chiginev, V. Kurin et J. G. Caputo, <i>J. Appl. Physics</i> , vol. 88, nb. 7, 4201-4211, (2000)
"Static properties and waveguide modes of a wide lateral window Josephson junction"	J. G. Caputo, N. Efrimidis, N. Flytzanis, N. Lazarides, Y. Gaididei, I. Moulitsa et E. Vavalis <i>Int. J. of Modern Physics C</i> , vol. 11, nb. 3, 493-517, (2000)
"Laminar flux flow for an exponentially tapered Josephson oscillator"	A. Benabdallah, J. G. Caputo et A. C. Scott <i>J. Appl. Physics</i> , vol. 88, nb. 6, 3527-3540, (2000)
"Raman solitons in transient SRS"	M. Boiti, J.G. Caputo, J. Leon et F. Pempinelli <i>Inverse Problems</i> , vol. 16, nb. 2, 303-315, (2000)
"Stability analysis of static solutions in a Josephson junction"	J. G. Caputo, N. Flytzanis, Y. Gaididei, N. Stefanakis et E. Vavalis <i>Supercond. Science and Technology</i> , vol. 13, 1-17, (2000)
"Amplitude modulated fiber ring laser"	C. Balslev-Clausen, J. G. Caputo, M. P. Soerensen et S. Bischoff <i>J. Opt. Soc. Am. B</i> , vol. 17, nb. 5, 705-712, (2000)

.../...

### Laboratoire de Mathématiques et d'Informatique – INSA de Rouen

#### Projet 1998 042 : Optimisation d.c. pour le problème de conformation moléculaire. Algorithmes parallèles pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire

"D.C. Programming approach and solution algorithm to the Multidimensional Scaling Problem"	Pham Dinh Tao, Le Thi Hoai An <i>Local and Global Approaches to Nonconvex Optimization, Nonconvex Optimization and Its Applications, Kluwer Academic Publishers 2001, pp. 231-276</i>
<p>"D.C. programming approach for large scale molecular optimization via the general distance geometry problem" - résumé :</p> <p>In this paper we are concerned with a new d.c. (difference of convex functions) approach to the general distance geometry problem and the two phase solution algorithm DCA. We present a thorough study of this d.c. program in its elegant matrix formulation including substantial subdifferential calculus for related convex functions. It makes it possible to express DCA in its simplest form and to exploit sparsity. In Phase 1 we extrapolate all pairwise dissimilarities from given bound constraints and then apply DCA to the resulting Euclidean Multidimensional Scaling (EMDS) problem. In Phase 2 we solve the original problem by applying DCA from the point obtained by Phase 1. Requiring only matrix-vector products and one Cholesky factorization, DCA seems to be robust and efficient in the large-scale setting as proved by numerical simulations which furthermore indicated that DCA always converges to global solutions.</p>	Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao <i>Optimization in Computational Chemistry and Molecular Biology : Local and Global Approaches Nonconvex Optimization and Its Applications, Kluwer Academic Publishers, 2000, pp. 301-339</i>
"Large Scale Molecular Conformation via the exact distance geometry problem"	Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao <i>Lectures Notes in Economics and Mathematical Systems, vol 481, "Optimization", Springer Verlag Publishers, mars 2000, pp. 260-277</i>
"A new algorithm for solving large scale molecular distance geometry problems"	Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao <i>High Performance Algorithms and Software for Nonlinear Optimization Nonconvex Optimization and Its Applications, Kluwer Academic Publishers 2003, pp. 279-296</i>
<p>"Large Scale Global Molecular Optimization from exact distance matrices by a d.c. optimization approach" - résumé :</p> <p>A so-called DCA method based on a d.c. (difference of convex functions) optimization approach for solving large-scale distance geometry problems is developed. Different formulations of equivalent d.c. programs are stated via Lagrangian duality without gap relative to d.c. programming. Substantial subdifferential calculations permit to compute quite simply sequences of iterations in the DCA. It actually requires matrix-vector products and only one Cholesky factorization, and allows exploiting sparsity in the large-scale setting. A technique, using the triangle inequality to generate a complete approximate distance matrix, was investigated in order to compute a good starting point for the DCA. Finally, many numerical simulations of the molecular optimization problems with up to 12567 variables are reported which prove the globality of found solutions, the robustness, and the efficiency of our algorithms.</p>	Le Thi Hoai An, Dinh Tao Pham <i>à paraître dans SIAM Journal of Optimization</i>
"Solving Large Scale Molecular distance geometry problems by a smoothing technique via the Gaussian transform and D.C. programming"	Le Thi Hoai An <i>à paraître dans le Journal of Global Optimization</i>

### Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques – CORIA - INSA de Rouen

#### Projet 1998 022 : Analyse physique et simulation numérique des écoulements dans des tuyères en présence de décollement

<p>"Computational study of nozzle-afterbody flows with propulsive jet" - résumé :</p> <p>In this paper we examine the performance of the multiscale model on complex flows at high speed including afterbody flows. The S3Ch single-flux axisymmetric nozzle is retained as a test case, and numerical results are compared with the experimental data. The qualitative effect nozzle start-up process is briefly discussed. A description of some of the most important flow phenomena occurring on typical aircraft afterbodies is presented. It is concluded that the multiscale model provides an interesting prediction of the pressure coefficient on the afterbody.</p>	<p>A. Hadjadj, D. Vandromme Published in 1998 by John Wiley &amp; Sons, Ltd</p>
<p>"Separated turbulent jets modeling for aeronautical applications" - résumé :</p> <p>The capability of turbulence models to predict the detachment together with the reattachment of turbulent jets is investigated. Four different closures accounting for anisotropy and nonequilibrium effects are utilized. The backward facing step is retained as a generic configuration for those tests, and numerical results are compared with the measurements conducted by Driver and Seegmiller. It is concluded that the multiscale and Shih-Zhu-Lumley A.S.M. models provide an interesting approximation of the recirculation bubble length. In particular, the superiority of the Shih-Zhu-Lumley is shown close to the reattachment point.</p>	<p>A. Hadjadj, D. Vandromme Published in 1998 by John Wiley &amp; Sons, Ltd</p>
<p>"Numerical simulation of shock wave reflection in over-expanded exhaust jets"</p>	<p>A. Hadjadj, A.N. Kudryavstev, D.V. Khotyanovsky and Dany Vandromme Soumis au 22nd International Symposium on Shock Waves, 1999, UK</p>
<p>"Numerical simulation of shock wave reflection in over-expanded exhaust jets"</p>	<p>A.N. Kudryavstev, A. Hadjadj, D. Vandromme and M.S. Ivanov 23rd International Symposium on Shock Waves, ISSW23 2001</p>
<p>"Numerical study of the starting process in a supersonic nozzle"</p>	<p>A. Hadjadj, A.S. Mouronval West East High Speed Flow Fields 2002, D.E. Zeitoun, J. Périaux, J.A. Désidéri and M. Marini (Eds.), CIMNE Barcelona Spain 2002.</p>
<p>"Flow visualization in computational fluid dynamics"</p>	<p>A. Kudryavtsev, A. Hadjadj, A.-S. Mouronval Soumis au Journal of Visualization, 2003</p>
<p>"Numerical Investigation of Shock-Reflection Phenomena in Overexpanded Jets"</p>	<p>A. Hadjadj, A. Kudryavtsev and M.S. Ivanov Soumis au AIAA Journal, 2003</p>
<p>"Une méthodologie générale pour l'étude numérique du couplage fluide-structure par une approche multicode"</p>	<p>A.-S. Mouronval, A. Hadjadj and E. Lefrançois Revue européenne des éléments finis, Vol. 12, No. 5, pp. 519-555, 2003</p>
<p>"Large eddy simulation of turbulent flows in reversing systems"</p>	<p>L. Blin, A. Hadjadj and L. Vervisch Journal of Turbulence, Vol. 4, No. 01 pp. 1-19, 2003</p>
<p>"Numerical investigation of transient nozzle flow"</p>	<p>A.-S. Mouronval, A. Hadjadj, A.N. Kudryavtsev, D. Vandromme Int. J. Shock Waves, Vol. 12, No. 5, pp. 403-411, 2003</p>

.../...

### Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques – CORIA - INSA de Rouen

"Numerical investigations of transition between regular and Mach reflections caused by free-stream disturbances"	A. Kudryavtsev, D.V. Khotyanovsky, M.S. Ivanov, A. Hadjadj and D. Vandromme <i>Int. J. Shock Wave</i> , Vol, 12, pp. 157-165, 2002
"Transition between regular and Mach reflection of shock waves : new numerical and experimental results "	M.S. Ivanov, D. Vandromme, V.M. Fomin, A. Kudryavtsev, A. Hadjadj and D. V. Khotyanovsky <i>Int. J. Shock Waves</i> , Vol, 11, pp. 199-207, 2001
"Comparaison of WENO with Low Dissipative High Order Schemes for Compressible Turbulence Computations", RIACS Technical Report (35 pages)	A. Hadjadj, H.C. Yee and N.D. Sandham, NASA Ames Research Center, 2001
<b>Projet 1998 028 : Simulation numérique directe et modélisation de plasmas d'argon turbulents</b>	
"Direct numerical simulation and modeling of a nonequilibrium turbulent plasma"	P. Domingo, T. Benazzouz <i>AIAA Journal</i> , January 2000, vol. 38, No. 1, p.73-76
<b>Projet 1999 017 : Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée dans un brûleur à jets séparés. Application à la stabilisation d'une oxy-flamme</b>	
"Edge flames and partially premixed combustion in diffusion flame quenching"	Favier, V., Vervisch, L. <i>Combust. Flame</i> , 125(1/2), pp.788-803, 2001
"Theoretical and numerical study of a symmetrical triple flame using the parabolic flame path approximation"	Ghosal, S., Vervisch, L. <i>Journal of Fluid Mechanics</i> , 415, pp. 227-260, 2000
"Using numerics to help understanding of nonpremixed turbulent flames"	Vervisch, L. <i>Proc. Combust. Inst.</i> , Vol. 28., pp. 11-24, 2000
<b>Projet 1999 007 : Couplage Fluide-Structure pour l'étude des charges latérales dans les moteurs fusée.</b>	
<p>"Numerical Study of the Aeroelastic Stability of an Overexpanded Rocket Nozzle" - résumé:</p> <p>Nous présentons ici un modèle numérique de stabilité aéroélastique appliqué aux cas de divergents de moteurs fusée surdétendus (présence d'un choc de décollement). Partant du modèle développé par l'équipe de Pekkari, nous proposons une extension pour la prise en compte des instabilités de type dynamique. Après vérification sur un modèle 1D simplifié nous observons que la stabilité d'un divergent flexible, pour la forme de sollicitation analytique proposée par le modèle, est fonction de la position initiale du choc de décollement. La perte de stabilité statique apparaît suite à l'annulation d'une des fréquences fondamentales de la structure. Dans le cas dynamique il s'agit d'une coalescence de deux fréquences, phénomène analogue au cas connu du flutter. Un calcul numérique avec couplage de codes, l'un dédié au fluide, l'autre à la structure, est finalement conduit pour permettre de valider la forme analytique de la sollicitation du modèle, dans le cas général d'une tuyère bidimensionnelle surdétendue.</p>	E. Lefrançois, G. Dhatt, D. Vandromme Numéro spécial « <i>Fluide-Structure Interaction</i> » de la <i>Revue Européenne des Eléments Finis</i> , vol 6-7, pp 727-762, octobre 2000

### Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 - Université de Rouen

#### Projet 1998 037 : Modélisation de POTTs dans le pavage octogonal

"Quasiperiodic fluctuation effect on a first-order phase transition : A Monte Carlo investigation"	<i>D. Ledue and D. P. Landau Phys. Rev. B 63, 054425 (2001)</i>
"Monte Carlo investigation of the eight-state Potts model on quasiperiodic tilings"	<i>D. Ledue, D. P. Landau and J. Teillet J. Appl. Phys. 83, 6305 (1998)</i>

#### Projet 1998 043 : Propriétés magnétiques de multicouches

<p>"Magnetic properties of Dy/Tb superlattices : A Monte Carlo investigation" – résumé : A Monte Carlo investigation of the thermal variation of the magnetization per spin in Dy/Tb superlattices is carried out. Our model consists of an alternate stacking along the <i>c</i> axis of the hexagonal compact Dy and Tb layers with abrupt interfaces. Each site is occupied by a classical Heisenberg spin. Competing exchange interactions up to the 4th neighbours have been considered in Dy layers in order to reproduce the low temperature helimagnetic phase whereas 2<sup>nd</sup> neighbour ferromagnetic interactions have been taken in Tb layers. Planar anisotropy and interaction with an applied field are also taken into account. The influence of the bilayer number in the model, the exchange interactions and the applied field is studied. It is shown that 7 bilayers are enough. For an applied field of <math>8.28 \times 10^4 \text{ Am}^{-1}</math>, the maximum in the magnetization per spin around 200 K is attributed to the flip of some Tb layer magnetizations due to the helimagnetic ordering in Dy layers. The main features of the magnetic ordering are qualitatively independent of the interaction sets which have been tested. The disagreement with experimental value of the magnetization per spin at low temperature is attributed to the thermal variation of the experimental « turn angle » which has not been taken into account in our model. For an applied field of <math>1.68 \times 10^5 \text{ A m}^{-1}</math>, the maximum around 200 K vanishes.</p>	<p><i>P. Verdier and D. Ledue Phys. Stat. Sol. (a) 189, 959 (2002)</i></p>
<p>"Monte Carlo investigation of transition and compensation temperatures of Fe/Tb multilayers" – résumé : A Monte Carlo investigation of the A thickness (<math>A \equiv \text{Fe}</math>) dependence of the transition and compensation temperatures of a simple cubic Heisenberg A/B bilayer is carried out. Our model, which includes a few mixed planes of the <math>A_{1-x}B_x</math> type that represent the disordered interfaces, basically consists of several coupled magnetic parts with different bulk transition temperatures. Numerical results are compared with the experimental data for amorphous Fe/Tb multilayers. The simulated Fe thickness (<math>t_{\text{Fe}}</math>) dependence of <math>T_C</math>, which reproduces the decrease <math>T_C</math>, of as <math>t_{\text{Fe}}</math> increases, is consistent with experimental one. Since our simulations indicate that the magnetic ordering is driven by the disordered interfaces, the decrease of <math>T_C</math> is explained by the fact that the interfaces are more and more decoupled as <math>t_{\text{Fe}}</math> increases. The experimental thermal behaviour of each sublattice magnetization can be reproduced with a Tb-magnetic moment of <math>6\mu_B</math> which seems to be reasonable for amorphous layers, whereas a value of <math>9\mu_B</math> is too large. Accordingly, a compensation point has been observed for a Fe thickness range that agrees with experimental one. The simulated and experimental Fe thickness variations of <math>T_{\text{comp}}</math> are in reasonable agreement.</p>	<p><i>L. Veiller, D. Ledue and J. Teillet J. Appl. Phys. 87, 432 (2000)</i></p>
<p>"Magnetic properties of Fe/Tb multilayers : a Monte Carlo investigation"</p>	<p><i>L. Veiller, D. Ledue and J. Teillet J. Magn. Magn. Mater. 193, 427 (1999)</i></p>

.../...



### Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 - Université de Rouen

<p>"Phase transitions in a ferrimagnetic Heisenberg multilayer : a Monte Carlo study" – résumé :</p> <p>Using a Monte Carlo method, the magnetic properties of a Heisenberg multilayer system consisting of four alternating ferromagnetic layers (A and B) with different spins and interaction constants are examined. The effects of sampling size, antiferromagnetic interlayer coupling (<math>J_{AB}</math>) and disordered interfaces on the specific heat and magnetisation thermal variation are investigated. For multilayers with steep interfaces, it is shown that the thermal variation of the specific heat exhibits two peaks, but only a single-phase transition occurs. The transition temperatures is independent on <math>J_{AB}</math> in the investigated range. On the other hand, this temperature depends on the kind of the interfaces.</p>	<p>L. Veiller, D. Ledue and J. Teillet J. Magn. Mater. 184, 55 (1998)</p>
---	---

"Monte Carlo simulations of magnetic properties in multilayers"	L. Veiller, D. Ledue and J. Teillet Comput. Mater. Sci. 10, 283 (1998)
"Magnetic properties of helimagnetic-ferromagnetic superlattices : a Monte Carlo study"	P. Verdier and D. Ledue Soumise à J. Magn. Mater.

#### Projet 1999 006 : Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V

"Simulation of the FCC → FCC+DO <sub>22</sub> +L1 <sub>2</sub> kinetic reaction"	C. Pareige and D. Blavette Scripta mater. 44 (2001) 243-247
"Atom probe and numerical calculations of ternary phase diagram in Ni-Al-V system"	H. Zapolsky, C. Pareige, L. Marteau, D. Blavette calphad 25 (2001) 125-13

#### Projet 2000 006 : Propriétés magnétiques des "nanoparticules"

"Monte Carlo study of the thermally activated magnetisation reversal in a single nanoparticle"	D. Ledue, P.E. Berche and R. Patte Acceptée à J. Magn. Mater.
"Magnetization switching in a ferromagnetic Heisenberg nanoparticle with uniaxial anisotropy : A Monte Carlo investigation"	D. Ledue, P.E. Berche and R. Patte Soumise à Physica B.

#### Projet 2000 007 : Influence de la présence d'impuretés non magnétiques sur la transmission de phase du modèle d'Ising tridimensionnel

"Monte Carlo studies of three-dimensional bond-diluted ferromagnets"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke High Performance Computing in Science and Engineering, eds. S. Wagner, W. Hanke, A. Bode, F. Durst (Springer, Berlin, 2003), p.227 <a href="http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0212504">http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0212504</a>
"Crossover effects in the bond-diluted Ising model in three dimensions"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke Computer Physics Communications 147 (2002) 427-430 <a href="http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0202117">http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0202117</a>
"Quenched disorder distributions in three-dimensional diluted ferromagnets"	W. Janke, P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVI, eds. D.P. Landau, S.P. Lewis, H.-B. Schüttler (Springer, Berlin, 2004) (in print) <a href="http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0304642">http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0304642</a>

## IRCOF UMR 6014 CNRS – Université de Rouen

Projet 1998 034 : **Structure et stabilité de complexes entre amidures de lithium et leurs partenaires réactionnels**

<p>"Theoretical quantification of the electrostatic contribution to complexes involving organolithium compounds" - résumé : A quantitative analysis of the intermolecular forces responsible for the formation of aggregates/complexes involving organolithium compounds has been undertaken using the Restricted Variational Space (RVS) decomposition scheme of the intermolecular interaction energy.</p> <p>Two series of RVS computations have been carried out for every complex. The first one concerns the fully optimized systems while for the second the optimization has been limited to the intermolecular parameters. As expected, our results confirm that the electrostatic contribution is always the main stabilising component in these systems even when one of the partners of the complex is non-polar. In the case of aggregation between two lithiated species, comparison of the two sets of results indicates that the distortion undergone by the partners in the complexes takes place at the expense of an energy decrease of the electrostatic contribution. In the case of methyllithium dimer we have checked that the extension of the basis set does not alter the results.</p>	<p>C. Fressigné, J. Maddaluno and C. Giessner-Prettre J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 1999, 2197-2201</p>
<p>"A DFT theoretical analysis of aldehyde condensation pathways onto methyllithium, lithium dimethylamide, and their aggregates"</p>	<p>C. Fressigné, J. Maddaluno, A. Marquez, C. Giesner-Prettre J. Org. Chem. 2000, 65, 8899-8907</p>
<p>"A NMR and theoretical study of aggregates between alkyllithium and chiral lithium amides : control of the topology through a single asymmetric center"</p>	<p>A. Corruble, D. Davoust, S. Desjardins, C. Fressigné, C. Giessner-Prettre, A. Harrison-Marchand, H. Houte, M.-C. Lasne, J. Maddaluno, H. Oulyadi, J.-Y. Valnot J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 15267</p>
<p>"Influence of the correlation, aggregation and solvation on ab initio computed Li-C, Li-N and Li-Li NMR coupling constants"</p> <p>Resume: The 1J and 3JCLi, 1JNLi and 2JLiLi NMR coupling constants have been calculated for various homogeneous and heterogeneous aggregates of methyllithium and lithium dimethylamide at the HF and MP2 levels of calculation. Etheral solvation has also been taken into account either through a continuum model or through the explicit introduction of Me<sub>2</sub>O molecules. The results obtained are in good general agreement with the experimental data available for methyllithium itself or model alkyllithiums and supports the empirical rule proposed by Bauer, Winchester and Schleyer to evaluate 1JCLi provided that calculations include solvent and/or aggregation effects.</p> <p>Mots-cles: ab initio, NMR coupling constants, correlation, aggregation, solvation.</p>	<p>O. Parisel, C. Fressigné, J. Maddaluno, C. Giessner-Prettre J. Org. Chem. 2003, 68, 1290-1294</p>
<p>"Multinuclear MNR study of the aggregate between methyllithium and lithium bromide in toluene"</p> <p>Resume: A set of high-field, low-temperature NMR experiments has been conducted on various mixtures of Me<sub>6</sub>Li and 6LiBr in toluene. All the <sup>6</sup>Li and <sup>1</sup>H signals of the (MeLi)<sub>n</sub>(LiBr)<sub>4-n</sub> aggregates were unambiguously assigned via one- and two-dimensional (HOESY and COSY) experiments. The influence of the MeLi/LiBr ratio on the concentration of these different aggregates in solution was then studied. The data suggest that the populations of the five possible complexes follow an almost purely statistical distribution with the exception of the MeLi(LiBr)<sub>3</sub> species. The later, which was found to be less abundant than expected, is also less favored on the basis of aggregation energies obtained from Density Functional Theory calculations.</p> <p>Mots-cles: multinuclear NMR, aggregation, ab initio calculations, solvation.</p>	<p>S. Desjardins, K. Flinois, H. Oulyadi, D. Davoust, C. Giessner-Prettre, O. Parisel, J. Maddaluno Organometallics 2003, sous presse</p>

### Laboratoire de Mécanique Energétique – Université de Valenciennes

#### Projet 1998 057 : Résolution des équations de Navier-Stokes sur des maillages cartésiens avec raffinement local et auto adaptation

"Self-Organizing Hybrid Cartesian Grid Generation and Solutions for Arbitrary Geometries"

*Deister F., Rocher D., Hirschel E. H., Monnoyer F. Numerical Flow Simulation II, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 75, Springer, Berlin-Heidelberg-New-York, ISBN 3-540-41608-0, p. 19-33., 2001*

### Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés – CNRS – Université d'Orléans

#### Projet 2000 011 : Sources plasmas de traitement de matériaux

"Molecular Dynamics simulations of palladium thin film growth on flat and rough surface"

*P. Brault, G. Moebs  
Soumis au journal Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2003*

"Ion extraction from a helicon source and PIC simulation" - résumé :  
The design of an ion extraction system often requires the help of computer codes. This article describes an experimental setup based on a helicon source equipped with a three-grid extraction system and that is used as an ion source. A numerical approach based on particles in cells (PIC) method is introduced. The results obtained are compared with the simulation and are used in order to validate the computer code. The numerical code is the first component of an ion source design package that deals with grid erosion and ion beam current distribution on the target.

*M. Irzyk, C. Laure, A. Bouchoule  
Plasma Source Sci. Technol., vol 10, pp 463-470, 2001*

"Early stages of silicon nitride film growth studied by molecular dynamics simulations" - résumé :  
The molecular dynamics method is used to simulate silicon nitride film growth through atomic deposition on an amorphous silicon surface, which is modelled by the stochastic classical trajectory-ghost theory. For the first time, realistic semi-empirical interatomic potential including both two-body and three-body interactions is employed to calculate the forces among deposited atoms. By the simulation we studied growth kinetics and the effects of substrate temperature and kinetic energy of vaporized atoms on the film growth. It is found that the film growth follows power law mechanism but with two different growth exponents in different growth stages, and changes of the substrate temperature and atomic kinetic energy lead to various film morphologies. This provides a possibility to precisely control the film properties, especially cluster size and compactness, by choosing suitable deposition parameters.

