



## Rapport d'activités 2005

La mise à jour de cette édition a été arrêtée  
au 15 novembre 2005

La période de référence de ce rapport d'activités s'étend  
du mois de novembre 2004 au mois d'octobre 2005

Ce rapport est également disponible sur le site Internet du CRIHAN :

**[www.crihan.fr](http://www.crihan.fr)**

<http://www.crihan.fr/admin/pub/RA/>

# SURVOL

L'année 2005 est, à nouveau, riche en événements marquants pour le CRIHAN.

Si le point le plus visible reste l'acquisition d'un nouveau supercalculateur qui traduit une mise à niveau significative des moyens de calcul, la mise en œuvre d'une série de nouveaux services mutualisés sur le réseau SYRHANO, l'accélération des soutiens à projets et les transferts de compétences ne sont pas en reste.

Concernant le Pôle de Modélisation Numérique, l'événement majeur est l'installation, en fin d'année, d'un nouveau calculateur qui place désormais le CRIHAN en quatrième position nationale pour ce qui est de la recherche publique : avec une puissance crête de 1,1 TFlops, cette nouvelle configuration va pallier à la saturation du précédent calculateur et permettre aux chercheurs d'avancer plus vite et plus loin dans leurs modélisations et simulations numériques.

Le réseau SYRHANO fait l'objet, en cette fin d'année, d'une nouvelle étude devant mener à une consultation de services et de transport dès le début 2006 : cette consultation prendra en compte les nouvelles demandes exprimées, le nécessaire accroissement de la qualité de service mais devra s'inscrire également en cohérence avec les nombreux projets de déploiement de services en réseau émanant des collectivités locales.

Dans le cas particulier du réseau d'agglomération rouennaise InterCampus, 2005 a vu la réalisation de nouvelles extensions comme celles de l'IUFM, du Rectorat-Inspection Académique et la mise en chantier de nouvelles tranches avec les projets vers la Faculté de Médecine, l'Ecole d'Architecture ou encore la future Cité des Métiers. Tout ce programme s'appuie sur une étroite collaboration avec la Communauté d'Agglomération Rouennaise en ce qui concerne la mutualisation des actions et le partage d'infrastructures.

Au delà des projets d'infrastructure, 2005 a vu pour la communauté SYRHANO l'arrivée de nouveaux services mutualisés répondant à des besoins exprimés par de nombreux utilisateurs. Citons en effet :

- la mise en place en début d'année du service régional de visioconférence qui a été immédiatement fortement sollicité, aussi bien pour des besoins de télé enseignement que pour des réunions de travail. Raccordé aux infrastructures mises en place sur les réseaux nationaux et européens pour la recherche, il offre un fort potentiel d'aides à la recherche et à l'enseignement régional.
- le lancement d'une expérimentation de téléphonie sur IP inter-sites, destinée non seulement à réduire les coûts de communications mais aussi à préparer la convergence sur IP des services interactifs de communications (audio, visioconférence, messagerie instantanée etc.).
- le renforcement du service mutualisé et sécurisé pour la messagerie électronique. Ce service, baptisé "CATA" et

mis en place en fin d'année 2004 est non seulement un filtre d'entrée au niveau de SYRHANO, en amont des services de messagerie mis en place dans chaque établissement, mais fournit aussi aux sites utilisateurs boîtes aux lettres sécurisées et espaces disque. Ce renforcement a été rendu nécessaire en raison de l'accroissement considérable du trafic de messagerie et donc des besoins de sécurisation qui en découlent.

En matière de soutien à projets, on constate :

- Une augmentation sensible des sollicitations du monde médical, notamment avec les projets issus du Plan Cancer.
- L'innovation régionale dans le domaine des TIC s'exprime par la naissance de nouvelles entreprises dont certaines sont hébergées dans les locaux du CRIHAN pendant leur phase de démarrage, afin de profiter de l'environnement humain et technique du Centre de Ressources ainsi que du réseau régional.
- Le CRIHAN accueille par ailleurs en ses locaux l'association Normandy Motor Valley qui exerce ses activités dans le cadre du pôle de compétitivité régional récemment reconnu dans le domaine de la propulsion.
- Le domaine culturel est bien entendu marqué par le service mis en place au CRIHAN pour la réalisation du portail des musées de Haute-Normandie et de la base de données des fonds culturels régionaux issue du plan de numérisation.
- D'autres actions comme la participation aux projets d'Environnement Numérique de Travail, l'action menée avec la Région et l'association Science Action pour le développement d'un centre de ressources pour les Espaces Publics Numériques, le soutien permanent à la semaine de la Science en Fête, le support du Festival du Film du Cinéma Nordique et enfin l'organisation d'une journée grand public sur le thème de la Modélisation Numérique sous forme de "Cafés des Sciences, sont autant d'actions qui traduisent la volonté du CRIHAN de mettre ses ressources à disposition de communautés d'utilisateurs plus variées.

On remarquera tout au long de ce rapport que les activités traditionnelles (réseau, calcul, formation) en génèrent de nombreux transferts de compétences.

2005 marque enfin le lancement d'une étude destinée à concrétiser un service ciblé sur le support aux entreprises dans le domaine de la modélisation et de la simulation numérique. Avec le recrutement d'un chargé de mission sur ce sujet, le CRIHAN se propose d'identifier les entreprises ayant de tels besoins et de leur proposer l'accès aux moyens matériels et logiciels dans une démarche de transfert de compétences, le support des différents services du CRIHAN devant leur permettre d'appréhender ces technologies dans les meilleures conditions.

<b>PROJETS ET SUPPORT À PROJETS.....</b>	<b>3</b>
1. Projets initiés par le CRIHAN	3
2. Support aux projets du domaine de la Santé	5
3. Support aux projets du domaine culturel	7
<b>PÔLE DE MODÉLISATION NUMÉRIQUE.....</b>	<b>10</b>
1. Renforcement des moyens du pôle de modélisation numérique	10
2. Service d'assistance scientifique du CRIHAN	11
3. Statistiques d'utilisation du supercalculateur p690	12
4. Publications réalisées par les laboratoires utilisateurs	14
5. Réseau Normand de Modélisation Moléculaire	14
<b>RÉSEAU RÉGIONAL SYRHANO.....</b>	<b>17</b>
1. SYRHANO en chiffres en 2005	17
2. Nouveaux services sur SYRHANO	19
3. Evolutions de l'infrastructure SYRHANO	22
<b>FORMATION, TRANSFERT DE COMPÉTENCES.....</b>	<b>23</b>
1. Formations organisées au CRIHAN	24
2. Transferts de compétences	24
<b>ANNEXES.....</b>	<b>26</b>
PLAQUETTE DE PRÉSENTATION DE LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE AUX ENTREPRISES.....	27
PLAQUETTE DE PRÉSENTATION DU PÔLE DE MODÉLISATION NUMÉRIQUE.....	28
CALCUL SCIENTIFIQUE : THÈME DE RECHERCHE DE CHAQUE PROJET.....	29
CALCUL SCIENTIFIQUE : PUBLICATIONS DES LABORATOIRES UTILISATEURS.....	31
MODÉLISATION MOLÉCULAIRE : LOGICIELS DISPONIBLES.....	47
RÉSEAU INTERCAMPUS EN 2005.....	48
PLAQUETTE DE PRÉSENTATION DU SERVICE RÉGIONAL DE VISIOCONFÉRENCE.....	49
PLAQUETTE DE PRÉSENTATION DU SERVICE "CATA".....	50



# PROJETS ET SUPPORT À PROJETS

## En bref

- ⇒ Service aux PME/PMI
- ⇒ Accueil d'entreprises innovantes
- ⇒ Prestations industrielles
- ⇒ Télésanté (ADICAP, INCA, INVS, Dossier médical partagé, etc.)
- ⇒ Culturel (Musées, Cinéma, Fête de la Science)
- ⇒ Espaces Publics Numériques
- ⇒ Environnements Numériques de Travail

Le CRIHAN soutient traditionnellement de nombreux projets innovants en matière d'utilisation ou d'intégration des TIC (voir plus loin) : l'année 2005 a également vu le démarrage de deux projets initiés par le CRIHAN lui-même :

- le lancement d'une étude pour un nouveau service aux entreprises pour l'accès aux outils de modélisation et de simulation numérique,
- l'accueil en ses locaux de structures innovantes en matière de TIC pour les aider dans leur phase de démarrage de projet.

## 1. Projets initiés par le CRIHAN

### 1.1. Aide aux PME-PMI pour la modélisation et la simulation numériques

En 2004, le CRIHAN avait réalisé une phase de tests auprès de quelques entreprises pour évaluer la faisabilité de création d'un service d'aide à l'utilisation des outils de modélisation numérique. La volonté du CRIHAN est d'augmenter le partenariat avec les entreprises, en particulier avec les PMI/PME régionales pour leur faciliter l'accès à des moyens de calcul importants dans le domaine de la modélisation numérique.

Cette stratégie s'appuie sur l'embauche d'un chargé de mission en charge des relations avec les entreprises et de la présentation d'une offre de services de modélisation adaptées à leurs besoins et au contexte du CRIHAN. Dans un premier temps, les contacts précédemment pris avec des structures comme l'ANVAR, ACCEVAL, les CCI régionales, la DRIRE et le réseau Haute-Normandie Technologie ont été poursuivis. Par ailleurs, l'aide d'un conseiller technique à l'expérience reconnue, apporte à la démarche une expertise reconnue en matière d'entreprise innovante.

Une première illustration de cette ouverture vers le monde économique a été l'organisation au CRIHAN, le 10 octobre 2005, d'une journée sur le thème de la modélisation numérique. A cette journée "tous publics", organisée sous forme de "cafés des sciences", le CRIHAN avait également convié un certain nombre d'entreprises régionales.

Les développements de cette démarche ciblée seront présentés plus en détail dans le rapport d'activités 2006.

La communication sur la démarche entreprise a constitué en la refonte de la plaquette de présentation du service (voir en annexe) et un premier mailing a été envoyé à environ trois cents entreprises.

Dans le même esprit a été réalisé un DVD de présentation des thématiques scientifiques qui utilisent les ressources en calcul du CRIHAN : plusieurs illustrations venant de laboratoires de recherche régionaux et extra régionaux figurent sur ce DVD. Une version incluant la problématique "entreprises" est en cours de préparation.

Par ailleurs, dans le cadre du salon dédié aux entreprises (RITH en novembre 2005), le CRIHAN participe aux Rencontres Technologiques du Madrillet avec l'Association du Technopôle du Madrillet où il présente son action à des groupes de visiteurs préalablement sensibilisés et informés des ressources disponibles sur le Technopôle.

### 1.2. Hébergements dans les locaux du CRIHAN

L'année 2005 a été fertile en ce qui concerne l'accueil de structures dans les locaux du CRIHAN sur le Technopôle du Madrillet. Des conventions ont été conclues avec quatre structures dont deux entreprises innovantes :

#### 1.2.1. Accueil d'entreprises innovantes

L'année 2005 a été fertile en ce qui concerne l'accueil de structures innovantes dans les locaux même du CRIHAN. Des conventions ont été conclues avec trois structures :

#### Société Novatice :

Depuis mars 2005, le CRIHAN héberge en ses locaux la société Novatice, qui conçoit et commercialise des solutions informatiques innovantes. Soutenue par l'ANVAR de Haute-Normandie, Novatice met au point une gamme de produits dont la vocation est la fiabilisation de l'outil informatique en milieu scolaire :

- Les systèmes sont immunisés contre les virus (sans anti-virus) et les erreurs humaines (mauvaises manipulations),
- Les solutions proposées ne demandent aucune maintenance (administration, configuration, mise à jour logiciels...),
- Grâce aux technologies utilisées, les solutions sont pérennes, économiques et écologiques (le matériel n'a plus besoin d'être remplacé et l'utilisation de PC dit "déclassé" est tout à fait possible).

#### L'apport du CRIHAN :

Du fait de son implantation au CRIHAN et avec l'expertise et le support de l'équipe technique, l'entreprise a pu recruter un ingénieur qui travaille sur la stabilisation et l'enrichissement de sa gamme de produits.

Ainsi pour la mise au point de "QuadMedia" (réalisation de 4 postes de travail avec une seule unité centrale) ou encore, en matière de réseaux, pour "Netserv" (solution permettant de réutiliser du vieux matériel informatique). Avec le réseau du CRIHAN, ce produit va pouvoir profiter d'une plateforme de test idéale pour les tests relatifs aux besoins en bande passante, mais également pour les expérimentations devant permettre aux élèves et enseignants d'accéder à leur environnement de travail de chez eux, grâce à un simple boîtier électronique.

A l'issue de cette première phase de six mois au CRIHAN, la société peut déjà envisager des accords de partenariat avec de grands groupes industriels et financiers pour industrialiser la gamme de ses produits, notamment sur la base d'un partenariat avec les collectivités pour le recyclage intelligent ou du réemploi du matériel informatique.

#### **Société IDT :**

Arrivée en octobre 2005, "Innovation et Développement Technologique" est une jeune société de logiciel innovant qui emploie quatre ingénieurs en développement.

Spécialisée dans l'intégration des produits et logiciels multimédia reposant essentiellement sur le protocole IP, la société comporte une activité de recherche et développement qui s'appuiera sur la plateforme réseau du CRIHAN pour ses expérimentations.

#### **1.2.2. Accueil des associations Normandy Motor Valley et Haute-Normandie Aérospace :**

L'association Normandy Motor Valley pilote le projet de pôle « Energétique et propulsion » (projet normand labellisé dans le cadre des pôles de compétitivité) qui doit devenir un pôle de référence en France en matière de technologies des systèmes de propulsion appliqués aux moteurs automobiles, aéronautiques et spatiaux. Il est soutenu par les Conseils régionaux de Haute et de Basse-Normandie mais aussi d'Ile de France.

Participent à ce pôle un certain nombre d'entreprises [Total, Renault, Snecma, Hurel-Hispano, Thalès, 3M, Gaz de France, Magnetti-Marelli, Valeo, Filtrauto et près de 350 PME], des unités de recherche et de formation [Ecoles d'ingénieurs : INSA, ESIGELEC (Rouen), ENSI (Caen), ISPA (Alençon), l'Université de Rouen].

L'hébergement de l'association au CRIHAN, ainsi que celui de Haute-Normandie Aérospace, toutes deux liées fortement dans leurs problématiques, est effective depuis le 21 novembre 2005.

#### **1.3. Prestations ( secteur associatif)**

L'association Seine-Aval est un GIP dont le programme scientifique multidisciplinaire relatif à l'estuaire de la Seine favorise la recherche appliquée. Il a été créé pour faciliter la compréhension de ce genre de milieu et aider à la prise de décisions publiques. Ce programme Seine-Aval constitue aujourd'hui l'un des outils principaux des acteurs et décideurs du "plan de gestion globale" impulsé en estuaire de Seine.

Le CRIHAN héberge depuis longtemps le serveur web de Seine-Aval : cette année, Seine -Aval a engagé une démarche de refonte de ce serveur et de structuration de

ses données, avec comme volonté la création d'une base documentaire. L'étude technique, faite par un stagiaire recruté par le CRIHAN, a permis à ce jour de cibler deux solutions pour atteindre cet objectif. La partie du stage consacrée à l'aspect conseil et étude technique des solutions envisagées s'est déroulée au CRIHAN avec encadrement du service système.

A ce jour, la dynamique autour du projet se poursuit et le CRIHAN continue à apporter son expertise technique sur ce sujet qui doit aboutir en 2006.

#### **1.4. Prestations (secteur industriel)**

Le Bassin d'Essai des Carènes a bénéficié cette année du soutien technique, de l'expertise système et de la veille technologique du CRIHAN qui ont porté sur :

- une aide pour le choix, la mise en place et la mise en production d'un cluster de calcul à base de PC (64 processeurs),
- une aide à l'administration système (exploitation) de ses machines,
- l'assistance auprès d'un stagiaire pour la réalisation d'un cluster basé sur la distribution "Kerrighed" dans le cadre d'un sujet de type "veille technologique". Ce point est crucial pour le Bassin d'Essai des Carènes. Dans l'optique ou cette solution s'avère finalisée (ce qui semble être le cas), cela permettrait de reconditionner de "vieilles" machines pour effectuer des calculs encore impossibles à réaliser à ce jour.

## 2. Support aux projets du domaine de la Santé

Depuis la réalisation, dès 1996, d'une plateforme d'échanges de dossiers d'expertises médicale pour l'ADICAP<sup>1</sup> le CRIHAN s'est trouvé souvent sollicité par des instances du monde médical (organisations professionnelles et pouvoirs publics) qui promeuvent l'utilisation des outils informatiques dans la pratique de la profession.

### 2.1. Les actions du CRIHAN dans le contexte de l'anatomo pathologie en France

L'année écoulée a été très riche en initiatives dans ce domaine, lesquelles ont toutes comme point commun la standardisation des comptes rendus avec, en arrière plan, la volonté de faciliter les études statistiques et épidémiologiques dans chaque pathologie cancéreuse.

En 2003, (voir le rapport correspondant) le CRIHAN avait mené une étude sur ces thèmes pour le compte de la Fédération des CRISAP (Centre de Regroupement Informatique et Statistique de données Anatomo Cyto Pathologiques).

En 2004, le CRIHAN a développé pour l'ADICAP un outil de production en ligne de comptes-rendus standardisés, le CRAO (voir rapport d'activités précédent).

En 2004-2005, les projets de l'INVS (Institut National de la Veille Sanitaire) puis de l'INCA (Institut National du Cancer) se sont avérés viser sensiblement la même problématique, ce qui les a amenés à associer le CRIHAN dans l'élaboration des cahiers des charges.

#### 2.1.1. Le projet INCA

L'INCA expérimente dans 4 régions françaises pilotes le "dossier cancer communiquant" (DCC) qui doit permettre aux professionnels de santé de mieux soigner les malades (cancers déclarés). Il s'agit d'un guichet unique d'accès à l'information pour les praticiens qui pourront, en ligne ou au travers de leurs outils et moyennant un interfaçage idoine, transmettre les données utiles à leurs collègues et consulter le dossier de leurs patients.

La démarche passe par la standardisation des documents utilisés par les pathologistes pour leurs compte-rendus. Cependant, chaque spécialité nécessite un format spécifique : ainsi, vingt quatre "fiches organes" sont nécessaires (sein, vessie, prostate, mélanome, côlon, thyroïde, poumon, foie, pédiatrie, hématologie, corps utérin, tissu mou, rein, pancréas, séreuses, neuropathologie, ophtalmologie, testicule, oesophage - estomac, ovaire, endocrine - digestif, col utérin, peau, ORL), les sept premières étant considérées comme prioritaires dans le planning de réalisation.

Dans chaque cas, un médecin est en charge du contenu médical de la fiche et coordonne un petit groupe de travail, auquel participe activement le CRIHAN sur les aspects de transcription des items de chaque fiche en formulaire informatique. A chaque fiche est associé un guide de bonnes

pratiques qui sera aussi accessible en ligne pour aider les médecins à remplir les fiches convenablement de sorte à faciliter leur exploitation informatique ultérieure.

Les outils informatiques développés doivent permettre d'automatiser le traitement de ces fiches, leur transmission au DCC et la génération de comptes-rendus standardisés et codés selon les différentes codifications en vigueur (SNOMED, ADICAP et ICDO).

Afin d'informatiser ces fiches, et d'offrir ensuite des possibilités de recherches transversales (multi-fiches), le travail s'est déroulé directement avec les praticiens, en établissant un glossaire hiérarchisé des paragraphes et termes employés dans l'ensemble des fiches. Cela donne un premier document qui servira de dictionnaire de structure des fiches informatisées. Ce document sera lui aussi mis à jour si besoin afin de permettre l'évolution des fiches organes.

