



# Rapport d'activités 2002



<b>1 L'installation du CRIHAN à Saint Etienne du Rouvray .....</b>	<b>4</b>
<b>1.1 Des retards de livraison .....</b>	<b>4</b>
<b>1.2 Un emménagement dans les plâtres .....</b>	<b>4</b>
<b>1.3 La migration des services « réseau » .....</b>	<b>4</b>
<b>1.4 La migration du service « calcul scientifique » .....</b>	<b>5</b>
<b>1.5 Inauguration du bâtiment .....</b>	<b>5</b>

Annexe A : Discours de Dany Vandromme pour l'inauguration des nouveaux locaux du CRIHAN .....	5
---	---

<b>2 Une année d'appels d'offres .....</b>	<b>6</b>
<b>2.1 Renouvellement de la machine de calcul .....</b>	<b>6</b>
2.1.1 Le besoin .....	6
2.1.2 Le cadre financier .....	6
2.1.3 Le déroulement de l'appel d'offres .....	6
2.1.4 La livraison de la machine et les procédures de recette .....	7

Annexe B : Descriptif détaillé des phases de recette du cluster IBM. ....	7
---	---

2.1.5 Déroulement de la recette .....	7
---------------------------------------	---

<b>2.2 Renouvellement des services SYRHANO .....</b>	<b>8</b>
2.2.1 Rappels sur la structure actuelle du réseau SYRHANO .....	8
2.2.2 Diversification des accès SYRHANO .....	9
2.2.2.1 La technologie BLR .....	9
2.2.2.2 ADSL .....	10
2.2.2.3 Le NERO .....	11
2.2.3 Les trafics utilisateurs sur SYRHANO .....	12
2.2.4 L'appel d'offres .....	13
2.2.4.1 Objectifs .....	13
2.2.4.2 Principes .....	13
2.2.4.3 Architecture .....	13
2.2.5 SYRHANO et IPv6 : Travaux sur le protocole IP V6 .....	14
2.2.5.1 Les faiblesses de IPv4 .....	14
2.2.5.2 Historique et définitions .....	14
2.2.5.3 Rôle du CRIHAN .....	15

Annexe C : Aspects technique sur les travaux IPv6 .....	16
---	----

<b>3 Service de calcul numérique .....</b>	<b>17</b>
<b>3.1 Disciplines scientifiques concernées .....</b>	<b>17</b>
<b>3.2 Zone d'influence du calculateur .....</b>	<b>18</b>
<b>3.3 Niveau d'exploitation d'Illiack 8 .....</b>	<b>19</b>
<b>3.4 Contrats industriels .....</b>	<b>19</b>
3.4.1 SEP (plateforme Thésée) .....	19
3.4.2 SNECMA .....	19
3.4.3 Le service d'assistance scientifique .....	19
3.4.4 Les domaines de l'assistance .....	19
3.4.5 Les besoins exprimés et leur résolution : quelques exemples. ....	19
<b>3.5 Evolution de la machine Illiack8 .....</b>	<b>20</b>
 Annexe D : Les projets 2002 exploitant le calculateur Illiack 8 .....	20
 <b>4 Le Réseau Normand en Modélisation Moléculaire .....</b>	<b>21</b>
<b>4.1 Evolution de l'équipement des laboratoires et des logiciels .....</b>	<b>21</b>
<b>4.2 Les logiciels disponibles en 2002 .....</b>	<b>22</b>
<b>4.3 Niveau d'exploitation du serveur Yoda .....</b>	<b>23</b>
<b>4.4 LA VIE DU RESEAU RNMM .....</b>	<b>23</b>
 <i>Annexe E : Publications et communications du réseau RNMM, Communications et affiches, Conférences invités, Thèses (soutenues fin 2001 -sept 2002), Thèses en cours .....</i>	<i>24</i>
 <b>5 Projets avancés .....</b>	<b>25</b>
<b>5.1 Le projet DAMIEN .....</b>	<b>25</b>
<b>5.2 Plateforme d'échanges ADICAP .....</b>	<b>26</b>
5.2.1 Etat des lieux .....	26
5.2.1.1 La plateforme initiée en 1996 .....	26
5.2.1.2 Fonctionnalités de la plateforme .....	26
5.2.1.3 Les besoins exprimés par l'association ADICAP .....	27
5.2.2 Une refonte du service en juillet 2002 .....	29
5.2.2.1 Les motivations .....	29
5.2.2.2 Les nouveautés sur le service .....	29
5.2.3 Nouvelles fonctionnalités pour de nouveaux usages .....	30
5.2.4 Vers une meilleure intégration aux dossiers médicaux normalisés ? .....	31

<b>5.3 Soutien à Science Action Haute-Normandie .....</b>	<b>32</b>
5.3.1 Vidéo transmission .....	32
5.3.2 Opérations d'été et formations .....	32
<b>6 Les serveurs hébergés au CRIHAN .....</b>	<b>33</b>
<b>6.1 Services et programmes d'initiative régionale .....</b>	<b>33</b>
<b>6.2 Serveurs d'associations diverses .....</b>	<b>34</b>

On peut distinguer dans l'année 2002 deux périodes majeures, approximativement calquées sur les deux semestres :

- Le premier semestre a vu toutes les conséquences du déménagement du CRIHAN et de ses services dans les nouveaux locaux du Madrillet, à Saint Etienne du Rouvray
- Le deuxième semestre, qui s'achève, a été marqué par les appels d'offres pour le renouvellement du supercalculateur d'une part, du réseau régional SYRHANO d'autre part.

## 1 L'installation du CRIHAN à Saint Etienne du Rouvray

### 1.1 Des retards de livraison

L'occupation du bâtiment avait été programmée pour fin 2001 : les retards s'accumulant pour un parfait achèvement, le CRIHAN a demandé une occupation progressive qui a pu se faire à partir de février 2002, de sorte à minimiser l'impact sur le déménagement des services assurés pour la communauté régionale, notamment le réseau et le calcul. La mise à disposition du CRIHAN des locaux du Madrillet a été convenue par une convention signée entre la Région et le CRIHAN le 15 février 2002.

### 1.2 Un emménagement dans les plâtres

Jusqu'à juin, et même pour certains jusqu'à début octobre, presque tous les domaines du bâtiment ont monopolisé les énergies. Les interventions répétées des entreprises ont occasionné une forte implication des personnels du CRIHAN ayant à jouer le rôle d'aiguilleurs, sinon de coordinateurs.

- Les aspects chauffage et climatisation ont été marqués par des dysfonctionnements à répétition et des problèmes très pointus de réglages.
- Fin février, le niveau d'achèvement du câblage informatique et électrique n'était pas encore satisfaisant et a nécessité des interventions continues de la part des entreprises, alors même qu'une partie du personnel travaillait déjà dans certains locaux.

- Les chemins de câble en faux planchers sont difficilement utilisables dans les salles techniques en raison du passage de canalisations qui n'ont rien à voir avec l'informatique : les activités du CRIHAN requièrent en effet l'utilisation de ces chemins de câbles au quotidien, contrairement aux installations industrielles d'aspect plus figé.
- La livraison de certaines machines a été rendue délicate par le non respect du CCTP quant à la hauteur des portes des salles techniques (correction envisagée pour début novembre), ainsi que par l'accès problématique des camions de livraison (le CCTP prévoyait d'accueillir un engin de 19 tonnes alors qu'en pratique, un 7,5 tonnes a des difficultés à y accéder.
- D'autres points comme l'étanchéité, la qualité des revêtements extérieurs, le fonctionnement des volets roulants, la mise en place des espaces verts ont laissé à désirer et révélé ainsi un manque de suivi et de coordination pour régler les problèmes soulevés.

Ces événements ont également eu un impact sur la conclusion des contrats de maintenance, certains systèmes non opérationnels ne pouvant permettre une évaluation des coûts de fonctionnement.

### 1.3 La migration des services « réseau »

Au-delà de la partie « visible » du déménagement du CRIHAN : personnel, mobilier et équipements de Mont-Saint-Aignan vers Saint Etienne du Rouvray, la partie « non-visible » c'est-à-dire la migration des liaisons et des services fut de loin la plus complexe.

Elle s'est déroulée suivant un calendrier serré de l'automne 2001 à mars 2002, en coordination avec les services de France Telecom pour certaines actions, et a porté sur des aspects de services comme sur des aspects de génie civil. En effet, dans l'attente de la construction du CRIHAN, des liaisons majeures comme celles de SYRHANO et d'InterCampus qui avaient été implantées dans les locaux de l'INSA

Madrillet, ont du être ré-acheminées vers les nouveaux locaux du CRIHAN : se sont également ajoutés les travaux préparatoires pour accueillir la liaison de RENATER 3.

Dans le détail,

- travaux de génie civil sur l'avenue de l'Université (pose de chambre de tirage des fibres), coupure du réseau et épissurage des fibres,
- déplacement des équipements réseau Inter-Campus de l'INSA vers le CRIHAN,
- migration des services France Telecom de Mont-Saint-Aignan vers le Madrillet pour les liaisons spécialisées SYRHANO et les NIS (Numéris pour lycées et collège),
- migration des liaisons spécialisées SYRHANO de l'INSA vers le CRIHAN,
- migration du service de collecte ADSL de l'INSA vers le CRIHAN,
- déplacement de tous les équipements actifs SYRHANO au CRIHAN,
- installation et configuration du réseau local du CRIHAN,
- migration « en douceur » des services de calcul numérique intensif et des serveurs Internet.

#### **1.4 La migration du service « calcul scientifique »**

Le service de calcul « ILLIAC8 » a été déménagé en mars 2002 sur une période de quelques jours. Cela a nécessité :

- une sauvegarde des données puis la déconnexion des réseaux,
- le démontage de la machine par la société SGI,
- le déménagement par SGI de Mont-Saint-Aignan vers Saint-Etienne du Rouvray,
- la ré installation dans la nouvelle salle machine du Madrillet.

Par ailleurs il a fallu procéder au démontage de la climatisation et des baies informatiques dans l'ancienne salle machine de Mont-Saint-Aignan et à la remise en état avant la restitution des locaux dont le bail arrivait à échéance le 1<sup>er</sup>

avril 2002.

La machine ILLIAC8 fonctionnera au Madrillet pendant toute l'année 2002 en attendant la mise en production du nouveau système livré fin juillet 2002.

#### **1.5 Inauguration du bâtiment**

Le ruban officiel a été coupé le jeudi 7 novembre 2002 par Alain Le Vern, Président de la Région Haute-Normandie, en préambule à une manifestation d'inauguration des nouveaux locaux qui a rassemblé quelques 150 personnes. Les personnalités invitées étaient Bruno Fontenaist, Préfet de région représenté par le Secrétaire Général aux Affaires Régionales, Jérôme Gutton, Hubert Wulfranc, Maire de Saint-Etienne-du-Rouvray, Charles Revet, Président du Conseil Général de Seine-Maritime représenté par André Danet, Vice-Président, Dany Vandromme, Président du directoire du CRIHAN. Monsieur Guy Aubert, Recteur d'Académie, Directeur du CNED et Président de l'AFNIC nous a honorés d'un discours remarqué.

Le discours de Dany Vandromme est reproduit in extenso en annexe.

*Annexe A : Discours de Dany Vandromme pour l'inauguration des nouveaux locaux du CRIHAN*

## 2 Une année d'appels d'offres

### 2.1 Renouvellement de la machine de calcul

#### 2.1.1 Le besoin

Fin 2001 fut lancé un appel d'offres pour le remplacement du calculateur ILLIAC8, acheté en 1997. Au départ utilisé par les laboratoires de mécanique des fluides, ces ressources sont depuis largement mobilisées pour la modélisation numérique et moléculaire et la machine saturée doit être remplacée en 2002.

Rappel des principales caractéristiques d'ILLIAC8

- mise en place en 1997 :
- SGI Origin 2000, 64 processeurs R1000 cadencés à 195Mhz, 32Go RAM.
- Puissance crête 25Gflops.
- Coût de l'opération intégrant la maintenance : environ 1 524 000 Euros.

#### 2.1.2 Le cadre financier

Le financement de la nouvelle opération s'inscrit dans le cadre d'une convention du CPER (fiche 15 année 2001 et 2002) établie entre les services de l'Etat et du CRHN pour un budget total qui se décompose ainsi :

- 1 600 715 Euros sur la Fiche 15 CPER années 2001 et 2002,
- 152 450 Euros par une dotation du MJENR.

Soit globalement, 1 753 165 Euros.

#### 2.1.3 Le déroulement de l'appel d'offres

La commission d'appels d'offres représentant les membres de l'association CRIHAN a procédé à la consultation durant tout le premier semestre 2002. Elle a été secondée dans cette démarche par une commission technique composée d'utilisateurs des moyens de calcul du centre de ressources informatiques et des ingé-

nieurs du CRIHAN, avec mission d'analyser les performances des solutions proposées par les constructeurs.

La consultation lancée en novembre 2001 prévoyait le remplacement d'ILLIAC8 par un système modulaire pouvant évoluer sur trois ans selon les besoins des utilisateurs. Aucune architecture n'était imposée au départ dans le cahier des charges. Seule une puissance minimale initiale de 100 Gflops était demandée avec une puissance souhaitée pouvant atteindre 250 à 300 Gflops ; l'évolution du système devant être possible par ajout de processeurs, de mémoire et de périphériques et se faire par l'intégration de nouveaux processeurs dans un nœud existant ou par l'adjonction de nœuds supplémentaires.

Les différentes phases de l'appel d'offres sur performances, de l'avis de publication à l'avis d'attribution, ainsi que toutes les étapes intermédiaires furent les suivantes :

1. 6 novembre 2001, avis de publication
2. Compte-rendu de réunion de la commission d'appels d'offres pour l'analyse et la sélection des candidatures,
3. Envoi du CCTP aux candidats sélectionnés en janvier 2002
4. 4 février 2002, réception des offres techniques,
5. Compte-rendu de la réunion de la commission d'appels d'offres pour l'ouverture et l'analyse des offres reçues,
6. Analyses des offres et des phases de tests de performances par la commission technique,
7. 17 mai 2002, la commission technique remets son rapport à la commission d'appel d'offres qui l'examine,
8. 31 mai 2002, auditions des candidats.

9. A la fin du mois de juin 2002, quatre configurations restaient en lice :

- 1\_ ADEQUAT/IBM avec une puissance crête de 330 Gflops,
- 2\_ Compaq avec une puissance crête de 160 Gflops,
- 3\_ SGI avec une puissance crête de 210 Gflops,
- 4\_ SUN avec une puissance crête de 170 Gflops.

5. 28 juin 2002, attribution du marché : La commission d'appel 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.
6. 5 juillet 2002, publication de l'avis d'attribution aux journaux officiels
7. 22 juillet 2002, livraison de la nouvelle machine dans le bâtiment du CRIHAN à Saint Etienne du Rouvray.
8. septembre/octobre 2002, phase d'installation, de mise en route et de validation préalablement à la mise en production prévue mi-octobre.

La configuration est constituée d'un cluster de deux nœuds P690 Turbo(32 processeurs Power4, 32 Go de mémoire chacun), reliés par un switch Colony, et un volume disque de l'ordre de 2 To.

#### **2.1.4 La livraison de la machine et les procédures de recette**

Le cluster a été livré fin juillet 2002.

Après l'installation physique dans la salle machine du CRIHAN, les équipes techniques d'IBM/ADEQUAT et du CRIHAN ont alors procédé au recettage du calculateur. Le calendrier de recette qui a alors été proposé à IBM est calqué sur les cinq phases décrites dans le CCTP de l'appel d'offres et s'échelonnent du 22 juillet au 21 octobre 2002.

#### *Annexe B : Descriptif détaillé des phases de recette du cluster IBM.*

Les cinq phases de la procédure de recette :

- 1 - Phase 1, installation ; deux semaines, du 22 juillet au 2 août,
- 2 - Phase 2, vérification d'aptitude ; trois semaines, du 19 août au 6 septembre,
- 3 - Phase 3, préparation de la vérification du service régulier,
- 4 - Phase 4, vérification du service régulier ; trois semaines de fonctionnement sans incident, du 23 septembre au 11 octobre,
- 5 - Phase 5, admission finale.

#### **2.1.5 Déroulement de la recette**

Au début de la phase 3, plusieurs «crashes» du nœud 2 sont survenus. Chaque incident a fait l'objet d'une collecte d'informations extrêmement poussée sur la machine en cause et d'un envoi de ces données chez IBM aux USA. Après de nombreuses vérifications (et plusieurs semaines d'itérations entre la France et les USA), il s'avère que plusieurs processeurs sont potentiellement défectueux. Malgré un échange standard des cartes posant problème, de nouveaux dysfonctionnement sont apparus. Début décembre, IBM prenait la décision de remplacer purement et simplement la totalité du nœud de calcul. La nouvelle machine devrait arriver au CRIHAN avant la fin de l'année 2002.



## 2.2 Renouveau des services SYRHANO

### 2.2.1 Rappels sur la structure actuelle du réseau SYRHANO

SYRHANO 2, qui est déployé depuis la fin de l'année 2000, est un réseau multi-usage qui offre de nombreux avantages par rapport à son prédécesseur, notamment en terme de débit, services et technologie.

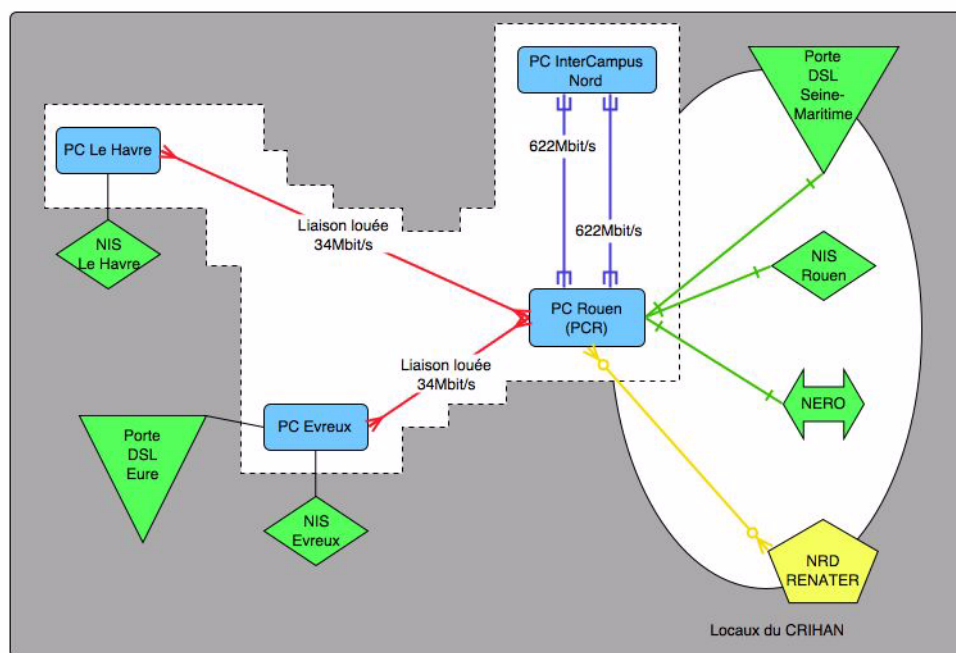
Il est constitué par :

- Un ensemble de nœuds actifs :
  - Trois points de concentration (PC), localisés au Havre, à Evreux et sur l'agglomération rouennaise, permettant de raccorder des réseaux métropolitains (RM) ou des réseaux de collecte (RC), les Nœuds d'Interconnexion sur SYRHANO (NIS) et les réseaux des sites utilisateurs. Chaque PC est constitué d'un commutateur ATM et d'un ou plusieurs routeurs IP,
  - Le PCR (Point de Concentration et de raccordement sur RENATER), en plus de son rôle de PC, interconnecte l'infrastructure SYRHANO 2 au réseau RENATER via le Nœud Renater Distribué (NRD), et potentiellement aux autres opérateurs Internet ; le PCR est installé dans les locaux du CRIHAN à Saint-Etienne du Rouvray.
- Un ensemble de liens permettant l'interconnexion entre eux des PC / PCR,
- Des réseaux métropolitains ou urbains connectés sur les PC,
- Des sites SYRHANO connectés sur les RM ou directement sur les PC,
- Des services complémentaires offerts par le CRIHAN :
  - Les Nœuds d'Interconnexion sur SYRHANO (NIS), qui concentrent les accès à bas débit vers les petits sites (typiquement des accès RNIS ou liaisons louées de débit inférieur ou égal à 2Mbit/s).
  - Un service de collecte ADSL régional, basé sur l'offre Turbo DSL de France Télécom. Une porte TDSL est installée à

Rouen (Seine Maritime), une autre à Evreux (Eure). Les liaisons (PVC ATM) venant des établissements sont remontés sur un routeur IP (Juniper M5) raccordé sur le PCR.

- Un Nœud d'Echange Régional pour les Opérateurs (NERO), connecté au PCR. NERO est un point de concentration neutre pour l'interconnexion des prestataires d'accès Internet. Il permet d'acheminer des flux entre des sites connectés sur SYRHANO 2 et des prestataires d'accès Internet privés et permet à ces prestataires d'établir des accords de peering en région.

Le schéma ci-après donne une vue d'ensemble de SYRHANO 2 et de son raccordement sur RENATER.