*X-Y. Guo, P. Brault  
Surface Science, vol 488, pp 133-140, 2001*



**Laboratoire de Thermocinétique – ISITEM Nantes****Projet 1998 023 : Etude de l'intensification des transferts par advection chaotique dans le sillage d'un cylindre en mouvement périodique**

"Use of chaotic advection regime for a heat exchanger and comparison with a regular regime for a large Reynolds number range"

*C. Chagny, C. Castelain, H. Peerhossaini  
J. Applied Thermal Engineering, vol 20, no 17,  
pp 1615-1648, 2000*

**LESP – CORIA – Université et INSA de Rouen****Projet 2002 003 : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses**

"Interaction between ultra short pulses and a dense scattering medium by Monte Carlo simulation : consideration of particle size effect"

*C. Rozé, T. Girasole, L. Mées, G. Gréhan, L. Hespel and A. Delfour  
Optics Communications, 220 (2003), 237-245*

**IRCOF****Projet 1998 034 : Structure et stabilité de complexes entre amidures de lithium et leurs partenaires réactionnels.**

Fate of  $\text{CH}_2=\text{CHE}$  ( $\text{E}=\text{H}$ ,  $\text{Ome}$ ) in the Presence of Unsaturated  $\text{Ru}(\text{X})(\text{H})\text{L}_2\text{q}^+$  ( $\text{X}=\text{Cl}$ ,  $\text{q}=0$ ;  $\text{X}=\text{CO}$ ,  $\text{q}=1$ ): Highly Sensitive to X and E  
DFT(B3PW91) calculations have been carried out to discuss the role of the ancillary ligand X on the transformations of ethylene and vinyl ether by  $\text{RuHX}(\text{PH}_3)_2\text{q}^+$  ( $\text{X}=\text{Cl}$ ,  $\text{q}=0$ ;  $\text{X}=\text{CO}$ ,  $\text{q}=1$ ). This study follows the experimental results presented in the preceding paper. The energy of isomerization of the vinyl ether adduct into an alkoxy-stabilized carbene complex is insensitive to the nature of X, whereas the energy of isomerization of the ethylene adduct into the ethylidene complex depends significantly on X. This is interpreted as competing donations from both the metal fragment and the alkoxy group into the empty p orbital of carbene. The insertion of an olefin into the Ru-H bond to make an unsaturated 14-electron alkyl complex is calculated to be strongly endothermic for Cl and much less so for CO. This is shown to be associated with the greater stability of the olefin adduct in the presence of Cl. Insertion of methyl vinyl ether follows the same rules as ethylene. This accounts for the direct (vinyl ether) or indirect (ethylene) experimental observation of alkyl complexes with CO. The regioselectivity of the insertion is discussed, and it is shown that the methoxy group prefers to go to the  $\alpha$  carbon of the ethyl skeleton unless a direct  $\text{Ru}\dots\text{O}\backslash\beta$  interaction forming a four-member ring is possible. An energy decomposition on a model system  $\text{Ru}(\text{H})(\text{X})(\text{PH}_3)_2(\text{OMe}_2)\text{q}$  ( $\text{X}=\text{Cl}$ ,  $\text{q}=0$ ;  $\text{X}=\text{CO}$ ,  $\text{q}=1$ ) is used to evaluate the electrostatic contribution to the  $\text{Ru}\dots\text{O}$  interaction.

*Helene Gerard,  
Eric Clot, Claude  
Giessner-Prettre,  
Kenneth G.  
Caulton, Ernest R.  
Davidson and  
Odile Eisenstein  
Organometallics,  
vol 19, pp 2291-  
2298, 2000*

## GSMA Université de Reims

Projet 2000 005 : **Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique : réactivité des radicaux alcoxyles**

et 2001 005 : **Etude fondamentale d'intérêt atmosphérique : "détermination des surfaces d'énergie potentielle et de moment dipolaire de la molécule H<sub>2</sub>S".**

A CASPT2 study of the dipole moment surfaces of hydrogen sulphide molecule

Abstract :

The ability of the CASPT2 method to yield accurate H<sub>2</sub>S dipole moment surfaces that could be further used for conclusive predictions about rovibrational calculations, has been evaluated using ANO-L basis set. The optimised geometry, permanent dipole moment, linearity barrier as well as general features of the I<sub>x</sub> and I<sub>z</sub> dipole moment components in the vicinity of the equilibrium conformation agree favourably with available empirical determination and with recent accurate ab initio calculations. Dipole moment functions behaviour is also well reproduced for those geometrical conformations which are far from equilibrium in dissociation path. Computational technical aspects are discussed.

*E. Henon\*, T. Cours,  
V.I.G. Tyuterev  
Chem. Phys. Lett.  
367 (2003) 284*

Features of the potential energy surface for the reaction of OH radical with acetone

The mechanism of the reaction of OH with acetone has been studied by quantum chemical computations. 21 stationary points (among them reactant complexes, reaction transition states, intermediate complexes and product complexes) have been characterised on the potential energy surface of the reaction. The MP2 method with 6-31G(d,p) basis set was employed for geometry optimisation. Electronic energies were obtained at the CCSD(T)/6-311G(d,p) level of theory. Hydrogen abstraction was found to occur through two complex mechanisms; no transition state for direct abstraction could be located. Minimum energy path analyses have revealed two distinct pathways which lead to CH<sub>3</sub> (+CH<sub>3</sub>COOH) formation. One of them sets out the abstraction channel and proceeds via intermolecular complexes and the other one involves addition of OH to the carbonyl double bond and subsequent decomposition of the adduct hydroxy-alkoxy radical. The rate limiting steps involve large energy barriers and, consequently, these pathways do not explain the high methyl yields observed experimentally at and below room temperature. Characteristic for the reaction of OH with acetone is the existence of numerous hydrogen-bridged complexes on the potential energy surface that are stabilised by as much as 3.2-26.6 kJ mol<sup>-1</sup> binding energy. Some properties of these complexes and their possible role in the molecular mechanism of the reaction are discussed.

*E. Henon\*, S.  
Canneaux, F. Bohr  
and S. Dobé  
Phys. Chem. Chem.  
Phys. 5 (2003) 333*

Theoretical study of photochemical processes involving singlet states of formaldehyde carbonyl oxide in the atmosphere

Abstract :

We report a theoretical study on the photochemical reactivity of formaldehyde carbonyl oxide H<sub>2</sub>COO, a compound of atmospheric relevance. Calculations are carried out at the CASSCF and CASPT2 levels with extended basis sets. We are particularly interested in three important unimolecular processes: isomerization into dioxirane, syn/anti isomerization and dissociation into formaldehyde and atomic oxygen. The results suggest that the photochemical reactivity of H<sub>2</sub>COO in the troposphere is strongly linked to the properties of the second singlet excited state a<sup>1</sup>A<sub>0</sub> because it is energetically accessible from the ground state and has a large oscillator strength. Construction of potential energy curves reveals that photochemical isomerization into dioxirane is very unlikely to occur whereas syn/anti isomerization should be favourable. Besides, in the a<sup>1</sup>A<sub>0</sub> state, carbonyl oxide spontaneously dissociates into formaldehyde H<sub>2</sub>CO and atomic oxygen O(<sup>1</sup>D) in close relationship to the excited <sup>1</sup>B<sub>2</sub> state of the isoelectronic ozone molecule occurring in Hartley's band.

*P. Aplincourt, E.  
Henon\*, F. Bohr\*, M.F.  
Ruiz-Lopez  
Chemical Physics 285  
(2002) 221*

.../...

## GSMA Université de Reims

<p><b>Reaction and complex formation between OH radical and acetone</b></p> <p><b>Abstract :</b> Kinetics and mechanism of the reaction of OH with have been studied by discharge-flow CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub> experiments and CCSD(T) quantum chemical computations. In the experiments, the rate coefficient for the overall reaction, (1), and the branching ratio for the specific reaction channel OH+CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub>→products (1a) have been determined to be cm<sup>3</sup> OH+CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub>→CH<sub>2</sub>C(O)CH<sub>3</sub>+H<sub>2</sub>O k<sub>1</sub>[(1.04<sup>+0.03</sup>)]10<sup>11</sup> mol<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> and respectively (T=298 K). Two different reaction pathways have C<sub>1</sub>a/k<sub>1</sub>a/k<sub>1</sub>0.50<sup>+0.04</sup>, been characterized by ab initio calculations. Both H atom abstraction and OH addition to the C=O group have been found to occur through hydrogen bonded complexes. Most of our results OH+CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub> support recent findings (M. Wollenhaupt, S. A. Carl, A. Horowitz and J. N. Crowley, J. Phys. Chem. A, 2000, 104, 2695; M. Wollenhaupt and J. N. Crowley, J. Phys. Chem. A, 2000, 104, 6429) but contradictions remain concerning the mechanism of this atmospherically important reaction.</p>	<p>G. Vasvari, I. Szilagyi, A. Bencsura, S. Dobe*, T. Berces, E. Henon* Phys. Chem. Chem. Phys. 3 (2001) 551</p>
<p><b>Rate Constants for the Reactions of CH<sub>3</sub>O with Cyclohexane, Cyclohexene, and 1,4-Cyclohexadiene: Variable Temperature Experiments and Theoretical Comparison of Addition and H-Abstraction Channels</b></p> <p><b>Abstract :</b> First kinetic measurements for CH<sub>3</sub>O reactions have been obtained for three cyclohydrocarbons using the discharge flow reactor combined with the laser induced fluorescence technique to detect CH<sub>3</sub>O radicals over the pressure and temperature ranges 1-7 Torr of helium and 300-513 K. Measurements have been performed for the cyclohydrocarbons c-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> (k<sub>1</sub>), c-C<sub>6</sub>H<sub>10</sub> (k<sub>2</sub>), and 1,4-c-C<sub>6</sub>H<sub>8</sub> (k<sub>3</sub>). In addition to the experimental work, we have performed ab initio molecular orbital computations to get an insight into the mechanism of the three reactions, using PMP2, HF-DFT (B3LYP), and CASPT2 methods. The rate constant k<sub>1</sub> has been calculated using the Transition State Theory. Measured rate constants are pressure independent in our experimental range. Arrhenius expressions are (k<sub>1</sub> in cm<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>) k<sub>1</sub> ) 8.8(-5.0 +11.0) 10<sup>-12</sup> exp[-(24.5 ( 3.0) kJ mol<sup>-1</sup>/RT)] (403-513 K), k<sub>2</sub> ) (3.1 ( 0.8) 10<sup>-12</sup> exp[-(15.3 ( 0.8) kJ mol<sup>-1</sup>/RT)] (300-503 K), and k<sub>3</sub> ) 1.9(-0.9 +1.6) 10<sup>-12</sup> exp[-(7.6 ( 1.9) kJ mol<sup>-1</sup>/RT)] (300-513 K). A good agreement between the experimental and theoretical rate constants k<sub>1</sub> has been found. The comparison between the computed and the experimentally determined barrier heights serves as an endorsement of the increasing reactivity in the series from cyclohexane system to the 1,4-cyclohexadiene system.</p>	<p>N. Gomez, E. Henon, F. Bohr and P. Devolder J. Phys. Chem. A 105 (2001) 11204</p>
<p><b>Theoretical study of the H-abstraction reaction of the CH<sub>3</sub>O radical with formaldehyde</b></p>	<p>E. Henon, F. Bohr Chem. Phys. Lett. 342 (2001) 659</p>
<p><b>Degradation of three oxygenated alkoxy radicals of atmospheric interest: HOCH<sub>2</sub>O, H<sub>3</sub>COCH<sub>2</sub>O, H<sub>3</sub>COCH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>O : RRKM theoretical study of the β-C—H bond dissociation kinetics</b></p>	<p>E. Henon, F. Bohr, N. Sokolowski-Gomez and F. Caralp soumis a PCCP</p>

## Groupe de Modélisation et Réactivité Chimique UMR 6519 – Université de Reims

<p>Projets 1999 009 : <b>Etude de la Thermolyse d'énaminoester</b> 1999 010 : <b>Condensation aldolique.</b> et 2001 003 : <b>Chimie organométallique : réactions d'insertions</b></p>	
<p><b>Theoretical Study of Intramolecular Aldol Condensation of 1,6-Diketones : Trimethylsilyl Substituent Effect</b></p>	<p>J-P. Bouillon, C. Portella, J. Bouquant, S. Humbel J. Org. Chem, vol 65, pp5823-5830, 2000</p>
<p><b>Palladium-catalysed oxidation of alcohols to carbonyl compounds with 1,2-dichloroethane as the primary oxidant : a theoretical study</b></p>	<p>G. Rothenberg, S. Humbel, J. Muzart J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, pp 1998-2004, 2001</p>

## Publications avec comité de lecture

Specific solvent effect on R <sub>2</sub> ZrCl <sub>2</sub> (R=butyl, ethyl) reactivity, a density functional study	E. Derat, J. Bouquant, P. Bertus, J. Szymoniak, S. Humbel <i>J. Organomet. Chem.</i> , vol 664, pp 268, 2002
Configurational Stability of Chlorophosphines	S. Humbel, C. Bertrand, C. Darcel, C. Bauduin, S. Juge <i>Inorg. Chem.</i> , vol 42, no 2, pp 420-427, 2003
Trans-Bis-[(-)-ephedrinat]-palladium <sup>II</sup> Complex: Synthesis and Molecular Modeling	S. Bouquillon, S. Humbel, F. Hénin, and J. Muzart <i>J. Organomet. Chem.</i> 2003, sous presse

## Laboratoire POMA UMR-CNRS 6136 - Université d'Angers

Projet 2000 018 : **Etude par simulation de Dynamique Moléculaire de matrice vitreuses dopées terres rares : structure et propriétés optiques du germanosilicate et du titanosilicate.**

Simulation by molecular dynamics of erbium-activated silica-titania glasses	C. Bernard, S. Chaussedent, A. Monteil, M. Montagna, L. Zampedri and M. Ferrari <i>J. Sol-Gel Science and Technology</i> 26 (2003) 925.
Molecular dynamics simulation of an erbium-activated titania-silica glass: composition influence on the structural properties	C. Bernard, S. Chaussedent, A. Monteil and M. Ferrari <i>Philos. Mag. B</i> 82 (2002) 681.

## Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs UPR 4211 – CNRS Université d'Orléans

Projet 1999 022 : **Modélisation de l'atomisation secondaire et de la vaporisation de gouttes de Lox**

Modeling of the Break-up of Liquid Oxygen Droplets for Application in a Cryogenic Rocket Engine Simulation Code	E. Bodèle, I. Gökalp, S. Zurbach and D. Saucereau <i>AIAA</i> 2002-4031
Modeling Droplet Break-up Effects For High-Pressure Cryogenic Spray Combustion Codes	I. Gökalp, R. Cousty, B. Vieille, E. Bodèle, I. Fedioun, D. Saucereau, S. Zurbach <i>AIAA</i> -2000-3496
Modélisation et simulation de l'atomisation secondaire des gouttes d'oxygène liquide à haute pression	E. Bodèle, I. Gökalp, B. Vieille, I. Fedioun, D. Saucereau, S. Zurbach <i>Combustion</i> , vol 2(3), pp. 191-230, 2003

**Laboratoire d'Aérodynamique UPR 9020 – CNRS Université d'Orléans****Projet 2000 003 : Simulation des Gaz Réactifs et Ionisés (SIGARIO)**

Transport dans un Couette plan à basse pression et haute température	<i>Lefrançois E., Izrar B. XVIème Congrès Français de Mécanique, 3-7 septembre 2001, Nancy, France</i>
Phénomènes de diffusion dans les Mélanges de Gaz Polyatomiques à Haute Température	<i>Omeïri D., Izrar B. XVIème Congrès Français de Mécanique, 3-7 septembre 2001, Nancy, France</i>
Les écoulements cisailés à haute enthalpie en régime raréfié », Colloque "Ecoulements Complexes	<i>Lefrançois E., Izrar B. 14-15 juin 2001, Orléans, France</i>
Coefficients de transport dans un gaz en régime transitionnel hors d'équilibre vibrationnel et rotationnel	<i>Lefrançois E., Izrar B. VIIIème Congrès Plasma de la Société Française de Physique, 28-30 mars 2001, Piriac sur Mer, France</i>

**Laboratoire de Mécanique – Université du Havre****Projet 1998 040 : Modélisation numérique du bruit, émis par une hélice aérienne**

Vibrations induites d'un pendule hydrodynamique	<i>Yann Roux, Elie Rivoalen et Benoît Marichal . R. Acad. Sc. Paris t. 328, Série iib, p. 829-834, 2000</i>
---	---

**Laboratoire d'Informatique – Université du Mans****Projet 1999 004 : Modélisation de nanostructures ferromagnétiques.**

Parallelizing generalized LSD calculations on real space grids : application to the spin structure of transition metal clusters	<i>F. Calvayrac Comp. Mat. Sci., 1999</i>
---	---

## Laboratoire de Physique des Matériaux – Université de Nancy

## Projet 2000 015 : Influence du désordre dans les transitions de phase à trois dimensions.

Softening of first order transition in 3D by quenched disorder	Christophe Chatelain, Bertrand Berche, Wolfhard Janke and Pierre Emmanuel Berche <i>Phys. Rev. E</i> , vol 64, 2001, 036120-1--036120-4
Influence of dilution on the strong first-order phase transition of the 3D 4-state Potts model	Christophe Chatelain, Pierre Emmanuel Berche, Bertrand Berche and Wolfhard Janke <i>Comp. Phys. Comm.</i> , vol 147, 2002, pp 431-434
3D bond-diluted 4-state Potts model: a Monte Carlo study	Christophe Chatelain, Pierre Emmanuel Berche, Bertrand Berche and Wolfhard Janke <i>Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)</i> , vol 106, 2002, pp 899-901
Phase transitions in disordered ferromagnets	Wolfhard Janke, Pierre-Emmanuel Berche, Christophe Chatelain and Bertrand Berche <i>NIC series 2004 Springer</i>
Size effect on magnetism of Fe thin films in Fe/Ir superlattices	Stephane Andrieu, Christophe Chatelain, Mohammed Lemine, Bertrand Berche and Philippe Bauer <i>Phys. Rev. Lett.</i> , vol 86, 2001, pp 3883-3886

## Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire – Université de Médecine de Paris

## Projet 1998 053 : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable

Complexes of Pentahydrated $Zn^{2+}$ with Guanine, Adenine and the Guanine-Cytosine and Adenine-Thymine Base Pairs. Structures and Energies Characterized by Polarizable Molecular Mechanics and ab Initio Calculations	Nohad Gresh, Jiri Sponer <i>J. Phys. Chem.</i> , 1999, 103
Electronic distribution influence on molecular mechanics results	N. Gresh, O. Parisel, et C. Giesner-Prettre <i>J. Mol. Struct. (TEOCHEM)</i> 458, 27, (1999)
Joint quantum chemical and polarizable molecular mechanics investigation of formate complexes with penta and hexahydrated $Zn^{2+}$ . Comparison between the energetics of model bidentate, monodentate, and through-water $Zn^{2+}$ binding modes and evaluation of nonadditivity effects	G. Tiraboschi, B.P. Roques et N. Gresh <i>J. Comput. Chem.</i> 20, 1379, (1999)
A joint ab initio and molecular mechanics investigation of polycoordinated $Zn^{2+}$ complexes with model hard and soft ligands. Variations of the binding energy and of its components with the number or the charges of the ligands	G. Tiraboschi, N. Gresh, C. Giesner-Prettre, D.W. Deerfield et L.G. Pedersen <i>J. Comput. Chem.</i> , <i>J. Comput. Chem.</i> , 21, 1011-1039 (2000)

.../...



## Publications avec comité de lecture

Interaction of neutral and zwitterionic glycine with $Zn^{2+}$ in the gas phase : ab initio and SIBFA molecular mechanics calculations	F. Rogalewicz, G. Ohanessian et N. Gresh <i>J. Comput. Chem., J. Comput. Chem.</i> , 21, 963-973 (2000)
Many-body effects in hydrogen-bonded peptide networks and their contributions to ligand binding : a comparison of DFT and polarizable molecular mechanics	H. Guo, N. Gresh, B.P. Roques et D.R. Salahub <i>J. Phys. Chem., Biopolymers</i> 45, 405-425, 1998
Parallel ab initio and molecular mechanics investigation of polycordinated Zn (II) complexes with model hard and soft ligands : variations of binding energy and of its components with number and charges of ligands	G. Tiraboschi, N. Gresh, C. Giesner-Prettre, L.G. Pedersen, D.W. Deerfield <i>J. Comput. Chemis.</i> , Vol 21, NB 12, 1011-1039 (2000)
Intramolecular chelation of $Zn^{2+}$ by $\alpha$ - and $\beta$ -mercaptocarboxamides. A parallel ab initio and polarizable mechanics investigation. Assessment of the role of multipole transferability	G. Tiraboschi, MC Fournié-Zaluski, BP Roques et N. Gresh <i>J. Comput. Chem.</i> , 22, 1038 (2001)
Modelling Copper(I) complexes : SIBFA molecular mechanics versus ab initio energetics and geometrical arrangements	N. Gresh, C. Policar et C. Giesner-Prettre <i>J. Phys. Chem. A</i> , 106, 5660 (2002)
Structure of the first-shell active site in metallolactamase : Effect of water ligands	M. Krauss, HSR Gilson, et N. Gresh <i>J. Phys. Chem. B</i> , 104, 33 (2001)
Binding of D- and L-captopril inhibitors to metallo- $\beta$ -lactamase studied by polarizable molecular mechanics and quantum mechanics	J. Antony, N. Gresh, L. Olsen, L. Hemmingsen, CJ Schofield et R. Bauer <i>J. Comput. Chem.</i> , 23, 1381 (2002)
Theoretical study of hydrated cations $Zn(II)$ and $Mg(II)$ to guanosine 5' monophosphate. Towards polarizable molecular mechanics for DNA and RNA	N. Gresh, J. E. Sponer, J. Leszczynski, J. Sponer <i>J. Phys. Chem.</i>

## 2 Posters

### IRCOF UMR 6014 CNRS – Université de Rouen

#### Projet 2002 004 : Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène

*"Étude par spectrométrie de masse ESI et calculs théoriques de complexes anioniques thiomolybdiques"*

Résumé :

Les complexes anioniques thiomolybdiques à ligands dithiolène de type  $[Mo_2(O)_2(\mu-S)_2(\mu^2-S_2)(\mu^2-S_2C_2R_2)]^{2-}$  sur lesquels porte cette étude sont des molécules nouvelles dont les intérêts sont multiples. Il s'agit en effet de complexes présentant, des centres métalliques avec des sphères de coordinations asymétriques dont les propriétés sont recherchées tant pour leur activité catalytique que pour la modélisation de sites actifs de certaines enzymes. Ils sont en outre utilisés comme additifs dans les huiles de moteur afin d'augmenter leurs propriétés lubrifiantes.

La caractérisation de ces composés nouveaux présente cependant des difficultés car ils sont parfois difficiles à isoler et ne donnent pas toujours de cristaux analysables par diffraction des rayons X.

La spectrométrie de masse ESI en mode négatif s'avère alors une méthode efficace. A l'aide des rapports  $m/z$  mais aussi du massif isotopique caractéristique du molybdène, elle permet d'obtenir rapidement la formule brute des composés à partir de mélanges des différents produits de réactions.

Pour caractériser plus avant ces produits nous avons entrepris une étude menant en parallèle des expériences de fragmentations induites par collision, et des calculs théoriques d'orbitales moléculaires. La conjonction de ces résultats devrait permettre d'interpréter les fragmentations observées d'un point de vue structural et énergétique. L'interprétation des fragmentations en phase gazeuse d'ions inorganiques et organométalliques obtenues par électrobulbisation est en effet encore peu connue. Elle suscite cependant un intérêt grandissant du fait des processus d'oxydo-réduction internes observés pour ce type de composés, avec en particulier des changements possibles du degré d'oxydation du métal et/ou des ligands aussi bien au cours de la synthèse que des fragmentations. De plus, l'étude des processus de fragmentation des complexes thiomolybdiques pourra nous permettre d'améliorer la mise au point des voies de synthèse, en aidant dans la compréhension des phénomènes de transferts électroniques et notamment en permettant l'identification des unités les plus stables.