Chaque fiche organe est travaillée, au cas par cas : il a été établi un premier questionnaire servant à décrire, d'un point de vue informatique, le document, le parcours des différents champs lors de la rédaction d'un compte-rendu, le caractère obligatoire ou non des champs, les unités s'il s'agit d'un champ numérique, les listes de valeurs possibles, ainsi que toutes les informations permettant à un logiciel de faire un minimum de vérifications de façon automatique. Ce questionnaire devra être rempli pour chaque fiche organe.

Ces informations seront ensuite incluses dans le document CDA (Clinical Document Architecture) de chaque fiche.

Le groupe de travail technique devra valider avec chaque responsable de fiche l'exactitude de ces données afin de passer à l'étape suivante : le document CDA en lui même.

Chaque fiche organe aura son propre CDA. Le groupe HL7 France (HL7 est une des organisations de normalisation accréditées par l'ANSI dans le secteur des soins de santé) propose son aide pour la réalisation du premier CDA de la fiche pilote (fiche thyroïde) ainsi qu'une validation pour les autres fiches.

D'autres documents électroniques seront aussi prévus pour chaque fiche. La notice explicative, à l'intention des praticiens, ainsi que les images l'accompagnant, doivent être exploitables à partir du CDA, et donc utiliser les mêmes codes de paragraphes.

Un dernier document pourrait indiquer l'aspect souhaité du compte rendu finalisé afin d'uniformiser les comptes-rendus jusqu'à leur rédaction.

Tous ces documents seront ensuite utilisés en annexe des cahiers des charges sur le marché des logiciels de création de compte-rendu pour les anatomo pathologistes afin que ceux-ci génèrent les formulaires adéquats (l'INCA travaille à un programme de label qui garantira qu'un logiciel respecte les recommandations INCA).

#### 2.1.2. Le projet INVS

L'InVS a, en parallèle, un projet de suivi épidémiologique des cancers (en commençant par celui de la thyroïde) qui nécessite la récupération d'une partie des données

<sup>1</sup> Association pour le Développement de l'Informatique en Anatomo Cyto Pathologie. (voir rapports précédents)

contenues dans les fiches standardisées. Pour éviter de demander aux professionnels de transmettre leurs données plusieurs fois, une collaboration sur le projet des comptes-rendus standardisés avec l'INCA est en cours : elle devrait aboutir à une remontée commune des informations vers le DCC que chacun des intervenants pourra utiliser selon ses besoins. Le CRIHAN participe donc aux travaux avec l'INVS sur cette thématique afin d'intégrer les besoins de données épidémiologiques pour l'INVS dans les fiches sur lesquelles il travaille pour l'INCA.

### 2.1.3. ADICAP

#### Le "CRAO"

Dans le même esprit, le Compte Rendu Assisté par Ordinateur, application développée par le CRIHAN pour le compte de l'ADICAP en 2004 (détaillé dans le précédent rapport d'activités) a été finalisé. Rappelons qu'il s'agit d'un outil en ligne permettant la rédaction de comptes rendus standardisés, basés sur des référentiels pour chaque type d'organe. Cet outil doit pouvoir représenter, dans la stratégie de l'ADICAP, un des maillons de l'ensemble des dispositifs nationaux qui se mettent en place pour répondre aux besoins de standardisation ci-dessus évoqués.

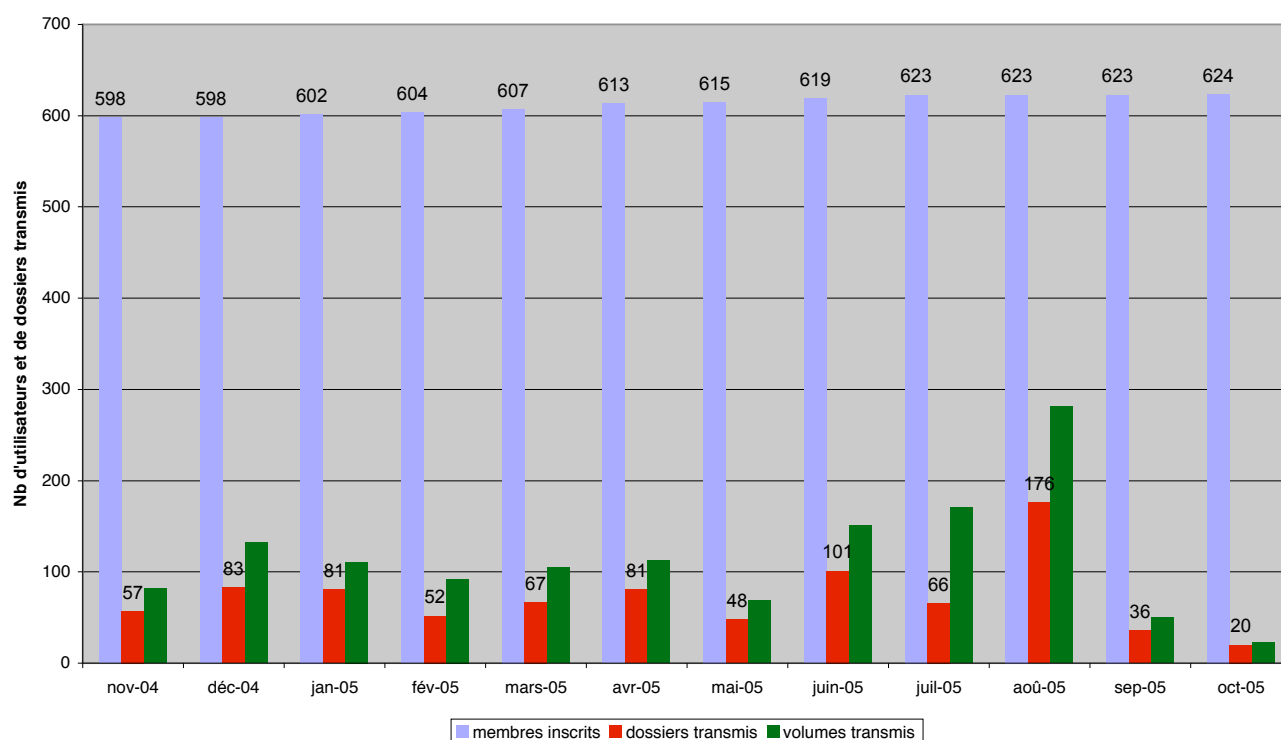
Cinq référentiels sont actuellement disponibles sur le serveur ADICAP du CRIHAN : Tumeurs du colon (Pièces opératoires), Tumeurs du colon (Biopsies), Tumeurs thyroïdiennes (Pièces opératoires), Lésions cervico-utérines (frottis), Tumeurs testiculaires.

#### Service de coexpertise

Le service d'échanges de cas médicaux mis en place pour l'ADICAP, continue à être régulièrement utilisé par les membres de cette profession pour leur besoin en coexpertise. Le graphique ci-après exprime le niveau d'activité de cette plateforme :

- Le nombre des utilisateurs inscrits au service (en bleu) confirme une régulière progression des inscriptions au service (en moyenne deux nouvelles inscriptions par mois),
- Le nombre mensuel moyen de dossiers transmis (violet) est de l'ordre de 72 (variation de 40 à 176 sur ce graphique),
- La masse globale de données (vert) est, elle, de l'ordre de 115 Mo en moyenne (variation de 50 à 300 Mo sur ce graphique).

Trafics sur la plateforme ADICAP (période de novembre 2004 à mi-octobre 2005)



### 3. Support aux projets du domaine culturel

Après le Festival du Cinéma Nordique, Science Action Haute-Normandie, le champ culturel s'élargit encore dans les activités du CRIHAN : cette année le développement du Portail des Musées de Haute-Normandie a pris une ampleur suffisante pour permettre l'emploi d'un chef de projet. D'autres actions comme l'organisation d'un Café des Sciences, la participation au centre de ressources pour les Espaces Publics Numériques (EPN) ou encore aux Environnements de Travail Numériques (ENT) peuvent être rattachées à ce domaine.

#### 3.1. Portail des musées de Haute-Normandie

Le portail mis en place l'an passé (<http://musees-haute-normandie.fr>) a continué sa progression grâce au travail du chef de projet recruté au CRIHAN et de la Section Fédérée des conservateurs de musées de Haute-Normandie. Les travaux sont définis chaque mois dans le cadre du comité éditorial qui se réunit au CRIHAN pour gérer la coordination éditoriale du portail et l'avancement du site en termes de contenus et de nouvelles fonctionnalités. Le comité rassemble des représentants de la SFHN, du Rectorat de Rouen, de la DRAC, du Conseil Régional, du Ministère de la Culture et de la Communication (DMF) et du CRIHAN.

##### 3.1.1. Vie du portail et actions 2005

En 2005, les travaux rythmés par les réunions mensuelles du comité éditorial se sont orientés autour de quatre axes essentiels à la vie du portail :

##### Formation des utilisateurs

Les personnels des musées ont bénéficié de formations spécifiques organisées au CRIHAN : trois sessions (en février, mars et avril) ont été consacrées à l'utilisation des outils permettant à chaque musée la mise à jour des informations le concernant sur le portail, ainsi qu'à l'utilisation des listes de diffusions consacrées à l'échange des informations entre tous les membres du réseau.

##### Enrichissement du contenu

En dehors des améliorations ponctuelles et des mises à jours quotidiennes du portail visant à donner le programme exhaustif des expositions temporaires, activités et animations assurées par l'ensemble des musées de France de la région, le comité éditorial s'est attaché à alimenter régulièrement les rubriques mettant en avant le caractère régional des collections et à prévoir l'ouverture de la rubrique "Expositions en ligne".

##### Développement du volet pédagogique

Pour valoriser l'aspect pédagogique du portail, une étude a été réalisée auprès d'étudiants de l'IUFM afin d'évaluer les attentes des futurs professeurs et leur perception du portail.

En outre, un groupe de travail a été monté avec le Rectorat pour la mise en place d'un service pédagogique propre au portail. L'élaboration d'un cahier des charges définissant les compétences et les missions de ce service éducatif a permis la sélection d'un professeur détaché.

#### Valorisation du portail et développement de la communication

Après le lancement officiel du portail, l'accent a été mis sur l'amélioration de la visibilité du portail. Dans l'objectif d'une promotion à plus grande échelle et systématique auprès d'autres sites Internet culturels et des acteurs du tourisme, un dossier de presse spécifique a été conçu.

En outre, un groupe de travail impliquant la Délégation Régionale au Tourisme (DRT) a été monté avec pour projet de mettre en valeur les informations destinées aux publics handicapés et de se conformer aux recommandations du gouvernement quant à l'accessibilité du portail aux handicapés. L'objectif de répondre, dans un premier temps, aux directives WCAG v1.0 du W3C au niveau de la priorité A (premier des trois niveaux) est en cours de réalisation.

L'objectif suivant consistera à faire tester le site auprès de personnes handicapées.

#### Évolution du portail : Actions menées en 2005

Afin de répondre aux objectifs définis en 2004, la réalisation d'une base de données pour les collections haut-normandes a été lancée.

La mise en place de la base de données des collections muséographiques haut-normandes a nécessité la définition des spécifications fonctionnelles et la réalisation d'une première version du cahier des charges pour le module de recherche dans les collections.

À ce jour, la base de donnée est réalisée et l'intégration des données à partir de la base nationale Joconde accomplie. L'application de gestion des données et l'interface de consultation des collections sont en cours de réalisation.

#### Orientations futures

En dehors des développements prévus dans la convention triennale initiale, le CRIHAN et la SFHN ont réfléchi et proposé des enrichissements pour une meilleure valorisation du portail régional des musées de Haute-Normandie, avec deux objectifs principaux :

Élargir les fonctionnalités offertes au grand public et lui faciliter l'accès aux données numérisées dans une perspective permettant de répondre aux attentes des acteurs du tourisme comme à celles du monde de l'éducation.

Garantir la pérennité des données et assurer une meilleure visibilité du portail et du programme de numérisation auprès des institutions, des communautés culturelles et scientifiques puis des publics européens, en respectant les normes développées au niveau européen (projet MINERVA).

#### 3.2. Festival du Cinéma Nordique

2005, neuvième année de soutien du CRIHAN au Festival du Cinéma Nordique, notamment au travers de l'hébergement de son site Web. Outre le travail sur la traditionnelle grille des programmes l'aide technique a aussi porté cette année sur la mise en place d'une interface de gestion directement en ligne, destinée au personnel de l'association qui peut ainsi travailler directement sur la base de données des films dont la structure et le fonctionnement sont également assurées par le CRIHAN.



### 3.3. Pôle Image

A la demande du Pôle Image de Haute-Normandie et de la Région, le CRIHAN a accueilli le tournage d'un film soutenu par le Pôle. L'architecture et le cadre du bâtiment du CRIHAN se prêtaient en effet au thème du film dont l'action se déroule dans un centre de formation. La perturbation des activités du CRIHAN n'aura duré que deux petites semaines.

### 3.4. Fête de la Science

La participation du CRIHAN à la Fête de la Science s'est concrétisée en 2005 sur le "Village des Sciences" organisée à la Faculté des Sciences du Technopôle du Madrillet, du 13 au 16 octobre. L'accent fut mis sur la présentation des nouvelles ressources en calcul du centre, illustrées par des animations reflétant quelques réalisations des laboratoires de recherche, en matière de modélisation et de simulation numérique, rendues possibles par l'utilisation de ces ressources.

### 3.5. Cafés des Sciences

En prélude à la Fête de la Science, mais également à l'occasion de l'inauguration du nouveau super ordinateur (voir au chapitre "calcul"), une journée d'information "grand public" sur le thème de la modélisation et de la simulation numérique a été organisée dans les locaux du CRIHAN, le 10 octobre 2005.

Un public varié, composé de curieux, d'étudiants et de quelques chefs d'entreprises s'est vu proposé, le matin et l'après-midi, un "Café des Sciences" au cours duquel il avait la possibilité d'interroger des chercheurs sur l'usage qu'ils font des outils mis à leur disposition par le CRIHAN. Les illustrations apportées et commentées par ces chercheurs ont permis de démontrer le niveau de la recherche régionale dans des domaines aussi variés que l'aéronautique, l'agro alimentaire, la chimie fine et l'environnement.

Un DVD de présentation de ces thématiques scientifiques utilisatrices des ressources en calcul du CRIHAN a été réalisé à cette occasion.

### 3.6. Espace Numérique de Travail

Dans le cadre de son action auprès des collectivités territoriales en matière de déploiement des TIC dans les territoires, la CDC s'est associée au projet PLUMEL.

PLUMEL (Plumier Electronique), est un projet de mise en place d'un Espace Numérique de Travail (ENT) ouvert à l'ensemble de la communauté éducative (élèves, enseignants, parents et personnels administratifs).

PLUMEL est porté par la Région, les Départements, le Rectorat et les Inspections Académiques de Haute-Normandie. Il a été retenu dans le cadre de l'appel à projet national sur les ENT lancé par le Ministère de l'Education Nationale et la CDC. Le comité de pilotage du projet regroupe les membres ci-dessus ainsi que le CRIHAN.

Le CRIHAN a donc participé à toutes les réunions de travail : il a notamment pour mission de fournir une étude de l'existant en matière d'infrastructures de réseaux disponibles pour la mise en œuvre des différentes plateformes qui seront testées dans une phase d'expérimentation.

### 3.7. Espaces Publics Numériques

#### Genèse

Dans le cadre du déploiement des Cyber-bases, la CDC est chargée d'appuyer des centres de ressources régionaux (CISI de décembre 2002).

Ces centres ont pour mission de coordonner et d'animer l'ensemble des espaces publics numériques présents sur le territoire.

Le Conseil Régional de Haute-Normandie s'est porté candidat pour mettre en œuvre le Centre Régional de Ressources des Espaces Publics Numériques.

Hébergeant déjà une Cyber-base en ses locaux, la Région a voulu s'appuyer également sur le CRIHAN et sur Science Action Haute-Normandie pour compléter le dossier de réponse à cet appel. Une convention quadripartite a été signée en septembre 2005.

#### Actions

La Région travaille sur un état des lieux, un diagnostic et sur la diffusion d'informations auprès du réseau en constitution. Il s'agit de recenser les finalités et les modes de fonctionnement des EPN existants en Haute-Normandie et des projets de développement des EPN régionaux (moyens, publics, fréquentation, besoins exprimés, degré de satisfaction, modes de financement, ...) en vue d'établir l'opportunité de mutualiser des ressources.

Les trois partenaires ont aussitôt travaillé à la constitution d'un planning d'actions dont la première phase a consisté à sélectionner un groupe expérimental restreint mais représentatifs des EPN haut-normands (après enquête, sur la base de critères définis par le Comité de pilotage). Cet échantillon recevra les soutiens pédagogique, technique, logistique et matériel en vue de préfigurer le fonctionnement d'un centre de ressources à l'échelle de l'ensemble des EPN haut-normands. Cette expérimentation doit se dérouler pendant douze mois (jusqu'en avril 2006). Sera ensuite organisé un séminaire réunissant les EPN identifiés, les partenaires supports techniques ou d'animation, les partenaires publics ou privés susceptibles de contribuer au développement de contenus régionaux ou des pratiques, les collectivités intéressées, et d'une manière générale les intervenants dans le secteur des TIC en tant que service public.

Réunions d'information et de sensibilisation sur le terrain, weblettre trimestrielle, diffusion de plaquette d'information, constitution d'une base de données relatives aux EPN sont les étapes prévues dans le plan de déploiement.

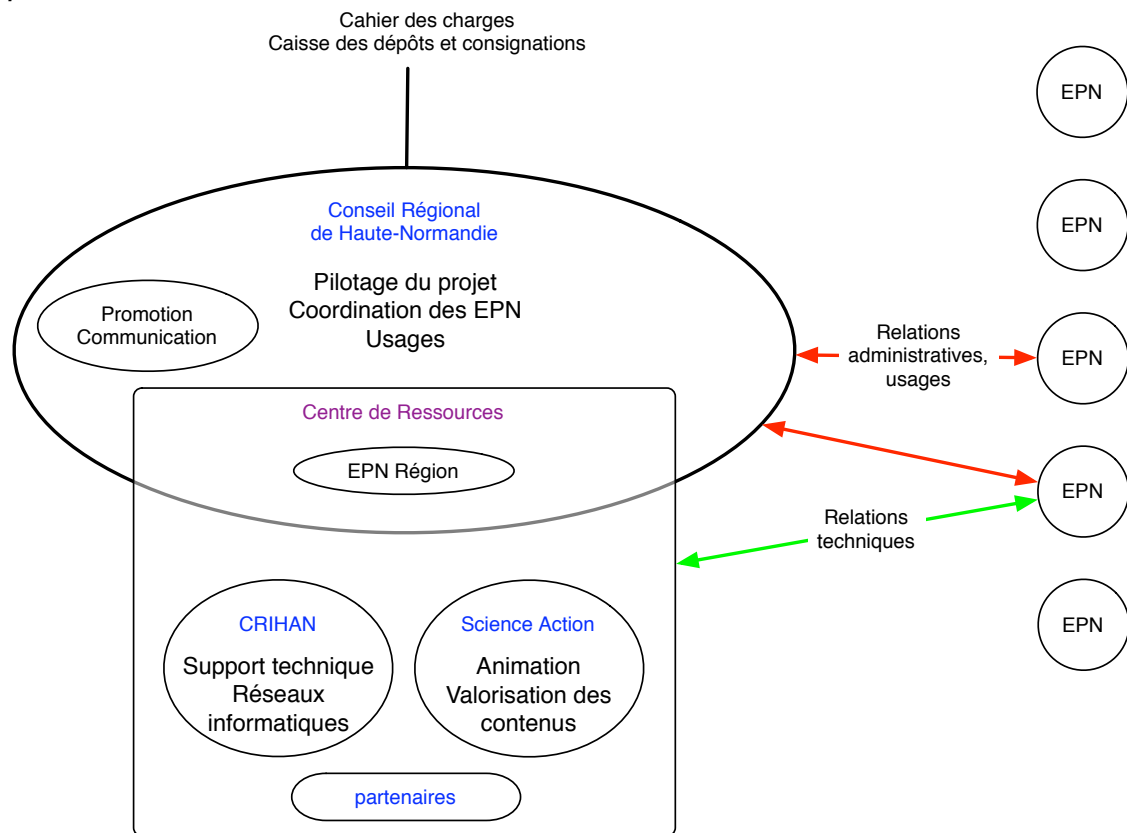
L'action du CRIHAN consiste en la mise en place d'une plate-forme de formation technique de base commune à tous les animateurs d'EPN, Science Action ayant en charge les actions sur le terrain, la mise en œuvre des moyens de vidéo-conférence en lien avec le CRIHAN et la mutualisation des connaissances et des pratiques entre EPN adhérents.