Sur ce schéma :

- Le périmètre de responsabilité de l'exploitant (exploitation, supervision, maintenance des équipements) est représenté en pointillés noirs.
- Tous les équipements actifs ont été acquis par le CRIHAN, et sont actuellement exploités par France Télécom (TRANS-PAC). Les services IP et ATM sont disponibles sur tout ce périmètre.
- Les PC sont représentés en bleu clair.
- La couleur verte indique certains services exploités par le CRIHAN.
- La couleur jaune indique un service offert par RENATER.
- Les traits rouges représentent les liaisons louées à France Télécom
- Les traits bleus représentent le réseau optique InterCampus, mis en œuvre par le CRIHAN.

## 2.2.2 Diversification des accès SYRHANO

### 2.2.2.1 La technologie BLR

En coordination avec le CRIHAN, Altitude Telecom, l'opérateur Normand, a déployé des antennes Boucle Locale Radio (BLR) sur les trois points de concentration actuels de SYRHANO. Cette démarche s'inscrit typiquement dans l'éventail des techniques nouvellement disponibles permettant d'enrichir et diversifier les solutions de raccordement sur SYRHANO. La finalité est d'offrir aux utilisateurs les techniques les mieux adaptées à leur situation géographique pour se raccorder dans de bonnes conditions à l'artère régionale.

Ainsi, un site ayant contractualisé un service BLR avec Altitude Télécom, peut voir son trafic directement acheminé sur SYRHANO, voire sur RENATER si le site le souhaite.

### 2.2.2.2 ADSL

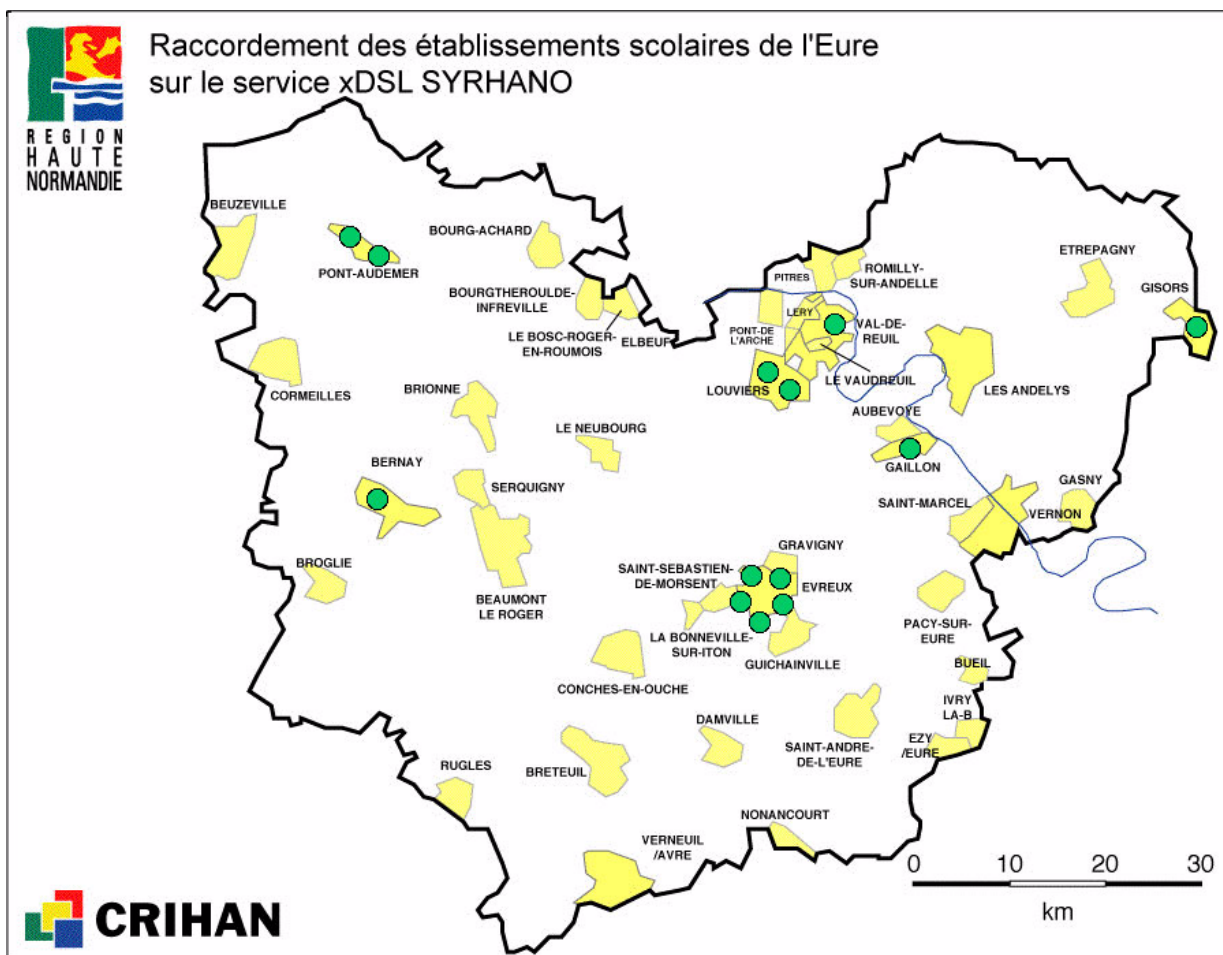
Le CRIHAN a mis en œuvre un service de collecte ADSL régional, en utilisant le service Turbo DSL de France Telecom. Deux « portes » sont opérationnelles en région (Evreux, Rouen), ce qui permet un raccordement à un tarif unique « offre sur mesure de France Telecom » pour tous les sites éligibles ADSL de la région. De plus, dans le cadre d'un partenariat avec le Rectorat de Rouen, un service dédié aux établissements scolaires a été étudié et la migration de tous les lycées et collège éligibles de la région est en cours.

Cette démarche correspond au souci d'offrir aux utilisateurs un débit plus confortable sur SYRHANO, débit leur permettant en outre de

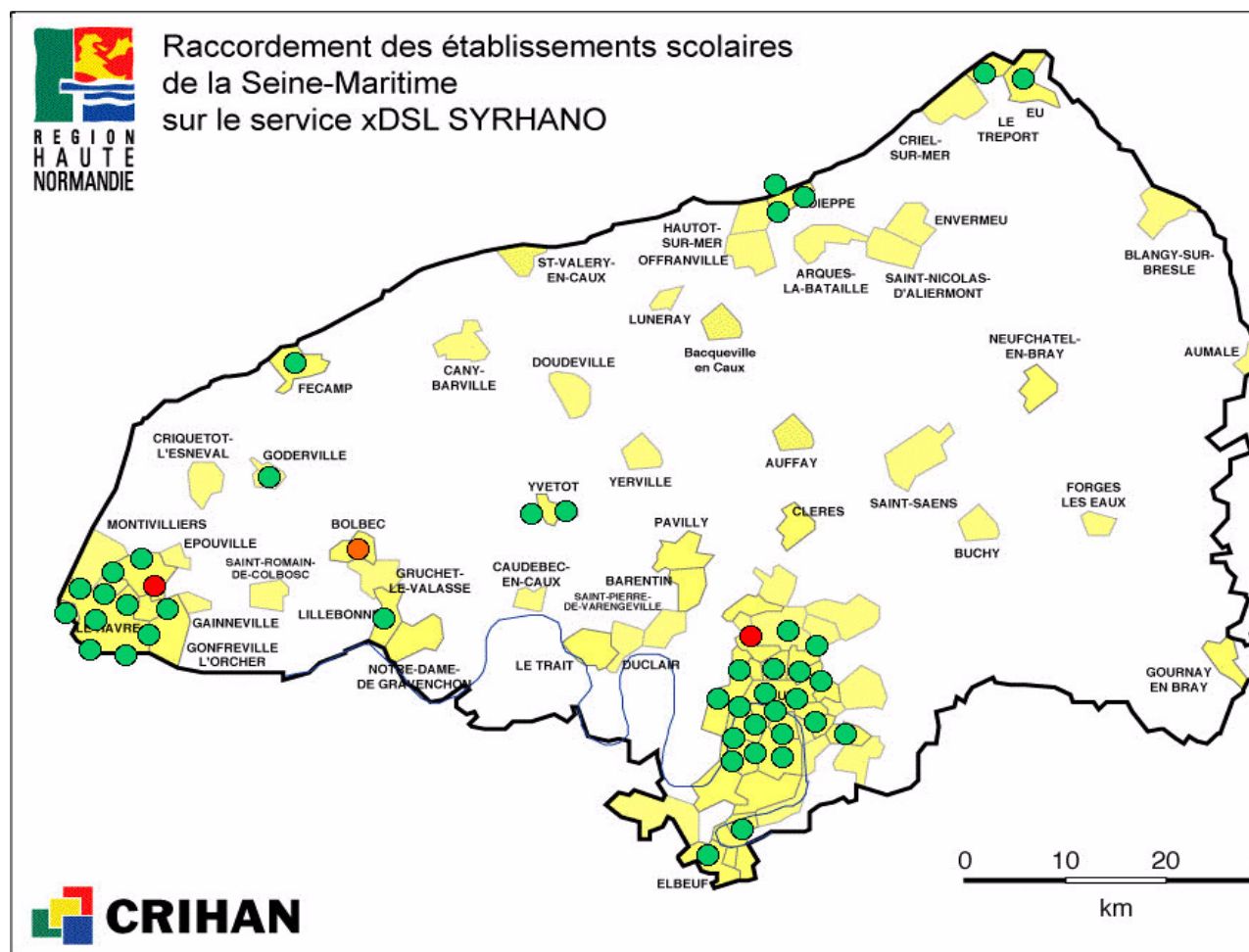
mettre en œuvre des applications qui ne sauraient fonctionner à moins, comme la visioconférence par exemple, très demandée dans les établissements scolaires.

Le déploiement suit autant le rythme de la disponibilité du service ADSL au niveau de l'établissement que la demande de ce dernier pour « migrer » du service RNIS vers le service xDSL.

Les cartes suivantes (une pour chaque département) illustrent ce déploiement. Elles sont extraites (en novembre 2002) du service web du CRIHAN qui représente à tout moment et dynamiquement, les sites raccordés et leur état :



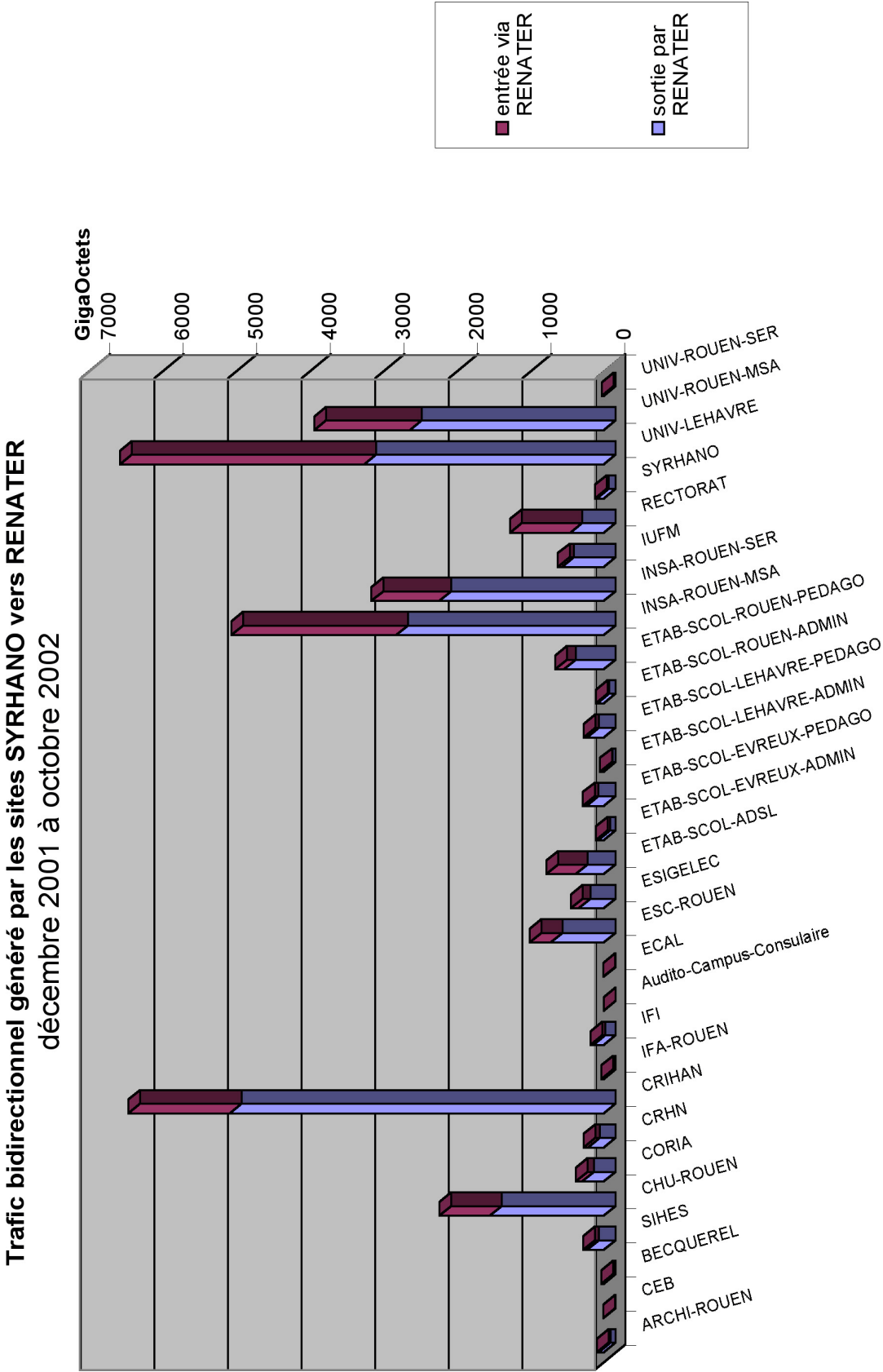
- en vert, les établissements en activité,
- en orange les établissements déconnectés, soit volontairement, soit suite à un incident quelconque,
- l'orange exprime des défaillances de fonctionnement à contrôler.



### 2.2.2.3 Le NERO

Altitude Telecom est également le premier opérateur à être raccordé au NERO mis en place par le CRIHAN cette année. Cette facilité permet à un site raccordé sur SYRHANO, selon la modalité de son choix, d'aiguiller son trafic Internet via Altitude s'il a souscrit un abonnement de raccordement à l'opérateur régional de boucle locale radio. Les échanges de trafic entre SYRHANO et l'opérateur sont également optimisés par un meilleur aiguillage local, dans l'intérêt réciproque de ces structures et de leurs utilisateurs.

2.2.3 Les trafics utilisateurs sur SYRHANO





#### 2.2.4 L'appel d'offres

Les contrats SYRHANO sont arrivés à leur terme en juillet 2002 et un nouvel appel d'offres a été préparé tout au long de l'été et publié mi-août.

Le CCTP a fait l'objet ensuite d'une concertation avec les utilisateurs et a été publié fin octobre.

##### 2.2.4.1 Objectifs

Appel d'offres sur performances afin de suivre l'évolution des services RENATER 3, il a pour objectifs :

- l'achat de routeurs rapides, en particulier pour le point de concentration de Rouen (supportant le raccordement direct sur RENATER) et pour Le Havre (liés à l'augmentation de la bande passante entre Le Havre et Rouen pour un accès rapide aux nouveaux moyens de calcul du CRIHAN en cours d'acquisition),
- l'augmentation du débit de la liaison Rouen - Le Havre,
- l'augmentation du débit de la liaison Rouen - Evreux,
- la prise en compte de nouveaux services IP par les équipes de supervision et d'exploitation du réseau,
- l'élargissement des points de présence pour prendre en comptes les initiatives locales de création de réseaux communautaires.

Afin de satisfaire aux exigences de certains utilisateurs et de préparer l'ouverture de SYRHANO à d'autres communautés (en particulier les hôpitaux), le niveau de service et la disponibilité du réseau feront l'objet de critères de qualité améliorés.

##### 2.2.4.2 Principes

Par rapport à SYRHANO 2, le futur réseau, provisoirement dénommé 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 IPv4 est élargi.
- Un service IPv6 est disponible sur l'ensemble du réseau.
- L'éventail technologique des liaisons entre les PC est élargi, et intègre par exemple les offres BLR et les faisceaux hertziens.

##### 2.2.4.3 Architecture

L'architecture de SYRHANO 2.1 est très similaire à la précédente, mais comporte les modifications suivantes :

- Un PC peut être constitué d'équipements variés : commutateur Ethernet, commutateur ATM, routeur IP, ou toute combinaison de ces équipements.
- SYRHANO 2.1 évolue vers le "tout IP". Le service IP est natif si possible ; il ne repose alors pas sur une infrastructure ATM.
- Le service ATM n'est pas obligatoirement fourni sur toute l'infrastructure SYRHANO. Des techniques de transport de PVC AAL5 sur IP peuvent être mises en œuvre si nécessaire.
- De nouveaux PC peuvent être mis en œuvre.

## 2.2.5 SYRHANO et IPv6 : Travaux sur le protocole IP V6

Depuis bientôt un an, le CRIHAN a commencé à mettre en place la migration de son réseau et du réseau régional SYRHANO sur IPv6<sup>1</sup>.

### 2.2.5.1 Les faiblesses de IPv4

Le protocole IP version 4 a été développé dans les années 70 pour un réseau Internet qui comportait une centaine de machines. Aujourd'hui la topologie et les dimensions du réseau des réseaux ont considérablement augmenté et même si IPv4 répond encore efficacement aux besoins les plus courants de nombreuses technologies et de nombreux services restent bloqués par ses lacunes. Le premier des défauts du protocole IPv4 est le nombre d'adresses disponibles, certains pays ne disposent aujourd'hui que d'une classe B (soit 65534 adresses) pour adresser la totalité de leurs abonnés. Comment, dans ces conditions, envisager des technologies comme la téléphonie fixe ou mobile sur IP quand il faudrait que chaque téléphone possède sa propre adresse. Pour pallier à ce manque d'adresses IPv4, de nombreuses astuces ont été imaginées. Ainsi le NAT ou translation d'adresse est une technique qui vise à partager une adresse IPv4 entre plusieurs stations mais le protocole IP est philosophiquement un protocole "de bout en bout" : cela signifie qu'une station doit pouvoir être identifiée de manière unique par son adresse IP. De nombreuses applications ont besoin du caractère point à point d'IP : la téléphonie sur IP, la sécurité avec IPSec, la visioconférence, les jeux en réseaux. Toutes ces applications sont incompatibles (en tous cas difficilement utilisables) avec la technologie NAT.

Au fil des décennies et des besoins, IPv4 s'est vu ajouter un nombre important de modifications et d'options (pour la Qualité de Service, la sécurité, etc.). L'utilisation d'un ajout est relativement aisée mais la combinaison de plusieurs d'entre eux reste très difficile à mettre en oeuvre.

1. IP version 6 : le protocole IP en cours est appelé IPv6

Le protocole IPv6 intègre toutes les qualités d'IPv4 mais corrige "par nature" les manques (et défauts) du protocole.

### 2.2.5.2 Historique et définitions

La standardisation du nouveau protocole IP, ou IP version 6, a débuté il y a plus de dix ans à l'IETF<sup>2</sup>. La forte croissance de l'Internet et la pénurie à court terme des adresses IP ont incité l'IETF à créer différents groupes de travail afin de réfléchir aux spécifications d'un nouveau protocole destiné à remplacer le protocole IP actuel. En 1995, le choix se porta sur IPv6.

La standardisation du protocole IPv6 est aujourd'hui achevée, celle des mécanismes de transition est proche de l'être. Le moment est donc venu d'inciter un nombre toujours plus grand de développeurs d'applications, de responsables de réseaux et d'utilisateurs à intégrer IPv6 dans leurs travaux.

- En Europe, les instances qui gèrent les réseaux pour la Recherche sont très actives pour préparer et commencer la migration vers IPv6, et proposent pour la plupart un service IPv6 pour que les premiers utilisateurs puissent expérimenter de nouveaux services.
- En France le développement du protocole IPv6 est animé principalement par trois structures :
  - l'AFNIC<sup>3</sup>
  - le GIP RENATER<sup>4</sup>. RENATER fournit maintenant<sup>5</sup> un service IPv6, comme également nombre de ses équivalents en Europe et dans le monde.

2. instance de régulation technique et de normalisation de l'Internet, chargée en particulier de définir les évolutions stratégiques des protocoles de communication de l'Internet

3. Association Française pour le Nommage Internet en Coopération

4. Réseau National pour la Technologie, l'Enseignement et la Recherche

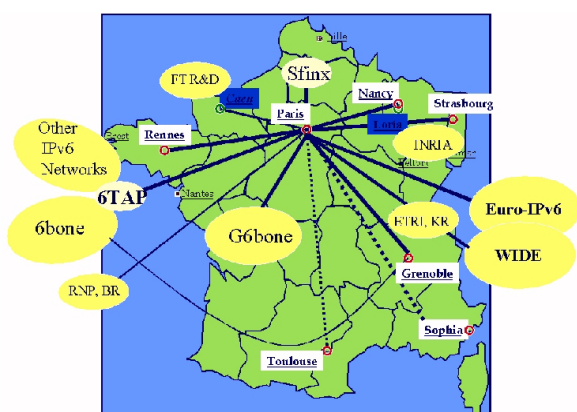
5. L'évolution récente du réseau national, RENATER3, intègre IPv6 en "natif" (concurrentement à IPv4), alors que sur l'infrastructure de base de RENATER2, le service IPv6 était rendu dans des circuits ATM dédiés.