Sont présentés ici les résultats préliminaires obtenus à partir d'un spectromètre de masse à analyseur quadripolaire dans lequel nous avons suivi l'intensité relative des espèces ioniques en fonction de la différence de potentiel au niveau du cône d'extraction. Ceux-ci sont corrélés aux résultats de calculs par DFT sur les différents produits et fragments ioniques observés.

H. Lavanant, C. Fressigné, C. Simonnet-Jégat, F. Sécheresse, C. Giessner-Prettre  
19èmes journées françaises de spectrométrie de masse, Chaville, France, 17-20 Septembre 2002



### Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 Université de Rouen

#### Projet 1998 037 : Modélisation de POTTS dans le pavage octogonal

"Etude des effets de la quasi périodicité sur une transition du premier ordre"	D. Ledue <i>Journées "Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre : Interface Simulation / Expérience", Jussieu (8-9/06/1999)</i>
--	--

#### Projet 1998 043 : Propriétés magnétiques de multicouches

"Magnetic properties of Dy/Tb superlattices : A Monte Carlo investigation"	P. Verdier and D. Ledue <i>First Seeheim Conference on Magnetism, Seeheim (Germany) (9-13/09/2001)</i>
"Propriétés magnétiques de super réseaux Tb/Dy : Etude par simulations numériques Monte Carlo"	P. Verdier et D. Ledue <i>7ème Colloque Louis Néel, Dourdan (8-9/03/2001)</i>

#### Projet 1999 001 : Perturbations aperiodiques et aléatoires du modèle de POTTS à 2 dimensions.

"Influence of aperiodic perturbations on the critical behaviour of the Potts model for $q=3,4$ "	P.E. Berche, W. Janke <i>International Conference on Statistical Physics (STATPHYS 20 - IUPAP), Paris, France, 20-25 Juillet 1998</i>
"Critical behaviour of the 2d Potts model perturbed by aperiodic sequences"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO 24), Wittenberg, Allemagne, 8-10 Mars 1999</i>
"Étude par simulation Monte Carlo du comportement critique du modèle de Potts perturbé par des séquences aperiodiques"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Journées de Simulation Numérique : Interface Simulation/Expérience (5ème édition), Paris, France, 8-9 juin 1999</i>

#### Projet 1999 006 : Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V

"Precipitation and ordering kinetics in the ternary Ni-Al-V system"	H. Zapolsky, D. Blavette and L.Q. Chen <i>International Conferences of Theoretical Physics, Paris, Unesco, 22-27 July, 2002</i>
"Numerical simulation of kinetics in the ternary systems"	H. Zapolsky, D. Blavette and L.Q. Chen <i>Thermodynamics, Microstructures and Plasticity, NATO Advanced Study Institute, Frejus, France, September 2-13, 2002</i>

.../...

### Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 Université de Rouen

#### Projet 2000 006 : Propriétés magnétiques des "nanoparticules"

"Simulation Monte Carlo du retournement d'aimantation thermiquement activé dans une nanoparticule ferromagnétique"	D. Ledue et P.E. Berche <i>Journées "Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre : Interface Simulation / Expérience", Jussieu, Paris (27-28/05/2002)</i>
"Propriétés magnétiques sous champ d'une nanoparticule : Etude par simulations Monte Carlo"	D. Ledue et P.E. Berche <i>Journées "Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre : Interface Simulation / Expérience", Jussieu, Paris (31/05-1/06/2001)</i>

#### Projet 2000 007 : Influence de la présence d'impuretés non magnétiques sur la transmission de phase du modèle d'Ising tridimensionnel

"Diagramme de phase et comportement critique du modèle de Potts tridimensionnel dilué"	C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche, W. Janke <i>Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre, Paris, France, 5-7 Juin 2000</i>
"Propriétés critiques du modèle d'Ising tridimensionnel en présence d'impuretés non magnétiques"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre, Paris, France, 5-7 Juin 2000</i>
"Influence of non-magnetic impurities on the critical properties of the 3D Ising Model"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO 25), Pont-a-Mousson, France, 9-11 Mars 2000</i>
"Bond dilution in the 3D Ising model"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO 26), Prague, 8-10 Mars 2001</i>
"Critical properties of the 2D and 3D diluted Potts model"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO 26), Prague, 8-10 Mars 2001</i>
"Modèles de Potts et d'Ising dilués en trois dimensions"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre, Paris, France, 31 Mai-1er Juin 2001</i>
"Critical properties of the bond-diluted Ising Model in three dimensions"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Europhysics Conférence on Computational Physics (CCP'2001), Aachen, Allemagne, 5-8 Septembre 2001</i>
"Monte-Carlo study of the bond diluted 3D 4-state Potts model"	C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche, W. Janke <i>SIMU Conférence : Challenges in Molecular Simulations (Europe Science Foundation Conférence), Constance, Allemagne, 10-13 Septembre 2001</i>
"Transitions de phase dans les systèmes désordonnés"	P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke <i>Congrès Général de la Société Française de Physique, Lyon, France, 7-10 Juillet 2003</i>

## GSMA Université de Reims

Projet 2000 005 : **Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique : réactivité des radicaux alcoxyles**  
 et 2001 005 : **Etude fondamentale d'intérêt atmosphérique : "détermination des surfaces d'énergie potentielle et de moment dipolaire de la molécule H<sub>2</sub>S"**.

Degradation of three oxygenated alkoxy radicals of atmospheric interest: HOCH <sub>2</sub> O, H <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> O, H <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> O : RRKM theoretical study of the $\beta$ -C—H bond dissociation kinetics	<i>E. Henon, N. Sokolowski-Gomez, F. Bohr, F. Caralp</i> <i>Chemical Reactivity: from gas-phase to solute and enzymes: An international conference in honor of Professor J.L. Rivail, Nancy, France, July 16-18-2003</i>
Features of the potential energy surface for the reaction of OH radical with acetone	<i>E. Henon, S. Canneaux, F. Bohr, S. Dobé</i> <i>17<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics, Essen, Allemagne, 24-29 août 2002</i> et <i>Workshop of the EUROTRAC-2 subproject "Chemical Mechanism Development (CMD), Paris, 9-11 septembre 2002</i>
Détermination de la surface de moment dipolaire CASPT2 de H <sub>2</sub> S en vue de la modélisation des bandes rovibrationnelles et des anomalies de son spectre infrarouge	<i>T. Cours, E. Henon, V.I.G. Tyuterev, A. Hamdouni</i> <i>3<sup>ème</sup> Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Strasbourg, 4 mai 2001</i>
Réactivité de l'acétone vis à vis des radicaux OH et H	<i>S. Canneaux, F. Bohr, E. Henon, et S. Dobé</i> <i>3<sup>ème</sup> Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Strasbourg, 4 mai 2001</i>
« Rate constants of the reactions of CH <sub>3</sub> O with cyclohexane, cyclohexene and 1,4-cyclohexadiene: experiments and ab initio studies »	<i>N. Gomez, B. Hanoune, P. Devolder, E. Henon, F. Bohr, S. Canneaux</i> <i>16<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics, Cambridge, 23-27 juillet 2000</i>
CH <sub>3</sub> O reactivity: Theoretical Study of Atmospheric Reactions involving Addition or H-Abstraction Processes	<i>E. Henon, S. Canneaux, F. Bohr, N. Gomez and P. Devolder</i> <i>X<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry, Menton, 5-10 juin 2000</i>
Réactions de CH <sub>3</sub> O avec quelques alcènes: mesures de constantes de vitesse et calculs ab initio sur la réaction modèle CH <sub>3</sub> O + propène	<i>N. Gomez, B. Hanoune, P. Devolder, F. Bohr, S. Canneaux, E. Henon</i> <i>Colloque de prospective du PNCA, Clermont Ferrand, 1-3 décembre 1999</i>
Chimie et photochimie atmosphérique de l'oxyde de carbonyle H <sub>2</sub> COO: Etude de quelques processus unimoléculaires et bimoléculaires	<i>P. Applincourt, E. Henon, F. Bohr et M. F. Ruiz-Lopez</i> <i>Deuxième Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Reims, 15 octobre 1999</i>

### Groupe de Modélisation et Réactivité Chimique UMR 6519 – Université de Reims

Projets 1999 009 : **Etude de la Thermolyse d'énaminoester**  
 1999 010 : **Condensation aldolique.**  
 et 2001 003 : **Chimie organométallique : réactions d'insertions**

Étude ab initio du réarrangement thermique d'énaminoester	<i>C. Bertrand, S. Humbel, J. Bouquant SFC Grand Est 1999</i>
Sur la stabilité configurationnelle des chlorophosphines	<i>S. Humbel, C. Bertrand, C. Darcel, C. Bauduin, S. Jugé Journées de Chimie Organique 2001, (JCO-Palaiseau)</i>
Influence du solvant sur la synthèse de catalyseurs au Zr : apports de quelques calculs	<i>E. Derat, J. Bouquant, S. Humbel SFC PACA 2003 (Marseille)</i>
A propos de la formation de chlorophosphines chirales : chemins théoriques	<i>M. Linares, S. Jugé, S. Humbel SFC PACA 2003 (Marseille)</i>
Analyse Théorique de la compétition entre l'hydrométallation et la cyclisation lors de l'attaque de H <sub>2</sub> CO sur ZrCl <sub>2</sub> Et <sub>2</sub>	<i>E. Derat, J. Bouquant, &amp; S. Humbel Grand Est III Chimistes Théoriciens 2003 (Nancy)</i>
A propos de l'effet spécifique de solvant sur la réactivité de dialkyl zirconium	<i>E. Derat, J. Bouquant, P. Bertus, J. Smytoniak, S. Humbel SFC 2002, Toulouse France, juillet 2002</i>

### Laboratoire de Physique des Matériaux – Université de Nancy

Projet 2000 015 : **Influence du désordre dans les transitions de phase à trois dimensions.**

Influence of dilution on the strong first-order phase transition of the 3D 4-state Potts model	<i>Christophe Chatelain, Pierre Emmanuel Berche, Bertrand Berche and Wolfhard Janke CCP: Conference on Computational Physics 2001 Aachen, Allemagne, 5/8-09-2001</i>
Monte Carlo study of the critical behaviour of 2D liquid crystal	<i>A. Farinas and B. BercheMeco 27, "Middle European Cooperation in Statistical Physics" Sopron, Hongrie, 07/09-03-2001</i>
Size effect on magnetism of Fe thin films in Fe/Ir superlattices	<i>Stéphane Andrieu, Christophe Chatelain, Mohammed Lemine, Bertrand Berche and Philippe Bauer MECO 26 : "Middle European Cooperation in Statistical Physics", Prague, République Tchèque, 8/10-03-2001</i>
Two Curie temperatures in a single iron thin film	<i>S. Andrieu, C. Chatelain, M. Lemine, B. Berche and P. Bauer 2001 MRS Fall Meeting, Boston, 26/29-11-2001</i>

### 3 Communications orales

#### Laboratoire de Mathématiques et d'Informatique – INSA de Rouen

#### Projet 1998 008 : Calcul numérique des zéros de polynômes ou fonction analytique sur machine parallèle

<p>"Weyl's complex polynomial root-finding method : a parallel implementation" - résumé :</p> <p>Weyl's algorithm computes a complex polynomial's roots using a geometric construction. It has the advantages of being global, so all roots are computed together, robust, and shows a linear convergence rate right from the start. Its adaptation to parallel programming is especially natural. We present in this paper the results of our implementations on the Origin2000 and T3E computers, focusing on the influence of data location schemes</p>	<p>O. Fanton, B. Gleyse and L. Léger 5<sup>ème</sup> European SGI/Cray MPP Workshop, Bologne, Italie, 9-10 septembre 1999 <a href="http://www.cineca.it/mpp-workshop/abstract/bgleyse.htm">http://www.cineca.it/mpp-workshop/abstract/bgleyse.htm</a></p>
<p>"Approximation des zéros d'un polynôme complexe sur ordinateur parallèle par la méthode de Weyl : comparaison de schémas de distribution de données"</p>	<p>O. Fanton, B. Gleyse and P. Manneback RenPar2000, Rencontres Francophones du Parallélisme des Architectures et des Systèmes, Besançon, 2000</p>

#### Projet 1998 042 : Optimisation d.c. pour le problème de conformation moléculaire. Algorithmes parallèles pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire

<p>"D.C. Programming Approach and Solution Algorithm to the Multidimensional Scaling Problem"</p>	<p>Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao 9th BELGIAN-FRENCH-GERMAN CONFERENCE ON OPTIMIZATION" Namur, 7-11 september 1998</p>
<p>"D.C. Programming Approach for Large Scale Molecular Optimization via the General Distance Geometry Problem"</p>	<p>Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao, International Conference On " Optimization in Computational Chemistry and Molecular Biology: Local and Global Approaches" Princeton University, 7-9 Mai, 1999</p>
<p>"Large Scale Molecular Optimization From Distance Matrices By a D.C. Optimization Approach"</p>	<p>Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao Conférence invitée International Workshop on Applied Analysis &amp; Optimization (AAO' 2000) August 23-27, 2000, Da Nang, Viet Nam</p>
<p>"A continuation approach via Gaussian transformation to the general distance geometry problem"</p>	<p>Le Thi Hoai An International Conference on Optimization : Techniques and Applications, HongKong December 15-18, 2001</p>
<p>"The predictor-corrector DCA for globally solving Large Scale Molecular Optimization from Distance Matrices via reformulations"</p>	<p>Le Thi Hoai An, Dinh Tao Pham 7th International Symposium on Generalized Convexity and Monotonicity, (GCM7), Hanoi, VietNam, August 27-31, 2002</p>
	<p>.../...</p>



### Laboratoire de Mathématiques et d'Informatique – INSA de Rouen

*"Reformulations and dc programming for large scale molecular optimization from distance matrices"*

*Le Thi Hoai An, Pham Dinh Tao  
The First International Conference on Optimization Methods and Software, December 15-18, 2002, Hangzhou, China*

### Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques - CORIA – INSA de Rouen

**Projet 1998 022 : Analyse physique et simulation numérique des écoulements dans des tuyères en présence de décollement**

*"Compressible turbulent flows"*

*A. Hadjadj  
Conférence invitée  
GAMM (Workshop on Numerical Methods in Fluid Mechanics Kirchzarten, (Black Forest) Allemagne, September 27 - 28, 1999*

*"Numerical study of the starting process in a supersonic nozzle" - résumé :*

The present paper is dedicated to the numerical study of both inviscid and viscous phenomena occurring during the starting process of supersonic nozzles. Two configurations experimentally studied by Amann have been considered. Special attention has been paid to the complex evolution of the wave structure and to the induced flow separation. The influence of the shape of the nozzle inlet is pointed out and the computational results are compared with Amann's findings. They are shown to agree well with the experimental results even if they also demonstrate that turbulent computations are needed to accurately predict the shock/boundary layer interaction and the subsequent flow separation.

*A. Hadjadj, A.S. Mouronval  
West East High Speed Flow Fields 2002, D.E. Zeitoun, J. Périaux, J.A. Désidéri and M. Marini (Eds.), CIMNE Barcelona Spain 2002*

*"Numerical study of shock wave reflection phenomena in overexpanded jets"*

*A. Hadjadj, A.N. Kudryavtsev, D. Khotyanovsky, M.S. Ivanov, D. Vandromme  
Proc. of the West East High Speed Flow Field Conference, Marseille, 2002*

*"Transition between regular and Mach shock reflections in plane overexpanded jets" - résumé :*

This paper presents computational results on the transition from regular to Mach reflection in a plane supersonic jet operating under over-expanded conditions. It is assumed that the jet is exhausting from an idealized nozzle providing a uniform flow at the nozzle exit. First, inviscid simulations are performed by solving numerically 2D Euler equations. The results demonstrate that a hysteresis phenomenon is observed as the jet/ambient pressure ratio decreases and increases causing, at first, the transition from regular to Mach reflection and, after that, the back transition. The angles of forward and back transitions are close to the theoretical detachment and to Neumann criteria, respectively.

Further, Navier-Stokes computations with the  $k-\varepsilon$  turbulence model are conducted in order to investigate the transition in a more realistic situation. The computations confirm the existence of the hysteresis and give the transition angles in very good agreement with both the theoretical criteria and the results of inviscid simulations. In fact, turbulence production is essentially concentrated in the jet shear layer and seems to be negligible in the jet core. It justifies the inviscid simulations when studying shock wave reflection in jets.

*A.N. Kudryavtsev, D. Khotyanovsky, M.S. Ivanov, A. Hadjadj, D. Vandromme  
AIAA paper 2002-0977, 40th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, NV, 2002*

.../...

## Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques - CORIA – INSA de Rouen

"Turbulence modeling validation for separated/reattached flows"	A. Hadjadj, A.N. Kudryavtsev <i>XI International Conference on Methods of Aerophysical Research, Novosibirsk, (ICMA R'2002)</i>
"Numerical simulation of complex problems of supersonic aerodynamics with high-order schemes"	A.N. Kudryavtsev, A. Hadjadj <i>XI International Conference on Methods of Aerophysical Research, Novosibirsk, (ICMA R'2002)</i>
"Numerical and experimental investigation of shock wave structures of a supersonic jet"	V.I. Zapryagaev, M.S. Ivanov, A.N. Kudryavtsev, A. Hadjadj <i>International Conference on Methods of Aerophysical Research, Novosibirsk, (ICMA R'2002)</i>
"Numerical simulation of shock wave interactions in supersonic non-isobaric jets"	A.N. Kudryavtsev, A. Hadjadj, D. Khotyanovsky, D. Vandromme, M.S. Ivanov <i>IV International conference on Non-equilibrium Processes in Nozzles and Jets, St.Petersburg, 2002</i>
"Implementation of high-order schemes for simulation of complex supersonic flows"	A.N. Kudryavtsev, D. Khotyanovsky and A. Hadjadj <i>IV International conference on Non-equilibrium Processes in Nozzles and Jets, St.Petersburg, 2002</i>
"Computational study of a plume-induced flow separation on a boattailed afterbody"	A. Chatelain, A. Hadjadj, <i>Proc. of the 4th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, Italy 2001</i>
"Numerical investigation of transient nozzle flow" - résumé : The starting process of two-dimensional and axisymmetric nozzle flows has been investigated numerically. Special attention has been paid to the early phase of the starting process to the appearance of a strong secondary shock wave. For both cases, shock intensities and velocities are obtained and discussed. The flow evolution in the axisymmetric case is proved to be more complex and the transient starting process is slower than in the plane case. Finally, the effects of changing the nozzle angle and the incident shock wave Mach number on the transient flow are addressed. It is shown that a faster start-up can be induced either by decreasing the nozzle angle or increasing the Mach number of the incident shock wave	A.-S. Mouronval, A. Hadjadj, A. Kudryavtsev and D. Vandromme <i>Proc. of the 4th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, Italy 2001</i>
"Further numerical investigations on transition to Mach reflection"	A. Hadjadj, M.S. Ivanov, D. Khotyanovsky, A.N. Kudryavtsev, D. Vandromme <i>European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Barcelona, Sept, 2000</i>
"Progress in the development of a class of efficient low dissipative high order shock-capturing methods"	H.C. Yee, B. Sjogreen, N.D. Sandham, A. Hadjadj <i>Proc. of the Symposium in Computational Fluid Dynamics for the 21st Century, Kyoto, Japan, July 15-17, 2000</i>
"Testing numerical schemes for large eddy simulations of thrust-reversers"	L. Blin, A. Hadjadj and L. Vervisch <i>AIAA paper 99-0787, Reno Meeting 1999</i>
"Separated turbulent jets modeling in the context of aero-engine thrust-reverser"	L. Blin, A. Hadjadj and L. Vervisch <i>4th ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conf., Athènes, 1998</i>

.../...

### Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques - CORIA – INSA de Rouen

"Computation study of nozzle-afterbody flows with propulsive jets"	A. Hadjadj, D. Vandromme 4th ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conf., Athènes, 1998
"Numerical investigation of hysteresis effects and slip surface instability in the steady Mach reflection"	A. Hadjadj, A.N. Kudryavtsev, M.S. Ivanov, D. Vandromme 21st International Symposium on Shock Waves, Edited by Paull Alan, 1998
"Visualisation graphique en mécanique des fluides numérique"	A. Kudryavtsev et A. Hadjadj, Colloque francophone de VISUalisation d'images en mécanique des FLUIDES (FLUVISU), CORIA, 2001
"Couplage fluide-structure appliqué à la propulsion aéronautique et spatiale"	E. Lefrancois, A. Hadjadj, A.-S. Mouronval and D. Vandromme "Towards a New Fluid Dynamics with its Challenges in Aerospace Engineering", NFD 2000 November 20- 22, DASSAULT-AVIATION/CNRS
"Large Eddy Simulation in thrust-reverser"	L. Blin, A. Hadjadj et L. Vervisch 35ème Colloque d'Aérodynamique Appliquée, Lille, 22-24 Mars 1999
"Etude aérodynamique des interactions de chocs dans des jets supersoniques non adaptés"	A. Hadjadj et D. Vandromme 34ème Colloque d'Aérodynamique Appliquée, Marseille, 23-25 mars 1998
"Simulation numérique d'écoulement supersonique turbulent"	A. Hadjadj, A. Nebbache et D. Vandromme 34ème Colloque d'Aérodynamique Appliquée, Marseille, 23-25 mars 1998
"Modélisation instationnaire des écoulements turbulents dans les tuyères de propulseurs"	A. Hadjadj, A.S. Mouronval, S. Dubos et D. Vandromme Séminaire turbulence & lanceurs spatiaux, CNES/AFM, juin 2002
"Mach reflection wave configuration in supersonic jets of overexpanded nozzles"	A. Hadjadj, D. Vandromme and G. Ben-Dor 13th International Symposium on Mach Reflection, Beer Sheva, Israel, 28 June, 1998
"Transition with hysteresis effects between regular and Mach reflection in a 2D supersonic nozzle"	D. Vandromme and A. Hadjadj 13th International Symposium on Mach Reflection, Beer Sheva, Israel, 28 June, 1998
<b>Projet 1998 028 : Simulation numérique directe et modélisation de plasmas d'argon turbulents</b>	
"Numerical and experimental study of supersonic turbulent wake conditions"	B. Van Ootegem, T. Benazzouz, P. Domingo, P. Vervisch First Joint French-German Symposium on Simulation of Atmospheric Entries by means of Ground test facilities. Stuttgart, 17-19 November 1999
"Modeling the coupling between ion recombination and turbulence in an argon plasma using probability density function approach"	T. Benazzouz, P. Domingo 21th international symposium on rarefied gas dynamics, Marseille, France, 1998

.../...



### Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques - CORIA – INSA de Rouen

"Probability density function modeling for a turbulent argon plasma jet"	<i>T. Benazzouz, P. Domingo</i> <i>Third European Symposium on Space Vehicles, ESA (European Space Agency), Netherlands 1998</i>
Studying turbulent plasma using direct numerical simulation and probability density function	<i>P. Domingo, T. Benazzouz, L. Vervisch</i> <i>AIAA paper 98-0982, 36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV</i>

#### Projet 1998 030 : **Simulation directe. Simulation des grandes échelles. Modélisation de la combustion turbulente**

"Separated turbulent jets modeling aeronautical applications" - résumé : The capability of turbulent models to predict the detachment together with the reattachment of turbulent jet is investigated. Four different closures accounting for anisotropy and nonequilibrium effects are utilized. The backward facing step is retained as a generic configuration for those tests, and numerical results are compared with the measurements conducted by Driver and Seegmiller[1]. It is concluded that the multiscale and Shih-Zhu-Lumley A.S.M. Models provide an interesting approximation of the recirculation bubble length. In particular, the superiority of the Shih-Zhu-Lumley is shown close to the reattachment point	<i>L. Blin, A. Hadjadj, L. Vervisch</i> <i>ECCOMAS 98</i> <i>conférence, Athènes, 1998</i>
"Testing Numerical Schemes for Large Eddy Simulations of Thrust-Reversers"	<i>L. Blin, A. Hadjadj, L. Vervisch</i> <i>AIAA 37<sup>th</sup> Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, 11-14 janvier 1999</i>

#### Projet 1999 017 : **Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée dans un brûleur à jets séparés. Application à la stabilisation d'une oxy-flamme**

"Edge flames and partially premixed combustion in diffusion flame quenching"	<i>Favier, V., Vervisch, L.</i> <i>Combust. Flame, 125(1/2), pp.788-803, 2001</i>
"Theoretical and numerical study of a symmetrical triple flame using the parabolic flame path approximation"	<i>Ghosal, S., Vervisch, L.</i> <i>Journal of Fluid Mechanics, 415, pp. 227-260, 2000</i>
"Using numerics to help understanding of nonpremixed turbulent flames"	<i>Vervisch, L.</i> <i>Proc. Combust. Inst, Vol. 28., pp. 11-24, 2000</i>
"Challenges in turbulent combustion modeling"	<i>Vervisch, L.</i> <i>Conférence invitée</i> <i>2001 Joint International Combustion Symposium,</i> <i>Kauai USA, Sept. 10-12, 2001</i>
"DNS to help understanding of non-premixed turbulent flames"	<i>Vervisch, L.</i> <i>Conference invitee</i> <i>Second AFOSR International Conference on DNS and LES, June 7-9. New Brunswick NJ., Kluwer Academic Publishers, Recent Advances in DNS and LES, pages. 49-59, ISBN 0-7923-6004-4, 1999</i>

.../...

### Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques - CORIA – INSA de Rouen

"DNS and LES of non-premixed turbulent combustion"	Vervisch, L. Conference invitee AIChE Annual Meeting, Oct. 31 - Nov. 5 1999, Dallas, TX, USA
"Numerical models for non-premixed turbulent combustion"	Vervisch, L. Plenary Lecture at 17th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, July 25-30 1999, Heidelberg, Germany
"Two-dimensional effects in diffusion flame quenching"	Favier, V., Vervisch, L. GAMM Conference-2000, Göttingen, April 3-6 2000
"Edge flame and partially premixed flamelets in nonpremixed combustion"	Favier, V., Vervisch, L. 8th European Conference on Turbulence, Barcelona, June 27-30 2000. pp. 429-432. Published in <i>Advances in Turbulence VIII</i> , C. Dopazo et al. (Eds), CIMNE, ISBN 84-89925-65-8.
"LES of mixing and flame stabilization in separated jet burners"	Lesieur, C., Domingo, P., Vervisch, L., Labegorre, B. EUROMECH Colloquium 4-12, Munich, Oct. 4-6 2000, pp. 73-74
"Further discussions on characteristic scales in nonpremixed turbulent combustion"	Vervisch, L. Modeling of Reaction Front I, Lyon, April 19-21 1999
"Stabilization of non-premixed turbulent combustion"	Favier, V., Vervisch, L. Japanese & French Conference on DNS and LES, Cargèse 6-8 Oct. (1999)
"Triple-flame and stabilization of non-premixed combustion"	Ghosal, S., Vervisch, L. IMA conference, Minneapolis 27-30 Sept. 1999

### LaRIA – Université de Picardie Jules Vernes

#### Projet 1999 002 : Implantations algorithmes de mises en correspondance de parenthèses sur BSP

"Algorithms for Stable Sorting to Minimize Communications in Networks of Workstations and their Implementations in BSP"	C. Cerin, J-L. Gaudiot IEEE International Workshop on Cluster Computing (IWCC'99), Melbourne, Australie, 2-3 Décembre 1999,
---	--

### Laboratoire de Mécanique Energétique – Université de Valenciennes

#### Projet 1998 057 : Résolution des équations de Navier-Stokes sur des maillages cartésiens avec raffinement local et auto adaptation

"Flow Simulation on Adaptive Cartesian and Hybrid Prismatic-Cartesian Grid around Arbitrary Geometries" - résumé :

An automatic Cartesian and hybrid prismatic-Cartesian grid flow solver is presented together with flow solutions around complicated geometries. The Cartesian computational grid is generated based on an octree representation of the spatial discretization. The solver of the Navier-Stokes equations is a novel second-order accurate upwind flow solver based on a MUSCL-type approach. Acceleration and stability improvements such as local time-stepping, cell-merging and limit pressure- and density-variation have been implemented. As far as the flux formulation and the data structure are concerned, the computer code benefits directly from the octree decomposition of the flow domain. The solution-based grid adaptation is based upon three criteria. Each of them is calculated for every cell, and is used to flag cells for further refinement or coarsening. Section 2 presents the generation process for the Cartesian grid, and section 3 for the Prismatic-Cartesian grid. Section 4 presents the grid adaptation. The new flow solver used in this work for the flow computations is introduced in section 5. Finally, section 6 shows results of flow simulations for the NACA0012 airfoil as well as for the ONERA-M6 wing.

D. Rocher, F. Deister, F. Monnoyer, E.H. Hirschel  
14<sup>th</sup> AIAA CFD Conference,  
28/06-01/07  
1999 Norfolk, Virginia

### Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 Université de Rouen

#### Projet 1998 043 : Propriétés magnétiques de multicouches

"Simulations numériques des propriétés magnétiques de super réseaux Tb/Dy – Comparaison à l'expérience"

P. Verdier et D. Ledue  
Journées "Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre : Interface Simulation / Expérience", Jussieu, Paris (31/05-1/06/2001)

"Monte Carlo investigation of magnetic properties in Fe/Tb multilayers"

L. Veiller, D. Ledue and J. Teillet  
3rd Euroconference on Magnetic Properties of Fine Particles and their Relevance to Materials Science, Barcelona (Spain) (19-22/10/1999)

"Propriétés magnétiques de multicouches Fe/Tb : Etude par simulation Monte Carlo"

L. Veiller, D. Ledue et J. Teillet  
6ème Colloque Louis Néel, Dieppe (3-5/06/1999)

#### Projet 1999 006 : Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V

"Onsager microscopic diffusion equations for the simulation of kinetics of the phase transitions"

H. Zapolsky, D. Blavette and L.Q. Chen  
conférence invitée  
workshop "Phase field simulations", Aachen, 9-10  
avril, 2002

.../...

### Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 Université de Rouen

#### Projet 2000 006 : Propriétés magnétiques des "nanoparticules"

"Etude par simulation Monte Carlo du retournement d'aimantation d'une nanoparticule ferromagnétique avec anisotropie uniaxiale"	<i>D. Ledue et P.E. Berche Colloque Matériaux 2002, Tours (21-25/10/2002)</i>
"Simulation Monte Carlo du retournement d'aimantation d'une nanoparticule ferromagnétique avec anisotropie uniaxiale"	<i>D. Ledue et P.E. Berche Colloque Louis Néel 2002, Gerardmer (24-26/09/2002)</i>
"Propriétés magnétiques sous champ d'une nanoparticule : Etude par simulations Monte Carlo"	<i>D. Ledue et P.E. Berche Meeting GDR POMMES, Gif-sur-Yvette (5-6/04/2001)</i>
"Etude des propriétés magnétiques d'une nanoparticule par simulations Monte Carlo"	<i>D. Ledue, P.E. Berche et F. Petit Journées "Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre : Interface Simulation / Expérience", Jussieu, Paris (5-7/06/2000)</i>

#### Projet 2000 007 : Influence de la présence d'impuretés non magnétiques sur la transmission de phase du modèle d'Ising tridimensionnel

"Influence of dilution on the strong first-order phase transition of the 3D 4-state Potts model"	<i>C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche, W. Janke 19<sup>th</sup> International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2001), Berlin, Allemagne, 19-24 août 2001</i>
"A Monte Carlo study of bond dilution in the Ising and Potts models in 3D"	<i>P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke 2<sup>nd</sup> Workshop on Computational Physics (CompPhys01), Leipzig, Allemagne, 13 décembre 2001</i>
"The random Potts model"	<i>B. Berche, P.E. Berche, C. Chatelain, W. Janke conférence invitée SPHINX European Science Foundation Conférence, Helsinki, Finlande, 17-20 janvier 2002</i>
"Monte Carlo studies of the three-dimensional bond-diluted ferromagnets"	<i>W. Janke, P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche First Joint HRLB and KONWIHR Result and Reviewing, Workshop, Garching, Allemagne, 10-11 Octobre 2002</i>

### Laboratoire de Thermocinétique – ISITEM Nantes

#### Projet 1998 023 : Etude de l'intensification des transferts par advection chaotique dans le sillage d'un cylindre en mouvement périodique

"Limites de l'effet de l'advection chaotique sur les performances thermiques d'un échangeur de chaleur"	C. Chagny, C. Castelain, H. Peerhossaini <i>colloque annuel SFT, Arcachon, Mai 1999</i>
"Etude de l'influence du comportement pseudoplastique en régime d'advection chaotique"	C. Chagny, C. Castelain, H. Peerhossaini <i>14ème congrès français de mécanique AUM, Toulouse, Septembre 1999</i>
"Numerical simulation of Chaotic Advection in an alternated Dean Flow for Complex Fluids"	C. Chagny, C. Castelain, H. Peerhossaini <i>1st International Conference on Simulation in food and Bio Industries, Juin 2000</i>
"The limits of chaotic advection flow regime on convective heat transfer"	C. Chagny, C. Castelain, H. Peerhossaini <i>20th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Chicago, 27 août – 02 septembre 2000</i>

### Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés – CNRS – Université d'Orléans

#### Projet 2000 011 : Sources plasmas de traitement de matériaux

"Simulations par dynamique moléculaire de la croissances de couches minces"	P. Brault, G. Moebs <i>7eme Journées de simulation numérique, Paris 31 mai - 1 juin 2001</i>
"Large-Scale Molecular Dynamics Simulations of Plasma Sputter Deposition"	P. Brault, G. Moebs <i>15th International Symposium on Plasma Chemistry, Orleans, France, 9-13 Juillet 2001</i>
"Simulation par dynamique moléculaire parallèle de la croissance de couches minces"	P. Brault, G. Moebs <i>Matériaux 2002, Tours, France, 21-25 Octobre 2002</i>

## LAME – CORIA – INSA de Rouen

Projet 1998 055 : **Simulation des épisodes de pollution atmosphérique autour d'agglomération**

« Local Refinement around a Pollution Source using a Domain Decomposition Method »

T. Rajaona, M.C. Ciccoli, A. Coppalle  
*Proc. Air Pollution Modelling and Simulation, Champs-sur-Marne, France, October 26-29, 1998, pp. 513-526*« A reactive plume model for the NO-NO<sub>2</sub> transformation close to the stack emission »C. Philippe, A. Coppalle, P. Plion  
*Proc. Air Pollution Modelling and Simulation, Champs-sur-Marne, France, Avril 9-12 2001, pp. 177-186*

## GSMA Université de Reims

Projet 2000 005 : **Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique : réactivité des radicaux alcox y**  
et 2001 005 : **Etude fondamentale d'intérêt atmosphérique : "détermination des surfaces d'énergie potentielle et de moment dyolaire de la molécule H<sub>2</sub>S".**Décomposition de trois radicaux alcoxyle oxygénés d'intérêt atmosphérique: HOCH<sub>2</sub>O, CH<sub>3</sub>OCH<sub>2</sub>O, CH<sub>3</sub>OCH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>O : étude théorique RRKM de la cinétique de dissociation C-HE. Henon, N. Sokolowski-Gomez, F. Bohr, F. Caralp  
*Réunion annuelle du groupe de cinétique et photochimie en phase gazeuse, Orléans, France, 4-5 juin 2003.*

Caractéristiques de la SEP pour la réaction de OH avec l'acétone

E. Henon, S. Canneaux, F. Bohr, S. Dobé  
*Réunion annuelle du groupe de cinétique et photochimie en phase gazeuse, Orléans, 4 juin 2002 ET Congrès Grand-Est SFC, Reims, 15-16 janvier 2003*

Etude théorique du mécanisme de la réaction atmosphérique : OH+acétone→produits

E. Henon, F. Bohr, S. Canneaux, S. Dobe  
*3ème Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Strasbourg, 4 mai 2001*  
et  
*Réunion annuelle du groupe de cinétique et photochimie en phase gazeuse, Lille, France, 11-12 juin 2001*Chimie et photochimie atmosphérique de l'oxyde de carbonyle H<sub>2</sub>COO: Etude de quelques processus unimoléculaires et bimoléculairesP. Aplincourt, E. Henon, F. Bohr, et M. F. Ruiz-Lopez  
*Deuxième Réunion des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Reims, 15 octobre 1999*



### Groupe de Modélisation et Réactivité Chimique UMR 6519 – Université de Reims

Projets 1999 009 : **Etude de la Thermolyse d'énaminoester**  
 1999 010 : **Condensation aldolique.**  
 et 2001 003 : **Chimie organométallique : réactions d'insertions**

Étude théorique et expérimentale de la thermolyse de N-alcoxycarbonylenaminoester	C. Bertrand, S. Humbel Réunion des chimistes théoriciens du Grand Est, 1999
Chlorophosphine Chiral Inversion: Theoretical Study of a Bimolecular Process	S. Humbel York University, Chemistry Dept (2001)
A propos de la racémisation des chlorophosphines, dialogue entre théorie et expérience	S. Humbel Université de Marseille, Département de Chimie (2002)
À propos de la chimie du Zirconium : études DFT	E. Derat Conférence du CR-MM (Marseille 2003)
Hydrozirconation des cétones : une étude DFT	E. Derat, J. Bouquant, P. Bertus, J. Szymoniak, S. Humbel Communication SFC Grand-Est 3 (Reims 2003)
Chlorophosphine easy halide exchange: stereochemistry mechanism & application	S. Humbel, C. Bertrand, C. Darcel, C. Bauduin, S. Juge Communication SFC 2002, Toulouse France, juillet 2002

### Laboratoire POMA UMR-CNRS 6136 - Université d'Angers

Projet 2000 018 : **Etude par simulation de Dynamique Moléculaire de matrice vitreuses dopées terres rares : structure et propriétés optiques du germanosilicate et du titanosilicate.**

Simulation by molecular dynamics of erbium-activated silica-titania glasses	C. Bernard, S. Chaussedent, A. Monteil, M. Montagna, L. Zampedri and M. Ferrari XI International Workshop on glasses, ceramics, hybrids and nanocomposites from gels, Padova (Italie) september 2001
Structural properties of Er activated silica-titania glasses studied by molecular dynamics	C. Bernard, S. Chaussedent, M. Ferrari and A. Monteil Workshop on disordered systems, Andalo (Italie) march 2001

### Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs UPR 4211 – CNRS Université d'Orléans

Projet 1999 022 : **Modélisation de l'atomisation secondaire et de la vaporisation de gouttes de Lox**

Modeling of MASCOTTE 10 bar case with THESEE code with and without a secondary atomization model,

*2<sup>nd</sup> International Workshop on Rocket Combustion Modeling, Lampoldshausen (Allemagne), 25-27 avril 2001*

### Laboratoire de Physique des Matériaux – Université de Nancy

Projet 2000 015 : **Influence du désordre dans les transitions de phase à trois dimensions.**

Influence of Randomness on the Phase Transition of the 3-Dimensional Potts Model

*C. Chatelain, B. Berche, W. Janke and P.E. Berche  
Fruhjahrstagung des Arbeitskreises  
Festkorperphysik, Hambourg, Allemagne, 26/30-03-2001*

Monte Carlo Study of the Bond-Diluted 3D 4-State Potts Model

*Christophe Chatelain, Pierre Emmanuel Berche, Bertrand Berche and Wolfhard Janke  
SIMU ESF Conference 2001: Bridging the time-scale gap, Konstanz, Allemagne, 10/13-09-2001*

Effets de taille finie dans les super réseaux Fe-Ir

*S. Andrieu, M. Lemine, M. Henkel, B. Berche et C. Chatelain  
Vingtième Rencontre de Physique Statistique de Paris, ESPCI, 27 et 28-01-2000*

Effets de taille sur la température de Curie dans les super réseaux

*S. Andrieu, C. Chatelain, M. Lemine, B. Berche, and P. Bauer COLLOQUE LOUIS NEEL 2002  
"Couches Minces et Nanostructures Magnétiques" Gerardmer, (24/26-09-2002)*



### Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans – Université d'Orléans

#### Projet 1998 005 : Environnement de programmation parallèle et application

Designing FPLA Combinational Circuits by Conditional Rewriting	N. Andrianarivelo, W. Bousdira, J. Chabin, Z. Maazouzi 13 <sup>th</sup> European Conference on Artificial Intelligence (ECAI'98), Brighton, Angleterre, Août 1998
A Divide-and-Rule based method for boolean function minimization	N. Andrianarivelo, W. Bousdira, J. Chabin, Z. Maazouzi 17 <sup>th</sup> International Symposium on Theoretical Aspect of Computer Science (STAC'2000) Lille, France, 2000
High level BSP programming : BSML and by Conditions BSLambda	O. Ballereau, F. Loulergue, G. Hains 1 <sup>st</sup> Scottish Functional Programming Workshop, Stirling, Ecosse, Septembre 1999
An efficient scalable parallel view maintenance algorithm for shared nothing multi-processor machines	M. Bamha, F. Bentayeb, G. Hains 10 <sup>th</sup> International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA'99), Florence, Italie, Septembre 1999

### Laboratoire PSI-LA3I - Université de Rouen

#### Projet 1998 044 : Traitement du document. Classification.

Hiérarchies indicées et catégorisation multi échelle	A. Ribert, A. Ennaji, Y. Lecourtier 6 <sup>emes</sup> Rencontres de la Société Francophone de Classification, Montpellier, France, Septembre 1998
--	--

#### Projet 1998 045 : Algorithmes génétiques dans un SMA pour l'ordonnancement

Genetic Algorithms in a Multi-Agent System	J-P Vacher, A. Cardon, F. Lesage, T. Galinho IEEE International Joint Symposium on Intelligence and Systems, Washington, 21-23 Mai 1998
--	--

#### Projet 1998 047 : Utilisation du calcul parallèle pour la résolution de problèmes linéaires et non linéaires en calcul des structures par méthode de décomposition de domaines et par algorithmes génétiques.

Performances obtenues pour des problèmes linéaires et non linéaires avec une méthode de décomposition de domaine multi niveau primate	J-F. Lassignardie, P. Marin, Y. Escaig Actes du Colloque National en Calcul des Structures, Giens, 1999
---	--

## IRCOF UMR 6014 CNRS – Université de Rouen

Projet 1998 034 : **Structure et stabilité de complexes entre amidures de lithium et leurs partenaires réactionnels**

"Mixed aggregates between chiral lithium amides and organolithium compounds: a NMR and molecular modeling characterisation."	A. Lautrette, H. Oulyadi, A. Harrison-Marchand, C. Fressigné, J. Maddaluno et D. Davoust, 2003 Younger European Chemists Conference, Grenoble (France), 27 - 29 août 2003
"Induction asymétrique par les amidures de lithium chiraux: étude statique voire plus si affinité"	C. Giessner-Prettre, O. Parisel, H. Gérard, journée SMART, Thiais (France), 19 septembre 2003.
"Static/dynamic DFT study of aggregation or solvation of small model organolithium compounds"	H. Gérard, D. Martyna, N. Tuckerman, C. Fressigné, J. Maddaluno et O. Parisel, 3rd International Conference on the Alkali and Alkaline Earth Metal (Alkchem-3), Würzburg (Allemagne), 28 septembre - 2 octobre 2003
"Mixed aggregates between chiral lithium amides and organolithium compounds: a NMR and molecular modeling characterisation."	A. Lautrette, H. Oulyadi, A. Harrison-Marchand, C. Fressigné, J. Maddaluno et D. Davoust, 3rd International Conference on the Alkali and Alkaline Earth Metal (Alkchem-3), Würzburg (Allemagne), 28 septembre - 2 octobre 2003

**4 Thèses soutenues****Laboratoire de Mathématiques et d'Informatique – INSA de Rouen**Projet 1998 007 : **Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique***Abdelhadi Benabdallah*

"Modèles mathématiques pour des oscillateurs supraconducteurs"  
LMI-INSA de Rouen, mai 1999

**Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique - CORIA – INSA de Rouen**Projet 1998 022 : **Analyse physique et simulation numérique des écoulements dans des tuyères en présence de décollement***L. Blin*

"Simulation numérique des grandes échelles application aux inverseurs de poussée"  
Thèse de doctorat, université de Rouen, 1999

*A.-S. Mouronval*

"Simulation numérique des phénomènes aéroélastiques application à l'étude des charges latérales dans les tuyères de moteur fusée"  
Thèse de doctorat, INSA de Rouen, 2003

Projet 1998 029 : **Simulation numérique directe et modélisation de plasmas d'argon turbulents***X. Silvani*

"Simulation numérique des couches cisailées planes à grand rapport initial de masse volumique"  
Thèse de doctorat, INSA de Rouen, 2001

Projet 1998 028 : **Simulation numérique directe et modélisation de plasmas d'argon turbulents***Tewfik Benazzouz*

"Modélisation numérique de plasmas en écoulements turbulents: application au cas de l'argon"  
Thèse de doctorat, INSA de Rouen, décembre 1999

Projet 1998 030 : **Simulation directe. Simulation des grandes échelles. Modélisation de la combustion turbulente***Laurent Blin*

"Modélisation statistique et simulation des grandes échelles d'écoulements turbulents. Application aux inverseurs de poussée"  
LMFN-Coria, Université de Rouen, Décembre 1999

.../...

**Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique - CORIA – INSA de Rouen**

Projet 1999 017 : **Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée dans un brûleur à jets séparés. Application à la stabilisation d'une oxy-flamme**

*Valérie Favier*

"Contribution de la combustion partiellement pré mélangée à la stabilisation des flammes turbulentes"  
LMFN-CORIA-INSA de Rouen, 2000

*Cyrille Lesieur*

"Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée dans un brûleur à jets séparés, application à la stabilisation d'une oxy-flamme"  
LMFN-CORIA-INSA de Rouen, 2003

**Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634 Université de Rouen**

Projet 1998 043 : **Propriétés magnétiques de multicouches**

*Pierre Verdier*

"Etude des propriétés magnétiques de super réseaux Dy/Tb par simulations numériques Monte Carlo"  
GPM Université de Rouen, 26 mars 2003

**LaRIA – Université de Picardie Jules Vernes**

Projet 1997 – 006 : **Projet expérimental (LaRIA)**

*Laurent Bergogne*

"Quelques algorithmes parallèles pour des séquences de pour différents modèles de calcul parallèle"  
Laria, Université Jules Vernes, décembre 1999

**Laboratoire de Thermocinétique – ISITEM Nantes**

Projet 1998 023 : **Etude de l'intensification des transferts par advection chaotique dans le sillage d'un cylindre en mouvement périodique**

*Clotilde Chagny-Regardin*

"Mélange et chauffage de fluides complexes à l'aide d'un échangeur de chaleur à effet d'advection chaotique"  
Université de Nantes, 9 juin 2000

**Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés – CNRS – Université d'Orléans****Projet 2000 011 : Sources plasmas de traitement de matériaux***Michael Irzyk*

“Génération de faisceaux d'ions a partir de plasmas a haute densité. Simulations numériques par code PIC de l'extraction, de la mise en forme du faisceau et de l'usure des grilles. Développement de source radiofréquences a forte densité de courant (Ar,Xe) et a fort taux de dissociation (O<sub>2</sub>,N<sub>2</sub>)”  
Université d'Orléans, Septembre 2001

**LAME – CORIA – INSA et Université de Rouen****Projet 1998 055 : Simulation des épisodes de pollution atmosphérique autour d'agglomération***T. Rajaona*

Raffinement local de maillage avec une méthode de décomposition de domaine : application au calcul de dispersion des polluants dans le voisinage d'une source  
Université de Rouen, juin 2000

**GPM – Université de Rouen****Projet 2000 007 : Influence de la présence d'impuretés non magnétiques sur la transmission de phase du modèle d'Ising tridimensionnel***Christophe Chatelain*

«Etude de l'influence du désordre sur les propriétés critiques du modèle de Potts»  
Université Henri Poincaré, Nancy 1, le 30 juin 2000.