Sont prévus au dernier trimestre 2005, la mise en ligne des informations sur les EPN recensés (environ 80), et l'expertise des matériels disponibles dans ces structures.

Ci-après, le schéma organisationnel du Centre de Ressources EPN ainsi créé :



**Structure organisationnelle**  
**Réponse EPN CdC**



# PÔLE DE MODÉLISATION NUMÉRIQUE

## En bref

- ⇒ Installation d'un nouveau cluster de calcul : puissance crête 1,1 TFlops
- ⇒ Activités du service d'assistance scientifique
- ⇒ 380 000 heures/processeur consommées
- ⇒ 48 projets scientifiques retenus en 2005
- ⇒ 120+ comptes utilisateurs
- ⇒ En moyenne, 80% de charge du cluster de calcul P690

L'événement marquant de l'année en matière de calculateur est l'arrivée d'une nouvelle configuration pour renforcer les moyens de calcul du pôle de modélisation et de simulation numérique. Cette configuration est en cours d'installation durant tout le troisième trimestre 2005.

L'utilisation par les laboratoires de recherche des ressources en cours de production sera traduite dans ce chapitre de plusieurs façons :

- Par les prestations et formations dispensées par le service d'assistance scientifique du CRIHAN pour les utilisateurs désireux d'optimiser leurs codes de calculs et de mieux exploiter le type d'architecture qui leur est proposé.
- Par une comptabilité d'utilisation des capacités machines,
- Par les publications issues de ces laboratoires (articles, communications, thèses etc.) en lien avec les ressources du CRIHAN.

## 1. Renforcement des moyens du pôle de modélisation numérique

Une consultation lancée au printemps 2005 a abouti à l'achat d'une solution présentée par Adequat et basée sur des matériels et logiciels IBM. Cette solution se compose de :

- 19 nœuds IBM p575, dotés chacun de 8 processeurs Power 5 (1.9 GHz) et 16 Go de mémoire,
- d'un réseau d'interconnexion rapide "Federation" (latence de 4  $\mu$ s et débit de 2Go/s bidirectionnel) ;
- de 21 To d'espace disque utile relié directement à chacun des nœuds au travers de fibre optiques,
- d'un ensemble de logiciels IBM (compilateurs, bibliothèques scientifiques, etc.).

La performance crête théorique de l'ensemble est de l'ordre de 1,1 TFlops.

La livraison des composants du cluster a eu lieu fin juillet. L'installation des matériels et logiciels, leur configuration et leur intégration dans l'environnement de calcul CRIHAN nécessitent plusieurs mois de travail.

A l'issue de cette phase de mise en production, la capacité de calcul aura été multipliée par 3,5 et la capacité de stockage par 20, faisant de l'ensemble, à ce jour, la quatrième puissance nationale pour les configurations du monde de la recherche.

La puissance du cluster révèle cependant les limites techniques des installations du CRIHAN. La capacité de rafraîchissement de la salle des machines a atteint son extrême limite et devra être accrue. La puissance électrique est encore suffisante mais l'installation a nécessité l'ajout de plusieurs circuits dédiés aux différents composants du cluster.

A noter l'arrêt définitif de l'ancienne configuration "ILLIAC8". Cet ensemble, après huit ans de bons et loyaux services (voir le bilan complet dans le rapport d'activités 2004) a été définitivement débranché au mois de mai 2005. Sa puissance (25 GFlops seulement !) ne correspondait plus aux besoins croissants des utilisateurs. Le coût de fonctionnement et de maintenance n'était plus en rapport avec le service rendu. De plus, il fallait limiter au maximum les puissances calorifiques diffusées dans la salle des machines pour les raisons évoquées ci-dessus. Dans le même esprit, plusieurs serveurs ont dû être déportés dans d'autres salles pour alléger le travail des centrales d'air rafraîchi.

## 2. Service d'assistance scientifique du CRIHAN

Le service d'assistance scientifique a plusieurs missions tournées vers la communauté des utilisateurs du CRIHAN et vers le monde académique pour des actions ponctuelles. Des prestations de service sont aussi effectuées auprès des entreprises de la région.

### Assistance quotidienne

Le service d'assistance est sollicité par les utilisateurs pour la résolution de problèmes et l'amélioration des performances de leurs applications : problèmes d'erreur de compilation ou d'exécution des programmes, problèmes de soumission des travaux, demandes d'aide pour optimiser les applications.

### Préparation des consultations

Dans le cadre de la consultation (voir § 1), le support scientifique a pour rôle :

- D'aider à la préparation du cahier des charges et préparation des applications fournies aux soumissionnaires pour évaluer les performances des architectures proposées.
- Le support pour ces soumissionnaires pour les aider à résoudre les problèmes de portage des applications sur leur plate forme respective.
- L'analyse et la critique des solutions techniques proposées.

### Actions de formation, d'enseignement, transfert de compétences

- Environnement de travail sur le cluster IBM

Chaque année, des séances de formation sont proposées aux utilisateurs sur ce thème. Il s'agit d'une formation théorique, gratuite, dispensée dans les locaux du CRIHAN, où sont traités les compilateurs, les procédures de soumission, l'optimisation scalaire, la parallélisation). Deux séances ont eu lieu, en février et en avril.

Le service d'assistance a aussi pour vocation de transmettre des connaissances en programmation scientifique et optimisations de code de simulations.

- Une formation d'une semaine, pour les doctorants de l'Ecole Doctorale SPMII<sup>2</sup>, consacrée au calcul parallèle a été organisée en mars 2005 au CRIHAN. Elle a été suivie par plus de 20 étudiants en cours de thèse.
- En décembre 2005, une présentation du calcul parallèle aura lieu dans le cadre d'un cours sur l'architecture des ordinateurs dispensé en Licence d'Informatique à l'Université du Havre.

### Cafés des Sciences

Pour l'ouverture de la semaine de la "Science en Fête", en octobre 2005, l'organisation de "Cafés des sciences" dans les locaux du CRIHAN a permis de débattre autour de l'utilisation du calcul scientifique pour la modélisation et des échanges avec le public ont été l'occasion de mieux faire

comprendre les enjeux et les applications de l'utilisation des supercalculateurs. Le service participait, aux cotés de scientifiques régionaux, aux échanges avec le public.

### Prestations auprès du secteur privé

- Prestations contractuelles

La parallélisation du code d'hydrodynamique ICARE utilisé par le Bassin d'Essais des Carènes de Val de Rueil, commencée en 2004, a été achevée cette année. Cette version parallèle du code a permis de traiter des maillages de carènes plus complexes.

- Formation au calcul scientifique

Une formation "in situ" a été montée pour des ingénieurs du Bassin d'Essais des Carènes et des personnels des laboratoires partenaires : sous forme de deux demi-journées à Val de Rueil consacrées à la programmation en Fortran 90 et à l'optimisation scalaire sur les architectures actuelles.

### Table ronde "utilisateurs" de mai 2005

Dans le cadre de la consultation pour le renouvellement des moyens de calculs le CRIHAN a convié les utilisateurs à venir exprimer les utilisations qu'ils en ont et les besoins en terme d'architecture, de puissance et de services.

Plusieurs responsables de projets ont mis en évidence dans leur exposé des besoins aussi variés que la quantité d'heures CPU, la nécessité de parallélisation, la quantité de mémoire minimale, la souplesse de soumission des travaux au calculateur. Il ressort de ces échanges plusieurs constats :

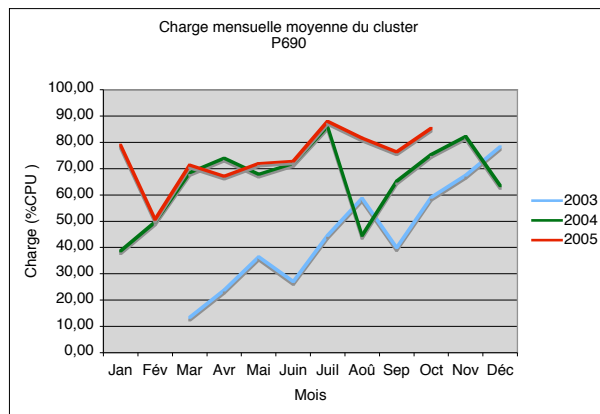
- Pour les applications parallèles, un grand nombre de processeurs reliés par un réseau d'interconnexion performant est la solution la plus adaptée pour la majorité des utilisateurs.
- La souplesse d'administration de la machine par les services du CRIHAN est appréciée et le souhait de la voir continuer avec la future configuration est exprimé. Dédier une partie des ressources pour des exécutions inhabituelles ou occasionnelles reste nécessaire.
- Affirmation du bien fondé de l'existence du CRIHAN qui garantit une assistance de proximité adaptée aux besoins spécifiques de chacun.
- Adaptation des procédures administratives et techniques aux contraintes des utilisateurs (en cas d'urgence, publications pour thèses ou conférences etc.).
- Malgré des ressources nettement inférieures à celles des centres nationaux, le CRIHAN est très apprécié par ses utilisateurs.

<sup>2</sup> Sciences Physiques, Mathématiques et de l'Information pour l'Ingénieur

### 3. Statistiques d'utilisation du supercalculateur p690

L'architecture même d'un super calculateur, le nombre de ses processeurs, sa quantité de mémoire, son espace disque, sont autant de caractéristiques utilisées différemment par les utilisateurs en fonction de leurs besoins : c'est la raison pour laquelle on trouvera ci-après plusieurs types de graphiques de présentation de ces utilisations.

#### Taux d'occupation du cluster IBM P690



Le graphique ci-dessus représente la charge mensuelle moyenne du cluster de calcul. On remarque bien sûr une augmentation sur les trois années de référence : la moyenne sur l'année est en effet voisine de 45% pour 2003 (données disponibles de mars à décembre), de 65% pour 2004 (12 mois) et de 74% pour 2005 (données disponibles de janvier à octobre).

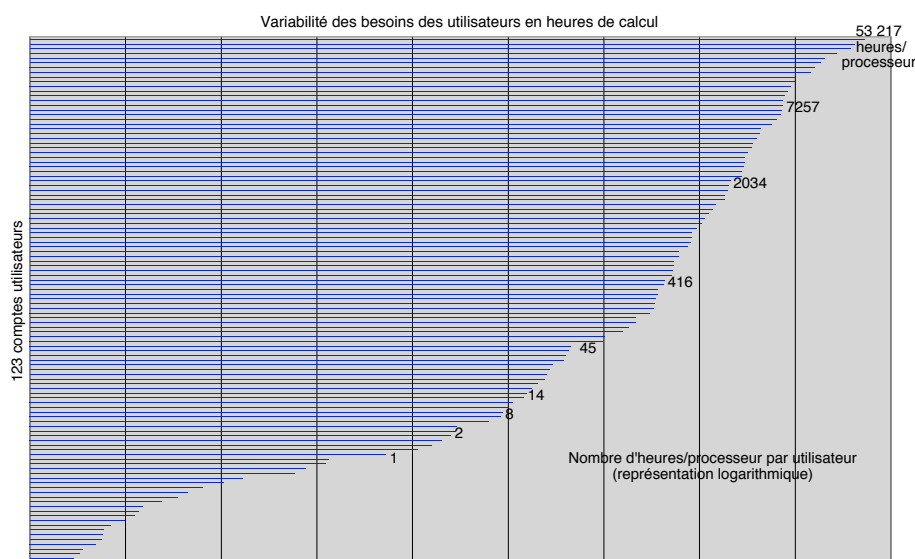
#### Besoins en heures et besoins en puissance

L'illustration ci-dessous n'a d'autre ambition que d'exprimer la variabilité des besoins. Elle montre la répartition des consommations faites par chacun des 123 utilisateurs recensés à ce jour (de quelques minutes à quelques dizaines de milliers d'heures).

Le graphique traduit aussi la grande diversité des besoins des utilisateurs des ressources du CRIHAN : on y voit la consommation CPU (heures processeurs) qui est très variable suivant les projets. Certains ont d'énormes besoins CPU, d'autres moins mais ce n'est pas le seul besoin en ressources.

La quantité de mémoire vive (et disque) nécessaire et la mutualisation des logiciels n'est pas représentable graphiquement car on ne dispose pas de données fines pour cela.

- Le premier cas caractérise les utilisateurs ayant de gros volumes de données à traiter. Cela ne peut être fait sur les stations disponibles au sein des laboratoires du fait de leur petite taille alors qu'au CRIHAN, sur des nœuds disposant de 32Go de mémoire vive, ce type de calcul est possible pour réaliser leurs travaux.
- Pour le second cas, l'achat de licences site pour des logiciels commerciaux (notamment ceux du Réseau Normand en Modélisation Moléculaire) permet de mettre à disposition ces applications pour de nombreux chercheurs qui ne peuvent y accéder du fait des budgets de leur laboratoire. De plus, ces logiciels sont aussi consommateurs d'espace disque (et de mémoire vive) et la mise à disposition de plusieurs To sur le cluster du CRIHAN leur permet de s'affranchir de cette contrainte supplémentaire.

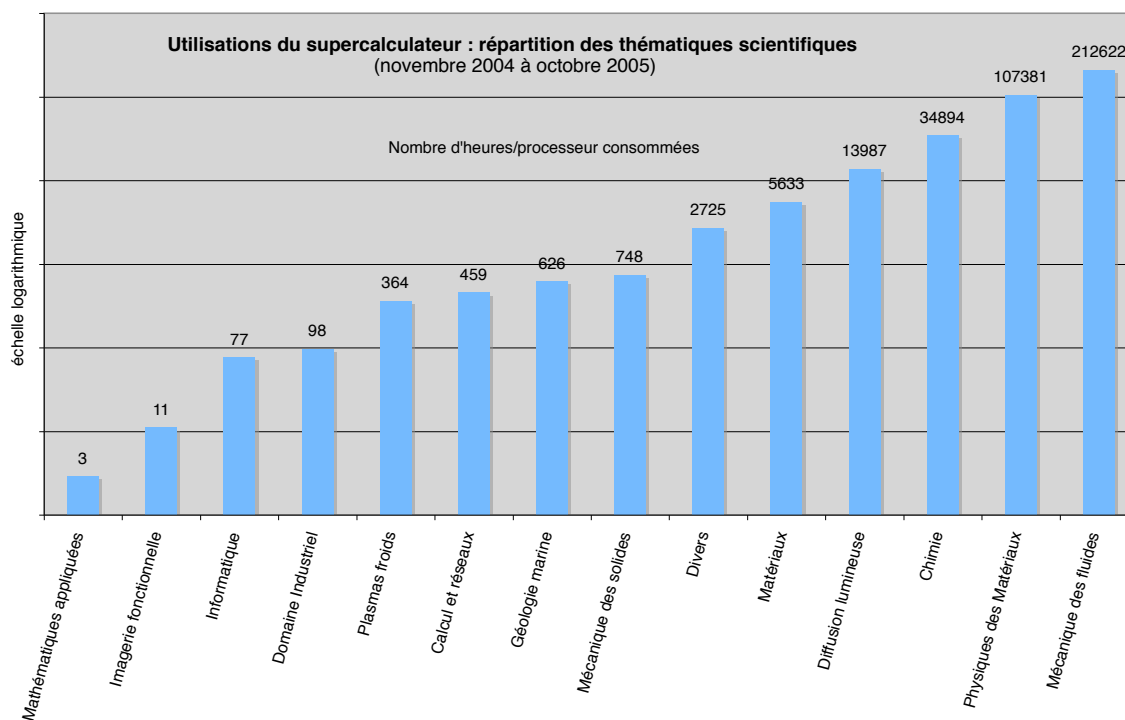


### Thèmes de recherche détaillés

En ce qui concerne les thèmes de recherche détaillés, on trouvera un tableau en annexe de ce document présentant la thématique de chacun des 42 projets retenus dans le programme d'attribution d'heures de calcul pour 2005.

### Besoins par thème scientifique

Le graphique suivant exprime la part de chaque grande thématique scientifique, en nombre d'heures par processeur consommées.



## 4. Publications réalisées par les laboratoires utilisateurs

La liste des publications (articles, communications) et des thèses et masters des laboratoires utilisateurs des ressources du CRIHAN est présentée en annexe de ce document.

- Le service de distribution de licences des logiciels. Cette fonction a été reportée cette année vers une machine plus standard fonctionnant sous Linux.
- La mise à disposition des logiciels de calcul pour la modélisation moléculaire. Ces derniers étant également disponibles sur le super calculateur avec un temps d'exécution beaucoup plus réduit pour les utilisateurs, le maintien de Yoda n'était plus nécessaire.

## 5. Réseau Normand de Modélisation Moléculaire

### 5.1. Yoda disparaît

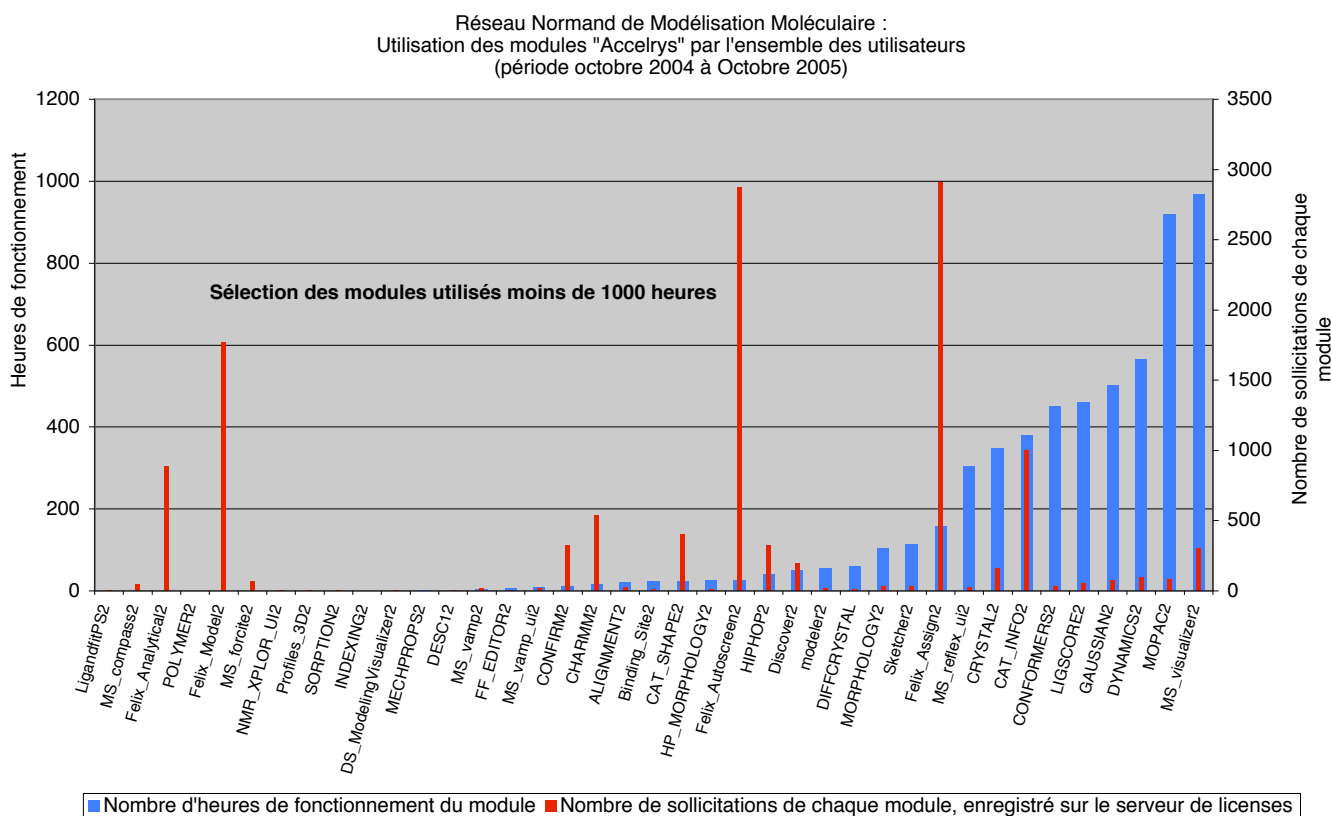
Le serveur "Yoda" (SGI Octane quadriprocesseurs) a été retiré du service en octobre 2005.