- le G6, groupe de travail Français sur IPv6 qui, depuis 1995, poursuit un double objectif,

- ◇ regrouper les expérimentateurs d'IPv6 en France en les aidant à partager leur expérience et en coordonnant des actions communes ;
- ◇ faire connaître et promouvoir le protocole IPv6.

Les acteurs du G6 ont mis en place un groupe de travail dont le rôle est de faciliter le transfert de compétences et d'aider à la mise en œuvre du protocole : ce groupe est appelé *GN6*.

- Au niveau mondial, en 1996 est née l'idée de créer un réseau mondial de machines fonctionnant sous IPv6. Il est appelé le *6Bone* :



de déployer IPv6 "chez l'abonné" et tester la migration progressive vers IPv6 ainsi que les nouveaux applicatifs dès leur disponibilité.

*Voir schéma.*

### 2.2.5.3 Rôle du CRIHAN

Le CRIHAN fait partie du GN6.

Il est également partenaire de la jeune société *6Wind*, concepteur d'équipements réseaux mettant en œuvre IPv6 : certains de ces équipements sont en test au centre de ressources.

Deux champs de déploiement concrets d'IPv6 :

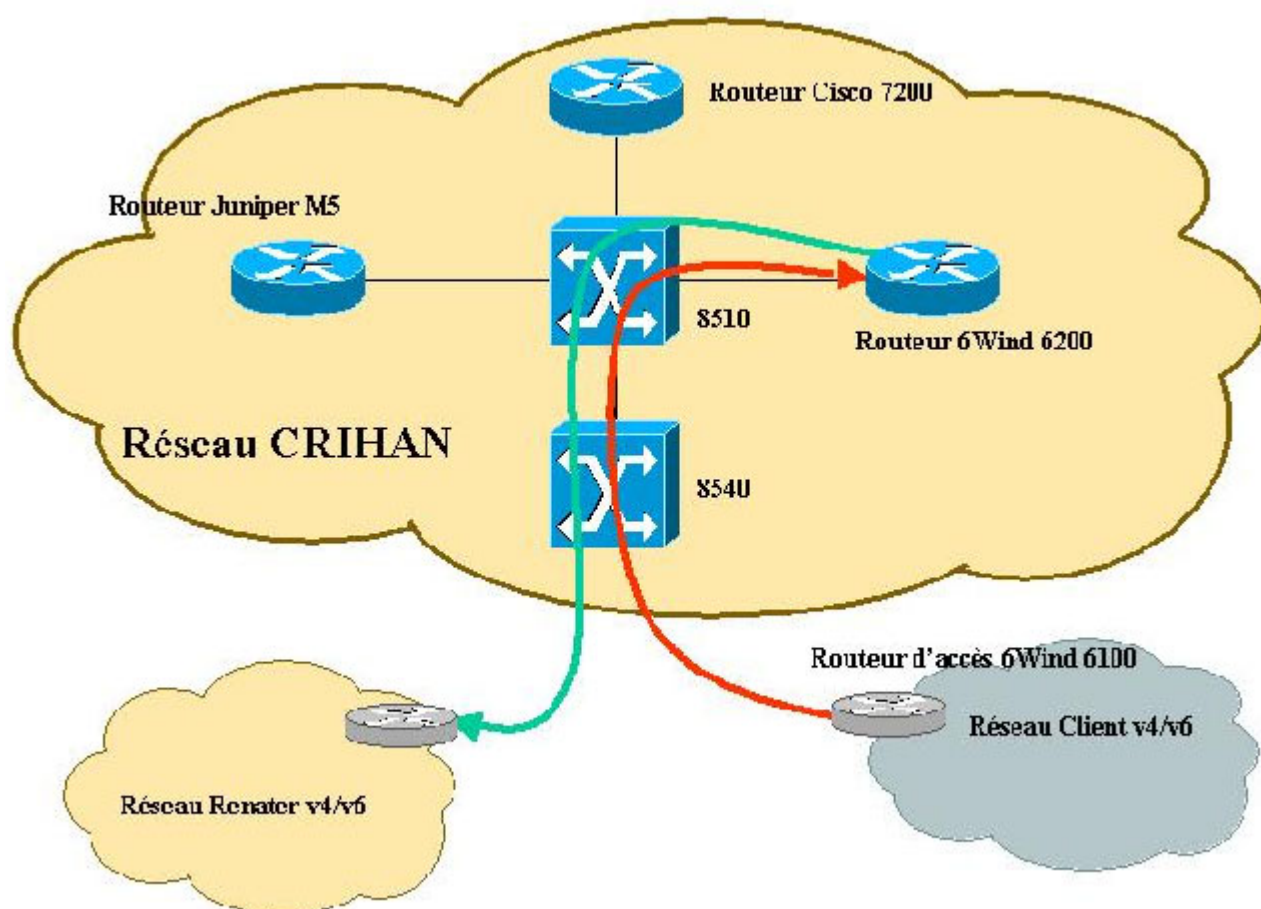
#### 1. Service TDSL :

Déploiement d'une mini plaque ADSL en IPv6 (simultanément à IPv4). Pour cela, on utilise<sup>1</sup> les portes de concentration ADSL déployées sur SYRHANO. La plaque est raccordée sur le réseau IPv6 du CRIHAN et connectée sur RENATER. L'objectif est

---

1. Des PVC ATM sont remontés vers un routeur de concentration dédié au test (6WIND 62xx). Les sites utilisateurs sont équipés d'un routeur dual stack Ethernet/Ethernet.





*Déploiement IPv6 sur xDSL en Haute-Normandie*

## 2. IPv6 sur SYRHANO

Le nouveau réseau régional SYRHANO, qui verra le jour début 2003, fonctionnera en mode IPv6 natif (en plus d'IPv4 bien sur).

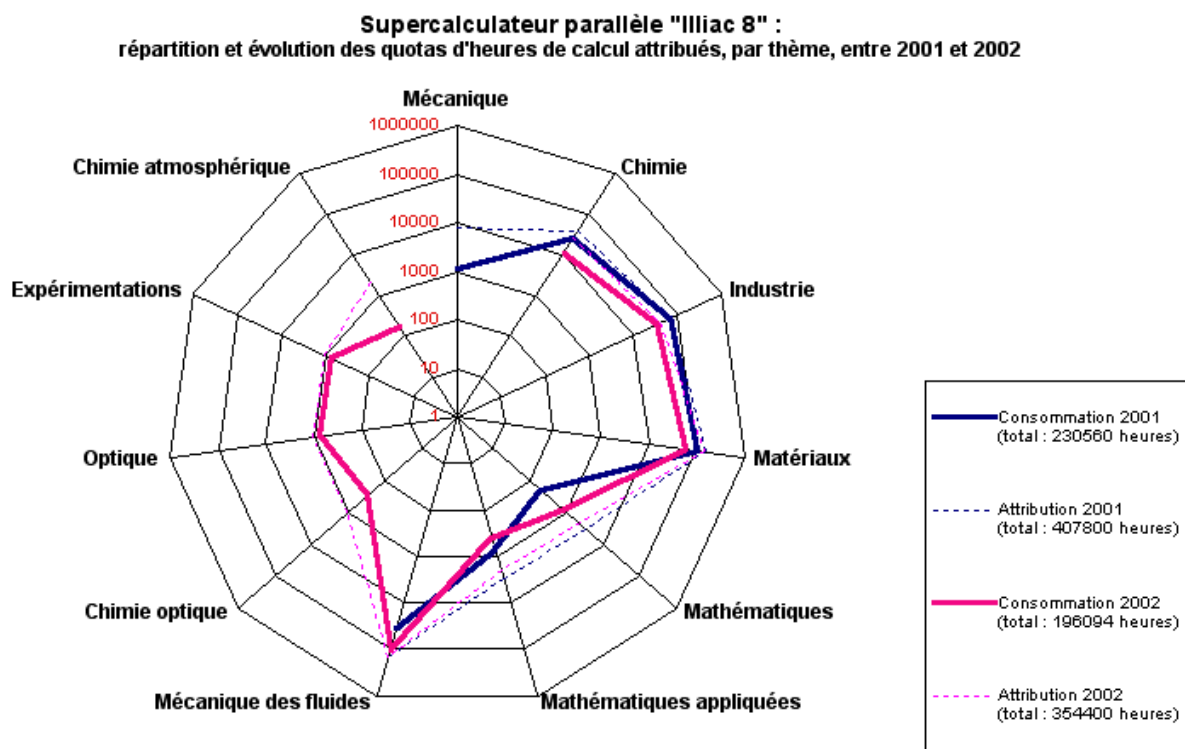
*Annexe C : Aspects technique sur les travaux IPv6*

### 3 Service de calcul numérique

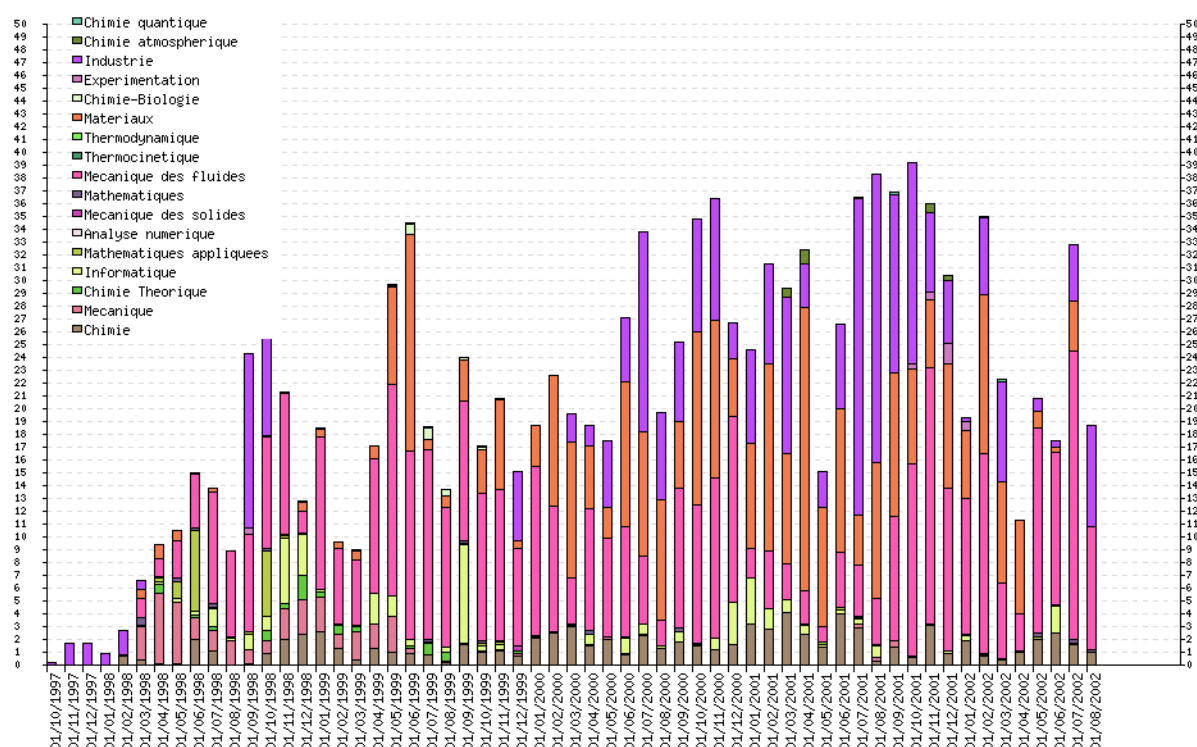
#### 3.1 Disciplines scientifiques concernées

Le graphique suivant exprime la répartition des disciplines scientifiques en termes de quotas

d'heures de calcul/processeur : sont comparées les deux dernières années ainsi que les écarts entre attribution par les experts scientifiques des projets et consommation réelles par chaque domaine.



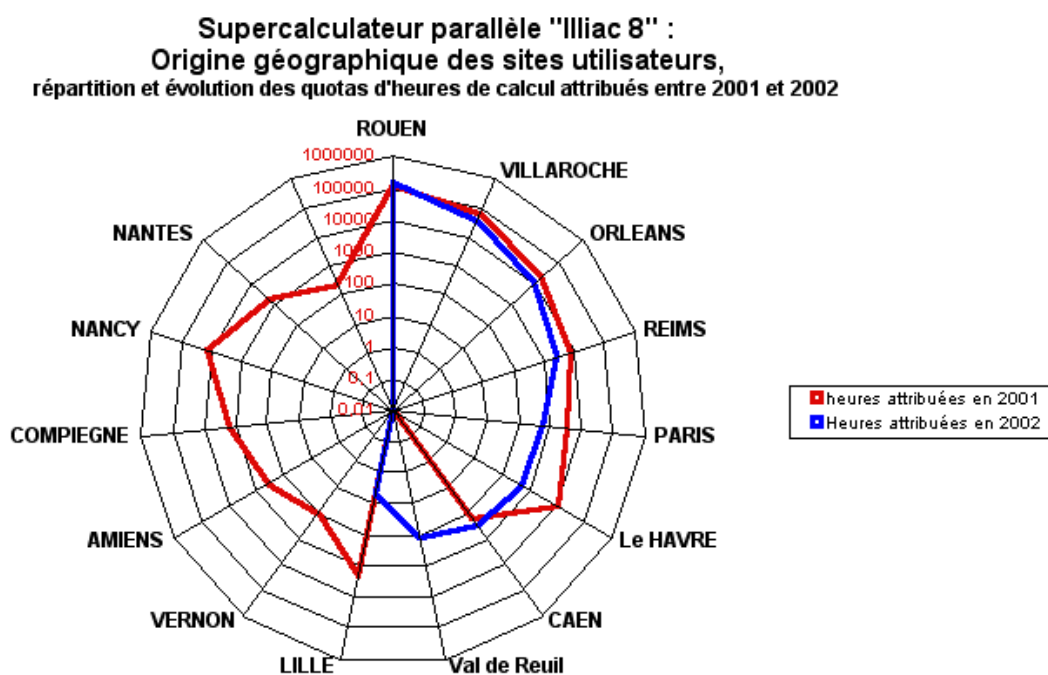
La représentation de la page suivante, en histogramme, exprime quant à elle le pourcentage occupé sur la machine par chaque discipline, tout au long de son histoire (octobre 1997 à août 2002).



### 3.2 Zone d'influence du calculateur

En ce qui concerne l'origine des laboratoires utilisateurs, répartis dans les régions constitutives du Grand Bassin Parisien, le graphique sui-

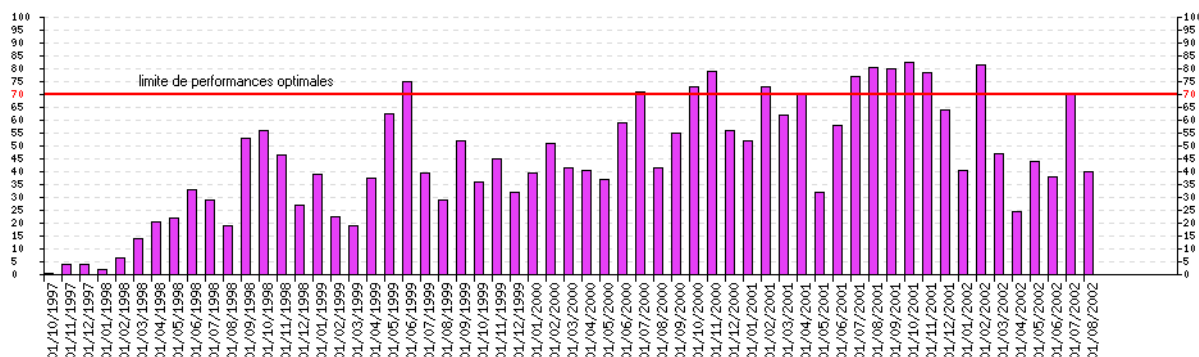
vant la représente également sous forme de quotas d'heures attribués et consommés et en comparaison des années 2001 et 2002 :



### 3.3 Niveau d'exploitation d'Illiacc 8

Ci-dessous est représentée le niveau d'exploitation des ressources du calculateur dont les

performances ne sont optimales qu'en deçà de la ligne rouge (70%).



### 3.4 Contrats industriels

#### 3.4.1 SEP (plateforme Thésée)

Un seul projet 1999022 utilise encore la plateforme Thésée, dans les mêmes conditions que les années précédentes.

#### 3.4.2 SNECMA

Le partenariat conclu avec SNECMA a fait l'objet d'un avenant, cette année, aboutissant à une réduction du nombre d'heures de calcul : ceci s'explique par le contexte morose du secteur aéronautique depuis fin 2001.

### 3.5 Le service d'assistance scientifique

#### 3.5.1 Les domaines de l'assistance

L'assistance scientifique sur Illiac8 et Atmos propose plusieurs types d'aide aux utilisateurs :

- aide au « portage » : le portage consiste à faciliter l'installation, sur le calculateur, de codes de calcul pré-existants chez les utilisateurs
- aide au « débogage » : le débogage consiste à utiliser des outils pour éliminer les erreurs dans les programmes (options de compilation, outils d'aide au développement présents sur les machines)
- aide à l'optimisation : l'optimisation vise à améliorer les performances des codes de

calcul (options de compilation, re-écriture des zones de code consommables du CPU, parallélisation)

Afin de mieux cerner les besoins des utilisateurs qui ne s'expriment pas forcément spontanément, un questionnaire détaillé leur a été adressé. L'étude des réponses fournit des directions de travail pour mieux cerner les besoins en assistance. Il en ressort trois besoins fondamentaux désormais satisfaits :

- la documentation en ligne (serveur web externe) a été enrichie dans les directions demandées par les utilisateurs : outils, parallélismes,
- une formation théorique dispensée dans les nouveaux locaux du CRIHAN a eu lieu en avril 2002 pour 3 personnes,
- une formation pratique, dispensée dans la salle informatique des nouveaux locaux du Madrillet a eu lieu en avril 2002.

#### 3.5.2 Les besoins exprimés et leur résolution : quelques exemples.

- Aide au portage de codes :
  - soumission batch, LMFN, INSA Rouen
  - soumission batch, LMI, INSA Rouen
  - consommation mémoire, ISMRA, Caen
  - conversion programme Matlab, INSA Rouen
  - soumission batch, ISMRA, Caen
  - soumission batch, LMFN, INSA Rouen

- Aide au débogage :
  - débogage code C++, Université de Reims
  - traque underflows, LAME - CORIA, Rouen
  - débogage Fortran, Université de Lille
- Aide à l'optimisation :
  - optimisation compilation, LAME - CORIA, Rouen
  - optimisation compilation, Université de Reims
  - optimisation scalaire, CORIA, Rouen
- Communications extérieures :
  - participation à un atelier de dynamique moléculaire, laboratoire GREMI, Orléans, juillet 2002 ;
  - communication orale : présentation des résultats de la parallélisation par MPI / OpenMP, SHMem d'un code de dynamique moléculaire.

### **3.6 Evolution de la machine Illiac8**

Le calculateur n'a pas connu d'évolution significative cette année : les seules opérations ont été des opérations de maintenance normale.

*Annexe D : Les projets 2002 exploitant le calculateur Illiac 8*

## **4 Le Réseau Normand en Modélisation Moléculaire**

### **4.1 Evolution de l'équipement des laboratoires et des logiciels**

Dans le cadre du CPER, fiche 15 de l'année 2000, le CRIHAN a pu réaliser une mise à niveau des stations de travail de certains laboratoires ainsi que l'achat des licences pour les logiciels Accelrys, Tripos, Gaussian et Schrödinger (voir ci-après le tableau récapitulatif des logiciels disponibles aujourd'hui).

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.

Les calculs exigeants, en CPU ou en temps de calcul, utilisent à la fois le serveur principal, Yoda, et le super calculateur, Illiac 8.

Parmi les autres, beaucoup utilisent essentiellement les logiciels graphiques (Accelrys et Tripos), directement sur leur station locale : les calculs de type Gaussian/Jaguar, lorsqu'ils sont peu gourmands, sont désormais également effectués en local.

L'utilisation des ressources du réseau ne suit pas un déroulement régulier mais est plutôt directement en rapport avec les types de périodes d'activités des laboratoires (période de modélisation, d'expérimentation, de conférences ou cours, rotation des thésards...).