**Laboratoire Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion – Ecole Centrale de Paris****Projet 2000 012 : Modélisation de la combustion cryotechnique à haute pression***Amitha Tripathi*

« Modélisation de la combustion cryotechnique a Haute Pression »  
Ecole Centrale de Paris, le 13 février 2001

### Laboratoire de Mécanique du Havre – Université du Havre

Projets 1998 039 : **Calcul de déformations de capsules**  
et 1998 041 : **Résolution numérique des équations de Navier Stokes 3D par une méthode particulière**

*Tokou-Bernard Adouobo*

« Simulations numériques des méthodes particulières et particules-maillage sur machines parallèles »  
Université du Havre, 1998

*Benoît Marichal*

« Contribution numérique à l'étude de la manœuvrabilité des corps élancés »  
Université du Havre, 2001

*Yann Roux*

« Etude de l'amortissement visqueux dans les problèmes de tenue à la mer d'un flotteur immergé »  
Université du Havre, 1999

Projet 1998 040 : **Modélisation numérique du bruit, émis par une hélice aérienne**

*Hervé Bratec*

« Modélisation numérique des jets : applications aux inverseurs de poussée »  
Université du Havre, 3 octobre 2003

*Pierre Navaro*

«Aéroacoustique numérique d'un écoulement tourbillonnaire»  
Université du Havre, 5 juillet 2002

### Groupe de Modélisation et Réactivité Chimique UMR 6519 – Université de Reims

Projets 1999 009 : **Etude de la Thermolyse d'énaminoester**  
1999 010 : **Condensation aldolique.**  
et 2001 003 : **Chimie organométallique : réactions d'insertions**

*C. Bertrand*

« Etude théorique et expérimentale de photocycloaddition [2+2] diastéréosélectives et de la thermolyse d'énaminoester N-substitués. »  
Université de Reims, Décembre 2000

*Habilitation à Diriger des Recherches (HDR) du Dr S. Humbel*  
*"Etude théorique de réactivités en chimie organique sélective"*  
Université de Reims, décembre 2001.

**Laboratoire d'Aérodynamique UPR 9020 – CNRS Université d'Orléans****Projet 2000 003 : Simulation des Gaz Réactifs et Ionisés (SIGARIO)***Estelle Lefrançois*

"Simulation numérique des écoulements cisailés à haute température en régime raréfié"  
Thèse de l'Université d'Orléans, Novembre 2001

**IRCOF****Projet 1998 034 : Structure et stabilité de complexes entre amidures de lithium et leurs partenaires réactionnels***Anne Lautrette et Franck Pate*

"Caractérisation par RMN multinoyaux de différents agrégats mixtes lithies en solution et compréhension de leurs caractéristiques structurales et spectroscopiques par chimie quantique"  
Thèses en cours

## **Annexe E :    Les travaux du CRIHAN sur IPv6**

### **Exemples de mise en œuvre du protocole IPv6 et de services associés sur le réseau régional SYRHANO (Haute-Normandie)**

Hervé Prigent  
CRIHAN  
745 avenue de l'Université, 76800 Saint Etienne du Rouvray  
Herve.Prigent@crihan.fr

Thomas Carlu  
CRIHAN  
745 avenue de l'Université, 76800 Saint Etienne du Rouvray  
Thomas.Carlu@crihan.fr

#### **Résumé**

*Le réseau régional multi usages SYRHANO irrigue depuis 10 ans les principaux sites universitaires et les grandes écoles de Haute-Normandie. Au fil des ans, l'ensemble des établissements scolaires du second degré a été intégré au dispositif et SYRHANO s'est petit à petit ouvert à d'autres communautés d'utilisateurs. Pour répondre à leurs attentes, l'éventail des services a été élargi et le niveau global de qualité de service a été élevé. Afin de devancer les besoins, le CRIHAN, Maître d'œuvre du réseau SYRHANO, a fait de la mise en œuvre du protocole IPv6 et du déploiement de services associés un des axes importants de l'évolution du réseau régional, dans la lancée de RENATER et de GEANT. Mais la tâche n'est pas aisée, pour de multiples raisons...*

#### **Mots clefs**

IPv6, SYRHANO, RENATER.

## **1    Introduction**

### **1.1    L'évolution du réseau normand en 2003 : SYRHANO « 2.1 »**

L'association CRIHAN a été créée fin 1991 à l'initiative du Conseil Régional de Haute-Normandie, pour aider les organismes publics et privés de la région à développer des activités d'enseignement, de recherche et de développement basées sur l'utilisation des nouvelles technologies de communication et sur l'informatique. Quatre thématiques principales sont proposées : les réseaux informatiques, le calcul numérique intensif, la formation et le soutien à des projets innovants. Le CRIHAN est ainsi responsable du déploiement du réseau régional SYRHANO, avec un double mandat de l'Etat et de la Région Haute-Normandie.

SYRHANO irrigue depuis 10 ans les principaux sites universitaires et les grandes écoles et depuis bientôt sept ans l'ensemble des établissements scolaires du second degré. Au fil des ans, SYRHANO a constitué l'épine dorsale de l'Internet non-marchand de notre région. En 2003, il devient réellement multi usages et multi opérateurs de par sa construction modulaire et s'ouvre à d'autres communautés comme celles de la Santé, de la Culture et de l'Administration.

Le CRIHAN a en effet conçu une architecture qui exploite la variété des compétences et des technologies aujourd'hui disponibles dans le monde des réseaux. Cette nouvelle articulation des savoir-faire autour de la plate-forme régionale en fait un outil de communication régionaux les plus performants :





➤ **Plus de services...** :

- Des classes de services peuvent être utilisées pour hiérarchiser les priorités des applicatifs
- Des techniques de sécurité élaborées sont déployées sur le réseau sans dégradation de performances.
- Des réseaux privés virtuels peuvent être déployés sur l'ensemble du réseau, permettant ainsi aux établissements d'utiliser relativement simplement l'infrastructure réseau mutualisée pour réaliser l'interconnexion logique de leurs sites distribués sur le territoire régional. Les VPN permettent également de rendre étanches plusieurs réseaux thématiques partageant la même épine dorsale de transport.
- Enfin, le déploiement d'IPv6 est envisagé de manière native sur l'ensemble des équipements de SYRHANO.

- **...pour une communauté élargie d'utilisateurs** : tous les services sont désormais ouverts aux communautés des domaines de la Santé, de la Culture et de l'Administration : avec le monde de l'enseignement supérieur et secondaire, c'est ainsi l'ensemble du domaine non marchand régional qui se voit proposer un service réseau de qualité.

## 2    Les objectifs de déploiement d'IPv6

Les évolutions de SYRHANO présentées dans cette introduction répondent à des attentes précises de la part des financeurs du réseau et à des demandes explicites venant des utilisateurs. Que ce soit l'ajout d'un point de présence, l'augmentation des débits des liaisons ou la mise en place de réseaux privés virtuels, ces demandes sont facilement justifiables et leur utilisation – ou les effets de leur déploiement – mesurables a posteriori.

Le transport d'IPv6 n'est pas encore une demande exprimée des utilisateurs. Encore moins son transport natif. Son déploiement dès aujourd'hui vise à acquérir un savoir-faire et à préparer les administrateurs réseau des sites connectés sur SYRHANO aux évolutions annoncées de l'Internet. Or ces évolutions stratégiques sont parfois difficiles à expliquer face à une argumentation présentant IPv4 comme un protocole encore satisfaisant pour les besoins courants et surtout à la mesure des moyens disponibles dans les services réseau. On peut citer :

- Services évolués (sécurité, facilité de configuration des équipements, VPN, etc.) : tous ces services sont aujourd'hui proposés sur IPv4 et satisfont la plupart de nos utilisateurs. Il est certes parfois difficile de concilier plusieurs demandes mais une solution technique est presque toujours trouvée pour satisfaire leurs attentes.
- Disponibilité de plages d'adresses IPv4 : si l'expérience montre qu'il est de plus en plus difficile d'obtenir des adresses v4 sans justifier d'un plan de déploiement extrêmement détaillé (et donc très souvent impossible à remplir avec rigueur), cela reste inaperçu pour la majorité des utilisateurs d'autant que le problème peut aussi être contourné par la solution NAT.
- Ouverture, égalité de traitement et facilité de communication pair à pair, qui sont les valeurs fondatrices de l'Internet, sont maintenant considérées comme des failles de sécurité importantes quand on lit les magazines spécialisés et qu'on écoute les responsables techniques de sites : ceux-ci considèrent NAT comme une technique simple à mettre en œuvre et qui leur permet en outre de résoudre plusieurs problèmes simultanément :
  - le plan d'adressage de leur site peut se faire avec des adresses privées dont ils ont l'entière maîtrise ;
  - l'accès vers leur site est par défaut interdit ;
  - l'ouverture de services se fait au cas par cas et est limitée ;

- les échanges pair à pair sont possibles en interne (parfois) mais pas avec le monde extérieur ;
- associée à quelques adresses publiques cette technique permet aujourd'hui également d'accéder à un service de visioconférence ou tout simplement échanger quelques dossiers par ftp entre collègues.

Déployer IPv6 est cependant nécessaire pour assurer une migration douce (en tous cas la plus transparente possible) vers d'éventuelles nouvelles applications, pour intégrer les technologies nouvelles (intégration PDA/téléphonie mobile/ordinateurs portables, etc.) et pour préfigurer les services réseau de demain en prenant en compte les contraintes des utilisateurs (et en premier lieu la sécurité).

## **3 Le déploiement d'IPv6 sur SYRHANO**

### **3.2 Contraintes et échéancier**

Déployer IPv6 sur le réseau régional est une entreprise qui se heurte à quelques obstacles :

- Pour la période 2000-été 2003, le réseau SYRHANO est opéré et supervisé par un prestataire qui ne nous permet pas un déploiement natif d'IPv6.
- IPv6 n'est pas supporté par tous les équipements, et les fonctionnalités disponibles ainsi que la compatibilité des équipements entre eux doivent être vérifiées.

Pour faciliter les choses, il est donc décidé dans un premier temps qu'une infrastructure logique v6 soit construite sur l'épine dorsale régionale v4 et qu'elle soit gérée par le CRIHAN de manière indépendante au service v4. En particulier, le CRIHAN commence à déployer v6 sur le service de collecte xDSL qu'il exploite déjà en v4.

Dans un deuxième temps, l'appel d'offres « SYRHANO 2.1 » doit imposer v6 aux soumissionnaires sur l'ensemble du réseau.

### **3.3 Préparations**

Une fois prise la décision de déployer IPv6, force est de constater que certaines questions restent encore sans réponse ou au contraire entraînent plusieurs réponses entre lesquelles il est malaisé de choisir.

#### **3.3.1 Obtention d'un préfixe IPv6**

SYRHANO est un des constituants du réseau français pour la recherche, et RENATER est son interlocuteur principal. C'est RENATER qui fournit habituellement les préfixes v4 et qui va donc également fournir un préfixe v6 (/48) : les formulaires de demande initiaux reflétaient eux-mêmes la complexité de l'organisation de l'adressage v6 et ont dû être adaptés suite à cette première expérience.

#### **3.3.2 Plan d'adressage**

La question du plan d'adressage peut sembler anecdotique, mais est révélatrice à la fois de la force de v6 et de son peu d'intérêt opérationnel dans l'immédiat. Une plage de 128 bits est disponible, ce qui paraît plus que nécessaire à court ou moyen terme ; pourtant, plusieurs options se présentent parmi lesquelles deux sont présentées ci-dessous :

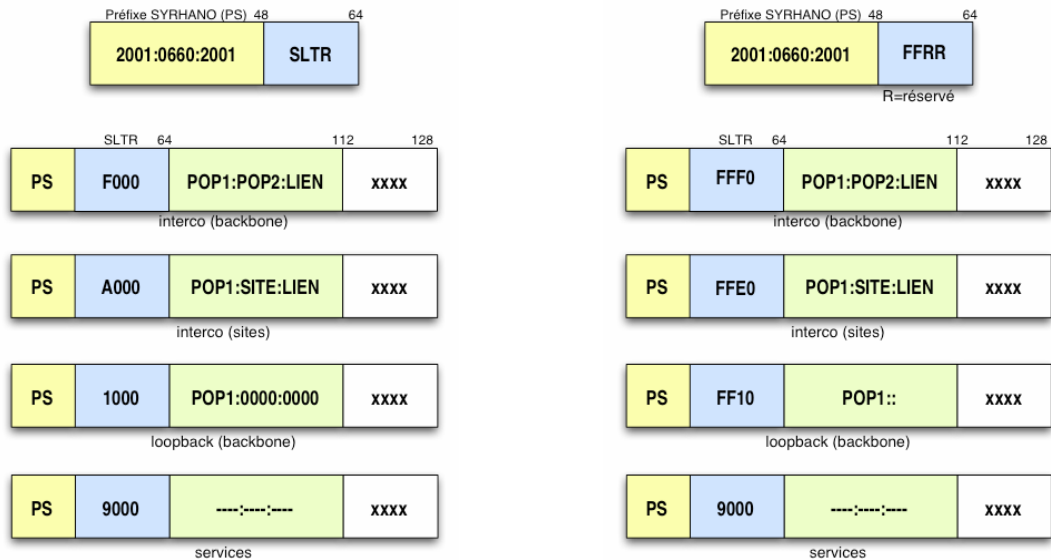


Figure 2 – Plans d'adressage pour SYRHANO (des séparations virtuelles sont positionnées à chaque frontière d'octet pour faciliter la représentation visuelle de l'espace d'adressage)

La première proposition répartit équitablement sur l'espace disponible les zones utilisées. La deuxième « économise » de plus grandes plages d'adresses. Après discussion avec plusieurs spécialistes IPv6 et quelques débats parfois animés, il apparaît que les deux options sont légitimes et que peu importe l'option retenue : en effet, la norme qui sera éventuellement retenue à l'avenir pour un déploiement massif de v6 n'est pas encore connue. Notre démarche est encore marquée par des automatismes liés aux règles applicables en v4 ce qui ne facilite pas une projection à quelques années dans l'avenir. Il apparaît enfin que les préfixes vont également être réattribués, ce qui conforte l'idée que tout n'est pas figé et normalisé. Cependant, grâce aux mécanismes d'auto configuration l'impact humain de la renumérotation devrait être minimum...

Il est donc décidé d'utiliser l'option 1 pour numéroter les équipements actifs de l'épine dorsale de SYRHANO. Une plage d'adresses est réservée pour les réseaux d'interconnexion avec les sites, comme cela est fait en v4 aujourd'hui. Une seconde plage est réservée pour de futurs services réseau, sans que nous puissions réellement les détailler aujourd'hui.

### 3.3.3 Matériels et logiciels

Les équipements réseau pour SYRHANO proviennent essentiellement de la gamme CISCO. Cependant, la collecte ADSL s'appuie sur un Juniper M5 et des équipements 6WIND sont également acquis pour servir de concentration et de routeur d'accès pour des futurs sites utilisateurs. Ces équipements dual-stack par défaut nous permettent d'élargir nos connaissances des implémentations v6 et de vérifier l'interopérabilité des logiciels avec nos routeurs existants.

## 3.4 Mise en place d'un point de peering v6 régional

Comme il a été dit précédemment, seul le transport d'IPv4 est proposé nativement sur l'épine dorsale du réseau SYRHANO. Un routeur de peering v6 géré par le CRIHAN y est donc installé ; il est connecté en IPv6 natif sur RENATER (PVC ATM). Les sites directement raccordés sur SYRHANO et souhaitant expérimenter un service v6 sont également connectés sur ce routeur (tunnel 6in4 pour l'Université du Havre et le CORIA, interconnexion IPv6 native pour le CRIHAN). Chaque site doit faire la démarche d'obtention d'un préfixe v6 auprès de RENATER.

Afin d'élargir le périmètre v6, nous proposons de maquetter le déploiement de v6 sur la plate-forme de collecte xDSL sur laquelle est raccordé un grand nombre d'utilisateurs.

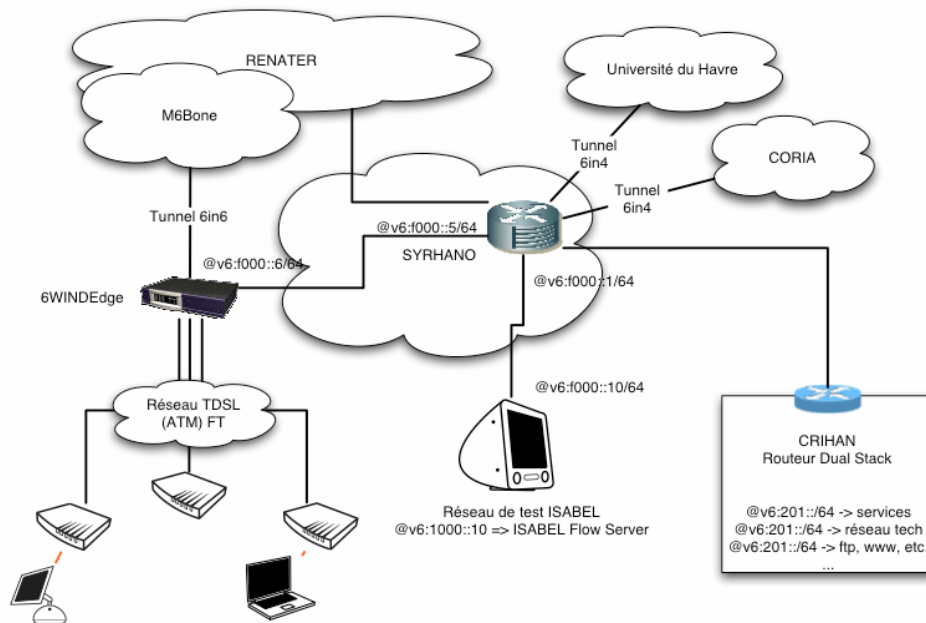


Figure 3 – Le réseau régional v6 (mai 2003) en attendant le passage à v6 natif

### 3.5 Collecte v6 sur xDSL pour les établissements scolaires

#### 3.5.4 Une communauté de sites, des besoins communs

La région Haute-Normandie compte environ trois cents établissements scolaires du second degré. La plupart ont été raccordés dès 1995-96 sur SYRHANO/RENATER par le CRIHAN via RNIS ; quelques uns le sont via satellite ou boucle locale radio. Depuis 2001, un service de collecte xDSL a été mis en place par le CRIHAN et le Rectorat de Rouen ; la migration de RNIS à xDSL s'opère depuis en fonction de l'éligibilité technique des sites.

Les établissements scolaires du second degré partagent des comportements et des besoins communs liés à leur fonctionnement administratif et leurs objectifs pédagogiques. Or, aujourd'hui, ces besoins ont du mal à être satisfaits à cause de certaines limitations du protocole IPv4 (malgré l'offre « sur mesure » faite par le CRIHAN et le Rectorat). Le protocole IPv6 est une solution tout à fait crédible pour répondre à leurs demandes et les nouvelles possibilités offertes par la connectivité de bout en bout feront également naître de nouveaux besoins.

Les lycées et collèges ont régulièrement besoin de faire des « remontées » d'informations sécurisées vers le Rectorat via des tunnels VPN IPSec. Seule une connectivité de bout en bout permet d'envisager une utilisation aisée et généralisée de ces techniques de sécurité. La connectivité globale et l'augmentation conséquente des débits sur le réseau SYRHANO permettent également d'envisager la généralisation de la visioconférence et de la téléphonie. Dans l'avenir, les fonctionnalités dites de « mobilité » offertes par IPv6 pourront également être déployées dans les établissements et sur SYRHANO/RENATER.

### 3.5.5 Architecture IPv4 de départ

La concentration des flux IPv4 provenant des établissements scolaires se fait sur un routeur Juniper M5 sur lequel remontent tous les PVC ATM provenant des sites connectés.

La plupart des sites disposent d'un routeur d'accès Cisco 827, et il n'est pas envisagé de les changer. Cependant, même si les routeurs Cisco 827 supportent IPv6, il est, dans certains cas, nécessaire d'augmenter leur mémoire vive pour qu'ils puissent supporter sans problème l'image IOS intégrant IPv6.

Les sites disposent de deux réseaux NATés : un réseau pédagogique et un réseau administratif.

### 3.5.6 Le déploiement d'IPv6

Trois étapes sont prévues. Les deux premières doivent permettre la validation globale de la plate-forme de collecte v6 avant de passer à la dernière qui consiste en un déploiement général de v6.

#### Première étape

La première étape du déploiement consiste en la simple adjonction d'un routeur de concentration 6WindEdge à la solution de collecte xDSL v4. Deux sites pilotes y sont raccordés. Le routeur a tout d'abord été relié au monde v6 à l'aide d'un tunnel 6in4 sur le 6Bone, puis sur le service v6 de RENATER quand il a été disponible, via le Cisco 7206 (peering v6) installé sur SYRHANO.

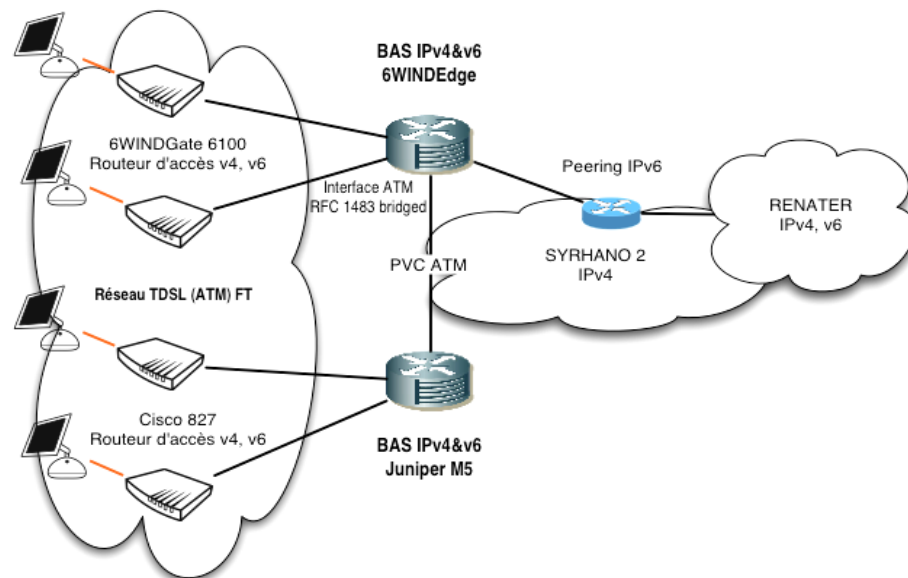


Figure 4 – Première étape : maquette pour un service de collecte IPv6 sur ADSL pour SYRHANO

#### Deuxième étape

La deuxième étape consiste à activer IPv6 sur les routeurs d'accès Cisco 827 des sites pilotes. Le fonctionnement du réseau IPv4 du site n'est pas modifié et l'utilisation du protocole IPv6 pour les communications reste transparente. Cette architecture permet de commencer à familiariser les différents acteurs avec le nouveau protocole et d'entamer la migration des stations et serveurs (double pile IP). En généralisant (banalisant) ainsi v6, les sites peuvent utiliser les nouvelles fonctionnalités offertes par IPv6 tout en gardant une compatibilité vis-à-vis des réseaux v4.

Ce déploiement n'est pas trivial. D'un point de vue technique, il s'agit de faire coexister deux réseaux logiques sur une même infrastructure physique. Cela entraîne des problèmes d'exploitation et de supervision du réseau, y compris le suivi des problèmes de sécurité. Pour ces raisons, cette infrastructure ne peut être que provisoire.

Il est difficile de maintenir une infrastructure qui ne propose pas de services applicatifs, même dans le cadre d'une expérimentation. Des services sont donc migrés sur v6, comme certains serveurs DNS, web et un serveur de messagerie électronique. Cela ne pose pas de problème particulier sous Linux. Pour ce qui concerne les clients, c'est un peu plus délicat, et savoir si la connexion se fait en v4 ou v6 n'est pas toujours chose aisée.

La société 6WIND nous propose de tester l'applicatif de visioconférence ISABEL, développé au DIT-UPM de Madrid et commercialisé par la société AGORA (<http://isabel.dit.upm.es/>). Fonctionnant sous Linux et ne nécessitant qu'une webcam, l'installation en est relativement aisée car « packagée » avec une distribution Linux Suze. Plusieurs sites sont équipés de postes ISABEL (6WIND, RENATER Paris, Université de Caen, Université du Havre, CRIHAN). Le poste du CRIHAN a servi de pont (Flow Server).