Yoda assurait, depuis la mise en place du réseau, deux fonctions :

### 5.2. Comptabilité d'utilisation des logiciels

Toutes les familles logicielles mises à disposition des utilisateurs n'autorisent pas une comptabilité "fine" de leur utilisation par l'ensemble des membres du réseau :

Celles de la famille Accelrys permettent néanmoins d'établir les statistiques présentées ci-après.



Le premier graphe ci-dessus présente tous les modules Accelrys ayant été activés durant la période de référence. Leur nom n'est bien entendu évocateur que pour les spécialistes mais leur nombre est significatif de la richesse de la palette logicielle. Cette palette comprend d'ailleurs beaucoup plus de modules que ceux présentés ici : en effet, les modules souhaités par les utilisateurs sont négociés dans le cadre de "packages" complets.

La courbe mauve indique le nombre d'heures de fonctionnement de chaque module. En raison de la prééminence de deux ou trois modules qui sont systématiquement actifs en "amont" des autres, la courbe

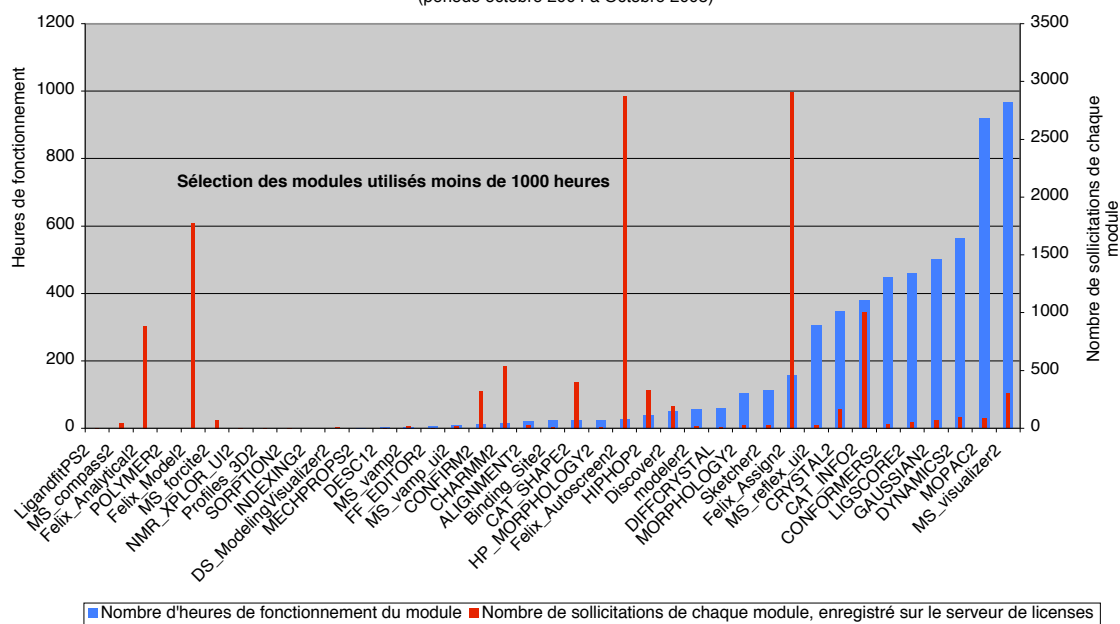
suit une échelle logarithmique (celle de gauche sur le graphique).

La courbe bleue, par contre, conserve une échelle normale (celle de droite sur le graphique). Elle représente le nombre de fois où le module a été sollicité par les utilisateurs.

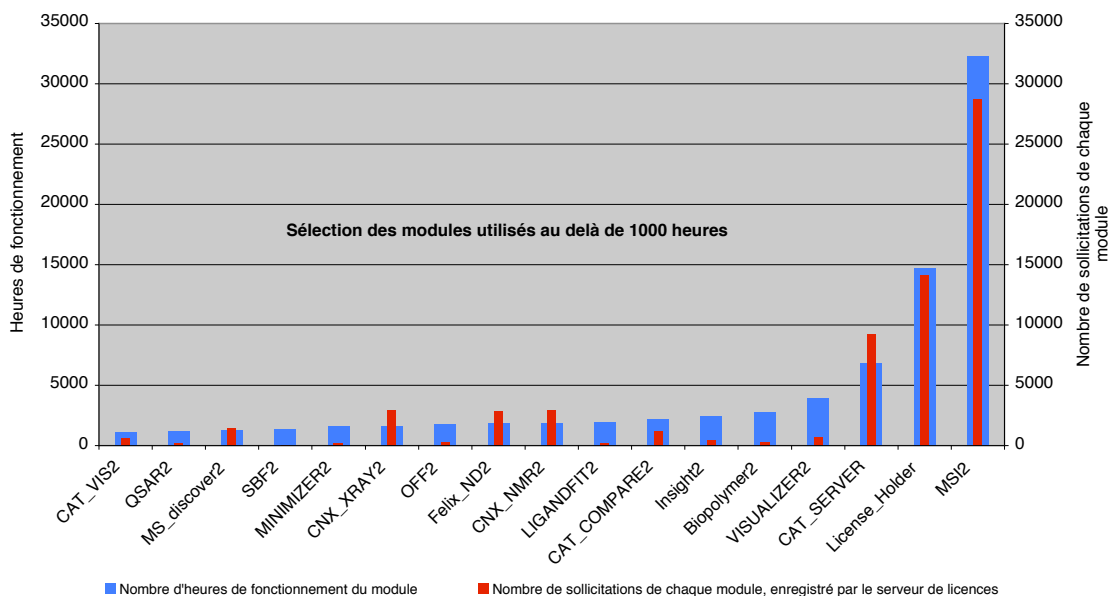
Pour une meilleure représentation visuelle du graphique précédent, on se reportera à la page suivante : les deux graphiques y représentent un redécoupage en deux groupes et en n'utilisant pas d'échelle logarithmique. Le premier groupe concerne les modules ayant fonctionné moins de 1000 heures, le deuxième, les modules ayant fonctionné de 1000 à 32300 heures (module MS12).



Réseau Normand de Modélisation Moléculaire :  
Utilisation des modules "Accelrys" par l'ensemble des utilisateurs  
(période octobre 2004 à Octobre 2005)



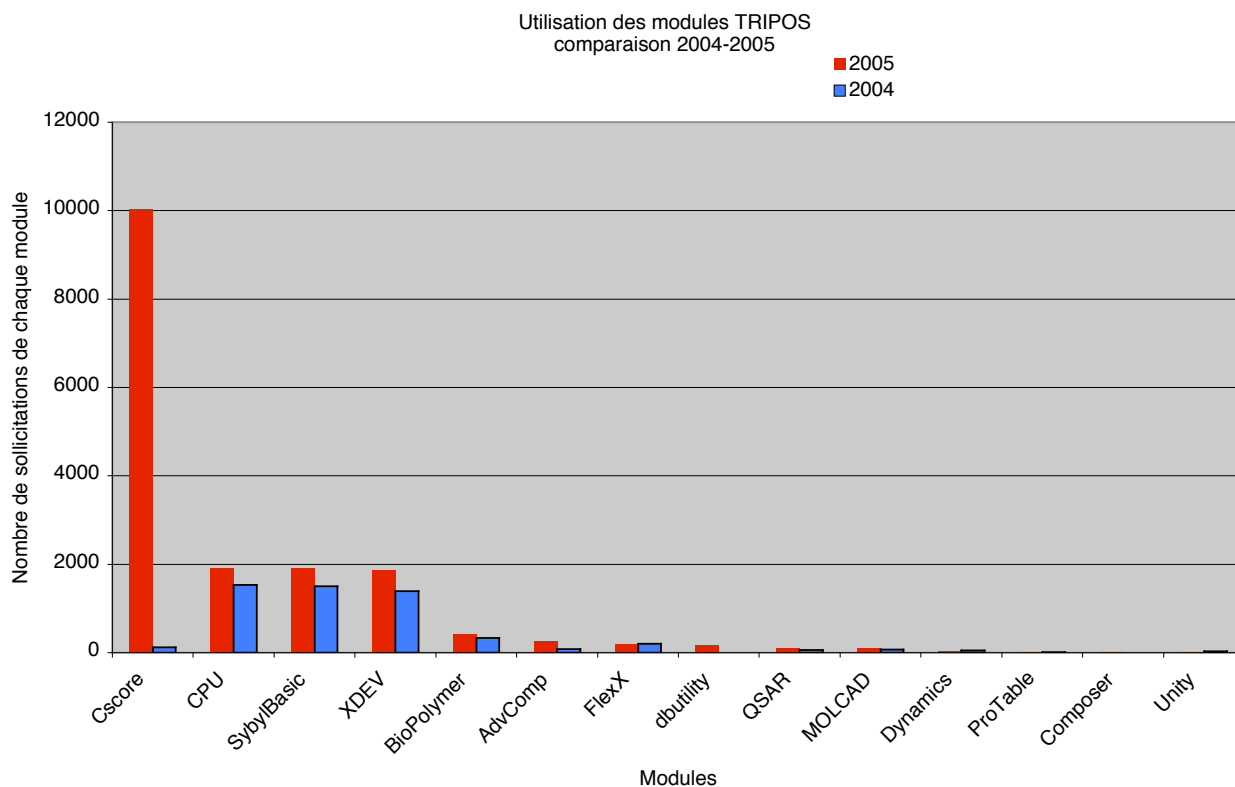
Réseau Normand de Modélisation Moléculaire :  
Utilisation des modules "Accelrys" par l'ensemble des utilisateurs  
(période octobre 2004 à Octobre 2005)



Concernant les modules de la famille TRIPOS, nous disposons de données sur le nombre de sollicitations de chaque module (graphique ci-dessous) mais pas en nombre d'heures de fonctionnement.

### 5.3. Logiciels disponibles

Le tableau des logiciels disponibles est joint en annexe.



# RÉSEAU RÉGIONAL SYRHANO

## En bref

- ⇒ 360 sites connectés
- ⇒ 3 opérateurs de télécommunications
- ⇒ mixages de plusieurs technologies (optique, xDSL, WiFi, BLR, satellite etc.)
- ⇒ Mise en production du service régional de visioconférence
- ⇒ Montée en charge des services CATA (filtrage anti-virus et anti-messages indésirables, espaces disque, espaces courriers électroniques etc.)
- ⇒ Démarrage de l'expérimentation de téléphonie inter-sites sur IP
- ⇒ Nouvelles extensions d'InterCampus (IUFM, IA 76, contournement SNCF)
- ⇒ Préparation des consultations de renouvellement des équipements actifs et des services SYRHANO

L'année écoulée se caractérise par deux groupes d'actions autour du réseau régional SYRHANO :

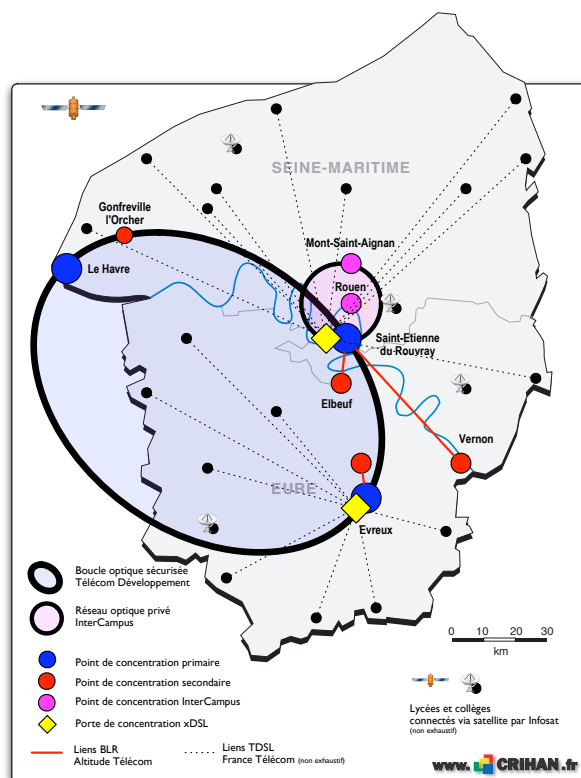
- La mise en place de nouveaux services mutualisés tels,
  - la visioconférence sur IP,
  - "CATA", filtrage anti-virus et anti-messages indésirables, messagerie fiabilisée et espaces disque,
  - l'expérimentation de téléphonie inter-sites sur IP.
- Des évolutions d'infrastructure avec,
  - la réalisation d'extensions sur le réseau d'agglomération InterCampus,
  - la préparation d'un nouvel appel d'offres pour le service d'épine dorsale régionale,
  - la prise en compte des projets réseaux des collectivités locale dans les perspectives de déploiement de SYRHANO.

## 1. SYRHANO en chiffres en 2005

Il n'est jamais inutile de rappeler en quelques chiffres simples le périmètre d'actions du réseau régional :

- Plus de 360 sites connectés à des débits allant de 1,2/0,25 Mbit/s (Turbo DSL) à 1Gbit/s symétriques (Ethernet), sans compter les sites RNIS,
- Plus de 20000 postes de travail (plus 24000 dans les lycées et collèges),
- Plus de 58000 boîtes aux lettres (plus 34000 pour les étudiants).

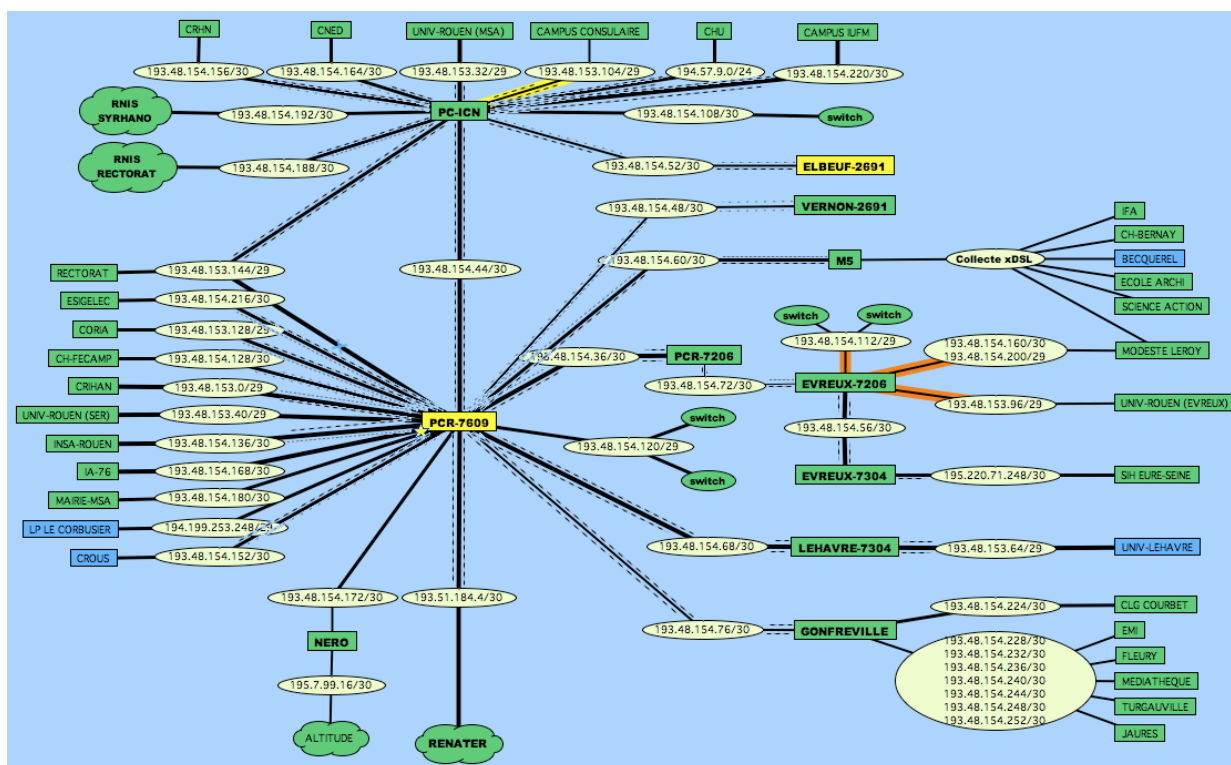
Le schéma ci-après traduit le champ d'action de SYRHANO sur le plan géographique : On y distingue l'épine dorsale régionale (les trois points bleus), le réseau d'agglomération InterCampus sur Rouen (points et cercle rose), les portes d'accès xDSL pour les lycées et collèges (losanges jaunes) et les sites raccordés sur l'épine dorsale à moindre débit (points rouges).



Si les liens sont le fait d'opérateurs différents (Cegetel, Altitude Télécom, France Télécom), l'ensemble est actuellement opéré au niveau service par Communications et Systèmes (CS). De son côté, le service réseau du CRIHAN contrôle en permanence l'état du réseau, site par site et organise les interventions en cas de problème

de perte de connectivité. Ci-dessous, un exemple d'écran de contrôle utilisé :

Le service réseau gère également un outil de métrologie qui permet de vérifier les volumes de trafic engendrés ou reçus par chaque site.



## 2. Nouveaux services sur SYRHANO

## 2.1. Mise en place d'un service "web" pour le DNS

Une des pierres angulaires du fonctionnement des réseaux IP ( et donc de l'Internet) repose sur une sorte de service d'annuaire qui permet d'associer un nom humainement compréhensible à un numéro de machine<sup>3</sup>. Ce service s'appelle le DNS (Domain Name System)<sup>4</sup>. Toute machine sur les réseaux de l'Internet est ainsi identifiée sans équivoque possible.

DNS, élément central du réseau, est indispensable aux utilisateurs pour accéder à leurs ressources (messagerie, sites web, super-calculateur, etc.) via un simple nom de domaine. La gestion des informations contenues sur un serveur DNS est donc sensible.