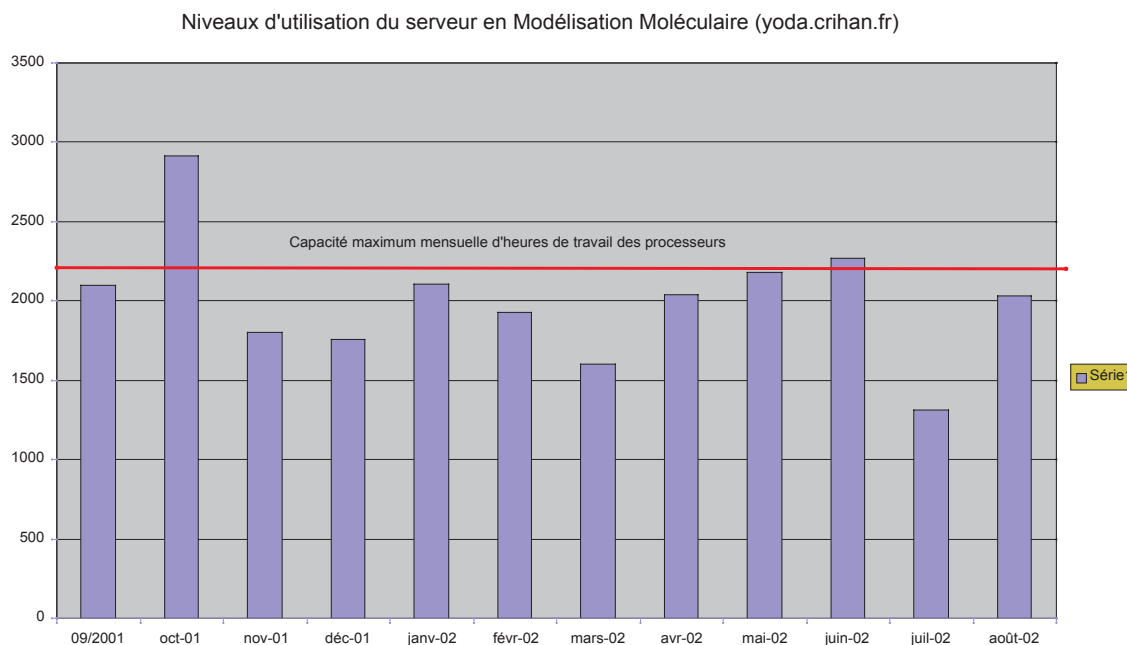
## 4.2 Les logiciels disponibles en 2002

Société	Logiciels	Fonctionnement et licences
ACCELRYS (ex MSI)	InsightII v2000 Cerius2 v4.6 Catalyst v4.6 Material Studio client (serveur non installé sur Yoda) v2.1	Licences exploitables jusqu'au 29 juin 2003 (fiche 15, année 2000).  Logiciels fonctionnant avec une interrogation de la licence : la licence doit être validée pour "lancer" le logiciel.  Fonctionnement en mode serveur de jetons (via le réseau) : le serveur <i>yoda.crihan.fr</i> distribue les jetons tant qu'il en a de disponibles. Les demandes non satisfaites faute de jetons doivent attendre leur disponibilité. 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.
TRIPOS	Sybyl v6.8 Unity v4.3	Licences exploitables jusqu'en décembre 2003 + 11 mois de compensation à titre commercial (fiche 15, année 2000).  Logiciels fonctionnant avec une interrogation de la licence : la licence doit être valide pour "lancer" le logiciel.
GAUSSIAN	g94,g98	Licence permanente pour ces logiciels distribués par ChemCAD. Version parallèle avec code source. Ces logiciels sont également installés sur Illiac8, principalement utilisés pour les calculs lourds.
SCHRODINGER	Jaguar v4.1	Distribué par ChemCad.  Licence de site pour 3 classes C, valable jusqu'en 2003. Elle contient le logiciel Maestro, peu utilisé. Jaguar est également installé sur Illiac8.

### 4.3 Niveau d'exploitation du serveur Yoda

Le graphique ci-dessous exprime le niveau de sollicitation des processeurs du serveur : il reflète une exploitation maximum de ses capacités. Les modalités de comptabilité ne permet-

tent de faire cadrer les comptes strictement au mois le mois (certains processus s'étalant sur plus d'un mois calendaire), ce qui explique que certains apparaissent en dépassement de la capacité maximum.



### 4.4 LA VIE DU RESEAU RNMM

(par le rapporteur scientifique du réseau, le Dr Alain-René Schoofs)

L'année 2002 (pour ce bilan réalisé fin octobre) a marqué :

- d'une part le très net renforcement des collaborations en réseau inter-laboratoires illustré par
  - les projets communs entre le Laboratoire de Spectrométrie de Masse Bioorganique de l'IRCOF, le Laboratoire de Chimie Théorique de l'Université Paris VI - Dr C. Claude Giessner-Prettre et Dr O. Parisel et le Laboratoire IREM de l'Université de Versailles Saint-Quentin,
  - les Projets communs entre les Laboratoires de l'IRCOF (Pr D. Davoust, Pr J-C. Quirion, Pr S. Piettre et Dr J.F. Maddaluno) et les Pr J. Costentin, T. Frébourg (Faculté de Médecine & Pharmacie de

Rouen) et le Pr F. Toma (Université d'Evry) et Dr H. Vaudry (INSERM U 418),

- la collaboration des laboratoires de l'IRCOF avec l'Université de Caen qui s'est aussi fortement accentuée avec le Groupe du Pr S. Rault (CERMN) et le CNRS UMR 6551 (Dr F. Dauphin) notamment avec un projet dans le domaine de la modélisation moléculaire, la synthèse rationnelle et l'évaluation pharmacologique d'agonistes spécifiques des récepteurs sérotoninergiques de type 5-HT7,

- d'autre part, l'accélération de collaborations suivies avec des Industriels de l'Industrie pharmaceutique et de la Chimie Fine soutenant des travaux de Recherche académique au sein même du Laboratoire de Croissance Cristalline et de Modélisation Moléculaire UC2M2 de l'IRCOF (Direction Pr G. Coquerel), notamment les Compagnies



Aventis (sites de Frankfurt, Vitry-sur-Seine et Romainville), Janssen-Cilag (Val de Rueil), Merck-Lipha (sites de Chilly-Mazarin, Pithiviers et Lyon), PCAS, Oril Industrie (site de Bolbec), Servier (site de Gidy) et Sanofi-Synthelabo (sites de Toulouse et Montpellier) ... (liste volontairement limitée pour cette note).

Ce renforcement se traduit aussi dans le nombre de DEA et de thèse en cours (liste non-exhaustive présentée en annexe E à titre d'exemple) soulignant l'ampleur du champ des études entreprises faisant appel à la Modélisation Moléculaire au sein du RNMM et associant intimement les disciplines de Résonance Magnétique Nucléaire, de Spectrométrie de Masse Biologique et de Cristallographie. Toutes ces actions nouvelles sont rendues possibles par la continuité et la cohérence des engagements financiers ayant permis la mise à disposition d'équipements scientifiques performants.

Dans les tableaux de l'annexe E sont présentés les travaux effectivement réalisés (ou en cours pour les seules thèses) dont les titres et résumés traduisent la diversité de ces travaux ainsi poursuivis et une cohérence dans les actions communes entreprises en partenariat.

*Annexe E : Publications et communications du réseau RNMM, Communications et affiches, Conférences invités, Thèses (soutenues fin 2001 -sept 2002), Thèses en cours*

## 5 Projets avancés

### 5.1 Le projet DAMIEN



**Distributed Applications and Middleware for Industrial use of European Networks**

Ce projet a débuté en janvier 2001 et prendra fin en juillet 2003. La contribution du CRIHAN repose,

- sur ses ressources de calcul,
- sur la connexion régionale haut débit via SYRHANO et vers le réseau national RENATER,
- sur sa capacité d'intégration des nouvelles technologies réseau, comme le nouveau protocole Ipv6 et la Qualité de Service.

Damien s'inscrit parmi les projets européens initiés par le programme de recherche de l'IST (Information Society Technologies). Son but est de répondre à l'émergence d'une nouvelle infrastructure de l'information, généralement décrite comme "la Grille", basée 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 ne devienne une réalité pour tous : parmi eux, l'usage d'une puissance de calcul distribuée, dans une grille de super-ordinateurs qui concerne Damien.

#### *Entités participantes*

Nom du participant	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 für Parallele Anwendungen und System mbH	Pallas	Allemagne

## 5.2 Plateforme d'échanges ADICAP

### 5.2.1 Etat des lieux

#### 5.2.1.1 La plateforme initiée en 1996

A cette époque, l'Association pour le Développement de l'Informatique en Cytologie et en Anatomie Pathologique (ADICAP)<sup>1</sup> demande l'aide technique du CRIHAN pour concevoir une plateforme d'échange et d'aide au travail collaboratif pour ses membres.

Les praticiens étaient en effet confrontés à plusieurs problèmes :

- les échanges d'informations pour la co-expertise à distance étaient jusqu'ici limités à l'utilisation du Réseau Numérique à Intégration de Services (RNIS, Numéris en France) ;
- les stations de numérisation utilisaient des protocoles d'échange propriétaires ce qui ne permettait le travail collaboratif qu'entre utilisateurs de matériels identiques

L'ADICAP avait depuis longtemps élaboré une codification pour annoter des images numérisées et fait adopter ce "standard de fait" par les industriels. Fort de ce succès, l'ADICAP a souhaité que le CRIHAN, organisme commercialement "neutre" dans la profession, définisse l'architecture d'un service lui permettant de s'affranchir des difficultés liées à la télétransmission.

Le CRIHAN a ainsi étudié, puis réalisé, une plateforme d'échange et d'aide au travail collaboratif, basée sur des protocoles ouverts issus des technologies de l'Internet. Performante et modulaire, la plateforme est périodiquement améliorée pour répondre au mieux aux besoins exprimés par les praticiens. Les industriels ont intégré dans leurs produits les techniques d'échange proposées par le CRIHAN, et coopèrent avec celui-ci pour améliorer l'efficacité du système. Ainsi, il est désormais possible pour un utilisateur, sans station de numérisation, de créer un dossier médical ADICAP et de l'envoyer à ses correspondants pour une experti-

tise à distance grâce à OpenCaseMaker, développé par la société Tribvn. Le CRIHAN a ensuite réalisé une version d'OpenCaseMaker utilisable en ligne au travers d'un simple navigateur www.

Aujourd'hui, plus de 550 utilisateurs sont inscrits au service proposé par l'ADICAP et le CRIHAN, et des dizaines d'expertises sont demandées chaque mois. De grands hôpitaux s'intéressent au service, et des études sont engagées pour mieux l'intégrer au système de gestion des dossiers médicaux.

#### 5.2.1.2 Fonctionnalités de la plateforme

La plateforme développée par le CRIHAN fonctionne sous Linux. Architecturée autour d'une base de données MySQL et des outils et protocoles standards issus du monde de l'Internet (ftp, SMTP, SSL, LDAP, etc.), elle permet, de manière sécurisée :

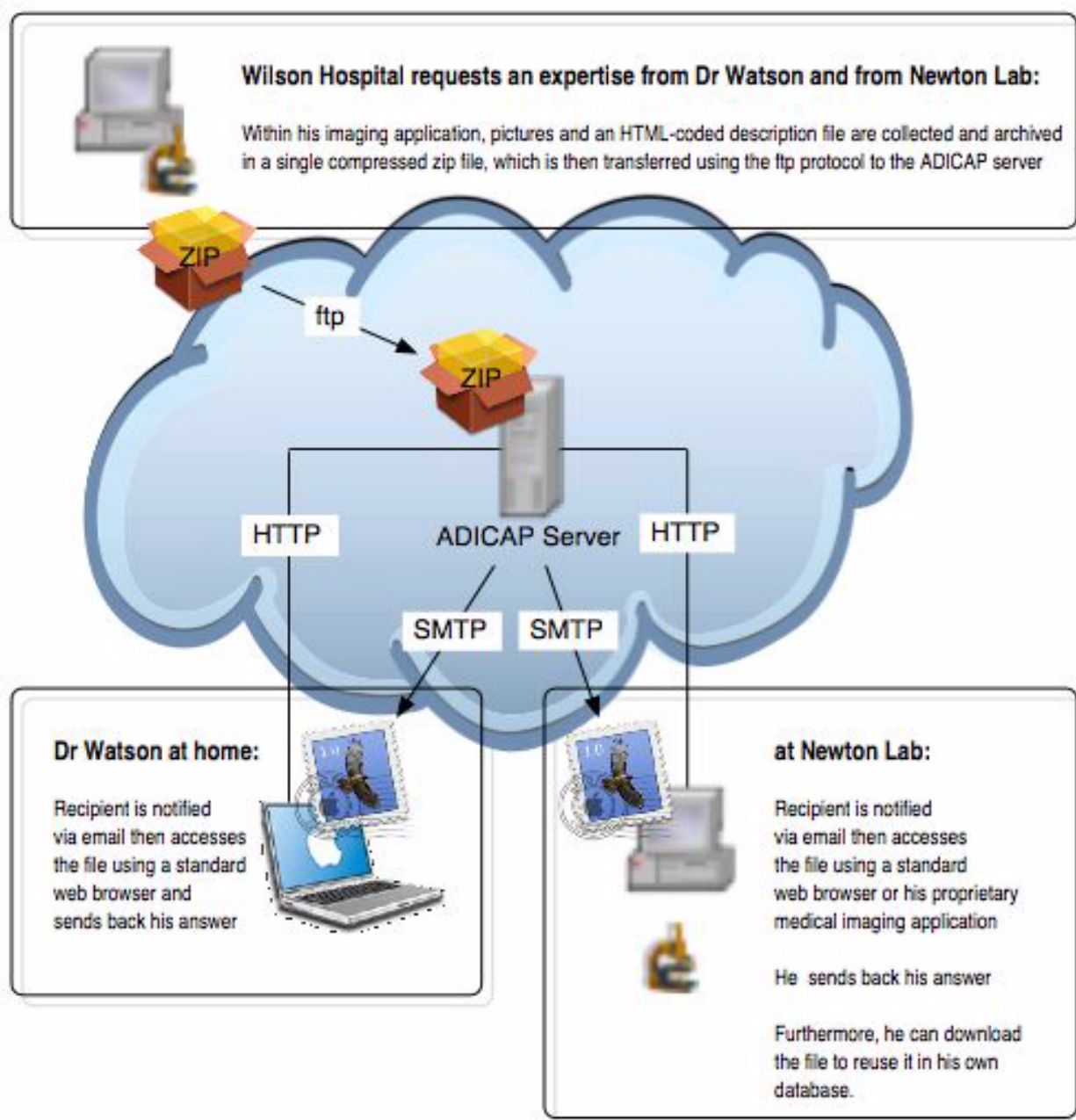
- l'inscription et la validation en ligne des nouveaux utilisateurs
- la constitution de listes d'experts
- les échanges de cas médicaux entre collègues (y compris de manière itérative - seconde opinion)
- la consultation des cas à distance
- la construction et la "modification" de dossiers médicaux (sans altération du dossier initial)
- la journalisation des échanges
- la sauvegarde et l'archivage des données

Avec, en plus :

- la possibilité pour un utilisateur d'utiliser le service intégré de gestion sécurisée de boîte aux lettres s'il ne dispose pas de ce service chez son prestataire ou dans son laboratoire
- la possibilité d'accéder au service via un lien RNIS sur des accès réservés

1. Association pour le Développement de l'Informatique en Cytologie et Anatomie Pathologique

Le schéma ci-dessous représente un échange typique entre praticiens :



### 5.2.1.3 Les besoins exprimés par l'association ADICAP

#### 1. Aspects médicaux

La réalisation d'un dossier médical utilisant l'image numérique doit se faire dans un format susceptible de contenir toutes les informations utiles à une demande d'avis et être interprétable par le plus grand nombre d'outils de lecture en

usage dans la profession.

Dépourvu d'informations nominatives, ce dossier permet de regrouper des images ordonnées, numérotées et spécifiées et de les lier à un descriptif textuel susceptible d'être classé et également spécifié. Ce dossier est largement utilisé pour l'ensemble des documents transmis dans un but de diagnostic, d'expertise,

de formation et de publication numérique.

Les principales exigences du dossier médical sont :

- le respect de la confidentialité du malade,
- la personnalisation des informations transférées par l'identification des utilisateurs : les utilisateurs inscrits doivent disposer d'un compte personnel avec mot de passe et les protocoles de transfert doivent être sécurisés,
- la garantie de l'intégrité du dossier en figeant définitivement les informations et en interdisant toute modification des dossiers originaux,
- la traçabilité et la sauvegarde de la "vie" du dossier à des fins d'expertise médico-légale.

Cependant, s'il est possible d'engager le transfert d'informations numériques sans aucune contrainte pour les dossiers qui ne sont plus directement liés à des actes de soin, il est nécessaire d'appliquer certaines garanties pour des transferts impliquant le respect des règles de la déontologie et des droits du patient : ces garanties ne peuvent être assurées que par l'utilisation d'un serveur dont l'accès est limité à la profession.

## 2. Aspects techniques

L'association ADICAP était initialement confrontée aux limitations inhérentes à l'usage de produits informatiques "propriétaires" destinés à la numérisation des images médicales : elle demande au CRIHAN d'étudier une solution permettant aux anatomopathologistes de bénéficier :

- d'une interopérabilité entre les stations de travail utilisées dans les laboratoires,
- d'une méthode alternative pour la consultation des dossiers médicaux "hors labo",
- de communications plus souples que le simple "vis à vis" autorisé par leurs outils habituels (communication point-à-point, c'est-à-dire vers un correspondant unique à chaque envoi),

- de la possibilité d'élargir leur sphère d'échanges,
- de jeter les bases d'une banque de données et de références dans un souci de formation.

Les atouts du CRIHAN dans cette démarche ont été :

- La structure du CRIHAN associe indépendance juridique et compétence informatique : neutre en tant qu'association, il peut répondre aux exigences d'une certification réclamée par les pouvoirs publics.
- Ses moyens informatiques en tant que centre de calcul et réseau régional.
- Son savoir faire dans la mise œuvre de solutions en réseau basées sur l'utilisation de logiciels standards.

Les solutions proposées par le CRIHAN :

- La définition consensuelle d'un format d'échange pour la communication (TCP/IP).
- Un format de définition structurelle des dossiers pour l'interopérabilité : allié aux normes descriptives des lésions éditées par l'ADICAP, le tout forme le "format de dossier ADICAP".
- Un lieu d'accueil pour les services : le CRIHAN développe et héberge le serveur ADICAP, assure la maintenance et la gestion des comptes des utilisateurs, supporte également les accès directs au serveur via RNIS pour les sites non raccordés à l'Internet<sup>1</sup>. L'ensemble forme la "Plateforme ADICAP".

L'existence de la plateforme résulte donc la volonté des pathologistes eux-mêmes, s'exprimant par le biais de l'association ADICAP qui

---

*1. Les pathologistes figurent parmi les plus anciens utilisateurs de l'image numérique et utilisent depuis déjà fort longtemps la télétransmission : c'est cette antécédence qui explique que leurs équipements utilisent majoritairement les réseaux de communications RNIS. N'oublions pas que la disponibilité des accès à l'Internet (à des débits convenables) dans les hôpitaux ou laboratoires n'est qu'un phénomène relativement récent.*



rassemble des pathologistes majoritairement français, pour des raisons historiques, mais qui accueille (depuis la mise place de cette plateforme en 1996), des membres de tous pays.

Les industriels impliqués dans les stations de travail et logiciels équipant les laboratoires des pathologistes ont accepté de participer à la définition des briques de base qui allaient permettre à leurs applications, via la plateforme, de pouvoir communiquer entre elles afin d'élargir le champ d'action relationnel de chaque pathologiste : c'est que l'on appelle l'Interopérabilité des applications.

### 3. Le bilan à la mi-2002

Le développement de la plateforme a été rendu possible, au niveau matériel, par les investissements de l'ADICAP dans le serveur et les équipements connexes. La partie développement a nécessité, de la part du CRIHAN, environ une année homme, répartie sur cette période.

On recense à la mi-2002 :

- plus de 550 utilisateurs inscrits,
- plus de 210 sites utilisateurs,
- environ 1000 dossiers déposés,
- entre 50 et 70 dossiers déposés par mois, chacun ayant une taille moyenne de 1,5 Mo.

### 5.2.2 Une refonte du service en juillet 2002

#### 5.2.2.1 Les motivations

D'un service expérimental, avec des fonctionnalités étudiées pour les besoins spécifiques d'une spécialité médicale, la plateforme a, au fil du temps, répondu à des besoins variés qui ont mis en évidence la nécessité de professionnaliser davantage l'outil.

Ces besoins sont essentiellement :

- Un nombre d'utilisateurs en nette progression qui exigent des capacités d'accueil supplémentaire.
- L'arrivée sur le service d'autres spécialités médicales utilisant l'image numérique et y

trouvant des structures d'accueil tout à fait adaptées ou adaptables (hématologues, cytologues, voire ophtalmologues).

- Des inscriptions massives issues de la volonté de grandes structures (AP/HP<sup>1</sup>, Hôpitaux de Lyon) ou de sociétés savantes (Groupe Français d'Hématologie Clinique).
- Reconnaissance de l'efficacité du service par l'AP/HP qui en recommande l'usage à ses médecins, dans un souci de traçabilité des échanges.
- Un besoin de "médicalisation" du service, c'est à dire de meilleur suivi, de statistiques, d'archivage médico-légal etc.
- Besoin d'accueil de nouveaux services (voir plus loin).
- Besoin d'interface plus conviviale.