L'intérêt d'ISABEL est de fonctionner en v4 et en v6. On a ainsi pu tester une visioconférence multipoints avec des postes v4 et des postes v6. Le poste de visioconférence doit cependant être dédié car il nécessite un processeur puissant ; de plus, la configuration matérielle est relativement figée.

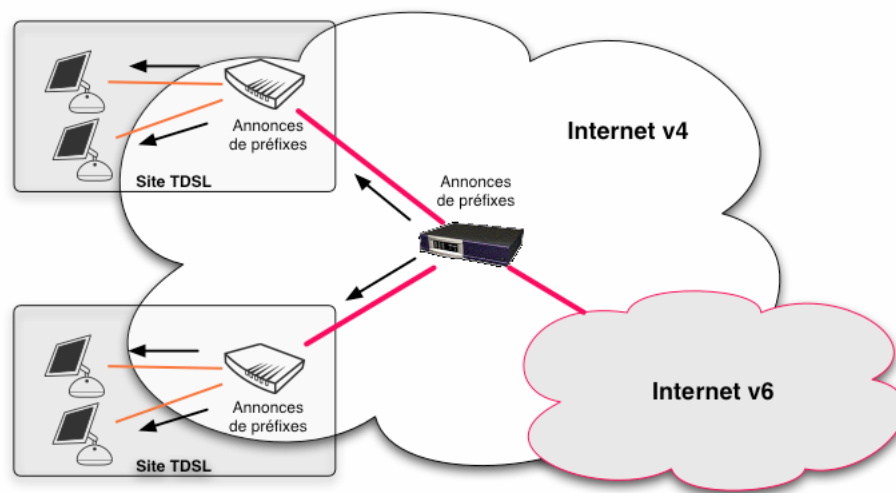


Figure 5 – Deuxième étape : sites TDSL IPv4 et IPv6 accédant à l'Internet v6 via un routeur 6WindEdge

### Troisième étape

La troisième étape consiste à généraliser le déploiement d'IPv6. Les sites fonctionnent alors en IPv6 natif et accèdent à l'Internet v4 grâce à des mécanismes de migration configurés sur le routeur d'accès (NAT-PT ou DSTM). Dans cette configuration, l'accès à l'Internet v4 est considéré comme devant se réduire au fil du temps.

Cette troisième étape du déploiement n'a pas encore démarré et seule une maquette « sur table » a été réalisée : le réseau SYRHANO « 2.1 », en fonctionnement depuis la fin de l'été 2003, doit permettre le transport natif d'IPv6, mais la date de mise en production de v6 dépend de la disponibilité de versions logicielles compatibles avec les services MPLS<sup>20</sup> déjà déployés sur l'infrastructure régionale.

<sup>20</sup> MPLS et IPv6 ne cohabitent pas encore sur le Cisco Catalyst 6509 qui constitue le nœud SYRHANO de Saint Etienne du Rouvray. Une version qui intègre les deux fonctionnalités devrait être disponible en fin d'année. MPLS est en particulier utilisé pour remonter sur le nœud de Saint Etienne du Rouvray les PVC des sites connectés sur la porte TDSL d'Evreux (AToM : Any Transport over MPLS).



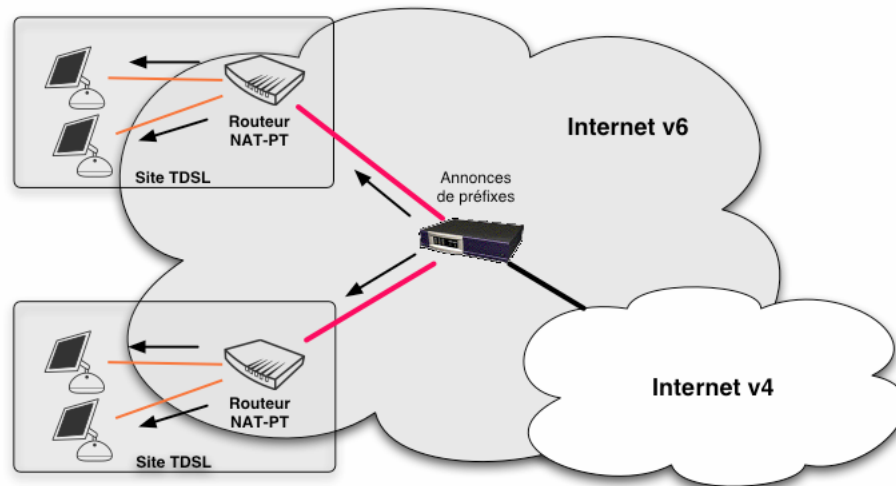


Figure 6 – Troisième étape : l'Internet v4 est devenu marginal, les sites sont uniquement v6 et accèdent aux réseaux v4 en mettant en œuvre une technique de migration

### Les mécanismes de transition envisagés

Les techniques de transitions à mettre en œuvre pour la phase 3 sont testées sur table avant leur déploiement. Le choix s'oriente vers NAT-PT ou DSTM :

- NAT-PT (Network Address Translation – configuration Translation) est similaire au NAT v4 mais assure en plus la conversion du protocole IP utilisé. Les sites en v6 natif n'ont bien sûr pas de problème pour accéder à l'Internet v6. Pour accéder à l'Internet v4 au travers de NAT-PT, la machine v6 qui initie une connexion avec une machine v4 envoie un paquet v6 vers le routeur NAT-PT avec comme adresse de destination, l'adresse IPv4 mappée de la machine de destination et comme adresse source son adresse v6. Le routeur NAT-PT va traiter ce paquet et lui affecter une adresse v4 de son pool et forger un nouveau paquet IPv4 avec comme adresse source l'adresse v4 récemment attribuée et comme adresse de destination l'adresse de la machine distante. Lorsque la machine v4 répond, le routeur NAT-PT exécute l'opération inverse et translate le paquet v4 reçu en un paquet v6 conformément aux paramètres stockés dans son cache. NAT-PT semble être un mécanisme de transition simple à mettre en œuvre. Les machines situées derrière NAT-PT peuvent être pleinement v6 et n'ont besoin de la translation que pour accéder à des réseaux v4. Néanmoins, NAT-PT souffre des mêmes limitations que le NAT IPv4.
- DSTM (Dual Stack Transition Mechanism) alloue dynamiquement des adresses v4 à la demande et encapsule les paquets v4 dans des paquets IPv6. DSTM semble plus difficile à déployer et à maintenir et impose que toutes les machines utilisant potentiellement v4 implémentent la pile de protocole IPv4. En revanche, la connexion entre les mondes v4 et v6 est établie de bout en bout.

## 3.6 Conclusion

Déployer IPv6 peut (doit ?) permettre une renaissance des valeurs fondatrices de l'Internet. Ce n'est pas seulement une question de nombre d'adresses IP disponibles : c'est l'occasion de se poser la question de savoir comment déployer des services nouveaux et de faire évoluer la technologie pour que chacun puisse se l'approprier avec le minimum de contraintes.

Les réseaux IP forment souvent aujourd'hui des ensembles d'une telle complexité que leur exploitation en est rendue très difficile, alors même que les services proposés aux utilisateurs sont pauvres et peu nombreux. Le caractère global d'IPv6 signifie aussi que toutes les machines de l'Internet seront potentiellement joignables (serveurs) et que les techniques de sécurisation des services devront évoluer

pour devenir, d'une manière ou d'une autre, plus souples et faciles à mettre en œuvre, plus efficaces et moins gourmandes en main d'œuvre<sup>21</sup>.

Pourtant IPv6 ne semble pas être encore la priorité pour certains équipementiers, ni celle des ingénieurs réseaux, trop occupés au quotidien par la stabilisation de leurs réseaux v4 en croissance souvent rapide.

Or les conséquences du déploiement d'IPv6 aujourd'hui sont principalement humaines car cela implique la construction d'une infrastructure logique IP supplémentaire et donc deux technologies réseau à configurer, maintenir, sécuriser, superviser et potentiellement deux fois plus de failles de sécurité et de sources de problèmes.

Pourtant, il nous paraît nécessaire de rapidement mettre en œuvre v6, pour acquérir un savoir-faire et se confronter aux problèmes de manière à réfléchir le plus sereinement possible aux solutions à y apporter. La tâche n'est cependant pas aisée, pour des raisons aussi diverses que les contraintes imposées par certains exploitants de réseau, les mises à jour requises pour certains équipements et l'indisponibilité ou l'incompatibilité de versions logicielles pour les routeurs.

Les techniques de migration intégrées dans la suite de protocoles v6 permettent aujourd'hui de déployer v6 par défaut et sans que l'utilisateur final ne s'en aperçoive, pour peu que les services applicatifs qui constituent son environnement de travail soient également accessibles. C'est en généralisant ainsi l'usage de v6 puis en activant des fonctionnalités innovantes (typiquement la mobilité, qui permettra entre autres une intégration aisée des ordinateurs portables, PDA et téléphones) que chacun prendra conscience que la page v4 est presque tournée.

## Références

- [1] Gisèle Cizault. *IPv6 Théorie et pratique*, Mars 2002
- [2] Silvia Hagen. *IPv6 Essentials*, Juillet 2002
- [3] Christian Schild, Tina Strauf. *Initial IPv4 to IPv6 Transition Cookbook for End Sites Networks/Universities*, (<http://www.6net.org/publications/deliverables/D2.2.2.pdf>), Février 2003
- [4] Tim Crown, Ming Feng. *Initial IPv4 to IPv6 Migration Cookbook for Organisational/ISP (NREN) and Backbone Networks*, (<http://www.6net.org/publications/deliverables/D2.3.2.pdf>), Mars 2003
- [5] Christian Huitena. *IPv6 the new Internet Protocol*, 1997
- [6] Site web du G6. <http://www.g6.asso.fr>
- [7] Site web du 6bone. <http://www.6bone.net/>
- [8] Site web du Forum IPv6. <http://www.ipv6forum.com/>
- [9] Site web de JOIN. <http://www.join.uni-muenster.de/?lang=en>
- [10] Site web du CRIHAN et de SYRHANO. <http://www.crihan.fr/>

---

<sup>21</sup> Il est vrai qu'on disait cela aussi pour v4 il y a quelques années...

## **Annexe F : Annexe technique sur l'installation du cluster IBM**

Cette annexe technique présente les différentes étapes qui ont permis de mettre en production le cluster 1600 IBM. Elle ne reprend pas entièrement les différentes phases du calendrier de recette dans sa forme.

Pour le fond, il s'agit de mettre en avant les différents choix effectués lors de cette mise en route.

### **4 Réception du cluster**

Le cluster 1600, dont la puissance crête théorique de chaque noeud est de 166,4 GFlops est composé de plusieurs éléments :

- ↳ 2 nœuds p690 Turbo de 32 processeurs Power4 cadencés à 1.3 GHz, et 32 Go de mémoire chacun
- ↳ 1 switch COLONY
- ↳ 1 baie de disques FastT500 contenant 20 disques de 72 Go
- ↳ 1 serveur RS/6000 (44p170)
- ↳ 2 PC/Linux

### **5 Installation des éléments**

Cette phase consiste en l'installation et la mise en ordre de marche de la solution, c'est-à-dire les 2 nœuds p690 Turbo, le switch Colony, la baie de disque FastT500, la console de surveillance et la console de remontée d'erreurs.

Elle comprend :

- Allumage électrique de la solution. Il s'agit d'un test électrique de la solution livrée, sans aucune installation logicielle. [validé]
- Validation du nombre de processeurs. Cette validation est effectuée lors du démarrage de la solution, pendant les tests matériaux, afin de vérifier que chaque nœud possède bien 32 processeurs et que ceux-ci sont bien disponibles (enabled). [validé]
- Validation de la mémoire physique (2 fois 32 Go). Comme pour l'action précédente, il s'agit de test de démarrage de la solution. Une fois un système d'exploitation installé, un programme développé au CRIHAN fait un remplissage de la totalité de la mémoire et une relecture afin de vérifier la cohérence des données. [validé]
- Validation des disques (2 fois 512 Go en interne et 1 To dans la baie). Action similaire à celle de la validation du nombre de processeurs. Il s'agit de test de démarrage de la solution. Une fois un système d'exploitation installé, chaque nœud est vérifié et ses disques accédés en lecture et en écriture . La baie de disques est aussi testée. [validé]
- Validation du switch et du réseau d'intercommunication. La console de supervision (CWS) doit être en mesure de gérer les remontées d'erreur provenant des deux nœuds de calcul, afin de préparer l'installation du système d'exploitation. [validé]
- Installation d'AIX et vérification de la reconnaissance du matériel. Les actions à réaliser sont les suivantes : installation et configuration du système d'exploitation AIX 5L à partir de la console (CWS) et vérification de la reconnaissance du clavier, des disques, des processeurs ainsi que de la mémoire au niveau de l'OS. [validé]
- Test de connections sur les deux nœuds et les consoles, ainsi que vers les autres machines du CRIHAN. Le test de visibilité entre les deux nœuds ainsi que vers les autres machines du réseau local afin d'intégrer la solution au réseau existant consiste en la vérification de l'accessibilité du calculateur à partir de différentes machines déjà installées au CRIHAN. [validé]
- Test des compilateurs (compilation et édition des liens). Installation des compilateurs Fortran 77/90 et C/C++ ainsi que des tests simples de compilation et d'édition de liens ; passage du code C de validation mémoire.

## 6 Vérification d'aptitude

Elle correspond à la validation des performances obtenues sur la solution livrée pour les codes de benchmark du CCTP.

Elle comprend les étapes suivantes :

- Passage de la batterie des codes du jeu de test (utilisé pour l'appel d'offres) sur un nœud en mode dédié, pour vérifier les performances fournies dans la réponse. Le passage des codes de calcul du jeu de test se déroule sur une configuration identique à celle utilisée par IBM pour répondre à l'appel d'offre (un nœud p690 Turbo de 32 processeurs.) L'écart entre les performances obtenues sur la solution ainsi découpée et ceux annoncées dans la réponse à l'appel d'offre ne doivent pas être inférieurs à 5%. [validé]
- Passage de la batterie des codes du jeu de test au travers de l'outil de traitement par lots (loadleveler) pour en valider l'exécution et les performances sur la solution retenue. La solution de calcul a évolué au cours de l'appel d'offres. Les codes du benchmark forment un échantillon représentatif des applications des utilisateurs à l'heure actuelle. Aussi est-il important que ces codes puissent s'exécuter sur la solution complète. Afin d'accéder simultanément à toutes les ressources sur les 2 nœuds, l'utilisation de loadleveler est indispensable. Les exécutions se font pour un utilisateur qui n'a pas les droits super utilisateur. Cette phase a mis initialement en évidence quelques problèmes de performances qui ont donné lieu à des appels au support IBM : PMR no 83188, 83189, 83191, 83192, 83193 et 83194. Ces problèmes ont été solutionnés. [validé]

## 7 Phase intermédiaire (préparation de la phase de vérification du service régulier)

Avant de passer à la phase de vérification de service régulier, il est nécessaire d'installer l'environnement de production et de valider les besoins exprimés dans le CCTP.

- Validation du redimensionnement de la solution. La solution est partitionnable en 2 modules de 32 processeurs. D'autres configurations sont possibles, mais dans ce cas seule une partition par nœud à accès à la baie de stockage et au switch Colony. Cette étape permet de vérifier le partitionnement facile et rapide de la solution à travers la console. [validé]
- Installation et le paramétrage des logiciels d'administration (notamment WLM, PSSP) et du séquenceur (loadleveler). [validé]
- Installation et la validation de la comptabilité journalière et mensuelle (processeur et disques) pour un utilisateur et un groupe d'utilisateurs (au sens UNIX). Notre système de gestion des utilisateurs repose sur des attributions d'heures de calcul, par groupe d'utilisateurs (au sens Unix). Le système d'accounting standard Unix et des fonctionnalités spécifiques AIX doivent être activés et vérifiés. [validé]
- Création des systèmes de fichiers pour les utilisateurs (notamment GPFS et NFS). Les différents systèmes de fichiers proposés aux utilisateurs sont testés. De plus, est réalisé un test de partage des disques internes des nœuds et du comportement du réseau privé face à un programme très consommateur en accès disques et communication. [validé]
- Vérification de l'efficacité des limites et des allocations de ressources demandées en interactif et en mode de traitement par lots (batch). Des restrictions doivent pouvoir être imposées aux utilisateurs en mode interactif : temps CPU, mémoire et nombre de processeurs, de manière à les inciter à soumettre leurs programmes à travers le logiciel de traitement par lots (outil batch IBM « phénomène »). Les allocations de ressources sont utilisées quand on garantit à un utilisateur ou à un groupe d'utilisateurs, l'accès à des ressources quelle que soit la charge de la machine. [validé] Le comportement de la solution de calcul en fonction de la charge de la machine est aussi vérifié, et

en particulier la réallocation dynamique des ressources non utilisées, et la localisation des processus en fonction des techniques de programmation utilisées. [validé]

- Installation et validation de l'environnement de développement utilisateur (entre autres les logiciels inclus dans IBM Schoolar Program). L'environnement *IBM Schoolar Program* est testé sur des codes du jeu de test de l'appel d'offres. [validé]
- Validation des diverses interfaces réseau sous les protocoles Ipv4 et Ipv6. Attribution d'adresses IP en v4 et v6 et tests de communication (fonctionnalités et performances) avec les autres machines du CRIHAN, à travers les interfaces ethernet 10/100/1000 et Gigabits.
- Validation de l'utilisation du robot ADIC GRAU Scalar 1000 pour le service de migration de la solution. Le robot ADIC Grau est désormais intégré au cluster et complètement dédié au service de migration sur la solution à l'aide de TSM. Il se fait donc en lieu et place du même service de migration offert par DMF sur le calculateur SGI. [validé]

## 8 Phase de vérification de service régulier

Elle correspond au fonctionnement de la solution en mode de production pendant trois semaines sans incident.

Les projets d'utilisateurs bêta sont installés sur la solution pour effectuer le portage et l'optimisation de leurs codes sur architecture Power 4. Ensuite, ils serviront pour constituer une charge de référence de la machine pour la vérification de service régulier.

Elle s'est déroulée du 14 janvier au 3 février 2003, après qu'une panne logicielle complexe ait retardé son démarrage d'environ 3 semaines. Cette panne a finalement entraîné le remplacement du nœud 1 du calculateur. Toutes les phases précédentes de la recette ont été de nouveau passées sur le nœud de remplacement. [Validé]

## 9 Admission finale

Elle est prononcée à l'issue de cette procédure, pour autant que toutes les vérifications soient positives et que tous les logiciels et matériels aient été installés et soient opérationnels. L'admission finale est prononcée au moins une semaine après la validation de chacune des étapes précédentes.

Cette phase a été validée.

## 10 Mise en production du cluster

Le basculement des utilisateurs de l'Origin 2000 Illiac8 vers le cluster 1600 d'IBM a eu lieu début février 2003. L'Origin 2000 est restée en production jusqu'à la mi-mai 2003 afin de garantir une ressource de calcul en cas de problème majeur rencontre lors du basculement.

### 10.7 Portage des projets d'Illiack8 vers les Dalton

Il a consisté en la recopie intégrale des fichiers des utilisateurs des projets actifs sur Illiac8 en 2002 au travers de montages NFS entre les espaces disques des deux calculateurs.

Pour pouvoir exécuter ses programmes sur la nouvelle architecture, chaque utilisateur a dû les recompiler et employer les commandes et outils spécifiques IBM (compilateurs, soumission des jobs, etc.).

## 11 Description technique du cluster IBM

A leur livraison, chaque composante du cluster dispose d'un système d'exploitation installé permettant un démarrage de base. Aussitôt après le raccordement des éléments entre eux et leur adaptation au réseau électrique de la salle, la vérification de conformité de chaque configuration matérielle est engagée :

Utilisation des commandes système,

- bindprocessor pour le nombre de processeurs actifs
- topas pour la mémoire
- lsdev pour les différentes cartes que devaient contenir les nœuds

ainsi qu'un code du CRIHAN permettant de valider la quantité et le bon fonctionnement des processeurs et de la mémoire.

La baie de disques contient 20 disques de 72 Go soit un total de 1,4 To : ceci est conforme au CCTP qui spécifiait 1 To utile (Les 400 Go « supplémentaires » sont utilisés pour garantir l'intégrité des données, même en cas de défaillance d'un disque. Cet aspect est détaillé plus loin à propos de la configuration de la baie de disque).

Le switch COLONY a été testé avec un code parallèle tournant simultanément sur les deux nœuds. Son bon déroulement étant entièrement dépendant du fonctionnement de cet équipement, ceci a permis de valider que tout fonctionnait correctement.

Enfin, le serveur RS/6000 (appelé CWS22 dans la suite du document) et les 2 PC Linux (appelés HMC23 par la suite) ont été vérifiés au travers de leurs fonctions dans le cluster.

## 12 Topologie du serveur

Comme le montrent les figures 1 et 2, le cluster comporte :

- 4.1 un réseau d'administration non routé (192.168.40.1 à 192.168.40.5)
- 4.2 un accès vers le réseau local CRIHAN (195.221.22.\*)
- 4.3 un câble croisé entre les deux nœuds (192.168.42.\*) dont l'utilité sera exposée dans le paragraphe traitant de Load Leveler
- 4.4 un switch COLONY que l'on peut assimiler à un hyper réseau, et dont le rôle n'est « que » d'améliorer les performances des tâches pouvant s'exécuter sur deux nœuds simultanément. Ces interfaces sont sur le réseau 192.168.41.\*
- 4.5 deux zones SAN (192.168.40.6 et 192.168.40.7) dont l'utilité sera développée dans le paragraphe traitant de l'espace de travail des utilisateurs.

---

<sup>22</sup> CWS : Control WorkStation.