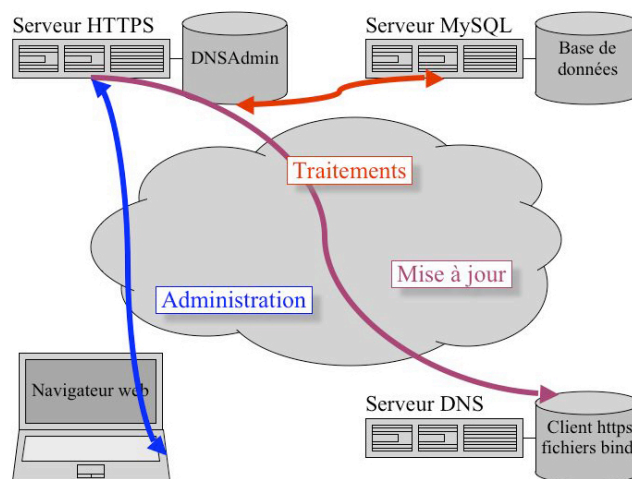
Au quotidien, la gestion du DNS est le travail de chaque administrateur de réseau : il utilise, pour le sous ensemble réseau le concernant, des outils divers pour gérer une ou des tables de correspondance entre nom de machine et numéro IP de cette même machine.

En cas d'incident informatique sur son serveur DNS, l'administrateur doit reconstruire manuellement ces tables.

Le CRIHAN a développé un outil d'administration DNS, "DNSAdmin", comprenant l'ensemble des fonctionnalités nécessaires au réseau SYRHANO. DNSAdmin est actuellement évalué sur une plateforme de test, avant d'être mis en production sur le réseau du CRIHAN, au bénéfice de tous les sites SYRHANO.

## Architecture technique

DNSAdmin est un outil d'administration du service DNS, qui assure la conformité syntaxique et la cohérence des informations. Il comprend une interface web, pour la gestion des informations DNS, et une interface de mise à jour destinée aux serveurs DNS.



Le fonctionnement de DNSAdmin est schématisé sur la figure ci-dessus. Un administrateur réseau consulte et gère les informations DNS à partir d'un navigateur web, via le protocole HTTPS. Sur le serveur HTTPS, les informations sont contrôlées par DNSAdmin avant d'être stockées sur le serveur de données (MySQL). Les serveurs DNS qui utilisent BIND, récupèrent périodiquement les fichiers BIND qui nécessitent une mise à jour.

## Evolution

DNSAdmin intègre l'ensemble des fonctionnalités souhaitées par le CRIHAN. Dans un proche avenir, le DNS décrira certainement l'ensemble des services disponibles sur le réseau. Pour cela, le DNS associera un nom de service à un numéro de port et un nom de domaine. Cette évolution du DNS est déjà spécifiée dans la RFC 2782, avec les enregistrements SRV.

Pour l'instant, très peu d'applications savent exploiter ces enregistrements. Si cette évolution s'avère viable, DNSAdmin intégrera la description des services avec les enregistrements SRV. Sa diffusion plus large sera alors possible.

<sup>3</sup> Les ordinateurs connectés à un réseau possèdent tous une adresse IP. Ces adresses sont numériques afin d'être plus facilement traitées par une machine. Selon IPv6, elles prennent la forme x:x:x:x:x:x où chaque x est un nombre hexadécimal compris entre 0 et ffff (soit 65535). Il n'est évidemment pas simple pour un humain de retenir ce numéro, lorsque l'on désire accéder à un ordinateur d'Internet.

<sup>4</sup> Le Domain Name System (DNS) fut inventé en 1983 par Paul Mockapetris. Il permet d'établir une correspondance entre une adresse IP et un nom de domaine, humainement plus simple à retenir. Lorsqu'un utilisateur souhaite accéder à un site, par exemple [www.crihan.fr](http://www.crihan.fr), son ordinateur émet une requête spéciale vers un serveur DNS, demandant "Quelle est l'adresse IP de [www.crihan.fr](http://www.crihan.fr) ?". Le serveur répond en retournant l'adresse IP, qui est dans ce cas 2003:660:7401:211:0:0:33. Une fois l'adresse IP connue, l'ordinateur peut établir une communication vers [www.crihan.fr](http://www.crihan.fr) et l'utilisateur peut alors naviguer sur les pages web.

## 2.2. Service régional de visioconférence

Depuis sa mise en place en janvier 2005, le service régional de visioconférence a déjà permis la tenue d'une centaine de conférences pour une vingtaine d'établissements.

Ce service, qui s'intègre dans l'architecture logique nationale et internationale H.323, a été monté pour répondre aux besoins exprimés par l'Université de Rouen, l'Université du Havre, de l'INSAR, du CORIA, du CRIHAN, etc. en matière d'enseignement à distance, de travail collaboratif (préparation des enseignements, recherche) et de travail administratif ou technique.

Chaque établissement était déjà équipé de salles de visioconférence mais la fonctionnalité "multipoint" était très limitée. Les besoins d'outils opérationnels 24h/24 permettant la visioconférence multipoint sur IP et RNIS de même qu'un support technique pour la mise en œuvre et l'assistance, devenaient pressants.

Le CRIHAN a tout d'abord expérimenté en ses locaux des équipements mutualisés (le "pont" lui-même ainsi que les passerelles applicatives) et installé sur site des équipements dédiés aux établissements.

Ce service est accessible à tous les utilisateurs de SYRHANO via IP (mode privilégié), RNIS, GMS et bientôt en UMTS (lorsque les réseaux et services associés seront disponibles).

Plusieurs conférences peuvent se dérouler en parallèle sans altération de la qualité. La réservation des ressources se fait via le CRIHAN simplement (un outil de réservation via le web est cependant en cours d'élaboration pour faciliter davantage son maniement). Enfin, une documentation est

proposée aux utilisateurs pour expliquer les différentes façons d'utiliser le service en fonction des outils dont ils disposent.

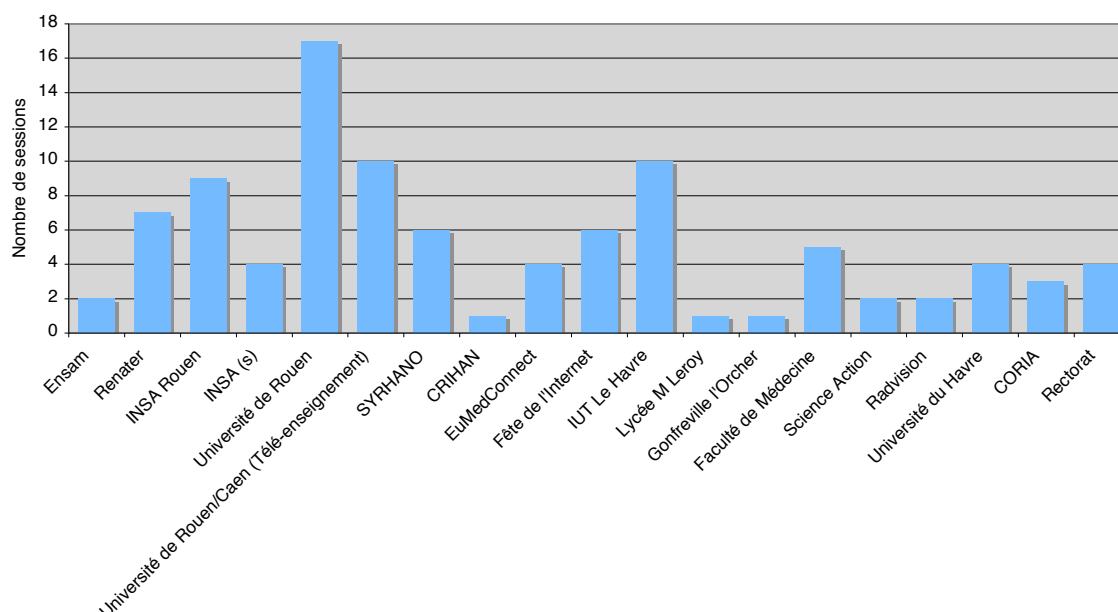
La communauté SYRHANO a déjà fait cette année une utilisation intensive du service : dans le graphique en bas de page, on retrouvera les principaux sites et le nombre de conférences déjà organisées en 2005 (en ordonnées). Ce pont multipoint (il peut recevoir 24 connexions IP et 120 connexions RNIS ou RTC)<sup>5</sup>, de grande qualité, répond bien aux attentes des utilisateurs du réseau régional qui peuvent l'utiliser avec d'autres utilisateurs régionaux, mais aussi avec des correspondants extérieurs à la région connectés sur RENATER ou l'Internet, en IP (H.323) ou RNIS (H.320).

### Utilisation du service

La procédure d'utilisation est relativement simple et sera encore améliorée d'ici quelques temps avec un service de réservation directement par le web :

- L'initiateur de la conférence effectue sa demande de réservation par simple mail au service en précisant le nombre de participants attendus et le nombre de ressources souhaité (IP et en RNIS) : il reçoit en retour un numéro de conférence,
- Les participants utilisant les réseaux IP s'enregistrent sur le GateKeeper. Tous les participants appellent le numéro de conférence qui est réservé à cette session, que ce soit par station de visioconférence dédiée, par utilitaire de visioconférence installé sur micro ordinateur ou encore directement par son téléphone.

Utilisation du service régional de visioconférence



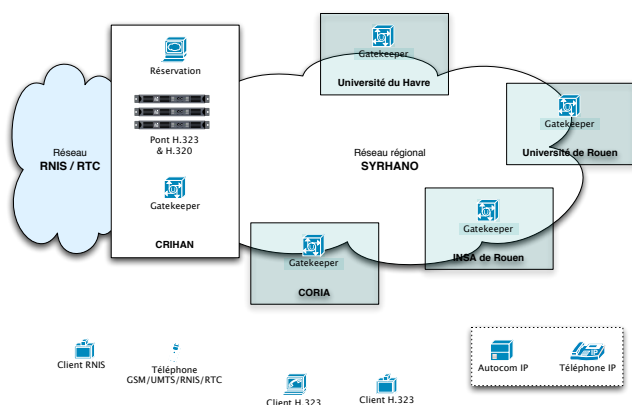
<sup>5</sup> La description technique du service a été présentée dans le rapport d'activités précédent.



## Evolutions 2005

En 2005, les actions du CRIHAN ont concerné l'intégration du service dans l'architecture H.323 nationale et internationale.

Dès le début 2005, le service réseau du CRIHAN a commencé l'installation sur les sites des "GateKeeper" locaux (là où chaque utilisateur doit s'enregistrer pour profiter du service), notamment l'Université de Rouen, l'Université du Havre, l'INSA de Rouen, le CORIA et SYRHANO (au CRIHAN). Cela concerne la signalisation, la mise en relation des participants, la gestion du plan de nommage, enfin la gestion des "proxy", c a d des données audio et vidéo, en relation avec la politique de sécurité de chaque site de sorte à ce que chacun puisse avoir son autonomie de décision.



La mise en production définitive du service pour tous ces sites est intervenue en mai 2005, sachant que la phase de pré programmation avait débuté au niveau du CRIHAN en décembre 2004.

En Mars 2005, les GateKeeper régionaux ont été interconnectés avec les autres GateKeeper disponibles sur les réseaux nationaux et internationaux pour la recherche. L'ensemble de ce "réseau" de GateKeeper est compatible avec un plan de numérotation international pour les services de visiophonie et audiophonie (GDS pour Global Dialing System).

## Développements en prévision

- Une application de réservation en mode web,
- La compatibilité avec le protocole IPv6 (disponible sur tout SYRHANO),
- Convergence vers la téléphonie sur IP (ToIP) (SIP)
- Intégration des téléphones de troisième génération 3G (UMTS)

## Illustrations



### 2.3. Expérimentation de "téléphonie sur IP" au travers de SYRHANO

Une expérimentation de téléphonie inter-sites sur IP (avec comme support les réseaux IP de l'Internet) a été engagée cette année par le CRIHAN avec l'ambition :

- D'acquérir des compétences en téléphonie sur IP pour préparer la migration vers IP des systèmes de téléphonie des établissements.
- De démontrer l'interopérabilité des systèmes de téléphonie sur IP,
- D'en déterminer les limites en fonction de l'évolution de la normalisation,
- De préparer et vérifier l'adéquation des infrastructures de communications, que ce soit les épine dorsales ou les réseaux d'établissements, au transport de services sensibles nécessitant une bonne qualité et une haute disponibilité,
- De préparer aussi la convergence des services IP comme la visioconférence, les systèmes de messagerie instantanée, le partage de documents, les téléphones SIP, etc.,
- Mutualiser un nouveau service sur SYRHANO pour les communications inter-sites,
- Déployer une infrastructure SIP régionale, avec les outils associés (annuaires, etc.)
- Expérimenter de nouveaux usages comme le télétravail ou la mobilité.

Concrètement, une maquette évolutive a été déployée entre plusieurs sites connectés sur SYRHANO. Cette maquette, mise à jour régulièrement du point de vue logiciel et matériel, constitue un banc d'essai multi-constructeurs.

Dans le schéma en bas de page, on remarque que pour minimiser les interactions entre l'expérimentation et le réseau de production, l'autocommutateur IP est installé en

coupure, entre le réseau téléphonique commuté (RTC) et l'autocommutateur traditionnel installé sur chacun des sites. Sans aucune configuration sur les équipements existants, les communications entre les sites SYRHANO sont routées via IP.

### 2.4. Service mutualisé et sécurisé "CATA"

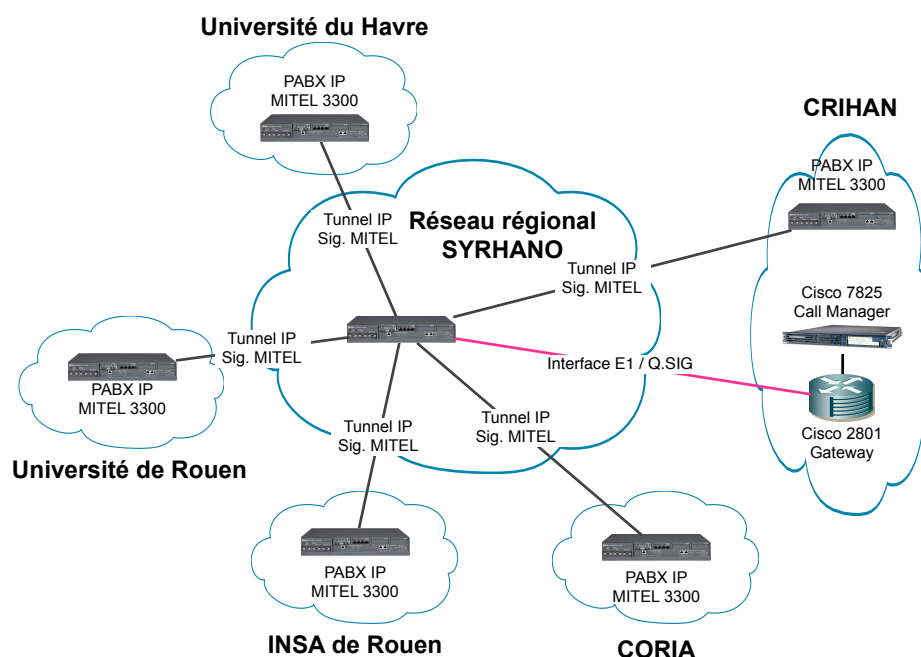
"CATA" est le nom donné à un service mutualisé installé au CRIHAN, en amont des utilisateurs de SYRHANO, équipé de fonctions de filtrage/marquage, d'antivirus, d'antispam et offrant également des espaces disque pour les utilisateurs, notamment pour leurs boîtes aux lettres.

En résumé, il offre une sécurité à l'utilisateur dans la mesure où son accès est soumis à authentification et chiffrement. De plus, installé au cœur des machines sensibles du CRIHAN, le serveur CATA est donc en zone sécurisée, tant en accès qu'en alimentation et protection.

Aujourd'hui, CATA c'est :

- 125 comptes utilisateurs
- 100 000 mails traités par jour, ... dont près de la moitié sont des messages indésirables censurés. Les mesures anti pollution de messagerie sont en mise à jour permanente mais le seuil d'indésirables reste personnalisable par chacun des sites (CRIHAN, INSA ROUEN, CORIA, Université de Rouen, Université du Havre, Conseil Régional, ESIGELEC) et les décisions sont prises en concertation avec ces utilisateurs.
- Le CRIHAN procède en outre à un transfert de compétences avec installation de serveurs de même type, en aval, sur certains sites.

### Vue d'ensemble de l'expérimentation de téléphonie inter-sites sur IP



## 3. Evolutions de l'infrastructure

## SYRHANO

### 3.1. Consultations

En cette fin d'année, débute la préparation de nouvelles consultations :

- Une consultation de services de transport et d'exploitation pour un renouvellement des contrats prévu pour la mi-2006,
- Une consultation de fourniture de matériels pour une mise à niveau technique des équipements.

Dans le premier cas, il s'agit de prendre en compte les nouvelles demandes de création de point d'accès SYRHANO comme par exemple celle de la mairie de Dieppe qui souhaite pouvoir y raccorder les établissements de son réseau de ville comme les lycées, collèges, écoles, etc.

Dans le deuxième cas, il est envisagé l'acquisition de routeurs de cœur de réseau plus performants et la migration du réseau au niveau 2 (Ethernet standard ou MetroEthernet).

Le réseau doit en effet prendre en compte dès à présent les nouvelles technologies pour faciliter les évolutions ultérieures, simplifier techniquement le réseau, améliorer la qualité de service et enfin proposer de nouveaux services.

### 3.2. Collaborations

Les départements et les agglomérations ont des projets de déploiement d'infrastructures. Dans certains cas, cela peut représenter pour le réseau régional une opportunité pour atteindre une meilleure capillarité pour y accueillir de nouveaux sites. En ce sens, des demandes ont été faites aux départements, sans retour satisfaisant pour l'instant (et même négatif pour le département de l'Eure). Les contacts avec l'Agglomération Rouennaise, qui vient de commencer le déploiement d'un réseau de fibres optiques, notamment, se poursuivent positivement.

### 3.3. InterCampus

2005 a vu la réalisation de plusieurs extensions ou modifications du réseau optique de l'agglomération rouennaise InterCampus. Rappelons que les déploiements prévus autour d'InterCampus sont basés sur le principe de l'utilisation préférentielle d'infrastructures existantes et économiques, notamment celles disponibles sur les réseaux de transports en commun Métrobus et TEOR. C'est la raison pour laquelle ces actions se font en étroite concertation avec la Communauté de l'Agglomération Rouennaise (CAR). Plusieurs tranches ont été réalisées dans le cadre de conventions spécifiques : avec les nouvelles compétence de la CAR en matières d'infrastructures de communications, le CRIHAN travaille à l'établissement d'une convention "cadre" permettant une plus grande réactivité au fur et à mesure du déploiement du réseau TEOR notamment.

#### 3.3.1. Modification de tracé

Le tracé initial d'InterCampus empruntait environ deux kilomètres sur le domaine de la SNCF, dans le secteur de la gare rive droite de Rouen. Le coût, pour les utilisateurs qui se partagent la maintenance du réseau étant trop élevé, il a été procédé à un contournement, à la faveur de l'extension du TEOR vers l'ouest et vers Mont Saint Aignan. On

repérera ce tracé sur le schéma joint en annexe (section 1 à 4a) : ces travaux ont été réalisés en septembre 2004.

#### 3.3.2. Le site IUFM

Un peu excentré par rapport au cœur du campus universitaire de Mont Saint Aignan, l'IUFM n'était toujours pas raccordé en fibre optique sur le réseau : là encore, avec la création du terminus de TEOR sur Mont Saint Aignan, une prolongation du réseau a pu être réalisée, également en septembre 2004 (section 1 à 1d sur le schéma annexé).

#### 3.3.3. Rectorat Inspection Académique

Le Rectorat a souhaité raccorder ses locaux de l'Inspection Académique, rive gauche de Rouen, au niveau du Centre Saint Sever : en utilisant le Métrobus puis quelques mètres de génie civil, le bâtiment a pu être rattaché à une station technique du réseau située au niveau de l'embranchement de TEOR (section 5 à 10 sur le schéma annexé). Ces travaux ont été réalisés en janvier 2005.