#### 5.2.2.2 Les nouveautés sur le service

Un stagiaire mis à disposition du CRIHAN par l'ADICAP durant six mois, de février à août 2002, a été chargé de développer les outils de cette refonte. Celle-ci a porté sur :

- Le changement de la machine serveur pour offrir une meilleure efficacité, un espace plus large, une sécurité accrue.
- La base de données des utilisateurs a été repensée pour améliorer l'authentification et être plus adaptée aux nouveaux développements.
- L'interface utilisateurs a été rendue plus conviviale et plus riche.
- La gestion des dossiers reçus et expédiés a été améliorée (tri, statut, renvois, etc.).
- Les messages d'erreurs aux utilisateurs ont été enrichis pour répondre essentiellement aux éventuels problèmes d'incohérence ou d'intégrité des fichiers envoyés au serveur.
- Une fonction de réponse en ligne a été ajoutée. Elle permet au consultant sollicité pour une expertise ou une demande d'avis, de produire immédiatement cette réponse et d'en faire un document infalsifiable qui

1. Assistance Publique/Hôpitaux de Paris

sera exploité dans la même forme par les deux parties et qui sera agrégé au dossier initial, jusqu'à son archivage.

- Les utilisateurs disposent des outils leur permettant de modifier les paramètres de leur propre compte, en ligne (leur site d'appartenance, leur mot de passe, leur email, leurs coordonnées etc.
- Dans un souci d'euphémisation, une facilité d'inscription en ligne et une traduction de l'interface en Anglais.
- L'archivage médico légal de tous les dossiers et de leurs traitements, depuis le dépôt.
- Une sécurité accrue, et une meilleure traçabilité des échanges, auxquelles s'ajoute des éléments statistiques dédiés aux utilisateurs eux-mêmes ou à leur groupe d'appartenance.

### 5.2.3 Nouvelles fonctionnalités pour de nouveaux usages

La modularité de la plateforme développée par le CRIHAN facilite l'émergence de services nouveaux souhaités par les industriels pour répondre à des demandes spécifiques de leurs clients : à la demande de ces industriels, le CRIHAN active certaines fonctionnalités sur le serveur et développe des outils spécifiques.

- On peut par exemple citer le groupe d'étude de protocoles thérapeutiques GOE-LAM<sup>1</sup> qui utilise le service selon une procédure particulière : une trentaine d'experts se répartissent des tâches de relecture de dossiers à l'issue de laquelle un consensus se fait pour établir un protocole thérapeutique adapté. Le suivi des relectures est assuré par un serveur tiers, celui d'un des industriels participants, le tout sous le contrôle d'un administrateur. 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.

1. Groupe d'Observations et d'Etudes des Leucémies Aiguës Myéloïdes

- Un industriel propose avec le concours du CRIHAN l'expérimentation du produit TELESIDE qui préfigure la plateforme d'accueil de dossiers beaucoup plus riches (donc plus volumineux) puisqu'ils s'appuient sur des images de grande résolution, appelées "grands champs". L'intérêt d'intégrer ces données dans la description des cas médicaux est de réduire à zéro le temps de traitement des demandes de numérisation d'une partie de l'image de base quand l'expert qui fait une analyse a un doute : le cas médical comprenant initialement des données extrêmement précises des zones "à risque" (choisies par le médecin qui fait la numérisation), l'expert ne fait que "zoomer" dans ces zones pour accéder aux images grands champs. L'évolution récente de la plateforme développée par le CRIHAN intègre déjà cette notion de grands champs. Une des conséquences de cette évolution est que l'espace de stockage va devoir être revu à la hausse, de plusieurs ordres de grandeur.
- Dans le même esprit, un projet se rapportant aux grands champs est en cours de préparation. Il s'agit cette fois d'exploiter les ressources de calcul du CRIHAN pour accélérer la restitution au lecteur, d'images nettes obtenues par sélection d'une profondeur de champ virtuelle dans un fichier de très grande taille, issu de la numérisation de plusieurs niveaux d'épaisseur d'une même lame.
- OpenCaseMaker est un produit conçu par le même partenaire, à la demande du Groupe Français d'Hématologie Clinique et de la Ligue Nationale de Lutte Contre le Cancer. Installé sur une machine spécifique au CRIHAN, cet outil, accessible en ligne via Internet, permet de composer un dossier ADICAP sans l'aide d'un logiciel propriétaire associé à une station de numérisation. Il est adapté aux laboratoires peu ou mal équipés : les produits permettant de produire isolément des images numériques sont aujourd'hui légion et facilement accessibles : le problème reste d'en faire un dossier intelligible et structuré pour être

accepté par le serveur ADICAP. OpenCaseMaker répond de façon simple à cette dernière étape. Associé à l'inscription en ligne déjà évoquée, OpenCaseMaker répond au souci d'élargissement du cercle des utilisateurs du service. Ainsi, tout pathologiste pourra recourir à des experts ou simplement transmettre un dossier d'où qu'il se trouve, pour peu qu'il dispose d'un accès à Internet. OpenCaseMaker est actuellement en test sur les installations du CRIHAN (<http://ocm.crihan.fr>) et doit être prochainement directement intégré dans l'interface utilisateur du service opérationnel (<http://www.adicap.asso.fr>).

#### **5.2.4 Vers une meilleure intégration aux dossiers médicaux normalisés ?**

Les congrès internationaux de télé médecine révèlent des démarches apparentées à celle de l'ADICAP et mettent en évidence le problème des formats d'échange. Ainsi, le congrès de 2002, à Héraklion, a permis d'envisager la création d'un groupe de travail autour des facilités d'échanges interdisciplinaires qui passent par la compatibilité des formats d'échange à ce niveau : Suisses, Italiens et Français ont révélé des buts à peu près semblables et pourraient mettre en commun leurs travaux.

Plus généralement, l'anatomie pathologique reste la seule spécialité utilisant l'image numérique à ne pas être accessible par les services qui utilisent le format et protocole DICOM. C'est pourquoi l'ADICAP et le CRIHAN ont entamé des discussions avec les représentants des instances DICOM. Plus qu'une compatibilité avec les formats DICOM, la démarche est plutôt de faire prendre en compte par DICOM le système de codification des lésions mis au point depuis de nombreuses années par l'ADICAP et qui repose sur le Thésaurus qu'elle a fait traduire en plusieurs langues.



### 5.3 Soutien à Science Action Haute-Normandie

#### 5.3.1 Vidéo transmission

Sur le thème «Des idées, des ressources pour résoudre des problèmes de sciences et de technologie à l'école primaire», Science Action Haute-Normandie a organisé une vidéo transmission avec le concours logistique du CRIHAN.

A l'invitation de l'Inspection Académique de l'Eure et de Science Action Haute-Normandie, Marcel Thouin et Jean-Pierre Astolfi<sup>1</sup>, ont participé à une table ronde le mercredi 20 novembre au lycée Modeste Leroy à Evreux.

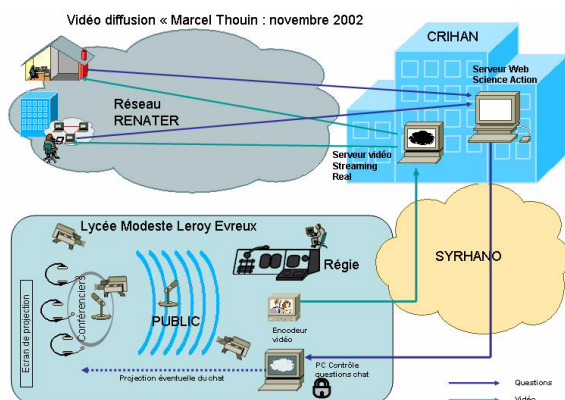
Cette table ronde était diffusée en direct sur Internet. Elle avait été préparée de longue date, notamment par la mise en place d'un forum de discussion qui a permis aux internautes de poser des questions préalablement mais également en direct le jour de la conférence-débat.



*Une vue de la table ronde*



*Le matériel déplacé*



*Principe de la vidéo-transmission mise en place à Evreux*

Pour cette première expérience, les capacités de la solution mise en place n'autorisaient qu'une quinzaine de connexions simultanées, ce qui était trop juste eu égard aux nombreux participants venus de toute la France. Science Action souhaitant reproduire régulièrement ce genre de conférence, d'autres solutions seront mises en place prochainement qui ne devraient pas induire de limitation d'audience.

1. Marcel Thouin et Jean-Pierre Astolfi sont respectivement professeurs d'université à Montréal et Rouen et didacticiens des sciences.

#### 5.3.2 Opérations d'été et formations

Le CRIHAN continue à soutenir les opérations itinérantes proposées par Science Action tout au long de l'été : désormais, Science Action organise également des formations de formateurs pour relayer ce type d'opération. Celles-ci ont lieu au CRIHAN : les nouveaux locaux du Madrillet s'y prêtent parfaitement et ont déjà accueilli cette année deux sessions de trois jours, en avril et en septembre, sessions au cours desquelles le CRIHAN intervient sur les aspects fonctionnels de l'Internet et le personnel de Science Action sur les aspects «contenus».

## 6 Les serveurs hébergés au CRIHAN

### 6.1 Services et programmes d'initiative régionale

Les serveurs d'associations et institutions régionales trouvent naturellement au CRIHAN et sur le réseau SYRHANO, un hébergement de qualité. Les équipes techniques du CRIHAN apportent dans quelques cas un soutien actif

aux auteurs pour la mise en place d'outils adaptés aux finalités recherchées. On trouvera dans le tableau suivant un inventaire de ce type de serveurs :

#### *Services et programmes d'initiative régionale*

1	Action Informatique Mathématique Physique pour la Génomique (IMPG)	<a href="http://www.impg.prd.fr">http://www.impg.prd.fr</a>
2	Agence Régionale de Développement de Haute-Normandie	<a href="http://www.ard-haute-normandie.asso.fr/">http://www.ard-haute-normandie.asso.fr/</a>
3	Agence Régionale de l'Environnement de Haute-Normandie	<a href="http://www.arehn.asso.fr/">http://www.arehn.asso.fr/</a>
4	Annuaire de la Recherche en Haute-Normandie	<a href="http://www.crihan.fr/ANNUAIRE-RECHERCHE">http://www.crihan.fr/ANNUAIRE-RECHERCHE</a>
5	Association du Technopôle du Madrillet	<a href="http://www.techno-madrillet.asso.fr/">http://www.techno-madrillet.asso.fr/</a>
6	Association Nationale des Centres de Culture Scientifique Technique et Industrielle	<a href="http://lareunion.crihan.fr/">http://lareunion.crihan.fr/</a>
7	Association pour le Développement de l'Informatique en Cytologie et en Anatomie Pathologique (ADICAP)	<a href="http://www.adicap.asso.fr">http://www.adicap.asso.fr</a>
8	Association Vétonet "Les vétérinaires sur le Net"	<a href="http://www.vetonet.asso.fr">http://www.vetonet.asso.fr</a>
9	Centres d'Entraînement aux Méthodes d'Education Active (CEMEA)	<a href="http://cemea.crihan.fr">http://cemea.crihan.fr</a>
10	Coopération des métiers de la lecture, du livre et de l'audiovisuel en Haute-Normandie	<a href="http://www.comellia.asso.fr/">http://www.comellia.asso.fr/</a>
11	Espace Régional Emploi Formation* (EREF, CREFOR, CARIF/RANFOR, OREF, APP, GR LI, PAIO/ML)	<a href="http://www.crefor.asso.fr">http://www.crefor.asso.fr</a>
12	Festival du Cinéma Nordique	<a href="http://www.festival-cinema-nordique.asso.fr/">http://www.festival-cinema-nordique.asso.fr/</a>
13	Institut de Recherche en Chimie Organique Fine	<a href="http://ircof.crihan.fr/">http://ircof.crihan.fr/</a>
14	Instituts des Formations par Alternance	<a href="http://www.ifa-rouen.fr/">http://www.ifa-rouen.fr/</a>
15	Programme Seine-Aval	<a href="http://seine-aval.crihan.fr/">http://seine-aval.crihan.fr/</a>
16	Science Action Haute Normandie	<a href="http://www.scienceaction.asso.fr/">http://www.scienceaction.asso.fr/</a>

## 6.2 Serveurs d'associations diverses

Dans le cadre de l'opération conjointe AFNIC-RENATER-CRIHAN, initiée en 2001 à l'occasion du centenaire des associations, en faveur de leur accès aux outils en ligne, le CRIHAN a

reçu un grand nombre de demandes d'hébergement provenant de toute la France. Le tableau ci-après en établit la liste :

### *Serveurs d'associations*

1	Aéro-club Rouen-Normandie	<a href="http://www.acrn.asso.fr/">http://www.acrn.asso.fr/</a>
2	Alpha Bulles Plongée	<a href="http://www.alpha-bulles.asso.fr/">http://www.alpha-bulles.asso.fr/</a>
3	Amicale Sportive d'Evry	<a href="http://www.ase.asso.fr/">http://www.ase.asso.fr/</a>
4	Association Amicale Couronnaise section Rugby	<a href="http://www.aac-rugby.asso.fr/">http://www.aac-rugby.asso.fr/</a>
5	Association culturelle de la langue russe d'Athis-Mons	<a href="http://www.langue-russe.asso.fr">http://www.langue-russe.asso.fr</a>
6	Association des Docteurs et Doctorants en Chimie et Biologie de l'Université de Rouen	<a href="http://adcbr.crihan.fr">http://adcbr.crihan.fr</a>
7	Association des Plaisanciers de Saint-Florent	<a href="http://www.appsfr.asso.fr/">http://www.appsfr.asso.fr/</a>
8	Association Ethnokids	<a href="http://www.ethnokids.asso.fr/">http://www.ethnokids.asso.fr/</a>
9	Association JALIX et son projet de Web Scolaire	<a href="http://www.jalix.org">http://www.jalix.org</a>
10	Association La Soule	<a href="http://www.lasoule.asso.fr/">http://www.lasoule.asso.fr/</a>
11	Association Oise-Vietnam	<a href="http://www.oise-vietnam.asso.fr/">http://www.oise-vietnam.asso.fr/</a>
12	Association Ramage	<a href="http://www.ramage.asso.fr/">http://www.ramage.asso.fr/</a>
13	Association Shaolin Kung Fu	<a href="http://www.shaolin-kung-fu.asso.fr/">http://www.shaolin-kung-fu.asso.fr/</a>
14	Autisme 76	<a href="http://www.autisme76.asso.fr/">http://www.autisme76.asso.fr/</a>
15	Cadre Associatif Menant, Encourageant Les Echanges Oise-Niger	<a href="http://www.cameleon-niger.asso.fr/">http://www.cameleon-niger.asso.fr/</a>
16	Centre pour l'Initiative Citoyenne et l'Accès au Droits des Exclus	<a href="http://www.cicade.asso.fr/">http://www.cicade.asso.fr/</a>
17	Club Subaquatique Rouennais	<a href="http://www.plongeecsr.asso.fr/">http://www.plongeecsr.asso.fr/</a>
18	Collectif des centres de documentation en histoire ouvriers et social	<a href="http://www.codhos.asso.fr/">http://www.codhos.asso.fr/</a>
19	Comité Départemental de Tir à l'Arc de l'Ardèche	<a href="http://www.tir-arc-07.asso.fr/">http://www.tir-arc-07.asso.fr/</a>
20	Comité des Fêtes de Saint Martin de Boscherville	<a href="http://www.cdf-boscher-ville.asso.fr/">http://www.cdf-boscher-ville.asso.fr/</a>
21	Débats en Vallée de Seine	<a href="http://www.dvs.asso.fr/">http://www.dvs.asso.fr/</a>
22	Différences	<a href="http://www.differences.asso.fr/">http://www.differences.asso.fr/</a>
23	Emplois, Partages, Initiatives de Rouen	<a href="http://www.epi-de-rouen.asso.fr/">http://www.epi-de-rouen.asso.fr/</a>
24	Ensemble Centre d'Art et d'Echange	<a href="http://www.ensemble-boscher-ville.asso.fr/">http://www.ensemble-boscher-ville.asso.fr/</a>
25	GEIST Herault	<a href="http://www.geist-herault.asso.fr/">http://www.geist-herault.asso.fr/</a>

*Serveurs d'associations*

26	Groupement Etudiant National d'Enseignement aux Personnes Incarcérées	<a href="http://www.genepi.asso.fr/">http://www.genepi.asso.fr/</a>
27	Images et Découvertes	<a href="http://www.id.asso.fr/">http://www.id.asso.fr/</a>
28	Institut d'Analyse Géographique	<a href="http://www.iag.asso.fr/">http://www.iag.asso.fr/</a>
29	La Paléoassociation	<a href="http://www.paleoassociation.asso.fr/">http://www.paleoassociation.asso.fr/</a>
30	Lire ensemble	<a href="http://www.lire-ensemble.asso.fr/">http://www.lire-ensemble.asso.fr/</a>
31	Mont-Sain-Aignan Notre Ville	<a href="http://www.msa-notre-ville.asso.fr/">http://www.msa-notre-ville.asso.fr/</a>
32	Observatoire des Usages de l'Internet	<a href="http://www.oui.asso.fr/">http://www.oui.asso.fr/</a>
33	Organisation de Tous les Manjaks	<a href="http://www.otm.asso.fr/">http://www.otm.asso.fr/</a>
34	Patrimoine du Pays de Sille	<a href="http://www.payssille.asso.fr/">http://www.payssille.asso.fr/</a>
35	Recherche en Interactivité et Multimedia dans les domaines de l'Education et de la Santé	<a href="http://www.rimes.asso.fr/">http://www.rimes.asso.fr/</a>
36	Recherches, Images, Textes et Musiques	<a href="http://www.ritm.asso.fr/">http://www.ritm.asso.fr/</a>
37	Société Française d'Onomastique	<a href="http://www.onomastique.asso.fr/">http://www.onomastique.asso.fr/</a>
38	Sporting Club de Lion Hermanville	<a href="http://www.sclh.asso.fr/">http://www.sclh.asso.fr/</a>
39	Tréteaux Amateurs de Massy	<a href="http://www.tam.asso.fr/">http://www.tam.asso.fr/</a>
40	Union Départemental des MJC des Yvelines	<a href="http://www.mjc-ud78.asso.fr/">http://www.mjc-ud78.asso.fr/</a>
41	Union des Radio-Clubs	<a href="http://www.urc.asso.fr/">http://www.urc.asso.fr/</a>
42	Union Régionale des Ingénieurs et Scientifique de Haute Normandie	<a href="http://www.urishn.asso.fr/">http://www.urishn.asso.fr/</a>
43	Université de Nantes Aviron	<a href="http://www.una.asso.fr/">http://www.una.asso.fr/</a>
		<i>Serveurs en construction</i>

# ANNEXE A

## ALLOCUTION DE DANY VANDROMME

### INAUGURATION DU CRIHAN

7 novembre 2002

Monsieur le Préfet, Monsieur le Président du Conseil Régional de Haute-Normandie, Monsieur le Président du Conseil Général de Seine Maritime, Monsieur le Recteur, Mesdames et Messieurs les membres du Conseil de Surveillance, chers collègues et amis, Mesdames et Messieurs ;

Je me réjouis de vous voir réunis aujourd'hui au CRIHAN à plus d'un titre. Tout d'abord, pour avoir le privilège de vous expliquer le mot « inauguration » en 2002, pour un projet qui a vu le jour en 1991, et ensuite pour pouvoir le resituer dans une perspective résolument tournée vers l'avenir. C'est de ce projet que je souhaite vous parler, plutôt que du nouveau bâtiment qui l'héberge aujourd'hui.

#### **Quelques mots pour le passé tout d'abord**

Dès la fin des années 1980, en même temps que germait à l'INSA et au CORIA l'idée du CERTAM, les collectivités avaient aussi le souci de mutualiser et optimiser les efforts qui leur étaient demandés dans le domaine de l'informatique et des télécommunications. L'Internet, dont tout le monde se réclame aujourd'hui, était totalement inconnu. La seule connexion à l'Internet existant dans la Région était celle du CORIA, qui était alors raccordé à 64 kbit/s au CIRCE, centre informatique du CNRS situé à Orsay. Le nom de domaine CORIA.FR est un des tout premiers noms de domaine INTERNET déclarés en France, dans la mouvance de l'INRIA et du CNRS.

Afin de répondre aux besoins de plus en plus importants en moyens de calcul, qui étaient nécessaires aux activités de modélisation numérique des laboratoires (et dont j'assume sans doute une part importante de la culpabilité), mais aussi dans le but de renforcer la cohérence et les échanges au sein du

dispositif régional d'enseignement supérieur et de recherche, un projet a pris forme pour faire évoluer globalement les ressources de calcul et de télécommunications de cette communauté d'utilisateurs. Ce projet a eu la chance d'avoir, dès 1991, un écho favorable à fois auprès du Conseil Régional (M. Dubosc) et auprès des conseils généraux (MM. Trassy-Paillogues et Leroy).

Une étude de définition a été entreprise dès le 1er avril 1991 avec 3 personnes, grâce à un financement du Conseil Régional. Qui se souvient encore que le projet a été hébergé pendant plusieurs mois au 3ème étage de l'Immeuble Fontenay du Conseil Régional ?

A la suite de cette étude, l'association CRIHAN (le nom a été difficile à trouver, mais j'avoue que la notion de décibel a milité en sa faveur) a été créée en octobre 1991 et elle s'est installée dans ses locaux de Mont Saint Aignan le 1er novembre 1991. En parallèle, une autre association a été créée en 1992 pour s'occuper des aspects réseau. Cette association, qui est SYRHANO, fédère tous les utilisateurs du réseau régional du même nom, même si elle n'a pas de rôle opérationnel comme le CRIHAN.