<sup>23</sup> HMC : Hardware Management Console

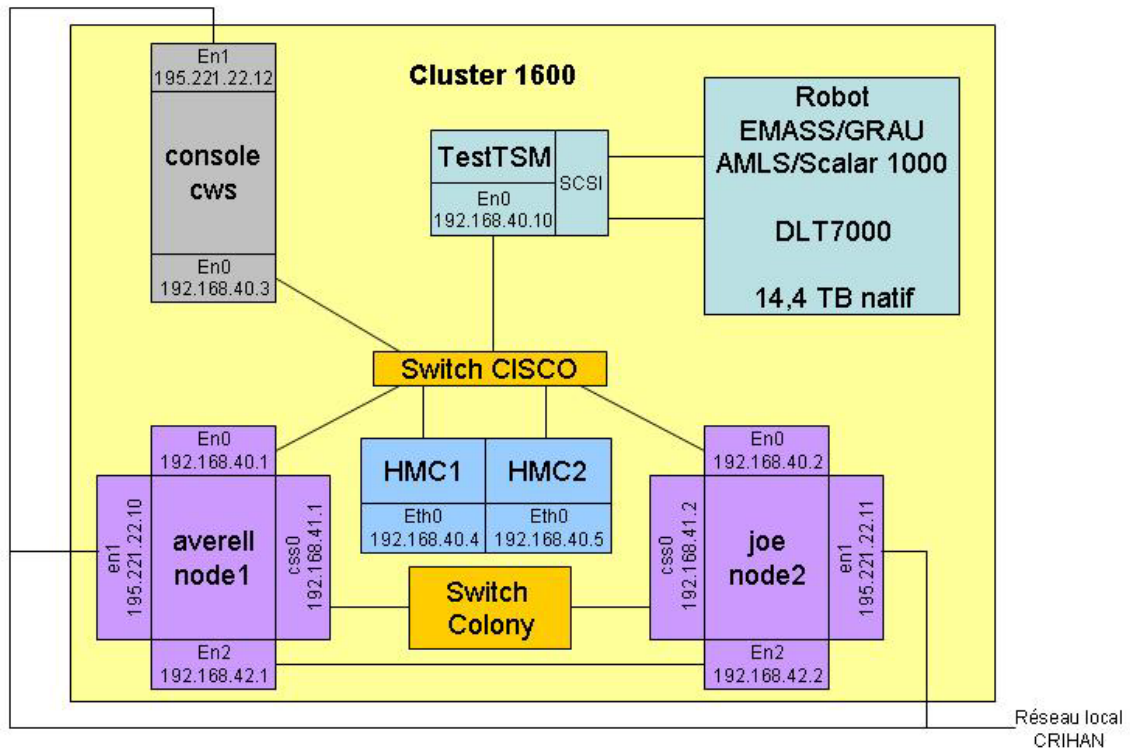


Figure 2 : Réseau d'administration, réseau CRIHAN et switch COLONY

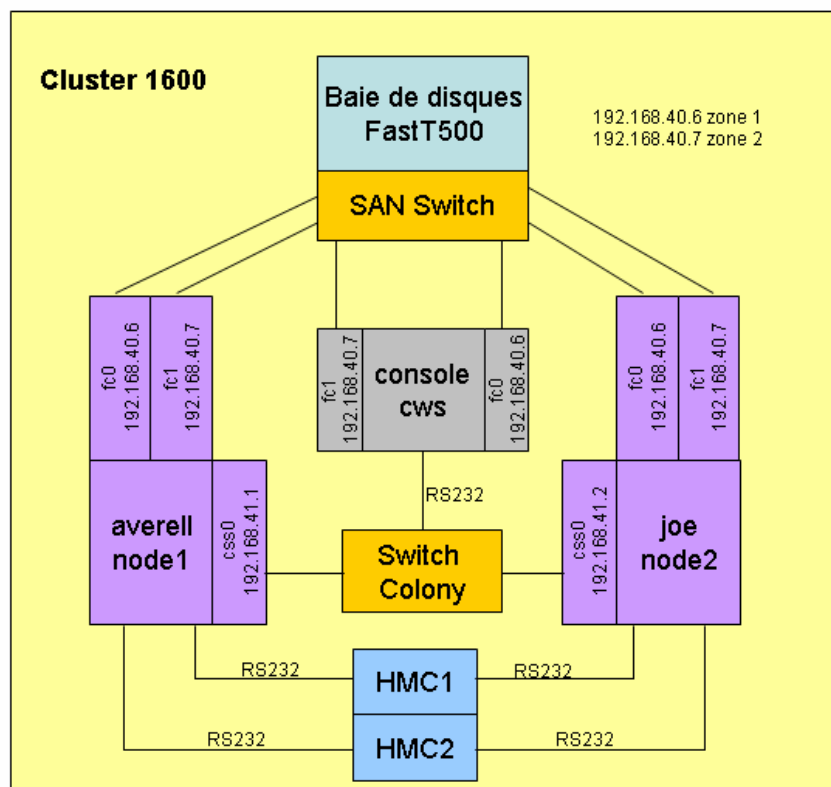


Figure 3 : connectique RS232 et SAN



## 13 Principes généraux

### 13.8 Exécution de travaux

Un cluster est en réalité un ensemble de machines indépendantes (appelées nœuds) que l'on fédère au moyen de couches logicielles et matérielles. Suivant la configuration logicielle, ce type d'architecture peut donc générer de fortes zones d'inactivités : alors même que les ressources sont disponibles pour effectuer un calcul, les limitations peuvent en interdire son exécution. Ainsi par exemple, si sur chacun des deux nœuds de 32 processeurs, 30 sont occupés, il reste en théorie 4 processeurs libres : mais le travail d'un utilisateur (s'il ne s'agit pas d'un job MPI)<sup>24</sup>, exigeant justement 4 processeurs devra tout de même attendre la disponibilité des quatre sur un seul nœud car une application ne peut s'exécuter sur 2 nœuds simultanément (seules les applications MPI ont la possibilité de s'exécuter sur 2 nœuds simultanément).

### 13.9 Espaces de travail

En termes de performances, il faut distinguer deux espaces :

- Un espace est de 410 Go sur les disques locaux aux nœuds, pour lesquels la performance maximum est garantie, mais sans aucune sécurité pour les données en cas de panne matérielle
- les disques de la baie FastT500, beaucoup moins rapides, mais sur lesquels la sécurité et l'intégrité des données sont garanties. Un espace de cette baie est sauvé via le module HSM<sup>25</sup> de TSM<sup>26</sup>.

A noter que la différence de performances entre ces deux espaces est de 1 pour 5. Par contre, toutes les données utilisateurs se doivent d'être dans ces espaces sécurisés.

D'autre part, il est indispensable que d'un point de vue système, la machine soit apte à faire face à des pannes disques sans pour autant que le service soit interrompu.

### 13.10 Tuning des nœuds

Il s'agit, pour cet aspect purement système, de trouver les paramètres les mieux adaptés à une exploitation scientifique et généraliste de la machine. Les nœuds offrent un profil scientifique dès le démarrage de la machine, par contre les valeurs standard de paramétrage de la mémoire ont du être modifiées.

### 13.11 Outils « CRIHAN »

Sous cette appellation, il s'agit en fait de logiciels du domaine public, compilés et installés par le CRIHAN. Il s'agit principalement de SSH (Secure Shell), de TCP Wrapper, ainsi que des éditeurs de texte, ou encore des outils graphiques permettant de schématiser le résultat d'une simulation.

---

<sup>24</sup> MPI : Message Passing Interface. Langage de programmation parallèle

<sup>25</sup> HSM : Hierarchical Storage Management. Principe visant à déporté les fichiers les plus volumineux et les moins consultés vers des médias dont le coût est de plus en plus faible. I. e. au CRIHAN, vers des bandes contenues dans un robot.

<sup>26</sup> TSM : Tivoli Storage Manager. Outil IBM permettant de faire du HSM mais également de la sauvegarde. La différence entre les deux services étant que la sauvegarde à la notion de durée de rétention. Elle permet, par exemple, de restaurer un fichier à une date donnée, ce que ne sait pas faire le HSM.

## 14 Configuration des espaces disques

### 14.1 Espaces locaux

Les espaces locaux sont en fait les disques contenus dans chacun des nœuds du cluster. Pour chaque nœud, la configuration est identique.

16 disques de 36 Go sont répartis sur 4 contrôleurs SCSI. Ils sont répartis de la façon suivante pour le meilleur équilibrage de la machine :

	Disque 0	Disque système
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 1	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 2	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 3	
	Disque 4	Miroir du disque 1
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 5	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 6	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 7	
	Disque 8	Espace de swap / Checkpoint Load Leveler
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 9	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 10	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 11	
	Disque 12	Miroir du disque 8
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 13	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 14	
Espace de scratch pour applicatifs	Disque 15	

#### a- Disque(s) système

Les disques 0 et 4 sont en RAID 1, ce qui signifie que tout est littéralement dupliqué entre ces deux disques. L'espace utile est alors amputé d'un disque soit 36 Go mais en revanche, en cas de panne sur l'un des deux disques, le nœud ne subit aucune interruption de service et ne nécessite pas d'être reconfiguré après remplacement du disque endommagé. Il se change « à chaud » et il ne reste qu'à resynchroniser les deux disques.

Il en va de même pour les disques 8 et 12. L'espace de swap est utilisé par le système pour augmenter artificiellement sa mémoire vive. Les 16 Go alloués sur disques permettent en fait de considérer que chaque nœud possède 48 Go de mémoire. Même si d'un point de vue performances, il paraît impensable d'utiliser ce swap, il s'agit en fait d'un espace nécessaire parer aux imprévus. D'autre part, si l'un des deux disques venait à tomber en panne, le système continuerait à tourner sans interruption de service.

Enfin, l'espace de checkpoint Load Leveler permet de stocker les informations nécessaires au redémarrage des applicatifs (pour peu qu'ils gèrent cette fonctionnalité dans leur code) suite à l'arrêt d'un nœud. Il est donc indispensable de le protéger.

Pour résumer, ces deux espaces nous permettent d'assurer un service continu d'un point de vue système, même en cas de panne sur un disque dur.

#### b- Espace de scratch

Il s'agit d'un espace temporaire mis à disposition des utilisateurs pour leurs applicatifs. Cet espace doit donc être le plus rapide possible, car systématiquement sollicité dans de fortes proportions.

Il est composé des 12 disques de 36 Go, répartis par grappe de 3 disques sur 4 contrôleurs SCSI. Ceci afin de répartir la charge des I/O sur les 4 contrôleurs simultanément. D'autre part, cet espace est « niveau » par bloc de 128 KB. Le « niveau » est un mécanisme qui permet d'écrire un fichier en parallèle sur plusieurs disques. Ceci permet donc d'accroître sensiblement les I/O.

En terme de performance mesurée, on obtient une valeur crête de l'ordre de 50 MB/s sur les 12 disques en simultané. Les bench d'I/O relèvent quant à eux des valeurs moins importantes dues à la nature des traitements (données formatées ou non). On obtient au maximum, un débit moyen de 35 MB/s sur la durée du test.

Toutefois, un espace de travail de 134 Go situé sur la baie, permet aux utilisateurs d'effectuer des travaux s'exécutant simultanément sur les deux nœuds. Il s'agit donc d'un file system de type GPFS dont le but n'est pas la performance. Il doit être visible et accessible de la même façon par tous les nœuds du cluster.

## 14.2 Configuration de la baie de disques FastT500

La baie de disque FastT500 se configure au travers du produit « FastT Storage Manager » qui permet de définir les grappes RAID au niveau de la baie. Une fois constituées et attribuées aux nœuds, ces grappes sont vues d'un point de vue AIX comme des disques physiques uniques sur lesquels nous pouvons faire des *file system*.

Les figures ci-après montrent respectivement les grappes RAID et le disque logique résultant, ainsi que le « mapping » de ces mêmes disques logiques sur le cluster.

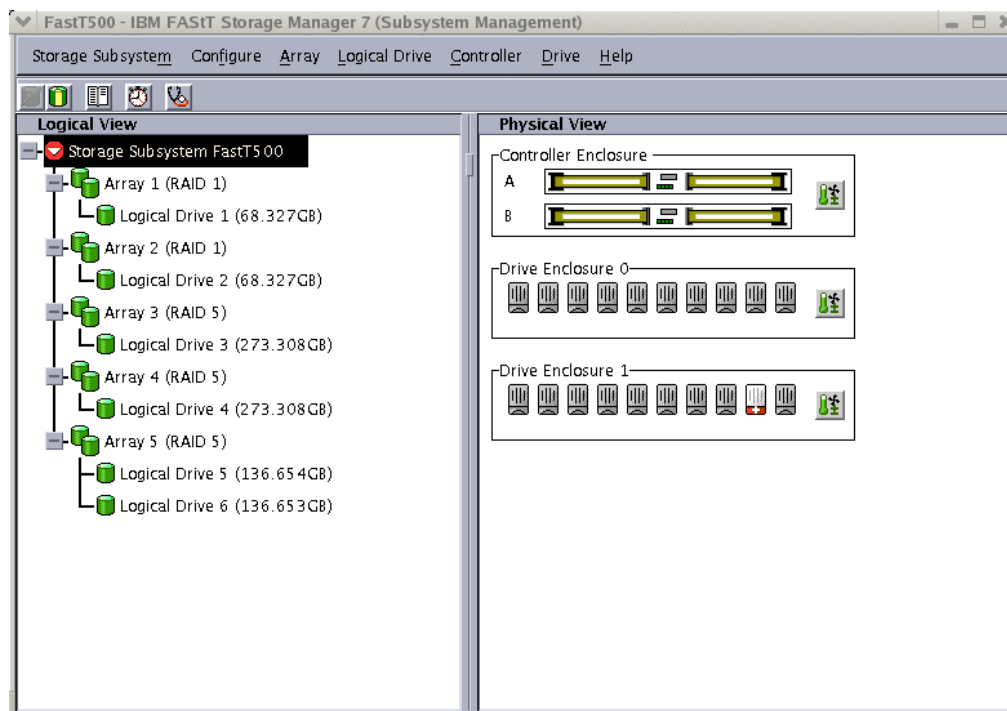


Figure 4 : Grappe RAID et disques logiques

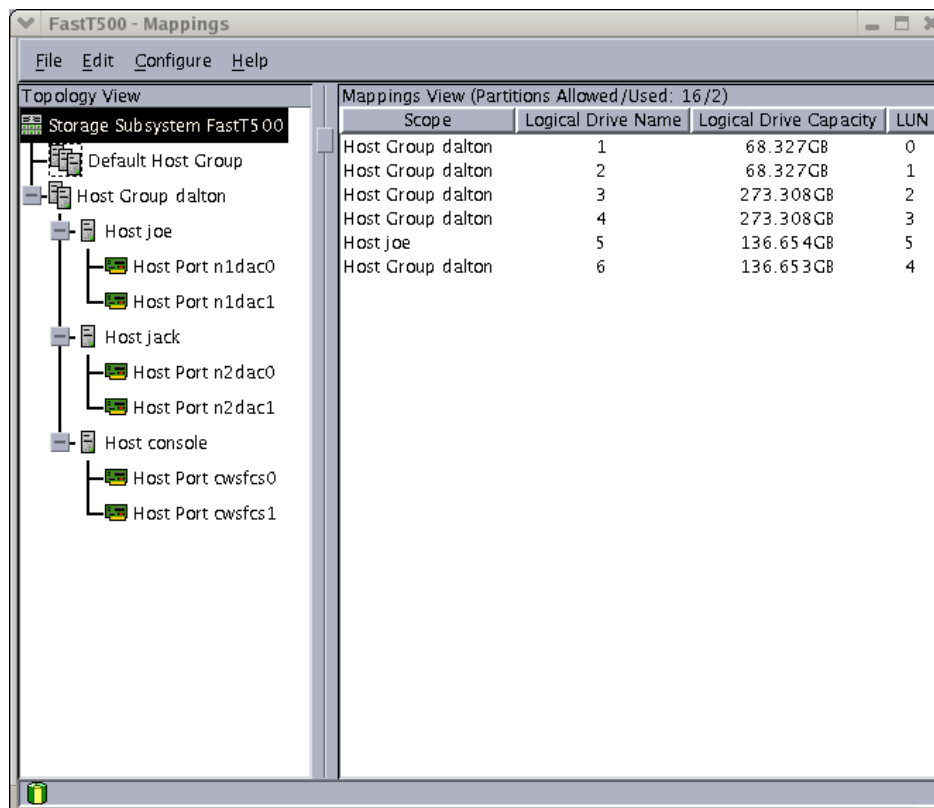
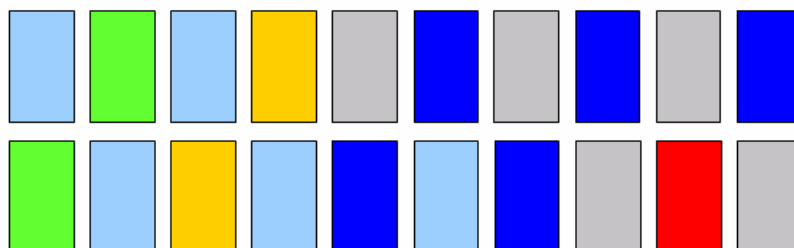


Figure 5 : attribution des disques logiques aux noeuds

L'intégrité de tous les espaces de travail hébergés sur la baie est garantie par un niveau de RAID 5 ou de RAID 1. En RAID 5, les espaces *home*, à *pair* et *save*, et en RAID 1 les espaces *indus* et *soft*. En outre, un disque est maintenu en stock pour remplacer automatiquement un disque défaillant de la baie. Il est ainsi possible de supporter la perte de disques.



- array 1, RAID1, Logical Drive 1, Controller A, 68.327 GB, Lun0
- array 2, RAID1, Logical Drive 2, Controller B, 68.327 GB, Lun1
- Disque de spare
- array 3, RAID5, Logical Drive 3, Controller A, 273.308 GB, Lun2
- array 4, RAID5, Logical Drive 4, Controller B, 273.308 GB, Lun3
- array 5, RAID5, Logical Drive 5 & 6, Controller A & B, 2 fois 136.654 GB, Lun 5 & 6

Figure 6 : grappes RAID de la baie FastT500

Les array sont vus comme des disques physiques par le système d'exploitation AIX. Des file system peuvent donc être constitués à partir de ces grappes mais doivent cependant être du type GPFS.

Le tableau ci après permet de faire une synthèse entre les disques logiques de la baie et les file system supportés.

Baie	AIX			File Systems				
Logical Drive	Noeud 1	Noeud 2	CWS	Volume Group	Logical Volume	Type	GPFS	Mount Point
1	hdisk16	hdisk16	hdisk2	mmsoftvg	mmsoftlv	JFS	Oui	/soft
2	hdisk17	hdisk17	hdisk3	mminduv	mmindulv	JFS	Oui	/indus
3	hdisk18	hdisk18	hdisk4	mmwhvg1	mmhome1lv mmwork1lv	JFS	Oui	Rq 1
4	hdisk19	hdisk19	hdisk5	mmwhvg2	mmhome2lv mmwork2lv	JFS	Oui	Rq 1
5	hdisk20	/	/	jfsavevg	savelv	JFS	Non	/save
6	/hdisk3	Hdisk20	hdisk6	dlocalvg	dlocallv	JFS	Oui	/dlocal

Remarque : le file system /home est la réunion de mmhome1lv et de mmhome2lv.  
De même, /à pair réunit mmwork1lv et mmwork2lv.

A noter également, que les file system concernant le HSM<sup>27</sup> (cf. paragraphe migration des données) ne sont pas GPFS. Par conséquent, seul le nœud 1 à connaissance de cet espace. Ceci est du au fait que le module HSM de Tivoli Storage Manager n'est pas encore validé avec GPFS.

### 14.3 Espaces de travail

Les espaces de travail sont tous hébergés sur la baie de disque, située sur le SAN<sup>28</sup>. Le SAN est découpé en deux zones afin de permettre :

- d'augmenter le taux de transfert des données entre la baie et les nœuds en mode de fonctionnement normal,
- de pouvoir accéder à la baie, même en cas de panne d'une des zone. Dans ce cas, tous les file system sont accédés au travers de la même zone.

Toutefois, étant donné que chaque nœud peut lire/écrire sur les mêmes file system, il est nécessaire de mettre en place une couche logicielle : GPFS<sup>29</sup> ainsi que HACMP/ES<sup>30</sup>.

L'espace HOME\_DIR est un espace utilisateur limité à 200 Mo par personne. Il contient les sources des codes et éventuellement les exécutables.

L'espace WORK\_DIR, de 7 Go par utilisateur, héberge les résultats des calculs devant être analysés (post processing) ou encore des jeux de données importants.

L'espace SAVE\_DIR est un espace est particulier en ce sens qu'il participe au HSM. Chaque utilisateur dispose d'un quota de 3 Go sur disque, ce qui ne représente pas la quantité réelle d'information pouvant être réellement stockée.

<sup>27</sup> Hierarchical Storage Management : Système qui consiste à déporter les fichiers les plus gros et les moins utilisés vers des espaces de stockage dont le coût au Go est de plus en plus faible. Typiquement au CRIHAN, vers des bandes DLT.

<sup>28</sup> SAN : Storage Area Network. Espace constitué de capacité de stockage (disques, bandes ...) et distribuées aux clients faisant partie de ce réseau particulier.

<sup>29</sup> General Parallel File System

<sup>30</sup> HACMP : High Availability Cluster Multiprocessing

HSM consiste à déporter les fichiers vers des bandes par un système de « pesée ». C'est-à-dire que le poids d'un fichier est d'autant plus important qu'il est ancien et gros. Dès que ce file system dépasse 70 % de sa capacité totale, les fichiers les plus lourds sont « pré migrés ». Ils sont présents à la fois sur disque et sur bande. Dès que cette valeur dépasse 90%, les fichiers sur disque sont « effacés » : il ne reste sur le disque que les « threshold » qui sont en fait les premiers octets du fichiers. Ce sont eux qui sont alors comptabilisés dans le quota. En théorie, ce mécanisme permet à l'utilisateur d'avoir un quota infini. En réalité, ce mécanisme est limité à la capacité totale des bandes du robot associé.

D'autre part, si les automatismes ne répondent pas aux besoins des utilisateurs, il est possible à chacun de déclencher volontairement la migration sur bande d'un ensemble de fichiers.

## 14.4 File system GPFS

On accède de deux manières à une baie de disques sur les clusters 1600 IBM :

- par VSD
- par HACMP / ES

### a- Fonctionnement avec VSD

Dans le système VSD/RVSD, chaque nœud est primaire pour un ou plusieurs file system. Toutes les lectures/écritures sur un file system passeront automatiquement par ce nœud. Cela signifie donc que l'on sature le switch COLONY pour des lectures/écritures alors même que chaque nœud a un accès rapide en fibre optique vers la baie, et que l'on utilise de la puissance CPU inutilement.

Par exemple, en se rapportant à la figure 4 ci-après, si une application sur le nœud 1 a besoin d'utiliser le file system /FS1, tous les I/O passeront par la couche PSSP/RVSD du nœud 1 et du nœud 2, en ayant traversé au passage le switch COLONY, puis ils seront traités par le nœud 2 au niveau d'AIX, de GPFS et enfin de VSD !

Ce mode de fonctionnement ne paraissant pas optimum, le choix a été d'utiliser HACMP/ES et GPFS.

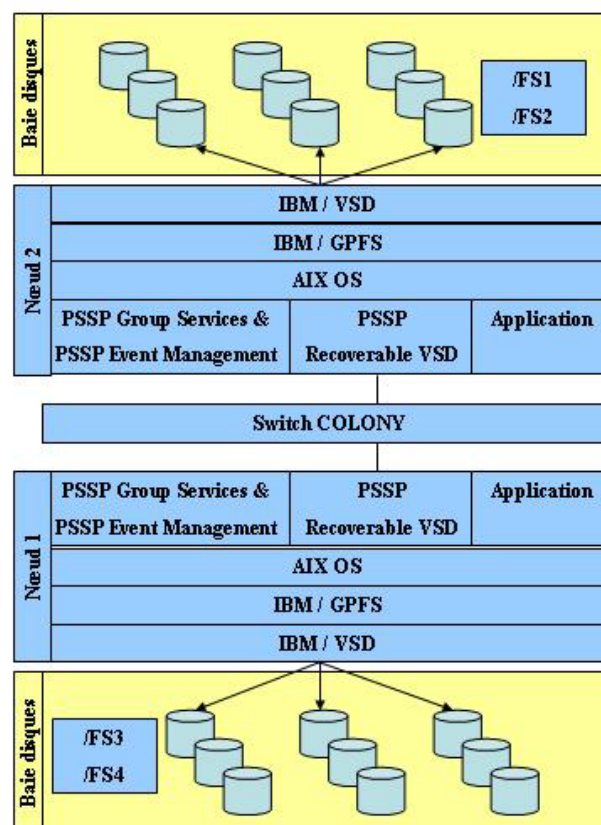


Figure 7 : Fonctionnement de GPFS en mode VSD / RVSD

#### b- Fonctionnement avec HACMP/ES

HACMP/ES a l'avantage de permettre à chaque nœud de « voir » tous les file system de la baie, et d'y effectuer des lectures/écritures. Seul le strict minimum passe par le réseau d'administration ( i.e. les lock des inode pour éviter que les nœuds écrasent mutuellement les données qu'ils traitent par exemple).

Les performances de lectures/écritures sont donc meilleures qu'avec VSD. Le seul point de contention sur ce type de solution reste l'interface fibre entre le nœud et la baie, ainsi que la capacité des contrôleurs fibres des disques.