#### 3.3.4. Extensions en préparation

Le CRIHAN travaille à la préparation de nouveaux chantiers autour d'Intercampus :

1. Le raccordement de la Faculté de Médecine et du CHU devient un besoin critique en raison des exigences de plus en plus grandes en bande passante pour ces structures. Sans attendre une extension de TEOR sur l'ensemble du secteur concerné, il est envisagé un lien reprenant le réseau au niveau de la station Métrobus " Gare Rue Verte" et utilisant des infrastructures de voirie. Ce travail est mené en concertation avec la CAR et dans le souci de mutualisation optimale des projets respectifs.
2. Une extension pour l'Ecole d'Architecture sera prochainement possible puisque les travaux de TEOR dans cette direction ont d'ores et déjà débuté.
3. Une demande du Conseil Régional pour le raccordement du site de la Cité des Métiers, rive gauche de Rouen, dans les anciens locaux de l'Ecole Normale de Garçons doit aboutir à une réalisation au premier trimestre de 2006.
4. En devenir, le raccordement du Conseil Régional : il n'existe pour l'instant aucune solution via TEOR mais un projet en génie civil peut-être étudié.
5. Enfin, concernant le Rectorat rive droite, plusieurs scénarios sont à l'étude.

**FORMATION,  
TRANSFERT DE  
COMPÉTENCES**

## En bref

- ⇒ Formations conservateurs de musées
- ⇒ Formations calcul
- ⇒ Formations SYRHANO
- ⇒ Assistance et expertise aux industriels
- ⇒ Assistance et expertise aux collectivités
- ⇒ Support aux sociétés innovantes hébergées

outils de sécurisation de type "CATA" (cf. plus haut au chapitre "De nouveaux services sur SYRHANO").

- Une semaine entière de formation à la téléphonie sur IP a également réunis les utilisateurs en octobre au CRIHAN.

### En préparation

- Les personnels de plusieurs espaces publics numériques (EPN) se verront proposer dès le début 2006 des formations à la mise en œuvre et à l'utilisation des outils de communication dont ils disposeront bientôt dans le cadre du centre de ressources des EPN auquel participe le CRIHAN; La visioconférence sera un élément essentiel de cette panoplie.

## 1. Formations organisées au CRIHAN

### Personnels des Musées

- Dans le cadre du développement du portail des musées de Haute-Normandie (voir chapitre correspondant) le CRIHAN a organisé en 2005 trois sessions de formation (février, mars et avril) pour le personnel des musées.

Il s'agissait de former les utilisateurs aux outils permettant à chaque musée de gérer directement en ligne les informations les concernant sur le portail.

### Utilisateurs du calculateur

- Une semaine de formation assurée par le service d'assistance scientifique pour une vingtaine d'étudiants en cours de thèse de l'école doctorale SPMII (Sciences Physiques, Mathématiques et de l'Information pour l'Ingénieur. Consacrée au calcul parallèle, cette session s'est déroulée en mars 2005.
- Une formation in situ au Bassin d'Essais des Carènes de Val de Reuil a permis aux ingénieurs du site et aux personnels des laboratoires partenaires de se familiariser avec la programmation en Fortran 90 et à l'optimisation scalaires sur les architectures de calcul actuelles.
- A venir en décembre, une présentation du calcul parallèle viendra compléter un cours sur l'architecture des ordinateurs dispensé en licence d'informatique à l'Université du Havre.
- Les formations théoriques traitant de l'environnement de travail sur les calculateurs du CRIHAN( compilateurs, soumission des travaux, optimisation scalaire, parallélisation ont fait l'objet de deux sessions, en février et en avril 2005.
- Par ailleurs, la journée du 10 octobre organisée au CRIHAN sous forme de "Cafés des Sciences", présentant à un large public comprenant beaucoup d'étudiants, a été l'occasion d'expliquer le domaine de la modélisation et de la simulation numérique, tant au niveau des outils employés que des applications dans de nombreux domaines scientifiques.

### Utilisateurs de SYRHANO

- Plusieurs journées ont été consacrées à la formation des responsables réseau des grands sites de SYRHANO sur la mise en place des outils de visioconférence ainsi qu'aux

## 2. Transferts de compétences

- Le service CATA (filtrage de courriers indésirables, boîtes aux lettres sécurisées, espace disque) a été l'occasion de plusieurs journées de formation auprès des administrateurs des sites utilisateurs avec entre autre comme objectif le déploiement en local de sous-systèmes.
- Le Bassin d'Essai des Carènes a sollicité le soutien technique, l'expertise système et la veille technologique du CRIHAN pour son projet de mise en place d'un cluster de calcul à base de PC (64 processeurs). Cela a nécessité la réalisation de scripts pour la comptabilité des ressources par plateforme et par utilisateur, ainsi que pour générer un rapport mensuel sur l'utilisation des clusters. Serveur de messagerie avec antivirus, antispam, accès web aux boîtes de messagerie, serveur DNS pour le réseau privé du Bassin ont également été installés. Par ailleurs, l'assistance auprès d'un stagiaire pour la réalisation d'un cluster basé sur la distribution "Kerrighed" dans le cadre d'un sujet de type veille technologique (reconditionnement d'anciennes machines en cluster de calcul performant) a complété cette prestation.
- Le programme Seine Aval est soutenu depuis plusieurs années par le CRIHAN qui héberge le serveur web Seine Aval. Les scientifiques gestionnaires de ce site doivent l'enrichir d'une base de données documentaires. Le CRIHAN s'est associé à ce projet en recrutant et en encadrant un stagiaire pour réaliser l'étude technique. Le CRIHAN poursuit son expertise technique et son rôle de conseil sur ce projet qui doit aboutir en 2006.
- Comme présenté au chapitre consacré aux projets du domaine de la Santé, le CRIHAN poursuit son aide à la réalisation des cahiers des charges en cours d'établissement par les organismes INCA et INVS. Il s'agit de créer les bases d'une standardisation des comptes rendus médicaux dans le domaine des cancers afin de permettre la constitution de bases de données informatiques exploitables tant à des fins épidémiologiques qu'à des fins de contrôle qualité.
- Au sein du projet d'Environnement Numérique de Travail PLUMEL (Plumier Electronique), soutenu par

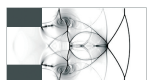
les collectivités territoriales, le Rectorat et les Inspections Académiques, le CRIHAN est chargé d'une étude technique concernant les infrastructures de réseaux devant supporter l'expérimentation de plusieurs plateformes logicielles qui seront évaluées dans ce projet. Ce projet important a mobilisé le CRIHAN tout au long de l'année : la phase expérimentale elle-même doit débuter début 2006.

- La présence de sociétés innovantes au sein du CRIHAN est l'occasion d'échanges fructueux entre équipes techniques. C'est le cas notamment pour la société Novatice, présente depuis le mois d'avril 2005, qui a pu tester et améliorer ses solutions informatiques dédiées aux établissements scolaires du premier degré (voir le premier chapitre de ce rapport).
-

# **ANNEXES**



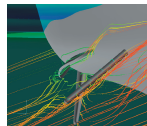
# Annexe A : Plaquette de présentation de la modélisation numérique aux entreprises



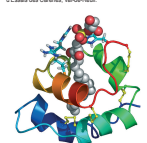
Simulation numérique de l'écoulement d'un moteur à réaction (ondes de choc et instabilité d'interface). Abdoulhadi JACQ, LMPN, CORIA, UMRI CNRS 6014.



Facilité à l'interface : une image d'un moteur à réaction. Simulation numérique de la propagation d'ondes de choc (et ondes acoustiques) au sein d'une cavité cylindrique. Abdoulhadi JACQ, LMPN, CORIA, UMRI CNRS 6014.



Simulation de l'écoulement de l'air autour des ailes d'un avion. Ewan JACQUIN, Bassin d'Essais des Carènes, Vél-de-Rueil.



Étude structurale par RMN locale haute-résolution de l'interaction entre le protéine du site (LTP-2) et l'alpha-galactosyltransferase. Jean-Luc PONS (1), Frédéric Du Lamoignon (2), Marie-Françoise Gaudier (2) et Marc-Antoine Baudry (1). (1) CRIHAN-Haute-Normandie (2) Montpellier 2. CACA (MMA Montpellier).



Simulation numérique 3D d'un aile d'avion pour lequel nous mettons en évidence la présence d'un tourbillon sur le bord de fuite. YVES PERRIER, LMPN, CORIA, UMRI CNRS 6014, en partenariat avec SNECMA.

**CRIHAN**  
Technopôle du Madrillet  
745, avenue de l'Université  
76800 Saint-Étienne du Rouvray  
FRANCE

Téléphone : + 33 (0) 2 32 91 42 91  
Télécopie : + 33 (0) 2 32 91 42 92

Contact administratif : crihan-admin@crihan.fr  
Contact technique : crihan-tech@crihan.fr  
Contact scientifique : crihan-sci@crihan.fr

SIRET n° 383 599 990 - code APE 00025  
Organisme de formation enregistré sous le N° 23760134176

**CRIHAN** L'association CRIHAN a été créée fin 1991 à l'initiative du Conseil Régional de Haute-Normandie pour aider les organismes publics et privés de la région à développer des activités d'enseignement, de recherche et de développement basées sur l'utilisation des nouvelles technologies de communication et sur l'informatique. Ses quatre thématiques sont les réseaux informatiques, le calcul scientifique, la formation et le support aux projets innovants. Pour tout renseignement complémentaire : <http://www.crihan.fr>

Piloté par le CRIHAN dans le cadre du Contrat de Plan État-Région, le réseau régional Haute-Normandie pour l'Éducation et la Recherche (SYNHAHO) gère le Réseau Haute-Normandie depuis 1993 les principaux sites universitaires et les grandes écoles, et depuis 1995 l'ensemble des établissements scolaires du second degré. SYNHAHO constitue aujourd'hui l'égide dorsale de l'internet non-marchand de notre région.



© CRIHAN 2005



## De la conception à la réalisation

### De nouveaux outils à votre service dans tous les domaines d'activité

Que ce soit via les activités de recherche dans les laboratoires ou au sein des entreprises, petites et grandes, l'utilisation des nouvelles technologies est aujourd'hui un passage obligé pour la performance et la compétitivité des entreprises. Les outils numériques de simulation permettent de supprimer les essais longs et coûteux, d'évaluer rapidement les propriétés des produits dans les phases de conception, bien avant de lancer les étapes de prototypage et de production. Ces outils permettent également de connaître et de dimensionner les pièces, modules ou composants d'un système. Il est également possible de connaître à l'avance les comportements des pièces qui sont soumises à des contraintes spécifiques (de la métallurgie aux composants en microélectronique par exemple).



Le trimaran Gouamba II a bénéficié des résultats obtenus sur les supercalculateurs du CRIHAN. Plusieurs simulations numériques ont permis d'optimiser ses performances. Bassin d'Essais des Carènes, Vél-de-Rueil.

### Une réponse moderne adaptée à vos besoins

Pour utiliser ces différents « outils » numériques, il faut disposer des applications de calcul (logiciels développés au sein des laboratoires publics ou disponibles auprès d'éditeurs de logiciels), mais également des machines de calcul, supercalculateurs permettant de les exploiter.

Ce sont des super ordinateurs, faits de processeurs ultra-rapides ou de grappes de processeurs (cluster) qui sont utilisés en parallèle, dont les entreprises peuvent disposer au CRIHAN.

Image de fond : étude de la carène du trimaran Gouamba II. Ewan JACQUIN, Bassin d'Essais des Carènes, Vél-de-Rueil.

**La mécanique des fluides** est un vaste domaine qui concerne à la fois l'hydrodynamique (carènes de navire), l'aérodynamique (voiles de bateau), les écoulements liquides, gazeux, réactifs et le comportement des fluides multiphasiques (combustion, explosions, etc.).

**La plasturgie** est également un domaine d'applications classiques pour lequel la modélisation numérique permet l'optimisation des procédés de moulage et de formage.

La capacité des ordinateurs à résoudre les équations de la physique permet de façon simultanée de comprendre et prévoir les phénomènes et de les représenter de façon graphique.

**La maquette numérique** est maintenant un standard dans les industries manufacturières. Elle permet des propriétés très importantes dans le domaine des phénomènes physiques (couplage entre fluides et structures ou entre mécanique et thermique) avec plusieurs composants physiques en interaction (intégration des éléments dans un système complexe).

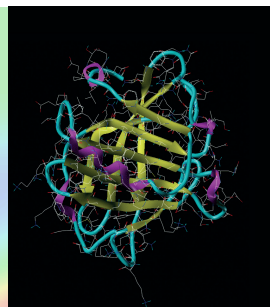
**La modélisation numérique** permet également la compréhension et la prédiction des phénomènes à petite échelle pour les micro technologies, mais aussi la chimie et la biologie. Il est ainsi possible de comprendre et représenter la matière au niveau des molécules et de leurs interactions.

## L'accès pour les activités de Recherche & Développement des entreprises

La Région Haute-Normandie est à l'initiative de la création du CRIHAN, centre de ressources qui héberge et exploite ce genre de supercalculateurs pour les laboratoires de recherche publique, mais aussi pour le développement des entreprises régionales.

Le CRIHAN centralise des moyens de calculs lourds, mutualisés à l'échelle régionale, afin de fournir aux équipes de recherche des ressources informatiques, qui seraient hors de portée financière pour un laboratoire ou une entreprise.

Le CRIHAN se place au premier rang des centres de calculs régionaux en France, immédiatement après les centres de calculs de couverture nationale.



La beta-lactoglobuline bovine, famille des lipocaline, serait un transporteur du rétinol (vitamine A).

Les ressources de calcul du centre sont prévues prioritairement pour le support des activités de recherche des laboratoires publics de la région, mais elles sont également accessibles pour les activités de recherche privée. Les modalités d'utilisation sont néanmoins sensiblement différentes. Deux cas sont distingués :

- ✓ **Activité de recherche en partenariat avec un laboratoire de recherche universitaire**
- ✓ **Activité de recherche propre à l'entreprise, sans partenariat public**

Dans le cas des activités de RAD en partenariat avec un laboratoire universitaire de la Région, la demande peut être adressée au CRIHAN directement par l'entreprise ou le laboratoire partenaire. La demande prend alors la même forme que celles des laboratoires, avec présentation d'un dossier scientifique complet, et justifications des ressources demandées. Le dossier fait l'objet d'une évaluation scientifique et l'attribution des ressources est faite par le CRIHAN.



Salle des machines du CRIHAN : supercalculateur du pôle de modélisation numérique.

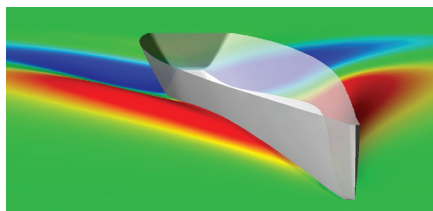
Dans le cas contraire, une convention de services peut être établie entre l'entreprise et le CRIHAN.

Cette convention définit la quantité de ressources et leurs modalités d'accès (avec éventuellement des clauses de confidentialité spécifiques) et la contrepartie financière qui est à la charge de l'entreprise. Elle peut prévoir éventuellement l'installation de logiciels applicatifs commerciaux et la prise en charge financière des droits d'usage imposés par les éditeurs.

## Annexe B : Plaquette de présentation du pôle de modélisation numérique

REGION HAUTE-NORMANDIE

### Pôle régional de modélisation numérique Calcul scientifique



#### Assistance aux utilisateurs et prestations personnalisées

Des phénomènes d'une complexité grandissante peuvent être aujourd'hui modélisés grâce aux performances atteintes par les supercalculateurs parallèles. Sans avoir à les construire, on peut simuler des prototypes dans de nombreux domaines d'application qui vont de la biochimie moléculaire à l'aéronautique en passant par la météorologie. Pour les laboratoires de recherche, la modélisation permet de simuler certains phénomènes et ainsi d'éviter des expérimentations réelles souvent coûteuses. Pour une entreprise, utiliser des ordinateurs scientifiques permet de dégager du temps dans les phases de modélisation et donc d'optimiser les coûts. **Dans de nombreux cas, la modélisation numérique est devenue un outil incontournable.**

Le service d'assistance scientifique du CRIHAN est en permanence à l'écoute des besoins des utilisateurs. Outre l'aide quotidienne pour une meilleure utilisation des ordinateurs, il peut effectuer des prestations de portage, d'optimisation et de parallélisation (MPI, OpenMP) d'applications afin d'en améliorer les performances et ainsi étendre les possibilités de simulation. Par exemple, un code séquentiel de mécanique des fluides simulant l'avancement d'une carène de navire a vu ses performances multipliées par deux. Sa parallélisation à l'aide d'une bibliothèque d'échange de message MPI a ensuite permis de réduire de nouveau sa durée d'exécution.

#### Moyens informatiques

Plusieurs systèmes sont disponibles parmi lesquels :

- Un cluster IBM eServer p690, mis en service en octobre 2002 et constitué de deux nœuds disposant chacun de

32 processeurs Power 4 cadencés à 1,3Ghz et de 32Go de mémoire. Sa puissance est d'environ 330Gflops.

- Un cluster IBM eServer p575 qui sera mis en service opérationnel en octobre 2005, constitué de 19 nœuds disposant chacun de 8 processeurs Power 5 cadencés à 1,9Ghz et de 16Go de mémoire vive. 20To de disques rapides sont également connectés à la solution de calcul dont la puissance est supérieure à 1,1TFlops.

#### Recherche académique

Les chercheurs des laboratoires universitaires, du CNRS et des écoles d'ingénieurs et plus largement ceux de la communauté académique peuvent soumettre des projets scientifiques au CRIHAN : évalués par des experts extérieurs, ils se voient affectés d'heures de calcul proportionnellement aux estimations de ressources demandées. L'accès aux ressources de calcul n'est pas facturé mais une justification des travaux (publications) est demandée.

#### Industriels

Les projets des laboratoires de recherche industrielle sont les bienvenus, dans le cadre de conventions spécifiques qui définissent les modalités d'accès sécurisés, les services fournis et la facturation éventuelle des prestations assurées par le CRIHAN.



Animateur du pôle régional de modélisation numérique, le CRIHAN met à disposition de ses utilisateurs des moyens informatiques lourds et un service d'assistance scientifique.



L'association CRIHAN a été créée fin 1991 à l'initiative du Conseil Régional de Haute-Normandie, pour aider les organismes publics et privés de la région à développer des activités d'enseignement, de recherche et de développement basées sur l'utilisation des nouvelles technologies de communication et sur l'informatique. Ses quatre thématiques sont les réseaux informatiques, le calcul scientifique, la formation et le support aux projets innovants. Pour tout renseignement complémentaire : <http://www.crihan.fr>.



Le pôle régional de modélisation numérique est une action commune de la Région et de l'État destinée à soutenir les activités de recherche en Haute-Normandie. Ce projet est financé dans le cadre du CPER 2000-2006 et piloté techniquement par le CRIHAN. Le renforcement de ses moyens informatiques a été cofinancé par l'Union Européenne (fonds FEDER).

Compilateurs, bibliothèques scientifiques, bibliothèques de parallélisation et logiciels commerciaux de modélisation moléculaire complètent le service proposé.

L'accès aux moyens de calcul se fait au travers de connexions chiffrées. Chaque compte utilisateur peut disposer d'un espace disque permanent dont le contenu peut être régulièrement sauvegardé.