La mission du CRIHAN est définie autour de trois thèmes d'activités :

- Moyens de calcul, collectifs et performants ;
- Réseaux de télécommunications ;
- Formation.

Dès l'installation du CRIHAN, les trois thématiques ont été poursuivies avec efficacité et persévérance, ainsi que je vais m'efforcer de vous en résumer les jalons :



### ***Moyens de calcul collectifs et performants***

1992 :

- Installation d'un supercalculateur SIMD de 4096 processeurs parallèles (MASPAR) ;
- Installation d'une grappe de 5 stations de travail IBM 6000-530h (dix ans plus tard, cela s'appelle un cluster !) ;
- Première dotation d'équipements de la société SUN Microsystems pour l'accompagnement du projet ;

1993

- Installation d'un serveur de calcul SGI (8 processeurs et mémoire partagée) et mise en place d'un premier service national pour le traitement des séquences pour la recherche sur le génome ;

1995

- Installation d'un serveur de calcul vectoriel CONVEX à 4 processeurs (il sera « upgradé » par la suite en cannibalisant son homologue de l'Institut Pasteur à Paris) ;

1997

- Installation de la machine ILLIAC-8, dans le cadre des actions prévues pour le Contrat de Plan Interrégional du Bassin Parisien ;

1998

- Déploiement du service de modélisation moléculaire avec un serveur central au CRIHAN et 8 stations graphiques installées dans les laboratoires de la région, avec gestion centralisée des licences logicielles ;

2002

- Installation du serveur de calcul IBM SP4 (qui est la version très intégrée de l'architecture de grappe installée en 1992 !).

Au-delà des outils de calculs, ces moyens communs ont permis l'émergence de nouveaux projets, au CRIHAN tout comme dans les laboratoires, et ont permis également de donner à la Région Haute-Normandie, une visibilité nationale et européenne dans le domaine des moyens de calcul. Le CRIHAN est reconnu aujourd'hui comme le premier centre de ressources de calcul en France, immédiatement après les centres à vocation nationale comme l'IDRIS, le CINES ou le CEA.

Ces moyens de calculs ont permis également au CRIHAN de participer de façon active aux premiers projets européens de calcul distribué, comme METODIS (programme ESPRIT) ou DAMIEN (5ème PCRD). Ces projets s'appellent communément aujourd'hui : GRID !

La disponibilité de tels outils de calcul a profité aux laboratoires (pas seulement de la région, mais de toutes les régions du Bassin Parisien). J'ai également en mémoire (je devrais plutôt dire le CRIHAN), d'avoir servi de ressource de calcul pour des chercheurs du CORIA pendant leur séjour post-doctoral à l'Université de Stanford ou de Manchester (grâce aussi au réseau évidemment). Mais je me souviens également que le service de traitement des séquences, dès 1993, représentait pour la communauté nationale, une ressource comparable à celle qu'elle retirait du NCBI américain ! L'étendue des outils logiciels pour la modélisation moléculaire reste encore aujourd'hui une ressource unique au niveau national !

Ces moyens ont également profité aux partenariats industriels de nos laboratoires de recherche, en particulier dans les secteurs de l'aéronautique, de l'hydrodynamique ou de la modélisation moléculaire par exemple. Ils contribuent également de façon significative à la politique régionale de recherche, dans laquelle s'inscrit parfaitement la convention de

partenariat signée entre le groupe SNECMA-Moteurs et le CRIHAN pour la période 1998-2002, et dont le renouvellement est en cours de discussion. Ce type de protocole définit le rôle du CRIHAN comme :

- Fournisseur de ressources de calcul pour des modélisations de très grandes tailles ou de démonstration ;
- Support d'exploitation de codes industriels par les laboratoires universitaires (comme THESEE, CANARIE ou N3S-NATUR) dans le cadre de programmes nationaux (GDR-CNRS sur les moteurs fusées par exemple) ;
- Centre d'expertise pour l'évaluation des nouvelles architectures de calcul et l'optimisation des programmes de modélisation (parallélisme).

Ces moyens informatiques puissants ont également généré d'autres activités de service qui représentent une valeur ajoutée pour la région, comme l'Annuaire régional de la Recherche ou l'hébergement et le support initial d'un grand nombre de serveurs d'information pour les laboratoires ou les utilisateurs du réseau SYRHANO.

### ***Réseaux de télécommunications***

Passons maintenant aux aspects réseaux. Déjà dans un souci de mutualisation, la liaison Internet du CORIA, supportée par le CNRS, a été partagée dès 1991 avec les autres composantes de l'enseignement supérieur de Rouen. On a vu ainsi la déclaration des noms Internet tels que UNIV-ROUEN.FR ou INSA-ROUEN.FR en même temps évidemment que CRIHAN.FR

L'année 1992 a permis la définition des spécificités du premier réseau régional SYRHANO, qui a abouti à la signature d'une convention en juillet 1992 entre le Conseil Régional de Haute-Normandie, France Télécom et le CRIHAN pour la mise en œuvre d'un service d'interconnexion entre huit sites

de la région et leur raccordement à RENATER.

Sur les huit sites prévus dans la convention, six étaient prêts (Université de Rouen, Université du Havre, CRIHAN, ESIGELEC, SEP-Vernon et Bassin d'essais des carènes au Vaudreuil) à être raccordés : la problématique du partenariat Université-Industrie faisait déjà partie de nos préoccupations ! Deux autres sites étaient prévus en anticipation des besoins futurs, pour le 1er janvier 1995 ! Le calcul était raisonnable : Le CHUR s'est raccordé 6 mois plus tôt que prévu, tandis que l'INSA au Madrillet a été raccordé six mois plus tard !

Presque tous ces sites disposaient d'une capacité d'accès de 2 Mbit/s.

Le premier impact du déploiement d'un tel réseau dans la région a été de forcer les établissements d'enseignement supérieur à se doter d'un réseau interne et d'adopter les nouveaux outils de communication comme le courrier électronique, le transfert de fichier ou le travail à distance sur les calculateurs du CRIHAN. Il est bon de mentionner quand même, qu'en ces temps reculés, le WEB (www) n'existait pas, et l'Internet était totalement inconnu : qui se souvient encore des services comme GOPHER ou WAIS qui nous permettaient de visiter à distance la bibliothèque de disques compacts du comité d'entreprise de l'INRIA à Sophia-Antipolis ?

En même temps que ce réseau se mettait en service, le CRIHAN expérimentait, expérimentait et expérimentait :

- Plate-forme d'accès Internet sur RNIS pour les entreprises ;
- Premiers raccordements d'établissements scolaires via RNIS (5 en 1995, 30 en 1996 etc...) ;
- Plate-forme ATM à haut débit (PEPSY) dans le cadre du Contrat de Plan Interrégional du Bassin Parisien ;
- Participation aux projets nationaux MIRIHAD (CNRS) et SAFIR (RENATER) ;
- Support pour le projet METODIS.

Au-delà des expérimentations, le CRIHAN



s'est efforcé de transformer les résultats en services. La plate-forme d'accès des entreprises a été arrêtée quand des offres d'accès Internet ont été disponibles commercialement dans la région ; les accès pour les établissements scolaires ont été généralisés par la suite, et sont en cours de migration vers une autre technologie permettant des plus hauts débits (xDSL, BLR etc...); PEPSY est devenu le réseau métropolitain INTERCAMPUS, qui est sous la responsabilité du CRIHAN, mais dont l'exploitation est sous-traitée à l'opérateur de SYRHANO ; MIRIHADÉ et SAFIR ont permis la définition et le déploiement de RENATER-2 en 1999 ; METODIS s'est prolongé dans DAMIEN et maintenant on ne parle plus que de Grilles de Calcul et de Données !

A côté des aspects liés directement aux infrastructures de réseaux, le CRIHAN a également innové au niveau des usages. A la question : «l'Internet peut-il modifier, avec une assistance appropriée, la pratique professionnelle d'une communauté d'utilisateurs?», nous pouvons citer deux exemples de démonstration qui s'appuient sur le secteur associatif : VETONET et ADICAP.

VETONET est une association de médecins vétérinaires pour lesquels nous avons apporté un support technique pour le déploiement de listes de diffusion, et le stockage et la diffusion de données professionnelles. L'association regroupe maintenant 600 praticiens, utilise 21 listes de diffusion correspondant à 800 abonnés professionnels auxquels s'ajoutent 450 étudiants ou praticiens étrangers. En plus de ces échanges, un serveur d'imagerie permet le diagnostic « partagé » à partir de radiographies. Cette méthode est devenue maintenant un standard, dans une communauté de praticiens qui exercent par définition de manière isolée.

ADICAP est une association de spécialistes anatomo-pathologistes. D'un système propriétaire basé sur des échanges RNIS point à point, le CRIHAN a fait un service Internet, tant pour les protocoles que pour l'architecture des échanges, accessible à une communauté

fermée d'utilisateurs, qui est une expérimentation en vraie grandeur de ce que sera, pour partie, la médecine de demain. Le service ADICAP a aujourd'hui 550 utilisateurs, qui travaillent sur un millier de dossiers aujourd'hui, avec environ une cinquantaine de nouveaux dossiers par mois. Lors de la définition de ce service, la codification des commentaires liés aux images, qui a été proposée par le CRIHAN, a permis une généralisation de ce service, au point que cette codification est maintenant reconnue comme un standard de fait pour la profession.

D'autres exemples de ce type sont évidemment disponibles, mais je n'en citerai pas d'autres aujourd'hui, de peur d'épuiser mon temps de parole pour cette intervention.

### **Formation**

Le troisième élément de la mission assignée au CRIHAN par ses statuts en 1991, est la formation. Il est certainement inutile de revenir sur les aspects de transfert technologique, qui impliquent évidemment une part importante de formation. Je souhaite néanmoins rappeler quelques exemples précis d'action, qui ont eu une importance particulière pour le développement régional :

- Le déploiement de SYRHANO a été accompagné de multiples formations pour les personnels des sites utilisateurs ;
- Le développement, dès 1995, de services d'accès à l'Internet via RNIS s'est également traduit d'un accompagnement en formation, qui a profité d'abord aux nouveaux entrants sur ce secteur d'activités commerciales, et en particulier les fournisseurs d'accès installés dans la région ;
- Toutes les activités liées à la parallélisation et l'optimisation des codes de calcul, ont été orientées prioritairement vers les utilisateurs des moyens de calculs du CRIHAN. Faut-il rappeler à quel point des sigles comme PVM, puis MPI ou maintenant OpenMP peuvent avoir été perçus comme inconnus puis innovants,

quand ils été proférés à partir des années 1992-93 ?

- L'Internet lui-même a fait également l'objet de nombreuses de nos attentions, car c'était un moyen de « vendre » les nouvelles technologies et les hauts débits : WEB, DNS, BIND, KERBEROS, OS, ATM, etc... Autant de domaines où il est nécessaire de prêcher dans le désert avant que cela ne relève de la banalité : le WEB en est la plus parfaite illustration !
- Le CRIHAN a même été labellisé comme site de formation pour SUN MICROSYSTEM.

Les actions de formation ne se sont pas traduites uniquement par des actions sous la forme maître/élève, mais également via une « foulitude » d'interventions sur le terrain pour traiter les cas particuliers de tout un chacun. Elles se sont également traduites par la formation des personnels du CRIHAN. Je n'ai jamais reçu un seul commentaire d'incompétence ou de manque de qualification du CRIHAN ! J'ajouterais même que le CRIHAN est maintenant utilisé comme conseil technique par des collectivités territoriales ou des organismes de recherche en dehors de la région !

En chiffres, l'activité de formation se traduit également par 873 stagiaires en formation continue, +15 000 heures/stagiaires assurées, en incluant l'heureuse époque où Monique Boender s'investissait au point d'organiser des sessions de formation d'une semaine à Aussois, avec de nombreux intervenants étrangers qui ont gardé la même nostalgie de ces cours !

Les effectifs du CRIHAN restent sous la barre des 15 personnes, mais depuis la création, 45 personnes sont passées dans le système de paie, 12 stagiaires rémunérés et 6 formations en alternance !

## Une transition par le présent

Quelle est alors la situation aujourd'hui ?

Les missions, telles que décrites dans les statuts de l'association, restent au cœur de nos préoccupations :

- Calcul
- Réseaux
- Formation

Pour la partie calcul, le CRIHAN termine actuellement l'installation de la nouvelle machine IBM, financée dans le cadre du contrat de plan entre la Région Haute-Normandie et l'Etat. Ce calculateur, qui s'inscrit dans la politique du Ministère de la Recherche, comme l'un des centres régionaux, bénéficie également d'un cofinancement complémentaire de la Direction de la Recherche. Cette machine, qui n'est que 13 fois plus puissante que la machine SGI installée en 1997, représente un budget d'investissement identique à l'action du CPIBP. Ce moyen complète également le service de modélisation moléculaire existant, et devra également être utilisé pour participer aux projets nationaux de « GRILLE ».

Pour la partie réseau, la situation est sensiblement plus compliquée dans la région, faute d'action collective avec les différents acteurs concernés. Dans le seul périmètre du CRIHAN, l'épine dorsale du réseau est en cours de remise à niveau, (appel d'offres en cours pour SYRHANO-2.1). La concertation et la collaboration avec les opérateurs locaux fonctionnent raisonnablement bien, aussi bien avec les Boucles Locales Radio (Altitude), les plaques xDSL (France Télécom) ou les technologies satellites (INFOSAT). Afin d'optimiser l'interconnexion locale des opérateurs, le CRIHAN a mis en place un GIX régional (NERO), ouvert à tous les opérateurs

sur un mode non-discriminatoire. Le réseau pourrait certainement diffuser plus largement sur le territoire régional avec des liens à très haut débits, pourvu que ce soit compris comme une action collective, de tous et pour tous. Faute de cette approche, la couverture régionale ne pourra pas aller au-delà des offres existantes chez les opérateurs, comme les technologies xDSL par exemple. Malgré cela, la connectivité xDSL de tous les établissements scolaires se poursuit et devrait être totalement achevée dans le courant de l'année 2003. Cette connectivité, qui est gérée conjointement par le Rectorat et le CRIHAN n'utilise les infrastructures de l'opérateur, que pour le transport des données, le service réseau restant géré par le CRIHAN, comme cela l'était déjà dans l'ère RNIS !

Néanmoins, je profite de l'occasion pour rappeler que, grâce à l'action du CRIHAN, le réseau régional SYRHANO est et reste l'un des réseaux régionaux les plus avancés et innovants de France **pour ses aspects techniques** ! Le modèle de collecte ADSL, le déploiement IPv6 jusqu'aux sites et la continuité avec les services nationaux (RENATER) et internationaux (GEANT) sont exemplaires pour les autres réseaux régionaux !

En commun pour les activités calcul et réseau, le CRIHAN s'appuie massivement sur des financements croisés entre l'Etat et la Région (CPER). La complexité de mise en œuvre administrative de ces financements relève aujourd'hui de la gageure, au point que je me demande si, au-delà d'apporter la garantie de dépenser correctement l'argent du contribuable, les règles et modalités d'application des lois, qui changent souvent dans la plus grande discrétion, ne sont pas écrites uniquement pour justifier l'existence de ceux qui les mettent en application ! Ce qui, d'un point de vue strictement comptable, finit par coûter plus cher au contribuable, car aucune banque ne permet les relais bancaires gratuits.

## Des perspectives d'avenir !

En conclusion, et malgré cette dernière contrainte, le bilan est très positif pour les tâches effectuées, mais il reste encore beaucoup à faire. Au-delà des actions qui sont déjà engagées, je vais seulement esquisser quelques pistes :

- Innovation : les technologies réseaux comportent elles-mêmes toutes les options pour innover, en particulier dans le domaine des usages ; Les machines de calcul seront les clefs de voûte des futures architectures de traitement distribué des calculs et des données. Le CRIHAN a un rôle majeur à jouer dans cette évolution en raison de la double compétence informatique-réseaux.
- Partenariat Recherche-Industrie : Même si le groupe SNECMA-Moteur a été à ce jour le principal partenaire pour l'activité de calcul scientifique, d'autres collaborations seront recherchées avec le souci que ces nouveaux partenariats sont plus utiles si ils sont au service de l'économie régionale, plutôt que si ils répondent uniquement à des préoccupations « alimentaires ».
- Transfert technologique : Au-delà des partenariats industriels, un apport important qui pourrait être supporté par le CRIHAN est de répondre aux attentes des PMI/PME pour leurs activités de modélisation. Entre l'analyse d'un problème, sa mise en équation et l'exploitation des outils de modélisation adaptés, il n'y a aucune réponse aujourd'hui pour les petites entreprises, qui ne disposent pas de leur propre bureau d'études. Cette action a fait l'objet de propositions à la fois à l'Etat et à la Région, sous la forme d'un « CERTAM NUMERIQUE ». C'est également dans cette perspective, que le programme de définition du bâtiment a inclu des espaces pour l'accueil de projets d'entreprises.
- Le support du réseau régional SYRHANO. Le développement de ce réseau et les usages qui en seront faits ne peuvent être que le résultat d'une action collective entre

collectivités et utilisateurs. Les règles d'usage et d'accès de ce réseau ne sont pas édictées à Paris, mais doivent être définies en fonction des besoins locaux, dans le respect des règles de la concurrence, dans un marché qui est à la fois vivace et sinistré, faute d'une croissance (je dirais plutôt d'une adoption) des usages, tant prophétisée mais encore si tardive.

Je termine maintenant mon intervention en rappelant que tout ce qui a été présenté n'a été possible que par la conjonction de deux facteurs indispensables :

- Une équipe technique et administrative dévouée et compétente ;
- Un soutien continu du Conseil Régional et de l'Etat.

Les deux sont et resteront indispensables et je remercie tous ceux qui se sentiront concernés par cette remarque : ils sont nombreux et persévérants.

En admettant un peu de flexibilité sur les dates, je leur souhaite à tous un bon anniversaire (11 ans pour le CRIHAN et un peu plus de 10 ans pour SYRHANO).

Je vous remercie pour votre attention.

# ANNEXE B

## Calendrier de recette proposé pour la réception du cluster IBM

### 1 Phase 1 : phase d'installation

Inférieure à deux semaines, du 22 juillet au 2 août. Elle consiste en l'installation et la mise en ordre de marche de la «solution»<sup>1</sup>. Elle comprend :

- I.1, la mise sous tension électrique de la solution. Il s'agit d'un test électrique de la solution livrée, sans aucune installation logicielle.
- I.2, la validation du nombre de processeurs (2 fois 32). 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 et actifs.
- I.3, la validation de la mémoire physique (2 fois 32 Go). Identique au paragraphe précédent. Il s'agit de test de démarrage de la solution. Une fois un système d'exploitation installé (voir I.6), passage d'un code "maison" qui fait un remplissage de la totalité de la mémoire et une relecture afin de vérifier la cohérence des données.
- I.4, la validation des disques (2 fois 512 Go en interne et 1 To dans la baie). Identique à la validation du nombre de processeurs. Il s'agit de test de démarrage de la solution. Une fois un système d'exploitation installé, vérification que chaque nœud a accès en lecture et en écriture sur ses disques internes ainsi que sur la baie de disques.
- I.5, la validation du switch et du réseau d'inter communication. Vérification que la console (CWS) voit les deux nœuds afin de préparer l'installation du système d'exploitation.
- I.6, l'installation d'AIX et vérification de la reconnaissance du matériel. Installation et configuration du système d'exploitation AIX 5L à partir de la console (CWS).

1. 2 nœuds p690 Turbo, le switch Colony, la baie de disque FastT500, la console de surveillance et la console de remontée d'erreurs

Vérification de la reconnaissance du clavier, des disques, des processeurs ainsi que de la mémoire au niveau de l'OS.

- I.7, le test de connection sur les deux nœuds et les consoles, ainsi que vers les autres machines du CRIHAN. Test de visibilité entre les deux nœuds ainsi que vers les autres machines du réseau local afin d'intégrer la solution au réseau existant.
- I.8, le 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 annoncé dans I.3.

### 2 Phase 2 : phase de vérification d'aptitude

Trois semaines, du 19 août au 6 septembre. Elle correspond à la validation des performances obtenues sur la solution livrée pour les codes de benchmark du CCTP. Elle comprend les étapes suivantes :

- II.1, le passage de la batterie des codes du benchmark sur un nœud seul pour vérifier les performances fournies dans la réponse IBM/ADEQUAT à l'appel d'offres. Passage des codes du benchmark dans la même configuration que celle utilisée pour répondre aux spécifications de l'appel d'offre (soit 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 supérieurs à 5%.
- II.2, le passage de la batterie des codes du benchmark sur l'ensemble des processeurs disponibles (2x32) pour valider l'exécution et les performances sur la solution retenue. Comme indiqué dans le CCTP (p.12), «la configuration matérielle et logicielle utilisée pour ces tests devra être telle que l'ensemble des valeurs fournies en réponse puisse être reproduit sur la future configuration installée au CRIHAN lors de la recette de celle-ci». Passage des codes du benchmark dans la configuration proposée (deux nœuds de 32 processeurs intercon-



nectés par un switch colony) pour répondre aux spécifications de l'appel d'offre. L'écart entre les performances obtenues et ceux annoncées dans la réponse à l'appel d'offre ne doivent pas être supérieurs à 5%. Les exécutions se font pour un utilisateur qui n'a pas les droits super utilisateur.