#### Fonctionnement de GPFS avec HACMP ES

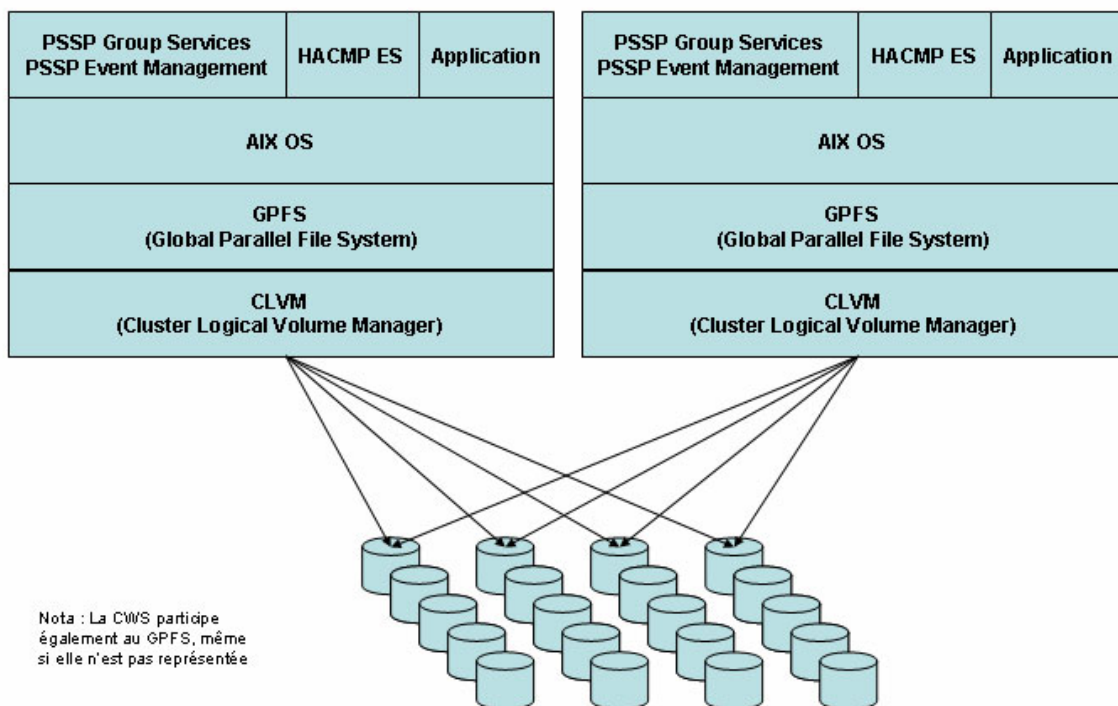


Figure 8 : Fonctionnement de GPFS en mode HACMP/ES

## 15 Exécution de travaux

L'exploitation des nœuds n'est pas symétrique. Une partie des ressources du nœud de connexion (joe.crihan.fr) est dédiée aux exécutions interactives. Il peut s'agir de compilation, d'exécution courtes de codes pour profilage ou mise au point de routine .... L'autre partie de ce même nœud, ainsi que le nœud 2 sont dédiés à l'exécution batch au travers de Load Leveler.

### 15.1 Work Load Manager (WML)

WLM est le logiciel qui permet de scinder les parties interactives et batch du nœud de connexion. Il faut en effet pouvoir garantir les ressources pour le batch pour ne pas entrer dans une politique d'overbooking (i.e. plus d'un processus/thread par processeur). Comme il n'est pas possible de prédire et d'ordonnancer les travaux effectués dans la partie interactive, il faut pouvoir la limiter quoiqu'il arrive.



En termes de ressources, la frontière est mobile. C'est-à-dire que le batch est prioritaire et ne peut pas utiliser plus de 28 CPU et 28 Go de mémoire. Par contre, la partie interactive est contrainte entre un minimum de 4 CPU/4 Go de mémoire, et un maximum de 8 CPU/8 Go de mémoire.

## 15.2 Load Leveler

Load Leveler est l'outil qui permet d'ordonnancer les travaux des utilisateurs de façon à optimiser l'utilisation de la machine en fonction des demandes utilisateurs.

L'idée est de classer les travaux en files d'attente en fonction de critères propres à chaque installation. Au CRIHAN, critère est la durée du travail, au sens temps de restitution. C'est ce qui permet de profiter au mieux des capacités qu'à Load Leveler à faire du back filling (capacité d'exécuter les travaux dans un mode autre que FIFO<sup>31</sup>).

Prenons trois travaux, dont l'ordre chronologique de soumission est J1, J2 et J3. Supposons que J1 et J2 ne peuvent pas s'exécuter car les ressources ne sont pas disponibles. Par contre, il reste ce qu'il faut pour J3 et le temps d'exécution de J3 est suffisamment court pour ne pas retarder le déclenchement de J1 et J2 : J3 passe immédiatement.

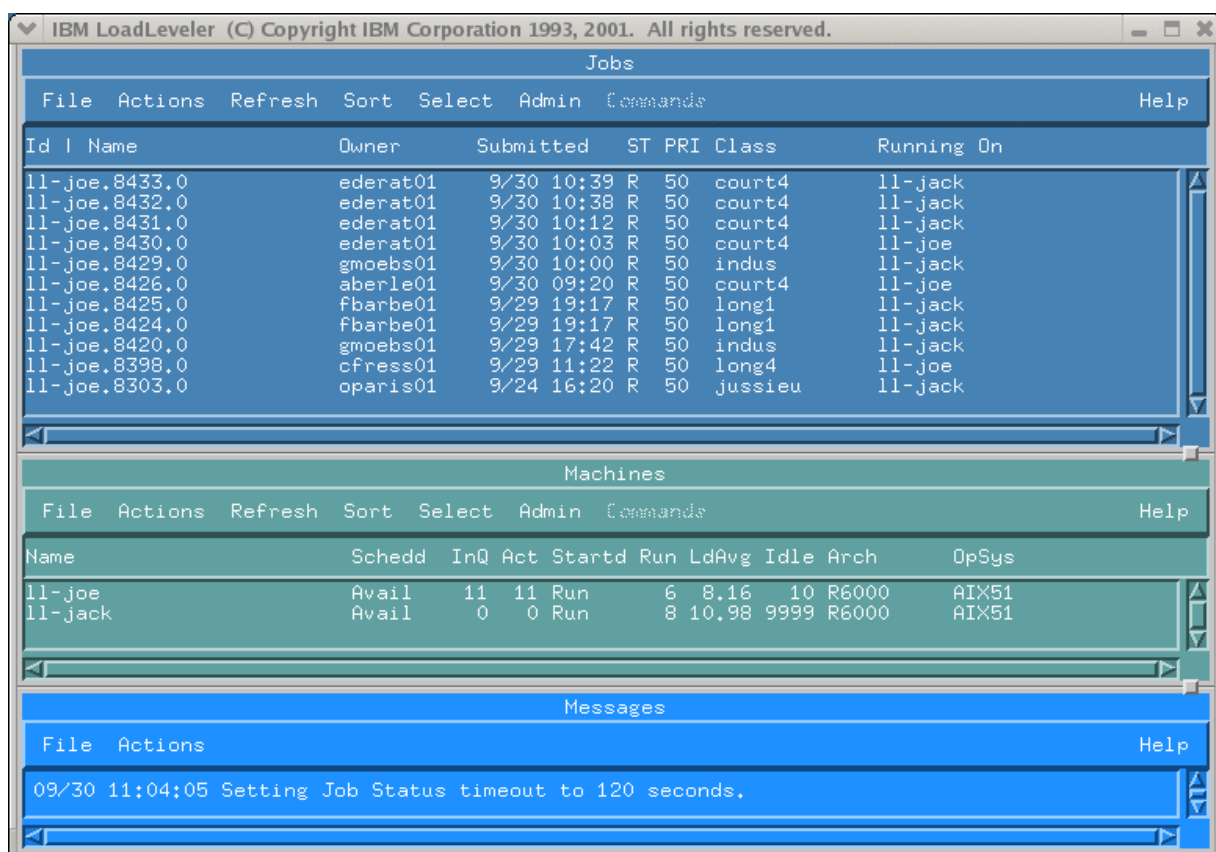


Figure 9 : Outil de gestion des travaux batch

## 16 Outils CRIHAN

Les outils CRIHAN consistent en un ensemble de scripts/programmes permettant de gérer les projets scientifiques, les comptes, les utilisateurs, ainsi que des aspects comme les impressions de lettres, compte-rendu, ou encore les statistiques concernant l'utilisation moyenne de la machine.

### 16.1 Gestion des utilisateurs

<sup>31</sup> FIFO : First Input First Output. Autrement dit premier entré, premier sortie

Cet outil est entièrement réalisé en interne. Il est totalement paramétrable, permettant à terme de gérer d'autres machines que celle de calcul. Il s'appuie sur un serveur web (apache), utilise PHP pour la partie scripts web dynamiques, et MySQL pour la partie base de données. Par ailleurs des scripts systèmes ainsi que des codes C permettent de gérer les incidences systèmes des saisies effectuées au travers de l'interface.

L'outil permet de gérer à la fois la partie administrative (projet, responsable scientifique, utilisateurs, experts, compte-rendu de consommation mensuelle ....) et la gestion de l'utilisation des ressources systèmes par l'utilisateur (login, password initial, accounting journalier, création des espaces disques .....)

Pour exemple, voici tous les événements que déclenchent la création d'un nouveau dossier scientifique.

Saisie des informations concernant ce dossier au travers de l'interface. Il s'agit de renseigner les informations sur le projet, sur son responsable scientifique, sur le laboratoire et enfin sur l'expert scientifique du projet.

Calculateur CRIHAN		
Home / Gestion IBM / Nouvelle demande		
<b>Type labo</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ajout</li> <li>Modification</li> <li>Suppression</li> <li>Liste</li> </ul>	<b>Nouveau dossier scientifique</b> En rouge, les champs obligatoires	<b>Dossiers scientifiques</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Nouvelle demande</li> <li>Renouvellement</li> <li>Liste</li> </ul>
	Titre du projet <input type="text"/>	
	Référence projet <input type="text" value="2003007"/>	
	Référence du projet père <input type="text" value="Pas de projet père"/>	
	Nombre d'heures demandées <input type="text"/>	
	Volume prévisible du stockage sur disque (en Go) <input type="text"/>	
	Volume prévisible du stockage sur robot (en Go) <input type="text"/>	
	Domaine de recherche <input type="text" value="Autre cas préciser"/>	
	Clôture automatique au 31.12 ? <input checked="" type="radio"/> Oui / <input type="radio"/> Non	
	S'agit-il d'un projet "industriel" <input type="radio"/> Oui / <input checked="" type="radio"/> Non	
<b>Thème</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ajout</li> <li>Modification</li> <li>Suppression</li> <li>Liste</li> </ul>	<b>Responsable scientifique du projet</b>	<b>Quota</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Attribution</li> <li>Réattribution</li> </ul>
<b>Experts</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ajout</li> <li>Modification</li> <li>Suppression</li> <li>Liste</li> </ul>	Personne déjà enregistrée : <input type="text" value="Nouvelle personne"/>	<b>Comptes</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ouverture</li> <li>Accounting</li> <li>(De)Blocage</li> <li>Fermeture</li> <li>Liste</li> </ul>
<b>Courriers</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Conso</li> </ul>	Civilité <input type="text" value="Monsieur"/>	<b>Personnes</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Rechercher</li> </ul>
	Nom <input type="text"/>	
	Prénom <input type="text"/>	
	Titre <input type="text"/>	

Une fois la validation effectuée, les tables de la base de données sont enrichies des informations non pré existantes. D'autre part, des « messages » sont envoyés au cluster. Dès lors, dans un délai de 60 secondes maximum, un script est déclenché. Sont alors créés les répertoires racines dans les différents espaces de travail, qui accueilleront par la suite les répertoires des différents utilisateurs travaillant sur ce projet.

Bien que du travail reste à effectuer, à ce jour toutes les fonctionnalités nécessaires à la bonne marche du quotidien existent.

D'autre part, dans le but d'automatiser tout ce qui peut l'être, les comptes-rendus de consommation mensuels sont automatiquement constitués et imprimés le premier de chaque mois. Cette correspondance est enregistrée dans l'outil et il devient alors possible de consulter tous les courriers à destination d'un ou de plusieurs projets au travers de l'interface web. Ce traitement génère également un compte-rendu permettant de juger de son bon déroulement.

## 16.2 Suivi de la consommation CPU

Chaque jour, la consommation CPU par utilisateur est calculée, puis enregistrée dans une base de données MySQL. Ces données servent, en autre chose, à constituer des graphes de consommation moyenne CPU. A noter qu'à ce jour ce graphe ne prend pas en compte les temps d'arrêt du cluster.

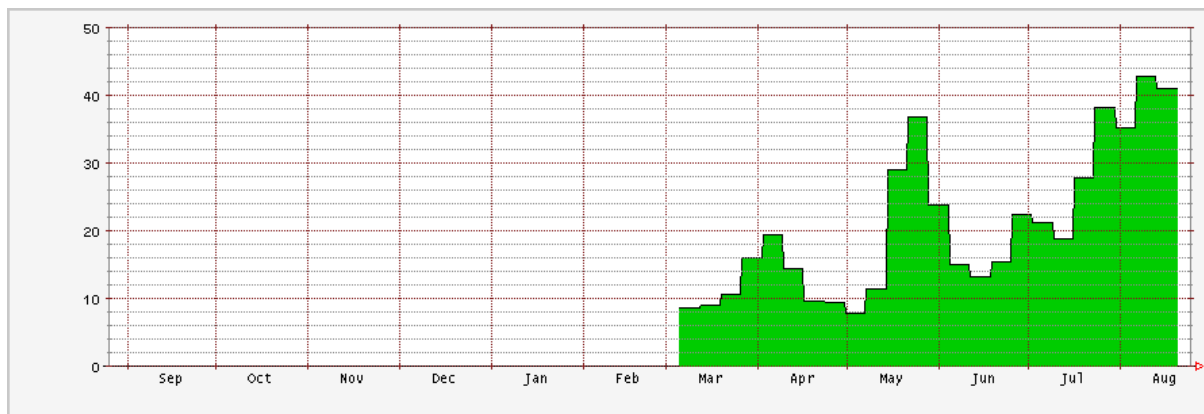


Figure 10 : consommation CPU en pourcentage depuis mars 2003

## 17 Sauvegarde des données du CRIHAN

Qu'elle différence y a-t-il entre sauvegarde et migration des données ?

La migration consiste en une photo instantanée, unique, d'un fichier. Toute modification annule et remplace l'ancienne photo par l'ancienne.

La sauvegarde consiste à faire un « historique » des modifications en conservant, sur une période donnée, les différentes versions de ce fichier. La limite reste la période qui s'écoule entre deux sauvegardes (24 heures au CRIHAN). D'autre part, nous ne conservons les différentes versions que durant 7 semaines. Au-delà, nous réutilisons la cartouche pour d'autres sauvegardes.

Cette solution de sauvegarde est en production depuis mi-septembre et est composée, en termes de matériel, d'un PC Rack 2U sous Linux (Redhat 9.0) et d'une librairie (robot) Overland, NEO 2000, 30 slots. Les lecteurs sont des HP LTO2 autorisant un taux de transfert de 35 MB/s et une capacité native de 200 GB par cartouche. La capacité native de cette solution est donc de 6 TB.

D'un point de vue logiciel, nous utilisons Time Navigator 3.7, édité par la société Atempo.

Grâce à l'acquisition de ces matériels et logiciels, nous conservons l'image des HOME\_DIR (cf. §IV-3) durant 7 semaines. Ceci nous permet de garantir un très important niveau de sécurité à nos utilisateurs. En effet, pour perdre des données, il faudrait que nous perdions 3 disques sur les 20 disques que comporte la baie, que les 3 participent à la grappe constituant le /home, et que les bandes où sont stockées les informations (environ 3 pour 45 jours de rétention) soient toutes endommagées. Cela fait un peu beaucoup !

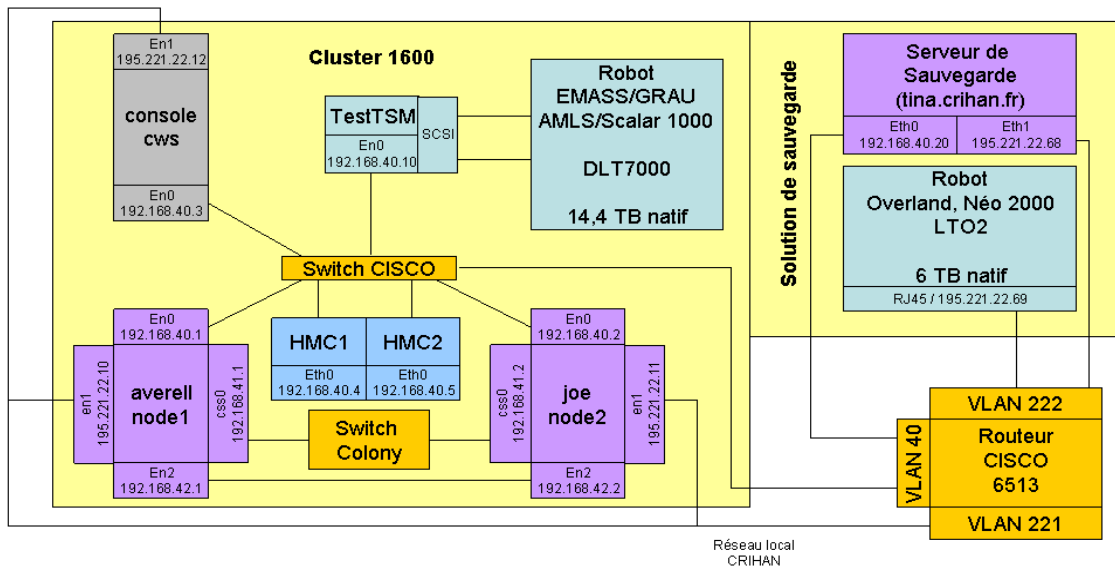


Figure 11 : serveurs de calcul et de sauvegarde

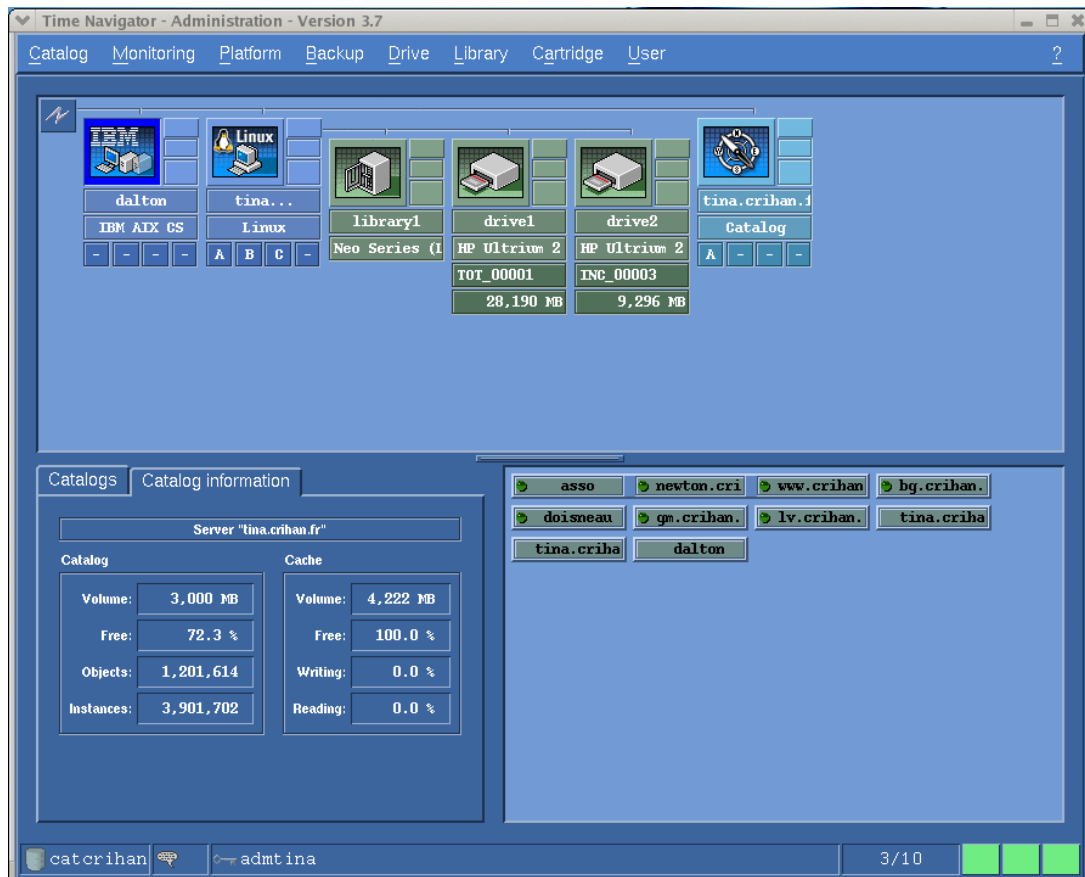


Figure 12 : TiNa 3.7, serveur de sauvegarde

**Annexe G : Appels à projets scientifiques****Premier appel à projets, novembre 2002**

Laboratoire	Titre des projets	Thème	Heures attribuées
Laboratoire de Mathématiques de l'INSA	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique.	Mathématiques Appliquées	1 000
Laboratoire de Mécanique de l'INSA	Calcul numérique des zéros de polynômes ou fonction analytique sur machine parallèle.	Mathématiques Appliquées	300
Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique	Ecoulements turbulents compressibles.	Mécanique des Fluides	60 000
Laboratoire des Fonctions Azotées & Oxygénées Complexes	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium / organolithiens.	Chimie	12 000
Laboratoire de Mathématiques de l'INSA	Optimisation d.c. pour le problème de conformation moléculaire. Algorithmes parallèles pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire.	Mathématiques Appliquées	2 000
Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques	Modélisation d'écoulement compressible turbulent.	Mécanique des Fluides	25 000
Laboratoire de adaptation Moléculaire et Structurale	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique moléculaire polarisable.	Chimie	8 000
Laboratoire Aérothermique Moteur et Environnement	Simulation des épisodes de pollution atmosphérique autour d'agglomération.	Mécanique des fluides	10 000
Groupe de Physique des Matériaux	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V.	Matériaux	600
Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs	Modélisation de l'atomisation secondaire dans THESEE.	Mécanique des Fluides	800
Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique.	Chimie	1 000
Groupe de Physique des Matériaux	Propriétés magnétiques de «monoparticules».	Matériaux	4 000
Groupe de Physique des Matériaux	Influence de la présence d'impuretés non magnétiques sur la transition de phase du modèle d'Ising tridimensionnel.	Matériaux	5 000
Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés	Sources plasmas de traitement de matériaux.	Matériaux	5 000

Laboratoire	Titre des projets	Thème	Heures attribuées
Laboratoire de Synthèse, Catalyse, Chiralité	Chimie organométallique : réactions d'insertions.	Chimie	1 000
Laboratoire de Mécanique de Lille	Etude des écoulements forcés stratifiés à grand Reynolds par simulation directe et simulation grandes échelles.	Mécanique des Fluides	25 000
CORIA	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses.	Optique non linéaire	2 000
Laboratoire des Fonctions Azotées & Oxygénées Complexes	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène.	Chimie	8 000
Laboratoire de Synthèse Organique	Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques.	Chimie	3 000
CORIA	Modélisation de la combustion turbulente supersonique non pré mélangée par une approche MIL.	Mécanique des Fluides	20 000
Centre de Recherche sur la Matière Divisée	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces de silice.	Matériaux	10 000
Laboratoire de Chimie Théorique	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en synthèse asymétrique.	Matériaux	20 000
Laboratoire Aérothermique Moteur et Environnement	Caractérisation des aérosols émis par la combustion.	Mécanique des Fluides	5 000
Laboratoire de Catalyse et de Spectrochimie	Etude théorique des propriétés superficielles d'oxydes métalliques : sondes de basicité .	Chimie	3 000
Laboratoire de Mécanique de Rouen	Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide.	Mécanique	30 000

**Deuxième appel à projets, mai 2003**

<b>Laboratoire</b>	<b>Titre des projets</b>	<b>Thème</b>	<b>Heures attribuées</b>
Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques	Simulation numérique des écoulements réactifs monophasiques et diphasiques.	Mécanique des Fluides	4 000
UMR 6614 - CORIA	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray.	Mécanique des Fluides	10 000
Laboratoire d'Etude et de Recherche sur les Matériaux	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	Matériaux	2 000
Laboratoire des Systèmes Mécaniques et d'Ingénierie Simultanée	Grandes déformations Micro-macro avec Zébulon.	Mécanique	1 000
Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans	Evaluation du parallélisme pipeliné lors du traitement des requêtes complexes sur architecture distribuée.	Informatique	2 000
UMR 6551 CNRS Mort neuronale, Neuroprotection et Neurotransmission	Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-Terminal de NR1.	Chimie	5 000
Laboratoire de Mécanique, Physique et Géoscience du Havre	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	Mécanique des Fluides	5 000