#### Contacts

**CRIHAN** - 02 32 91 42 91 - <http://www.crihan.fr>  
Équipe technique : [crihan-tech@crihan.fr](mailto:crihan-tech@crihan.fr)  
Administratif : [crihan-admin@crihan.fr](mailto:crihan-admin@crihan.fr)  
Support scientifique : [crihan-sci@crihan.fr](mailto:crihan-sci@crihan.fr)

© CRIHAN 2005  
[mailto:info@crihan.fr](mailto:mailto:info@crihan.fr)



## Annexe C : Calcul Scientifique : thème de recherche de chaque projet

référénc e projet	Thème de recherche	heures/ processeur
2000006	Propriétés magnétiques des nanoparticules	0,01
2003011	Evaluation du parallélisme pipeliné lors du traitement des requêtes complexes sur architecture distribuée.	0,01
2005013	Etude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	0,01
2000005	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	0,02
1998008	Calcul numérique des zéros de polynômes ou fonction analytique sur machine parallèle	2,92
2004007	Etude des schémas cryptographiques et étude de fonctions booléennes	3,15
2005008	Etude numérique des navires en mouvement non stationnaire.	6,19
2005007	Modélisation d'une décharge électrique de type Streamer	8,62
FNCLCC	Quantification en imagerie fonctionnelle	11,24
2003007	Simulation numérique des écoulements réactifs monophasiques et diphasiques	18,34
2005001	Modélisation Entérique de l'injection haute pression. Influences sur la vaporisation et la combustion induite.	43,43
taow	Tests du produit FUJITSU TAOW auprès des utilisateurs du Réseau de Modélisation Haut Normand	77,38
1997017	Optimisation code Icare	97,73
2005011	Etude par dynamique moléculaire des interactions entre ligands de type phéromone et leurs protéines transporteuses	101,18
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	157,72
2003012	Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-Terminal de NR1.	212,42
2004006	Génération automatique de structures de protéines	212,75
2005012	Simulation et modélisation de la combustion turbulente	326,95
2004005	Spectroscopie infrarouge d'espèces adsorbées.	340,85
2003015	Modélisation de décharges impulsionnelles	364,09
CRIHAN	Comptes CRIHAN	458,92
2005009	Etudes théoriques de processus atmosphériques : études cinétiques de réactions élémentaires et capture d'un composé organique volatil par une goutte d'eau	517,05
1998042	Optimisation d.c. pour le problème de conformation moléculaire. Algorithmes parallèles pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire.	609,75
2005005	Modélisation de l'interaction Océan/Surfaces continentales	626,43
2003006	Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide	748,24

référénc e projet	Thème de recherche	heures/ processeur
2002005	Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques	811,27
CNPP	Modélisation du début d'incendie	827,15
2001003	Chimie organométallique : réactions d'insertions	892
2005006	Modélisation de complexes ternaires entre le cuivre (II) et deux acides aminés.	1138,86
2005004	Découverte de nouveaux leaders par des approches structurales liées aux techniques de screening virtuel.	1566,38
2005010	Etude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.	2104,04
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	2904,49
2005002	Etude théorique du mécanisme d'une réaction d'hétérocyclisation anionique cascade.	2957,14
1998053	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	3461,31
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	3618,15
2002003	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	3679,63
2003014	Simulation de la relavation des polymères.	3698,72
2005003	Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".	5623,91
1999006	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V	9742,61
1998007	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	10307,52
2004002	Etude par simulation numérique du comportement magnétique de trisouches Fe/Dy/Fe.	12112,2
2004004	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	19628,69
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	25298,07
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	27949,64
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en synthèse asymétrique	50259,93
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	51067,98
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	53216,89
2003013	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	81816,94
Total		379628,92



## Annexe D : Calcul Scientifique : publications des laboratoires utilisateurs

### 1. LASOC, SMS - UPRES EA 323 Evreux

**Responsable Pr P.L. Desbene**

(rédacteur Nadine Mofaddel)

#### Publications- Articles

Use of Capillary Electrophoresis and Molecular Mechanics for Studying the Potentialities of Aromatic Phosphonic Acids to Complex Selectively Ammonium and Potassium Cations, Morin, C.; Carli, M.; Mofaddel, N.; Al Rifai, R.; Villemin, D.; Desbène, P.L. *Chromatographia* 2005, 62, 139.

#### Thèses

Nouvelles approches en Electrophorèse Capillaire pour l'énantioséparation d'acides aminés aromatiques ou aliphatiques non dérivés : Abderrahim Aït - Adoubel, Rouen, Septembre 2004

#### Communications

Chiral and structural separation By Capillary ELECTROPHORESIS of NATIVE amino acids By USING cyclodextrins derived OR NOT ; A. Aït - Adoubel, N. Mofaddel, P.L. Desbène ISC'04, Paris, septembre 2004

#### Collaborations

Modélisation de la complexation entre des lipides (triglycérides) et une sonde de fluorescence, Pr Tchaplá, groupe de chimie analytique de Paris-sud, EA 3343, LETIAM-IUT d'Orsay

### 2. CERMN (Université de Caen, UPRES EA3915), département de modélisation moléculaire.

**2005004 : Découverte de nouveaux leaders par des approches structurales liées aux technique de screening virtuel**

**Responsable Pr. R. Bureau**  
**Directeur du CERMN : Pr S. Rault.**

(rédacteur : Ronan Bureau)

Encadrants : Dr J. Sopkova (MCU), Dr N. Saettel (MCU) et Dr J. Rodrigo de Losada (MCU, nomination 2005).

#### Thématiques principales :

- Conception et études structures activités de ligands sérotoninergiques.
- Conception de nouveaux ligands de kinase (GSK-3 / ALK-5).
- Conception de nouveaux ligands d'acétyl cholinestérase.
- Exploitation des chimiothèques (screening virtuel sur la base des pharmacophores, docking).

- Analyses des données issues de diffraction RX.

#### Publications

1. Lisowski V., Léonce S., Kraus-Berthier L., Sopkova-de Oliveira Santos J., Pierré A., Atassi G., Caignard D.-H., Renard P. and Rault S. Design, synthesis and evaluation of a novel thienopyrrolizinone series as antitubulin agents. *J. Med. Chem.*, 2004, 47, 1448-1464.
2. Rochais, C.; Lescot E.; Lisowski, V.; Lepailleur, A.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Bureau, R.; Dallemagne, P.; Meijer, L.; Rault, S. Synthesis, Biological Evaluation and SAR Study of Thienopyrrolizines, a New Family of CDK/GSK-3 Inhibitors. *J. Enz. Inh. Med. Chem.*, 2004, 19, 585-593.
3. Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Montouillout, V.; Fayon, F.; Fernandez, C.; Delain-Bioton, L.; Villemin, D.; Jaffres, P.A. Assembly of benzene-1,3,5-tris(methylenephosphonic acid) and guanidinium salt: Single crystal-X-ray characterisation and <sup>31</sup>P solid state NMR investigations. *New Journal of Chemistry*. 2004, 28, 1244-1249.
4. Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Bouillon, A.; Lancelot, J.C.; Rault, S. 2-(6-Bromopyridin-2-yl)-6-methyl-[1,3,6,2]dioxazaborocane, a new stable (pyridin-2-yl)boronic acid derivative. *Acta Cryst. C* 2004, C60, 584-585.
5. Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Contesse, V.; Delarue, C.; Vaudry, H. and Rault, S. Molecular design based on 3D-Pharmacophores. Applications to 5-HT<sub>7</sub> receptors. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2004, 44, 1148-1152.
6. Feddoui A., Moulay Youssef Ait Ito, Hasnaoui A., Villemin D., Jaffres P.-A., Sopkova-de Oliveira Santos J., Riahi A., Huet F. et Daran J.-C. One Pot Diastereoselective Synthesis of New Chiral Spiro-1,3,4-thiadiazoles and 1,4,2-Oxathiazoles from (1R)-Thiocamphor. *J. Heterocyclic Chem.* (2004), 41, 731-735.
7. Lescot, E.; Bureau, R.; Sopkova, J.; Rochais, C.; Lisowski, V.; Lancelot, J.C.; Rault, S. 3D-QSAR and docking studies of selective GSK-3 inhibitors. Comparison with a thieno [2,3-b]pyrrolizinone derivative, a new potential lead for GSK-3 ligands. *J. Chem. Inf. Model.* 2005, 45, 708-715.
8. Lepailleur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Saettel, N.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Rault, S. Molecular Modeling Studies Focused on the 5-HT<sub>7</sub> vs 5-HT<sub>1A</sub> Selectivity. Discovery of Novel Phenylpyrrole Derivatives with High Affinity for 5-HT<sub>7</sub> Receptors. *J. Chem. Inf. Model.* 2005, 45, 1075-1081.
9. Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Lepailleur, A.; Bureau, R.; Butt-Gueulle, S.; Dauphin, F. and Rault, S. Phenylpyrroles, a New Chemolibrary Virtual Screening Class of 5-HT<sub>7</sub> Receptor Ligands. *Biorg. Med. Chem. Lett.* 2005, 15, 3753-3757.
10. Omran Z., Cailly T., Sopkova-de Oliveira Santos J., Agondanou J.-H., Lisowski V., Fabis F., Godard A.-M., Stiebing S., Leflem G., Boulouard M., Dauphin F., Patrick Dallemagne P., and Rault S.. Synthesis and Biological Evaluation as AChE Inhibitors of New Indanones and Thiaindanones Related to Donepezil. *J. Eur. Med. Chem.*, 2005 (accepté).

#### Communications (orales et affiches).

1. Lepailleur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Dauphin, F.; Butt-Gueulle, S.; Lesnard, A.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Lancelot, J.C.; Rault, S. Rôle joué par la flexibilité des ligands lors du problème de sélectivité 5-HT<sub>7</sub> vs 5-HT<sub>1A</sub>. IX<sup>ème</sup> Journée Scientifique du Réseau LARC-Neurosciences, Amiens, 14 Octobre 2005.

2. E. Lescot, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, S. Rault. Etude du récepteur GPR14 humain couplé à une protéine G : Modélisation par homologie de séquence. 9ème Journée Scientifique de Réseau Larc-Neurosciences, 14 octobre 2005, Amiens, France.
3. E. Lescot, R. Bureau, A. Lesnard, J. Sopkova-de Oliveira Santos, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, S. Rault. Antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine II Humaine : Approche 3D-QSAR et recherche de nouveaux leads. 14èmes rencontres européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique GP2A, 15 et 16 septembre 2005, Angers, France.
4. Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Butt-Gueulle, S.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Synthèse de nouveaux antagonistes des récepteurs 5-HT7 en série phénylpyrrole. XIVèmes Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, Angers, 15-16 Septembre 2005.
5. E. Lescot, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, S. Rault. Analyse d'une chimiothèque sur la base d'un pharmacophore des antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine II : Recherche de nouveaux leads. 2ème Journée Scientifique de la Chimiothèque Nationale, 29 juin 2005, Caen, France.
6. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Saettel, N.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lesnard, A.; Lancelot, J.C.; Rault, S. Etude de la sélectivité 5-HT7 vs 5-HT1A par des approches de modélisation moléculaire. XIXèmes Journées Franco-Belges de Pharmacochimie, Liège, 26-27 Mai 2005.
7. E. Lescot, J. Sopkova-de-Oliveira Santos, A. Lesnard, R. Bureau, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, S. Rault. Étude de la structure tridimensionnelle de l'Urotensine II par minimisation énergétique et dynamique moléculaire : Perspectives pour la conception de nouveaux antagonistes non-peptidiques. XIXèmes Journées Franco-Belges de Pharmacochimie, Liège, 26-27 Mai 2005.
8. Lepaillieur, A.; Bureau, R. Conception de nouveaux ligands 5-HT sur la base d'une même plate-forme tricyclique. Approche méthodologique 3D-(Q)SAR. XIVème Colloque du Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire, Ile des Embiez, 2-4 Mai 2005.
9. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, R. Bureau, Ch. Rochais, V. Lisowski, P. Dallemagne, S. Rault. Étude des interactions entre un dérivé thieno[2,3-b]pyrrolizine et la GSK-3 : Implication dans la maladie d'Alzheimer. XIVème Colloque du Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire, Ile des Embiez, 2-4 Mai 2005.
10. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Saettel, N.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Etude de la sélectivité 5-HT7 vs 5-HT1A. Optimisation d'un pharmacophore 5-HT7. VIIIème Journée de l'Ecole Doctorale Normande Chimie-Biologie, Le Havre, 18 Mars 2005.
11. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Dauphin, F.; Lesnard, A.; Butt-Gueulle, S.; Lancelot, J.C.; Rault, S. Etude du problème de sélectivité 5-HT7 vs 5-HT1A à travers une nouvelle famille de dérivés phénylpyrroles. XIIème Journée des Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, Paris, 28 Janvier 2005.
12. "Synthèse de biaryles, ligands des récepteurs sérotoninergiques 5-HT7." Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Butt, S.; Dauphin, F.; Rault, S. XIIème Journée des Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, Paris, 28 Janvier 2005.
13. "Etude du problème de sélectivité 5-HT7 vs 5-HT1A à travers une nouvelle famille de dérivés phénylpyrroles." Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Dauphin, F.; Lesnard, A.; Butt, S.; Lancelot, J.C.; Rault, S. XIIème Journée des Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, Paris, 28 Janvier 2005.
14. "Antagonistes non-peptidiques de la vasopressine humaine : Approche 3D-QSAR." E. Lescot, E.; Bureau, R.; Sopkova-De Oliveira Santos, J.; Rault, S. IIème Journée des Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, Paris, 28 Janvier 2005.
15. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Contesse, V.; Lenglet, S.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Conception de nouveaux ligands sur la base d'un pharmacophore 3D. Application aux récepteurs 5-HT7. VIIIème Journée Scientifique du Réseau LARC-Neurosciences, Paris, 15 Octobre 2004.
16. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Comparison of the 5-HT7 / 5-HT1A pharmacophores. Implication in the design of selective ligands. XIIIèmes Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, Rennes, 16-17 Septembre 2004.
17. Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepaillieur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. Etude de la sélectivité de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques 5-HT7. (partie 2). XIIIèmes Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, Rennes, 16-17 Septembre 2004.
18. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Fabis, F.; Paillet-Loilier, M.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Screening virtuel d'une chimiothèque. Application à la découverte de nouveaux ligands 5-HT7. XLèmes Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Bordeaux, 30 Juin-2 Juillet 2004.
19. Rochais, C.; Lisowski, V.; Lescot, E.; Sopkova-De Oliveira Santos, J.; Bureau, R.; Meijer, L.; Dallemagne, P.; Rault, S. Synthèse et Evaluation Biologique de nouvelles tripentones en série pyrrole. XLèmes Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Bordeaux, 30 Juin-2 Juillet 2004.
20. Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepaillieur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. Etude de la sélectivité de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques 5-HT7. (partie 1). XLèmes Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Bordeaux, 30 Juin-2 Juillet 2004.
21. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Fabis, F.; Paillet, M.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Similarity searching performed on a chemolibrary. Application to new 5-HT7 ligands discovery. VIIth Anglo-Norman Organic Chemistry Colloquium, Cabourg, 2-4 Mai 2004.
22. Lepaillieur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Contesse, V.; Lenglet, S.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. Conception de nouveaux antagonistes des récepteurs sérotoninergiques de type 7 (5-HT7). VIIème Journée de l'Ecole Doctorale Normande Chimie-Biologie, Caen, 19 Mars 2004. Communication récompensée par le Premier Prix de chimie.
23. Paillet, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepaillieur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. Synthèse et évaluation pharmacologique de nouveaux ligands des récepteurs 5-HT7. (partie 3). VIIème Journée de l'Ecole Doctorale Normande Chimie-Biologie, Caen, 19 Mars 2004.
24. Lescot, E.; Bureau, R.; Sopkova-De Oliveira Santos, J.; Rochais, C.; Lisowski, V.; Dallemagne, P.; Rault, S. Recherche de nouveaux inhibiteurs de GSK-3 : Implications dans le traitement de la maladie d'Alzheimer. 11ème



journée Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutiques,  
30 Janvier 2004 Paris, France.

25. Omran, Z.; Lescot, E.; Sopkova-De Olivera Santos, J.; Bureau, R.; Dallemagne, P.; Rault, S. Synthèse et Evaluation de Nouveaux Inhibiteurs de l'Acétylcholinestérase Dérivés des Aminocyclopenta [c] et Aminocyclopenta [b] thiophénones. 11ème Journée Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutiques, 30 Janvier 2004 Paris, France.

#### Master/DEA.

- M. Thibault Varin (2004 – 2005).

Sujet : Détermination de nouveaux ligands sélectifs ALK-5. Application dans le cadre du traitement de la myopathie.

Reçu en juin 2005 avec Mention Bien.

- M. Denis Levrat (2004 – 2005).

Sujet : Analyse des interactions tPA – récepteur au glutamate (sous unité NR1). Implication dans le cadre de l'ischémie cérébrale.

Reçu en juin 2005 avec Mention Bien.

#### Thèse.

Mlle Elodie Lescot (début 2004).

Financement du Ministère de la Recherche et de la Technologie

Sujet : Conception d'antagonistes de l'urotensine.

M. Alban Lepaillleur (début 2002).

Financement Région – industrie.

Sujet : Synthèse rationnelle, criblage, modélisation moléculaire, évaluation pharmacologique et applications thérapeutiques potentielles de ligands des récepteurs sérotoninergiques de type 7 (5-HT<sub>7</sub>).

#### Collaborations universitaires.

- Dans le cadre du LARC Neurosciences : Synthèse rationnelle, criblage, modélisation moléculaire, évaluation pharmacologique et applications thérapeutiques potentielles d'agonistes spécifiques des récepteurs sérotoninergiques de type 7 (5-HT<sub>7</sub>). Ce projet est mené conjointement à Caen, par l'UPRES EA 2126 (Centre d'Etude et de Recherche sur le Médicament en Normandie CERMN, dirigé par le Pr. S. Rault) et l'UMR 6551 CNRS (Dr François Dauphin) et à Rouen, par l'unité INSERM U 413 (Dr C. Delarue, Dr. H. Vaudry).
- Collaboration avec le Professeur S.J. Lee (Department of molecular biology and genetics. Johns Hopkins School of Medicine, Baltimore, USA) dans le cadre d'un programme de recherche subventionnée par l'AFM.
- Collaboration avec Pr D. Vivien (INSERM-Avenir, GIP Cyceron, Caen) sur l'analyse des interactions tPA – récepteur au glutamate.
- Collaboration avec l'Université St Joseph De Beyrouth, Professeur K. Sahakian. Etudes structure-activité sur les ligands 5-HT<sub>6</sub>. Thèse de modélisation moléculaire actuellement en collaboration directe avec notre laboratoire.

#### Enseignements.

- Travaux dirigés de modélisation moléculaire dans le cadre du Master Professionnel "Imagerie de la santé" : 20 étudiants (4 heures).
- Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmaceutiques. Mise en place cette année (début des cours : janvier 2006) d'un nouveau laboratoire de modélisation moléculaire avec une orientation enseignement (3 stations SGI, 12 PCs) : 80 étudiants (autour de 40 heures).