### 3 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. Cela consiste en :

- III.1, la 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 seul 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.
- III.2, l'installation et le paramétrage des logiciels d'administration (notamment WLM, PSSP) et du séquenceur (loadleveler).
- III.3, l'installation et la validation de la comptabilité journalière et mensuelle (cpu 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). Prise en main du système d'accounting standard Unix et des fonctionnalités spécifiques AIX.
- III.4, la création des systèmes de fichiers pour les utilisateurs (notamment GPFS, VSD et NFS). Test des différents systèmes de fichiers pour configurer l'environnement utilisateur. Tests de partage des disques internes des nœuds et comportement du réseau privé face à un programme très consommateur en accès disques et communication.
- III.5, la vérification de l'efficacité des limites et des allocations de ressources prises en interactif et en batch. Un utilisateur doit avoir des restrictions quand il utilise l'interactif : temps CPU, mémoire et nombre de processeurs. Ceci afin de les obliger à soumettre leurs programmes à travers LoadLeveler. 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. Vérification du comportement de la solution suivant la charge de la machine : les ressources réservées peuvent-elles être accédées par les autres utilisateurs si elles ne sont pas déjà utilisées ? Peut-on réserver des ressources sans dire explicitement sur quel nœud et sur quels processeurs ? Cette étape va nous permettre de faire le point sur les services que le CRIHAN pourra offrir à ses utilisateurs en termes de garanties d'utilisation.
- III.6, l'installation et la validation de l'environnement de développement utilisateur (entre autre les logiciels inclus dans IBM Schoolar Program). Test de fonctionnement et prise en main des différents logiciels de l'environnement IBM Schoolar Program sur des codes de la batterie du benchmark.
- III.7, la 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 G Ethernet optique.
- III.8, la validation de l'utilisation du robot ADIC GRAU Scalar 1000 pour le service de migration de la solution. En attendant l'arrivée d'un robot dédié à la sauvegarde du calculateur et des autres machines du CRIHAN, le robot ADIC GRAU sera partagé entre les deux fonctions sauvegarde et migration comme c'est le cas à l'heure actuelle. Le service de migration sur la solution à l'aide de TSM se fait donc en

lieu et place du même service de migration offert par DMF sur le calculateur SGI (ce service pour le calculateur SGI est alors arrêté). Migrations des fichiers présents sur la baie de disques ainsi que sur les disques internes des nœuds.

- III.9, Sécurité UNIX. Tests destinés à vérifier le niveau de sécurité du système d'exploitation de la solution livrée. A passer sur chaque machine possédant un système d'exploitation.
  - Vérification des droits sur les fichiers/répertoires systèmes.
  - Vérification des processus actifs, arrêt des processus non nécessaires.
  - Vérification de la version des logiciels livrés (sendmail, ftp, etc.).
  - Vérification des processus inetd, protection par wrapper quand c'est possible, désactivation des services non nécessaires.
  - Implémentation de logiciels liés à la connexion sur la machine (tcpwrapper, ssh), et à l'utilisation de droits restreints (sudo).
  - Implémentation de logiciels permettant de vérifier l'intégrité des données (tripwire, AIDE....).
  - Implémentation de logiciels permettant de surveiller l'état de certains processus (net-saint).
  - Test sur les failles liées à la sécurité (nmap, nessus,...).

#### **4 Phase 3 : phase de vérification de service régulier**

Trois semaines de fonctionnement sans incident, du 23 septembre au 11 octobre. Elle correspond au fonctionnement de la solution en mode de production pendant trois semaines sans incident. Les projets d'utilisateurs beta 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.

#### **5 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, soit le 21 octobre.



# ANNEXE C

## ANNEXE Technique sur IPv6

## 1 Les nouvelles fonctionnalités offertes par v6

Devenu nécessaire notamment à cause du nombre limité d'adresse IPv4, IPv6 est beaucoup plus qu'une simple extension du protocole v4. Outre le nombre d'adresses disponibles beaucoup plus confortable (plus de 1500 par mètre carré de surface terrestre), les avantages les plus visibles de la nouvelle norme portent sur :

- l'auto-configuration des équipements (la possibilité de calculer automatiquement sa nouvelle adresse quand on change de sous-réseau et de connaître celles de ses voisins) ;
- La mobilité (capacité à s'associer temporairement à un réseau hôte quelconque tout en restant accessible) ;
- La confidentialité (chiffrement).

## 2 Aperçu plus technique de IPv6

### 2.1 Les adresses v6

Une adresse IPv6 est un mot de 128 bits. La taille d'une adresse IPv6 est donc le quadruple de celle d'une adresse IPv4.

#### 2.1.1 Notation

La représentation textuelle des adresses IPv6 se fait en découpant le mot de 128 bits de l'adresse en 8 mots de 16 bits séparés par le caractère " : ", chacun d'eux étant représenté en hexadécimal. Par exemple :

*FEDC:BA98:7654:EDBC:A987:6543:210F*

Dans un champ il n'est pas nécessaire d'écrire les zéros placés en tête :

*FEDC:0:0:0:400:A987:6543:210F*

En outre plusieurs champs nuls consécutifs peuvent être abrégés par " : ". Ainsi l'adresse précédente peut s'écrire :

*FEDC::400:A987:6543:210F*

Pour éviter toute ambiguïté, l'abréviation " : " ne peut apparaître qu'une seule fois dans une adresse IPv6.

La représentation des préfixes IPv6 est similaire à la notation CIDR (RFC 1519) utilisée pour les préfixes IPv4. Un préfixe IPv6 est donc représenté comme suit :

*adresse IPv6 / longueur-du-préfixe-en-bits*

#### 2.1.2 Types d'adresses

IPv6 connaît trois types d'adresses : *unicast*, *multicast* et *anycast* :

- Une adresse de type *unicast* désigne une interface unique, une telle adresse est utilisée pour envoyer un paquet à l'interface désignée ;
- Une adresse de type *multicast* désigne un groupe d'interfaces qui en générale appartiennent à des noeuds différents pouvant être situé partout dans l'Internet. Lorsqu'un paquet a pour destination une adresse de type multicast, il est acheminé par le réseau à toutes les interfaces membres de ce groupe ;
- Une adresse de type *anycast* désigne également un groupe d'interfaces. Lorsqu'un paquet a pour destination une adresse anycast, il est acheminé à un des élément du groupe (par exemple le plus proche).

Il faut noter qu'il n'y a plus d'adresses de type *broadcast* comme sous IPv4, elles sont remplacées par les adresses de type *multicast*.

#### 2.1.3 Plan d'adressage

Plusieurs plans d'adressage ont été étudiés pour arriver finalement au plan d'adressage dit agrégé.

##### 2.1.3.1 Plan d'adressage agrégé

**Table 1: Adresse de type plan agrégé**

3 bits			13 bits	8bits	24 bits	16 bits	multicolum n 64c64 bits
0	0	1	TLA	res	NLA	SLA	Interface ID

Ce plan d'adressage garde la structure classique d'adressage IP où une adresse comprend à la fois un préfixe identifiant le réseau et une par-

tie identifiante locale. Il est défini dans le RFC 2450.

Ce plan d'adressage comprends trois niveau de hiérarchie :

- une topologie publique (48 bits) ;
- une topologie de site (16 bits) ;
- un identifiant d'interface (64 bits).

La topologie publique est constituée par l'ensemble des prestataires et des points d'échanges de connectivité IP. Le format de la topologie publique est le suivant :

- un préfixe *2000::/3*, identifiant le plan d'adressage ;
- une unité d'agrégation haute (TLA : *Top Level Aggregator* sur 13 bits ;
- une partie réservée sur 8 bits ;
- des unités d'agrégation basse (NLA : *Next Level Aggregator* dont la longueur totale est de 24 bits. La dernière unité d'agrégation basse constitue l'identificateur de site (ou domaine). Le choix de découpage en unités d'agrégation basse est laissé à la discrétion de chaque unité d'agrégation haute. Ainsi plusieurs NLA peuvent se suivre.

Les TLA représentent de grands opérateurs internationaux. Les NLA représentent des opérateurs intermédiaires échangeant leur connectivité en des points d'interconnexions avec les TLA. La partie réservée de 8 bits dans l'adresse permet de faire évoluer le plan d'adressage.

### 2.1.3.2 Adresses de test

**Table 2: Adresse de test du plan agrégé**

3 bits			13 bits	8bits	24 bits	16 bits	multicolumn n 64c64 bits
0	0	1	IFFE	pTL A	pNL A	SLA	Interface ID

Le TLA 0x1FFE a été attribué par l'IANA au 6Bone afin de tester le plan d'adressage agrégé (RFC 2471). Ceci donne le préfixe *3FFE::/16* pour l'ensemble du 6Bone. Des pTLA (pseudo-TLA) ont été attribués à des noeuds du coeur

du 6Bone afin de simuler l'attribution des TLA.

### 2.1.3.3 L'adresse indéterminée

L'adresse indéterminée est utilisée comme adresse source par un noeud du réseau pendant son initialisation, avant d'acquérir une adresse. Sa valeur est " :: ".  
 Cette adresse est utilisée uniquement par des protocoles d'initialisation, elle ne doit jamais être attribuée à un noeud et ne doit jamais apparaître comme adresse destination d'un paquet IPv6.

### 2.1.3.4 L'adresse de bouclage

L'adresse de Loopback vaut " ::1 ", c'est l'équivalent de l'adresse 127.0.0.1 d'IPv4.

### 2.1.3.5 Les adresses Lien-local :

**Table 3: Adresse lien local**

12 bits												52 bits	64 bits
1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	0	0	Interface ID
F				E				8					

Les adresses de type lien-local (Link local use adress) sont des adresses dont la validité est restreinte à un lien.

# ANNEXE D

**Table 1: Les projets 2002 exploitant le calculateur Illiac 8**

Laboratoire	Affiliation/ Adresse	Titre des projets	Thème	Heures attribuées
Laboratoire de Mathématiques de l'INSA	LMI - CNRS ESA 6085 INSA Rouen	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique.	Mathématiques Appliquées	1000
Laboratoire de Mathématiques de l'INSA	LMI - CNRS ESA 6085 INSA Rouen	Calcul de zéros d'un polynôme ou d'une fonction analytique par la méthode de Weyl sur machine parallèle.	Mathématiques Appliquées	500
Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique	LMFN - CORIA - UMR CNRS 6614 INSA de Rouen	Simulation numérique et modélisation de la turbulence compressible, tuyères d'arrière-corps.	Mécanique des Fluides	40000
Laboratoire des Fonctions Azotées & Oxygénées Complexes	LFAOC - UMR CNRS 6014 - IRCOF	Influence de la solvation sur la conformation de complexes entre amidures chiraux et le méthyllithium.	Chimie	12000
Laboratoire de Mathématiques de l'INSA	LMI - CNRS ESA 6085 INSA Rouen	Optimisation d.c. pour le problème de conformation moléculaire. Algorithmes parallèles pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire.	Mathématiques Appliquées	2000
Groupe de Physique des Matériaux UFR Sciences et Technique	GPM - UMR CNRS 6634 Université de Rouen	Propriétés magnétiques des multicouches métalliques.	Matériaux	30000
Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique	LMFN - CORIA - UMR CNRS 6614 INSA de Rouen	Modélisation d'écoulement compressible turbulent ou réactif.	Mécanique des Fluides	25000
Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Structurale	LPMS - UMR CNRS 8600 INSERM U 266 PARIS	Complexes polycoordinnés de cations métalliques et complexes stabilisés par des liaisons hydrogène multiples. Etude des effets de la non-additivité par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique moléculaire.	Chimie	12000
Laboratoire Aérothermique Moteur et Environnement	LAME - CORIA - UMR CNRS 6614 INSA de Rouen	Simulation des épisodes de pollution atmosphérique autour d'agglomération.		5000
Groupe de Physique des Matériaux UFR Sciences et Techniques	GPM - UMR CNRS 6634 Université de Rouen	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V.	Matériaux	1700



**Table 1: Les projets 2002 exploitant le calculateur Illiac 8**

Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique	LMFN - CORIA - UMR CNRS 6614 INSA de Rouen	Modélisation de la combustion turbulente non-pré mélangée dans un brûleur à jets séparés ; application à la stabilisation d'une oxy-flamme.	Mécanique des Fluides	50000
Laboratoire de Combustion des systèmes Réactifs	LCSR - UPR CNRS 4221 - EPEE ORLEANS	Modélisation de l'atomisation secondaire dans THESEE.	Mécanique des Fluides	2500
Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique	GSMA - ESA CNRS 6089 UFR Sciences de Reims	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique : réactivité de l'acétone.	Chimie	2000
Groupe de Physique des Matériaux UFR Sciences et Techniques	GPM - UMR CNRS 6634	Propriétés magnétiques des "nanoparticules".	Matériaux	20000
Groupe de Physique des Matériaux UFR Sciences et Techniques	GPM - UMR CNRS 6634 Université de Rouen	Influence de la présence d'impuretés non-magnétiques sur la transition de phase du modèle d'Ising tridimensionnel.	Matériaux	30000
Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés	GREMI - UMR CNRS 6606 Université d'Orléans	Sources plasmas de traitement de matériaux et faisceaux d'ions.	Matériaux	20000
Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique	GSMA - ESA CNRS 6089 UFR Sciences de Reims	Méthodes non-perturbatives de calcul des spectres des systèmes tri atomiques.	Matériaux	500
Laboratoire d'Automatique et de micro électronique	LAM Université de Reims	Application de la théorie du chaos à l'analyse des dynamiques aperiodiques du moteur pas à pas. Calculs intensifs de diagrammes de Fergensbaum.	Mathématiques	1200
Réactions Sélectives et Applications UFR Sciences	RSA - UMR CNRS 6519 Université de Reims	Chimie organométallique : réactions d'insertions.	Chimie	5000
Laboratoire Energétique systèmes et Procédés	LESP - CORIA UMR CNRS 6614 Université de Rouen	Champ transitoire dans une micro cavité optique.	Optique (Matériaux)	2000
Laboratoire Catalyse et Spectrochimie	LCS - UMR CNRS 6506 ISMRA CAEN	Etude théorique de la réactivité du sulfure d'hydrogène avec des zéolithes acides et basiques.	Chimie Quantique	1000

**Table 1: Les projets 2002 exploitant le calculateur Illiac 8**

Laboratoire de Mécanique de Lille	LML - URA CNRS- Cité Scientifique VILLENEUVE D'ASCQ	Etude des écoulements forcés stratifiés à grand Reynolds par simulation directe et simulation grandes échelles		2000
Laboratoire de Spectroscopies et Structures Biomoléculaires	LSSBM - EA 3305 Université de Reims	Condensation de résidus Lysine en résidus exotiques.		3000
CORIA	CORIA - UMR CNRS 6614 Saint Etienne du Rouvray	Etude des différentes situations de diffusion multiple de la lumière par l'intermédiaire de codes de Monte-Carlo		1000
Laboratoire des Fonctions Azotées & Oxygénées Complexes	LFAOC - UMR CNRS 6014 - IRCOF Université de Rouen	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène.		5000
Laboratoire de Synthèse Organique	UMR CNRS 6011 Université du Maine LE MANS	Modélisation des états de transition de réactions de Diels-Alder asymétriques.	Chimie	1000

# ANNEXE E

**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>"Efficient Synthesis of 3-Furanosyl-6'-furanosylphosphinate through a Tandem Sequential Radical Process".</p> <p>The sodium salt of hypophosphorous acid is shown to act as a double radical precursor in a double, sequential radical addition on 3-exo-methylenefuranose derivative 14 and 4-ethylenefuranose 10 to furnish phosphinates 18d in good overall yields. Unambiguous structural assignment establishes the high diastereoselection of the process.</p>	<p>O. Dubert, A. Gautier, E. Codamine and S. R. Piettre, <i>Org. Lett.</i>, 2002, 4(3), 359-362.</p>
<p>"A NMR and Theoretical Study of the Aggregates Between Alkylolithium and Chiral Lithium Amides: Control of the Topology Through a Single Asymmetric Center".</p> <p>The complexes between methylolithium and chiral 3-aminopyrrolidine (3-AP) lithium amides bearing a second asymmetric center on their lateral aminogroup have been studied using multinuclear (<math>^1\text{H}</math>, <math>^6\text{Li}</math>, <math>^{13}\text{C}</math>) low-temperature NMR in THF-<math>d_8</math>. The results indicate that the lithium chelation forces the pyrrolidine ring of the 3-AP to adopt a norbornyl-like conformation and that robust 1:1 non-covalent complexes between methylolithium and 3-AP lithium amides form in the medium. A set of <math>^1\text{H}</math>-<math>^1\text{H}</math> and <math>^1\text{H}</math>-<math>^6\text{Li}</math> NMR cross coupling correlations show that the binding of methylolithium can take place along the "exo" or the "endo" face of this folded structure, depending on the relative configuration of the lateral chiral group. This aggregation step induces the "chiralization" of the nitrogen of the 3-amino group, the "exo" and "endo" topologies corresponding to the (R) and (S) configurations, respectively, of this atom. Theoretical calculations applied to these exact complexes using DFT show that the "exo" and "endo" arrangements are, for both diastereomers almost isoengetic even when three dimethylether (a solvent model of THF) molecules, completing lithium coordination spheres, are taken into account in the computation. This result tends to indicate that the formation of the mixed aggregates is, in our conditions, under strict kinetic control. A relation between the topology of these complexes and the sense of induction in the enantioselective alkylation of aromatic aldehydes by alkylolithiums is proposed.</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 and J.-Y. Valnot, <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 2002 (sous presse).</p>
<p>"Why are lithium amides planar?".</p> <p>The Electron Localization Function (ELF) provides an explanation for the planarity of lithium dimethylamide <math>\text{sp}^3</math> nitrogen; due to the highly ionic character of the N-Li bond, the nitrogen atom carries two lone pairs located symmetrically with respect to the C-N-C plane on the one hand, and with the lithium cation on the other. Because it takes into account all the electrons of the system studied rather than the only frontier orbitals analysis previously applied to this system, ELF gives also indications on the origin of the preference for the planar <math>\text{D}_{3h}</math> or <math>\text{D}_{4h}</math> structure obtained from theory in the cases of the trimer and tetramer of <math>\text{LiNH}_2</math>. Such arrangements correspond to an optimal location of the lithium atoms with respect to the nitrogens <math>\text{sp}^3</math> lone pairs. This result suggests that comparable tetrahedral geometrical arrangements are to be found in lithium amide complexes, provided that the steric strains are compatible with such supermolecular structures.</p>	<p>Fressigné C., Maddaluno, J.; Giessner-Prettre C. and Silvi B. <i>J. Org. Chem.</i> 2001, 66, 6476-6479.</p>

**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>"Influence of the correlation, aggregation and solvation on ab initio computed Li-C, Li-N and Li-Li NMR coupling constants."</p> <p>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 alkylolithiums 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>Parisel, O., Fressigné, C., Maddaluno J. and Giessner-Prettre, C. J. Org. Chem. 2002 (soumis)</p>
<p>"Theoretical study of phenol and 2-aminophenol docking at a model of tyrosinase active site".</p> <p>DFT calculations using the B3LYP functional are reported for a model of (oxy)tyrosinase active site including the two copper cations, six imidazoles and dioxygen (in the oxy form), plus either phenol (taken as a model of tyrosine, the natural substrate) or 2-aminophenol, a very efficient inhibitor. The results obtained tend to show that both the substrate and the inhibitor have to be deprotonated to give a stable complex with the model of the "native" or the oxy form of the enzyme. These informations are discussed in relation with the mechanisms of the biooxidation and the competitive inhibition.</p>	<p>Piquemal J.-P., Maddaluno J. and Giessner-Prettre, C. New J. Chem., 2002 (soumis).</p>
<p>"The structure core and the antibacterial activity of the macrocyclic microcin J25 are preserved upon thermolysin-linearization".</p>	<p>A. Blond, M. Cheminant, D. Destoumieux-Garzon, I. Segalas-Milazzo, J. Peduzzi, C. Goulard and S. Rebuffat. Eur. J. Biochem., 2002 (soumis).</p>
<p>"Structural studies of synthetic analogues of Na<sup>+</sup> and K<sup>+</sup> ion channels pore regions".</p>	<p>I. Segalas-Milazzo, D. Davoust, G. Molle, T. Jouenne and P Cosette, Eur. J. Biochem., 2002 (soumis).</p>
<p>"Molecular design based on 3D-Pharmacophore Application to 5-HT subtypes receptors-436".</p> <p>A first definition of a pharmacophore for the serotonin reuptake. inhibitors was carried out by considering a three dimensional model which correlates the chemical structures of series of reuptake inhibitors with their biological affinities. A molecular design was described by analyzing two different 3D serotonin pharmacophores.</p>	<p>Bureau R.; Daveu C.; Lancelot J.-C. and Rault S. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 2002, 42, 429-436.</p>
<p>"Molecular design based on 3D-Pharmacophore. Application to 5-HT<sub>4</sub> receptors".</p> <p>A definition of a pharmacophore for the 5-HT<sub>4</sub> antagonist was carried out by considering a three dimensional model which correlates the chemical structures of series of antagonists with their biological affinities. A molecular design is described by analyzing the differences between two 3D serotonin pharmacophores. This successful structural modification demonstrates the efficiency of this approach to design new serotonin ligands.</p>	<p>Bureau R.; Daveu C.; Lancelot J.-C. and Rault S., J. Chem. Inf. Comput. Sci., 2002, 42, 962-967.</p>

**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>“New Benzo[h][1,6]naphthyridine and Azepino[3,2-c]quinoline Derivatives as selective Antagonists of 5-HT<sub>4</sub> Receptors: Binding Profile and Pharmacological Characterization”.</p> <p>A series of benzo[h][1,6]naphthyridine and azepino[3,2-c]quinoline derivatives were prepared and evaluated in order to determine the necessary requirements for high affinity on the 5-HT<sub>4</sub> receptors and high selectivity versus other receptors. The compounds were synthesized by substituting of the chlorine atom of benzonaphthyridines and azepinoquinolines with various N-alkyl-4-piperidinylmethanolates. They were evaluated in binding assays with [<sup>3</sup>H]GR 113808 as the 5-HT<sub>4</sub> receptor radioligand. The affinity values (K<sub>i</sub> or inhibition percentages) depended upon the substituent on the aromatic ring on the one hand, and the substituent on the lateral piperidine chain on the other hand. A chlorine atom produced a marked drop in activity while a N-propyl or N-butyl group gave compounds with nanomolar affinities (1 &lt; K<sub>i</sub> &lt; 10 nM). Among the most potent ligands (3a, 4a, 5a), 4a was selected, on the basis of its high affinity and selectivity, for pharmacological screening and evaluated in vivo in specific tests. This compound reveals itself as an antagonist / low partial agonist in the COS-7 cells stably expressing the 5-HT<sub>4</sub>(a) receptor. Derivative 4a also showed in vivo potent analgesic activity in the writhing test at very low doses.</p>	<p>Hinschberger A., Butt S., Lelong V., Boulouard M., Dumuis A., Dauphin F., Bureau R., Pfeiffer B., Renard P. and Rault S., J. Med. Chem., 2002 (acceptée).</p>
<p>"Towards a new T-fold protein ? The coproporphyrinogen III oxidase sequences matches structural features from urate oxidase".</p> <p>Urate oxidase (UOX) and coproporphyrinogen III oxidase (CPO) are two unusual oxidases as they accomplish their catalytic act with no co-factor nor metal ion. They both require molecular oxygen, and lead to hydrogen peroxide in addition to the product. UOX is composed of two contiguous T-fold domains and CPO appears to be also divided into two structurally equivalent domains. Moreover, each of these putative domains can be coherently aligned on UOX domains. Although their sequences are very distant, we therefore suggest that functional CPO dimer is built around a tunnel, with the substrate sitting above it, on the N and C terminal side. This overall model is supported by mutation data and is coherent with the chemical events expected for substrate processing by CPO.</p>	<p>Colloc'h N., Mornon J-P. and Camadro J-M., Febs. Letters, 2002, 526, 5-10.</p>



**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>"Etude par spectrometrie de masse ESI et calculs théoriques de complexes anioniques thiomolybdiques".</p> <p>Les complexes anioniques thiomolybdiques à ligands dithiolène de type <math>[\text{Mo}_2(\text{O})_2(\text{-S})_2(\text{-S}_2)(\text{-S}_2\text{C}_2\text{R}_2)]^{2-}</math> 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 <math>m/z</math> 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 électronebulisation 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.</p>	<p>H. Lavanant, C. Fréssigné, C. Simonnet-Jégat, F. Sécheresse and C. Giesner-Prettre, 19èmes Journées Françaises de Spectrométrie de Masse (Chaville, 17- 20 sept. 2002).</p>
<p>"Solvent exchange between dimethylsulfoxide and water in the dexamethasone acetate structure".</p> <p>Dexamethasone acetate can crystallize as a DMSO (dimethylsulfoxide) solvate with a stoichiometry (1:1), and its crystal structure shows the presence of channels containing the DMSO molecules. When single crystals of this solvate are immersed in water according to the methodology proposed by Nordhoff &amp; Ulrich, the exchange between DMSO and water occurs, associated with the formation of needle-like crystals (whiskers). The phase obtained is a sesquihydrate, instead of the monohydrated variety already described, and the whiskers are formed preferentially on high energy sites (defects, edges). These observations are discussed with the aim to propose a mechanism describing both the desolvation step and the formation of the whiskers, and seem to be consistent with a mechanism of destructive-reconstructive transformation.</p>	<p>F. Mallet, S. Petit, M.-N. Petit, P. Cardinael, P. Bilot, S. Lafont and G. Coquerel, J. Physique IV, 2001, 11, Pr10-253-259</p>

**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>“Influence of supersaturation and structurally related additives on the crystal growth of <math>\alpha</math>-lactose monohydrate”.</p> <p>It is shown that increasing the supersaturation during crystal growth of the title compound in water at room temperature induces an important increase in the mean crystal size, which can be explained by taking into account the role of the solvent and that of the <math>\alpha</math>-lactose anomer acting as large scale impurities in the crystallizing medium. Among the six structurally related additives tested, four of them lead to significant morphological changes, due to their anisotropic adsorption abilities. Depending on the nature of the additive, crystal habit varies from “elongated” along the b direction or “flattened” along the a axis. These data could be rationalized by a careful analysis of the 3D hydrogen bond network and by using molecular modeling for the simulation of the adsorption mechanisms, assuming that adsorption ability and desorption difficulty were directly dependent on the proportion of preserved intermolecular hydrogen bonds.</p>	<p>S. Garnier, S. Petit and G. Coquerel, J. Crystal Growth, 2002, 234, 207-219</p>
<p>“Oscillating crystallization in solution between (+) and (-) 5-ethyl-5-methylhydantoin under the influence of stirring”</p> <p>Although the title compound crystallizes as a stable conglomerate without any detectable solid solution, particles in the shape of single crystals grown from the racemic aqueous solution without stirring contain almost no enantiomeric excess. From stereoselective dissolution experiments carried out in a solution saturated with a single enantiomer, it is shown that the formation of these particles results from the epitaxial association of macroscopic homochiral lamellar fragments parallel to the {101} faces. This alternated 2D nucleation and growth process is shown to constitute an oscillating crystallization mechanism controlled by diffusion only. This is confirmed by the implementation of a gentle stirring of the mother liquor during the crystallization which led to crystals having a high enantiomeric excess. Molecular modeling investigations indicate that the epitaxial region can be described at a molecular level. The structure of two racemic compounds could be generated from this epitaxial zone.</p>	<p>C. Gervais, S. Beilles, P. Cardinael, S. Petit and G. Coquerel, J. Phys. Chem. B, 2002, 106(3), 646-652</p>
<p>“Dehydration mechanism and crystallization behaviours of lactose”.</p> <p>The dehydration mechanism of <math>\alpha</math>-lactose monohydrate was investigated by several techniques and interpreted on the basis of structural data. Whatever the dehydration conditions (heating or use of hygroscopic organic solvents), the departure of water molecules occurs cooperatively in channels parallel to the c axis of the initial structure. Subsequently, the reorganization leads to the closest packing (hygroscopic metastable form, L<sub>H</sub>) under heating or to the stable anhydrous form (L<sub>S</sub>), probably via a nucleation and growth process in ethanol. The use of acetone as dehydrating solvent on single crystals of <math>\alpha</math>-lactose monohydrate led to the unexpected formation of single crystals of the anomeric <math>\beta</math>-lactose at room temperature, from which the crystal structure of <math>\beta</math>-lactose could be accurately redetermined. Recrystallization experiments of anhydrous lactose allowed to prepare N-methylpyrrolidinone and DMSO solvates of <math>\beta</math>-lactose.</p>	<p>S. Garnier, S. Petit and G. Coquerel, J. Therm. Anal. &amp; Calor., 2002, 68, 489-502</p>
<p>“Simple model designed to generate new crystal structures derived from a mother phase; application to molecular compounds”.</p> <p>The basic principles of a model predicting new lattices from a known crystal structure are described. The first of the two-step procedure consists of extracting one- or two-dimensional periodic fragments (PF) from the mother structure. In the second step, symmetry operators are added to the PFs in order to generate one or several new three-dimensional lattices consistent with the 230 space groups. Most of the examples are related to polymorphism, but relationships between racemic compounds and enantiomers, twinning and lamellar epitaxy phenomena are also exemplified.</p>	<p>C. Gervais and G. Coquerel, Acta Cryst., 2002, B58, 662-672</p>

**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>"Chiral NADH models with restricted or blocked rotation at the amide function. Attempts to interpretate the mechanism of the enantioselective hydrogen transfer to methyl benzoylformate".</p> <p>Various NADH models with the following characteristics were studied and compared with previously reported models: (1) use of (S)-phenylalaninol as chiral auxiliary; (2) orientation in or out of the plane of the amide carbonyl. Despite the occurrence of apparently similar characteristics, they gave very different results in the asym. redn. of Me benzoylformate. A detailed NMR study was performed in order to explain the behavior of these models</p>	<p>C. Vitry, J. Bédard, Y. Prigent, V. Levacher, G. Dupas, I. Salliot, G. Quéguiner and J. Bourguignon, Tetrahedron, 2001, 57, 9101-9108.</p>
<p>"Stable annelated chiral NADH models with a rigidified amide part in the quinoline series: Synthesis, reactivity and grafting on a Merrifield resin".</p> <p>The synthesis of new chiral NAD hydrogenated models derived from quinoline is described. Using a biomimetic approach, the out-of-plane positioning of the amide carbonyl was obtained by involving the chiral auxiliary in a lactam structure. It is shown that electron-donating groups on the benzene ring of the quinoline structure are necessary to obtain high chem. yields during the redn. of Me benzoylformate. An interesting variation of the enantioselectivity as a function of magnesium ion concn. has been obsd. Under the best conditions, Me mandelate was obtained in up to 95% ee (R). To facilitate the recycling of these models, grafting of one of the reagents on a Merrifield resin has been developed. The resulting polymer-supported reagent was tested in the asym. redn. of Me benzoylformate.</p>	<p>C. Vitry, J.-L. Vasse, G. Dupas, V. Levacher, G. Quéguiner and J. Bourguignon, Tetrahedron, 2001, 57, 3087-3098.</p>
<p>"A convenient synthesis of 3,4-disubstituted <math>\alpha</math>-carboline".</p> <p>An efficient and direct prepn. of functionalized <math>\alpha</math>-carboline, via a ring closure reaction between the appropriate indole amine and a masked 1,3-dicarbonyl compd. is described. This method afforded new 3-substituted <math>\alpha</math>-carboline and these products were subjected to ortho-lithiation expts. Various 3,4-disubstituted <math>\alpha</math>-carboline were obtained in acceptable yields.</p>	<p>C. Papamicaël, G. Quéguiner, J. Bourguignon and G. Dupas, Tetrahedron, 2001, 57, 5385-5391.</p>
<p>"Acyl transfer of 8-acetoxy-2-oxazolinyquinoline assisted by hydrogen bonding formation".</p> <p>A significant acceleration of acyl transfer has been achieved on 8-acetoxy-2-oxazolinyquinoline in the presence of benzylamine. Comparison of the aminolysis by the new acylating reagent with that of 8-acetoxyquinoline and 8-acetoxyquinoline-2-carbonitrile has been carried out. The results of these expts. suggest that the proximity of a supplementary basic atom to the ester group increases the participation effect of the basic site mainly by formation of a possible second hydrogen bond. The assocn. const. of benzylamine into the basic cavity of 8-methoxy-2-oxazolinyquinoline (<math>K_a=80 \text{ M}^{-1}</math>) has been measured by <math>^1\text{H}</math> NMR titrn. expts.</p>	<p>L. Hortal, C. Moberg, V. Levacher, J. Bourguignon and G. Dupas, Tetrahedron Lett., 2002, 43, 1027-1029.</p>

**Table 1: Publications et communications du réseau RNMM**

<p>"Rational design of novel axially chiral NADH models based on configurational control of atropisomeric lactams".</p> <p>The prepn. of a new class of axially chiral NADH models based on configurational control of atropisomeric lactams is described. The configurational control of this chiral axis is achieved via the presence of a second chirality element installed on the lactam moiety of the reagent I. Redn. of Me benzoylformate led to Me mandelate in 89% yield and 92% e.e. This result suggests that the chiral axis about the C(3)-C:O bond is the main configurational element responsible for the high enantioselectivity obsd. with this biomimetic model.</p>	<p>J. L. Vasse, V. Levacher, G. Dupas, J. Duflos, G. Quéguiner and J. Bourguignon. Tetrahedron Lett., 2001, 42, 3713-3716.</p>
<p>"Design of new axially chiral NADH mimics. Mechanistic investigation of the enantioselective hydride transfer",</p> <p>This paper reports the design of a new axially chiral NADH model (I) which relies on the configurational control around the C3-C:O chiral axis by means of a chiral relay installed on the cyclic structure. The conformational and configurational control of the lactam moiety was successfully achieved affording two conformational diastereoisomers (aS,S)-I and (aR,S)-I in a ratio of 95:5, resp. Redn. of Me benzoylformate with model I afforded (R)-Me mandelate in up to 84% e.e. The stereoselective synthesis of 4-deuterated model I allowed us to establish that this enantioselective redn. arises from the migration of the syn-oriented hydrogen with regard to the carbonyl dipole.</p>	<p>J. L. Vasse, G. Dupas, J. Duflos, G. Quéguiner, J. Bourguignon and V. Levacher, Tetrahedron Lett., 2001, 42, 4613-4616.</p>
<p>"Atropisomeric quinolinium salt promoting the access to both enantiomeric forms of methyl mandelate: a versatile NADH mimic".</p> <p>Asym. redn. of Me benzoylformate by a new NADH mimic is reported; depending on the hydride source used to reduce the NAD<sup>+</sup> precursor, NADH mimics so obtained lead to an inversion of enantioselectivity, affording either (R)-Me mandelate in 88% ee or (S)-Me mandelate in 78% ee.</p>	<p>Vasse, J-L., Levacher V., Bourguignon J. and Dupas G., Chem. Commun., 2002, 19, 2256-2257.</p>
<p>"Influence of the C(4)-C(3)-C:O dihedral angle of chiral NADH mimics on the stereoselectivity of reductions".</p> <p>The authors report the stereoselective synthesis of new chiral NADH mimics I and II of the benzo[b]-1,6-naphthyridine series. The synthesis of I and II relies upon a Friedlander-type condensation between an amino imine and piperidine-2,4-dione bearing a stereogenic center at C(6). The resulting NADH models were involved in the redn. of Me benzoylformate. A comparison of their performance with that of previously reported NADH mimics throws new light on the role played by the C(4)-C(3)-C:O dihedral angle (°) on the stereoselectivity of the hydride transfer.</p>	<p>Vasse J-L., Levacher V., Bourguignon J. and Dupas G., Tetrahedron: Asymmetry, 2002, 13, 227-232.</p>

**Table 2: Communications et affiches**

- "Oscillating nucleation and crystal growth of 5-ethyl-5-methylhydantoin enantiomers in aqueous solution"	C. Gervais, S. Beilles, P. Cardinaël, S. Petit and G. Coquerel, BIWIC-8, Delft (NL), Sept. 2001, ISBN 90-901504-4, pp. 202-207
- "Solvent exchange between DMSO and water in the dexamethasone acetate structure"	F. Mallet, S. Petit, M.N. Petit, D. Lemarchand, P. Billot, S. Lafont and G. Coquerel, BIWIC-8, Delft (NL), Sept. 2001, ISBN 90-901504-4, pp. 249-254
- "Size and morphology of $\beta$ -lactose monohydrate : influence of supersaturation and structurally related additives"	S. Garnier, S. Petit and G. Coquerel, BIWIC-8, Delft (NL), Sept. 2001, ISBN 90-901504-4, pp. 196-201
- "Topotactical Solvent exchange in Roxithromycin structure"	F. Mallet, S. Petit, MN Petit, P. Billot, S. Lafon and G. Coquerel, BIWIC-9, Halle (Allemagne), Sept. 2002, ISBN 3-86010-652-X, pp. 133-139
- "Concept and experimental limitations of structural purity"	M. Pauchet, C. Gervais and G. Coquerel, BIWIC, Halle (Allemagne), Sept. 2002, ISBN 3-86010-652-X, pp. 1-4
- "The 'Derived Crystal Packings' model: prediction of new crystal structures derived from a mother phase"	C. Gervais and G. Coquerel, ISIC-15, Sorrento (Italy), Sept. 2002, ISBN 88-900775-0-6 (Chem. Eng. Trans.), pp. 575-580
- "Dehydration mechanism and crystallisation behaviour of $\beta$ -lactose monohydrate"	S. Garnier, F. Mallet, S. Petit and G. Coquerel, ISIC-15, Sorrento (Italy), Sept. 2002, ISBN 88-900775-0-6 (Chem. Eng. Trans.), pp. 569-574
- "Enantiopurification during the crystallization of host-guest supramolecular compounds : crystal growth and structural investigations"	Grandeury, S. Tisse, V. Agasse, G. Gouhier, S. Petit and G. Coquerel, ISIC-15, Sorrento (Italy), Sept. 2002, ISBN 88-900775-0-6 (Chem. Eng. Trans.), pp. 813-818
- "Formation of New Crystalline Phases by means of Solvent Exchange and Growth of Whisker-like Crystals"	F. Mallet, S. Petit, S. Laffont, P. Billot and G. Coquerel, PhandTA 6, Ascona (Suisse), Mai 2002 (abstr. Book, p. PO 12)
- "Influence of grinding on the dehydration process of $\beta$ -lactose monohydrate"	F. Mallet, S. Garnier, S. Petit, M.N. Petit and G. Coquerel, XXVIIIème JEEP, Agadir (Maroc), Mars 2002, pp. 143-146

**Table 3: Conférences invités**

- "Influence of physical pretreatments on the thermal behaviour of $\beta$ -lactose mono-hydrate"	S. Garnier, S. Petit and G. Coquerel, PhandTA 6, Ascona (Suisse, mai 2002)
- "Oscillating Crystallisation of a Chiral Compounds in Quasi-racemic Solution ; Evidence of a Multi-epitaxy Crystal Growth Mechanism and Influence of Stirring"	C. Gervais, S. Beilles, S. Petit and G. Coquerel, PhandTA 6, Ascona (Suisse, mai 2002)
- "Quelques aspects du Crystal Engineering : Application à la résolution énantiomérique préparative et à la croissance cristalline"	S. Petit, Journée de Conférences de la Société Française de Chimie, Section Normande (Rouen, janvier 2002)
- "Desolvation of solvates : possible application for finding new polymorphic forms. Case of $\beta$ -lactose monohydrate"	S. Petit and G. Coquerel, Séminaire de Chimie Supramoléculaire, Université d'Etat de Novosibirsk (Russie, août 2002)

**Table 4: Thèses (soutenues fin 2001 -sept 2002)**

" Contribution à l'étude de la cristallisation en solution, application à la purification et à l'étude de composés moléculaires : un thiocarbaester et le $\alpha$ -lactose monohydrate".	- GARNIER Stéphanie (2001) Directeurs : Pr G. Coquerel & Pr J.-C. Combret
"Proposition of a model generating derived crystal structures from a given lattice" (thèse Européenne),	- GERVAIS Claire (2002) Directeur : Pr G. Coquerel
«Etude par RMN $^6\text{Li}/^{13}\text{C}/^1\text{H}$ à Haut Champ de Complexes Mixtes Non-Covalents entre Amidures Chirales et Alkylolithiens».	- Stéphanie DESJARDINS Codirection : Pr D. Davoust & Dr J. Maddaluno (EFAOC - 16 avril 2002).
«Synthèse et analyse conformationnelle par RMN et Modélisation Moléculaire de pseudopeptides comportant des composés polycycliques».	- Marianne AXT Codirection Pr J.-C. Quirion (EHO) et Pr V.E.U Costa (Universidade Federal do Rio Grande do Sul-Brésil, 26 avril 2002).

**Table 5: Thèses (en cours)**

"Caractérisation structurale par Résonance Magnétique Nucléaire et Modélisation Moléculaire de la Proline déshydrogenase. Analyse de l'effet de la mutation L441P sur l'activité enzymatique".	- Ludovic CARLIER
"Etude structurale de neuropeptides par spectroscopie RMN et Modélisation Moléculaire sous contraintes RMN".	- Karine COURCHAY
"Synthèse et étude par RMN $^6\text{Li}/^{13}\text{C}/^1\text{H}$ et Modélisation Moléculaire de complexes mixtes entre la 1-benzyl-3-(S)-diphényl méthylaminopyrrolidine et des composés organolithiens contenant un carbone $\text{sp}^2$ ".	- Anne LAUTRETTE
"Synthèse, étude par RMN à haut champ $^6\text{Li}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}/^1\text{H}$ et modélisation moléculaire de complexes mixtes amidures de lithium/alkylolithiens".	- Franck PATE
"Etude du domaine de reconnaissance à l'ADN de la protéine v-myb par RMN et Modélisation Moléculaire".	- Didier RIVIERE
"Synthèse rationnelle, criblage, modélisation moléculaire, évaluation pharmacologique et applications thérapeutiques potentielles de ligands des récepteurs sérotoninergiques de type 7 (5-HT7)".	- Alban LEPAILLEUR