#### 3. Equipe SMS (UPRES EA 3233) Rouen

IRCOF Université de ROUEN,

**2003009 : Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.**

**Directeur Pr Gérard Coquerel**

(rédacteur Stéphane Petitl)

#### Publications

1. Crystal growth mechanism in solution of hollow whiskers of molecular compounds F. Mallet, S. Petit, S. Lafont, P. Billot, D. Lemarchand, G. Coquerel *Crystal Growth & Design*, 2004, 4 (5), 965-969
2. Successful Application of the DCP Model in Resolving the Crystal Structure of a Metastable Polymorph of Modafinil M. Pauchet, C. Gervais, L. Courvoisier, G. Coquerel *Crystal Growth & Design*, 2004, 4(6), 1143-1151
3. Pleconaril polymorphs : crystal structures of form I and form III, evidence of the enantiotropy and assessment of the structural purity S. Coste, J.-M. Schneider, M.-N. Petit, G. Coquerel *Crystal Growth & Design*, 2004, 4(6), 1237-1244
4. Application of the DCP model to a metastable racemate of mandelic acid M. Pauchet, G. Coquerel *J. Phys. IV France, Proceedings of JEEP-XXX*, 2004, 122, 177-182
5. Polarizing a Hydrophobic Cavity for the Efficient Binding of Organic Guests: the Case of Calix[6]tren, a Highly Efficient and Versatile Receptor for Neutral or Cationic Species U. Darbost, M.-N. Rager, S. Petit, I. Jabin, O. Reinaud *J. Am. Chem. Soc.*, 2005, 127, 8517-8525
6. New Synthesis of (Z,E)-2,7-bis(4-cyanobenzylidene)cycloheptan-1-one under Stereospecific Constraints Induced by Host-Guest Interactions A. Grandeury, S. Petit, S. Coste, G. Coquerel, C. Perrio, G. Gouhier *hem. Commun.*, 2005, 4007-4009

#### Thèses

- GRANDEURY Arnaud (Décembre 2004)

Directeur G. Coquerel

« Complexes supramoléculaires de type hôte-invité avec des cyclodextrines perméthylées : étude des mécanismes lors de la séparation chirale et extension à la complexation d'un inhibiteur enzymatique »

- MALLET Franck (Février 2005)

Directeur G. Coquerel

« Etude critique de modèles de déshydratation des cristaux moléculaires »

#### Collaborations

- Université du Havre, équipe URCOM (Dr. Ivan Jabin)
- IRCOF, Université de Rouen, équipe LFAOC (Dr. Géraldine Gouhier)
- Centre Cycéron, Université de Caen, UMR CEA (Dr. Cécile Perrio)

#### 4. Equipe des Fonctions Azotées et Oxygénées Complexes, Rouen

**IRCOF Université de ROUEN,  
Laboratoire de Chimie Théorique UMR 7616 Université  
P et M Curie Paris**

**Responsable Catherine Fressigné**

**2005002 : Etude théorique du mécanisme d'une réaction d'hétérocyclisation anionique cascade.**

(rédacteur : Catherine Fressigné)

#### Articles

- “ Mass spectral and theoretical characterisation of non-symmetric Mo(V) dithiolene complexes .”

Hélène Lavanant, Catherine Fressigné, Corine Simonnet-Jégat, Rémi Dessapt, Alain Mallard, Francis Sécheresse, Nicole Sellier

« International Journal of Mass Spectrometry, 243, (2005) 205-214» .

#### Collaboration

Institut Lavoisier, Université de Versailles-St-Quentin, 45 avenue des Etats-Unis, 78035 Versailles

#### Publications

“ A C3' modified nucleotide. The difluorophosphonate function, a phosphate mimic, governs the conformational behavior of the ribofuranose.”

Catherine Fressigné, serge Piettre, Eric Condamine, Cornelis Altona, Arnaud Gautier

« Tetrahedron, 61, (2005) 4769-4777» .

#### 5. Laboratoire des Fonctions Azotées & Oxygénées Complexes, Rouen

**UMR 6014 CNRS, IRCOF Université de Rouen**

**2004004 : Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.**

**Responsable Jacques Maddaluno**

(rédacteur : Jacques Maddaluno)

#### Articles

1. “Solvent effects on the mixed aggregates between chiral 3aminopyrrolidine lithium amides and alkylolithiums.”

Yi Yuan, Stéphanie Desjardins, Anne Harrison-Marchand, Hassan Oulyadi, Catherine Fressigné, Claude Giessner-Prettre, Jacques Maddaluno

Tetrahedron 2005, 61, 3325-3334.

2. “A DFT theoretical study of the key factors in the enantioselective alkylation of aldehydes catalyzed by chiral lithium amides.”

C. Fressigné, C. Giessner-Prettre et J. Maddaluno

En cours de révision pour Journal of Organic Chemistry.

3. “A DFT theoretical study of the condensation of aggregates of sp<sup>2</sup> organolithium compounds on formaldehyde.”

C. Fressigné, A. Lautrette, J. Maddaluno

Journal of Organic Chemistry 2005, 70, 7816-7828.

4. “3-aminopyrrolidine lithium amides as chiral ligands for alkylolithium derivatives: synthesis, NMR analysis and computational study of their mixed aggregates.”

A. Harrison-Marchand, J.-Y. valnot, A. Corruble, N. Duguet, H. Oulyadi, S. Desjardins, C. Fressigné, J. Maddaluno

Pure & Applied Chemsitry 2006, sous presse.

#### Communications

1. “Les agrégats mixtes d'organolithiens : structure et application en synthèse asymétrique.”

Conférence à l'Université Paris XI (invitation : Dr. Emmanuelle Schultz), Orsay, 8 février 2005

2. «Mixed aggregates of 3-aminopyrrolidines lithium amides in asymmetric synthesis. »

Conférence à l'Université de Stockholm (invitation : Pr. Stefan Oscarson), Stockholm (Suède), 15 février 2005

3. «Mixed aggregates of 3-aminopyrrolidines lithium amides in asymmetric synthesis. »

Conférence à l'Université d'Upssala (invitation : Dr. Per Arvidsson), Uppsala (Suède), 16 février 2005

4. «Mixed aggregates of 3-aminopyrrolidines lithium amides in asymmetric synthesis. »

Conférence à l'Université de Göteborg (invitation : Dr. Göran Hilmersson), Göteborg (Suède), 17 février 2005

5. «Les agrégats mixtes d'organolithiens : un outil pour la synthèse asymétrique »

Conférence à l'Institut de Chimie des Substances Naturelles du CNRS (invitation : Dr Catherine Guillou), Gif-sur-Yvette, 24 mars 2005

6. « Synthèse hétérocyclique par voie carbanionique cascade »

Conférence à l'Université du Maine (invitation: Dr Gilles Dujardin), Le Mans, 11 mai 2005

7. « Approches de systèmes polycycliques et hétérocycliques par cyclisation/cycloaddition »

Conférence au centre de recherche Sanofi-Aventis (invitation : Dr Jean-Luc Malleron), Vitry-sur-Seine, 18 mai 2005

8. « Les agrégats mixtes d'organolithiens : un outil pour la synthèse asymétrique »

Conférence à l'Université de Nantes (invitation : Dr Bruno Bujoli), Nantes, 20 mai 2005

9. « Atypical use of chiral lithium amides in asymmetric synthesis »

Conférence au 13rd IUPAC Symposium on Organometallic Chemistry directed toward Organic Synthesis (OMCOS 13), (invitation : Pr Peter Kundig et Alexandre Alexakis), Genève (Suisse), 18 juillet 2005

10. « Chiral organolithium mixed aggregates: new versatile tools in asymmetric synthesis »

Conférence au 18th French-Japanese Symposium on Medicinal and Fine Chemistry (FJS XVIII), (invitation: Dr Jacques Royer), Chamonix, 13 septembre 2005

#### Thèses en cours

- Mlle Anne Lautrette (en cours depuis 2000).

Complexes mixtes entre amidures chirales et organolithiens sp<sup>2</sup> (aryllithium et vinylithium). Caractérisation par RMN et modélisation moléculaire.

- M Franck Paté (en cours depuis 2001).

Titre : Etude par Résonance magnétique nucléaire 6Li/13C/1H/15N à haut champs de complexes mixtes non-covalents entre amidures chirales et divers partenaires lithiés.

#### 6. Laboratoire Catalyse et Spectrochimie, Caen

**UMR CNRS - ENSICAEN - Université de Caen,  
2004005 : Spectroscopie infrarouge d'espèces  
adsorbées.**

**Responsable scientifique MCF Arnaud Travert**

(rédacteur : Arnaud Travert)

#### Publication soumise :

Use of pyridine CH(D) vibrations for the study of Lewis acidity of metal oxides.

A. Travert, A. Vimont, A. Sahibed-Dine, M. Daturi and J.-C. Lavalley.

Applied Catalysis A:General, 2005, submitted.

#### 7. LABORATOIRE DE GEOMORPHOLOGIE CONTINENTALE ET COTIERE, Caen

**UMR CRNS 6143 - Université de Caen ,  
Directeur : Patrick Lesueur  
EQUIPE MODELISATION NUMERIQUE,**

#### 2005005 : Modélisation de l'interaction Océan/Surfaces continentales

**Responsable K.D. Nguyen)**

(rédacteur : Robinson Hordoir)

#### Publications

1. Two-phase numerical simulation for the turbidity maximum in the Seine estuary (France), Chauchat J. , Guillou S. , Phan N.V., Barbry N. & Nguyen K.D. Soumis à Mechanics Research Communications (Elsevier)
2. Simulating tropical river plumes, validation with observations from the region of freshwater influence of the Mekong Delta, R. Hordoir, K.D. Nguyen & J. Polcher, Soumis à Journal of Geophysical Research (American Geophysical Union)

NB : Les deux articles viennent d'être soumis.

#### Communications

- Ecoulement turbulent sur une dune sous-marine : Etude numérique, Chauchat J. , Guillou S. & Nguyen K.D., XVIIème Congrès Français de Mécanique 29/08 au 02/09 2005, Troyes

#### Thèses en cours

- J. Chauchat
- R. Hordoir

#### Collaborations

- Sylvain Guillou – Maître de Conférences au Laboratoire Universitaire des Sciences Appliquées de Cherbourg, Université de Caen Basse-Normandie
- Jan Polcher - Directeur de Recherche au Laboratoire de Météorologie Dynamique, Université Pierre et Marie Curie, Paris

**8. Laboratoire de Chimie Théorique, Paris**

**UMR 7616 UPMC/CNRS Université Paris VI**  
**Laboratoire de Chimie Théorique,**  
**Direction B. Silvi**

**2003003 : Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en synthèse asymétrique**

**Responsable Hélène Gérard**

(rédacteur Hélène Gérard)

**Thématique**

Interface chimie / biologie

**Publications**

"Revisiting the structure of (LiCH<sub>3</sub>)<sub>n</sub> aggregates using Car-Parrinello molecular dynamics."

H. Gérard\*, A. de la Lande, J. Maddaluno, M. Tuckerman, O. Parisel,

soumis J. Phys. Chem. A

**Thèses, Master et DEA**

"Evaluation de la constante de couplage 1J(6Li, 13C) dans les agrégats de méthyllithium."

A. de la Lande rapport de DEA (codirection : H. Gérard, O. Parisel), Université Paris VI, 2004

**Communication orales**

" Étude théorique de la stéréosélectivité : problèmes et perspectives."

H. Gérard, Séminaire de l'IRCOF, Rouen, 2005

**Collaborations**

J. Maddaluno, Rouen

Membres du projet SCALA : <http://scala.crihan.fr/>

E. Vrancken, P. Mangeney, Paris

M. Tuckermann, New-York

**9. Groupe de Physique des Matériaux, Rouen**

**UMR CNRS 6634 UFR Sciences Université de Rouen,**  
**Site du Madrillet**

**20030014 : Simulation de la relaxation des polymères.**

**Responsable, Cristelle Pareige**

(rédacteur : Cristelle Pareige)

**Thèse en cours**

Mickael Arnoult

**Poster**

"Relaxation kinetics of organic and inorganic glasses",  
M.Arnoult, A. Saiter, C. Pareige, E. Dargent, J.M. Saiter, 5th International

Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems - 7 au 13 juillet 2005, Lille.

**10. Equipe Chimie Organique et Biologie Structurale, Rouen**

**ECOBS - UMR 6014 CNRS**

**2004006 : Génération automatique de structures de protéines**

**Responsable, Isabelle Milazzo**

(Rédacteur : Isabelle Milazzo)

L'ECOBS, dirigée par le Pr. D. Davoust, est constituée de deux groupes, RMN et Modélisation Moléculaire d'une part, et Spectrométrie de Masse d'autre part. 8 doctorants (dont 1 préparant une thèse CNAM), 1 docteur, 5 Maîtres de Conférences et 1 Ingénieur de recherche utilisent ou ont utilisé quotidiennement la Modélisation Moléculaire dans leurs activités de recherche :

- Traitement et analyse de spectres RMN à l'aide du logiciel FELIX (Accelrys)
- Calculs de structures sous contraintes RMN à l'aide du logiciel CNX (Accelrys)
- Analyse des structures obtenues à l'aide des logiciels CNX (Accelrys) et SYBYL (Tripos)
- Représentation par les logiciels CERIOUS2 (Accelrys) et SYBYL (Tripos) des interactions RMN sur les modèles obtenus dans les études structurales en chimie organique
- Calculs théorique semi-empiriques à l'aide du logiciel Jaguar (Schrödinger) et représentation par le logiciel MOLGEN

Il est à souligner que, parmi les 5 Maîtres de Conférences est compté le successeur de Catherine MAYER (partie en retraite en février 2004), qui a été recruté avec un profil "modélisation moléculaire par homologie". Ceci montre que notre équipe est plus que jamais engagée dans ces thématiques et qu'elle entend bien les développer.

Le groupe de RMN et de Modélisation Moléculaire de l'ECOB (Equipe Chimie Organique et Biologie Structurale) de l'UMR 6014 CNRS s'intéresse à l'étude structurale de molécules organiques et bioorganiques en solution. Les recherches du groupe s'orientent autour de deux axes principaux:

- l'étude structurale de peptides et de fragments de protéines
- l'étude structurale de petites molécules organiques.

Les enseignants-chercheurs et les doctorants du groupe de Spectrométrie de Masse de l'ECOB s'intéressent à une nouvelle approche méthodologique, combinant leur technique avec les calculs de modélisation moléculaire. Deux thèmes sont actuellement abordés:

- les relations hôte-invité dans les supramolécules « coronands »
- l'étude de la structure électronique en phase gazeuse de complexes soufrés du molybdène

### Publications

- Structure-activity relationships and structural conformation of a novel urotensin-related peptide.  
CHATENET, C. DUBESSY, J. LEPRINCE, C. BOULARAN, L. CARLIER, I. SEGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, H. OULYADI, D. DAVOUST, E. SCALBERT, B. PFEIFFER, P. RENARD, M.-C. TONON, I. LIHRMANN, P. PACAUD AND H. VAUDRY  
Peptides, 2004, 25, 1819-1830.
- Structural studies on 26RFa, a novel human RFamide-related peptide with orexigenic activity.  
R. THUAU, L. GUILHAUDIS, I. SEGALAS-MILAZZO, N. CHARTREL, H. OULYADI, S. BOIVIN, A. FOURNIER, J. LEPRINCE, D. DAVOUST AND H. VAUDRY  
Peptides, 2005, 26, 779-789.
- Solvent effects on the mixed aggregates between chiral 3aminopyrrolidine lithium amides and alkyllithiums.  
Y. Yuan, S. Desjardins, A. Harrison-Marchand, H. Oulyadi, C. Fressigné, C. Giessner-Prettre and J. Maddaluno.  
Tetrahedron, 2005, 61, 3325-3334.
- A C3' modified nucleotide. The difluorophosphonate function, a phosphate mimic, governs the conformational behaviour of the ribofuranose.  
C. FRESSIGNE, S. PIETTRE, E. CONDAMINE, C. ALTONA, A. GAUTIER.  
Tetrahedron, 2005, 61, 4769-4777.
- A DFT Theoretical Study of the Condensation of Aggregates of sp<sup>2</sup> Organolithium Compounds on Formaldehyde.  
C. FRESSIGNE, A. LAUTRETTE, and J. MADDALUNO  
J. Org. Chem., 2005, 70, 7816-7828.
- Synthesis and Stereochemistry of New Bis(1,3-Oxathian-2-yl) Derivatives: Epimerisation and Chair-Twist Equilibria.  
C. Cismas, I. Grosu, G. Ple, E. Condamine, Y. Ramondenc, L. Toupet, I. Silaghi-Dumitrescu, G. Nemes, A. Terec, I. Muntean.

Structural Chemistry, 2005, 16, 369-377.

- 3-Aminopyrrolidines Lithium Amides as Chiral Ligands for Alkyllithium Derivatives: Synthesis, NMR Analysis and Computational Study of their Mixed Aggregates.

A. Harrison-Marchand, J. Y. VALNOT, A. CORRUBLE, N. DUGUET, H. Oulyadi, S. Desjardins, C. Fressigné AND J. Maddaluno.

Pure Appl. Chem., 2005, sous presse.

### Communications

- 26RFa : A novel hypothalamic neuropeptide with orexigenic activity.  
N. CHARTREL, F. BRUZZONE, H. TOLLEMER, Y. ANOUAR, J. LEPRINCE, D. CHATENET, J.C. DO-REGO, L. GUILHAUDIS, I. MILAZZO, P. COSETTE, T. JOUENNE, C. LLORENS-CORTES, J.C. BEAUVILLAIN, J. CONSTANTIN, & H. VAUDRY  
7ème colloque de la société des Neurosciences (Lille, France, 17-20 mai 2005).
- Etude structurale par RMN en milieu micellaire de deux nouveaux neuropeptides stimulant l'appétit, le 26RFa et le 43RFa.  
I. BUCHET, I. MILAZZO, L. GUILHAUDIS, N. CHARTREL, H. OULYADI, J. LEPRINCE, & H. VAUDRY  
11ème Journée Scientifique de l'IFRMP (Rouen, France, 10 juin 2005).
- Etude de l'interaction entre l'urotensine-II et des domaines de son récepteur.  
S. BOIVIN, I. MILAZZO, L. GUILHAUDIS, H. OULYADI, D. DAVOUST, & A. FOURNIER  
11ème Journée Scientifique de l'IFRMP (Rouen, France, 10 juin 2005).

### Thèses soutenues

- Didier RIVIERE (thèse soutenue le 22 décembre 2004)  
«Etude structurale par RMN de la protéine v-myb».

### Thèses en cours

Au laboratoire :

- Anne LAUTRETTE (soutenance prévue en 2006)  
«Synthèse et étude par Résonance Magnétique Nucléaire 6Li/13C/1H et Modélisation Moléculaire de complexes mixtes entre la 1-benzyl-3-(S)-diphénylméthylaminopyrrolidine et des composés organolithiens de type sp<sup>2</sup>. Etude du docking de l'aldéhyde».
- Franck PATE (soutenance prévue en 2006)  
«Synthèse et caractérisation structurale par RMN multinoyaux 1H, 13C, 6Li et 15N de nouveaux agrégats mixtes entre amidures de lithium dérivés de 3-aminopyrrolidines et organolithiens ou sels de lithium. Etude théorique de leur réactivité vis à vis d'électrophiles».
- Ludovic CARLIER (soutenance prévue en 2006)  
«Production de domaines recombinants de la proline déshydrogénase PRODH en vue de l'analyse structurale.



Caractérisation par Résonance Magnétique Nucléaire et Modélisation Moléculaire de la structure du domaine K2 de la protéine humaine Kin17».

- Romain THUAU (soutenance prévue en 2006)  
« Production du domaine recombinant CBD (Chitin-Binding Domain) de la chitinase CgChit2 identifiée chez l'huître creuse. Caractérisation structurale par RMN et Modélisation Moléculaire de ce domaine ».
- Thomas VINCENT (soutenance prévue en 2006)  
« Relations hôte-invité dans les supramolécules « coronands ».
- Pedro LAMEIRAS (soutenance prévue en 2008)  
« Etude structurale par Résonance Magnétique Nucléaire et Modélisation Moléculaire de la Dystrophine, protéine impliquée dans la maladie de Duchenne ».

En co-direction :

- Stéphane BOIVIN (soutenance prévue en 2006)  
« Etudes structurales du récepteur de l'urotensine II ».  
Collaboration avec le Laboratoire d'Etudes Moléculaires et Pharmacologiques des Peptides, Institut National de la Recherche Scientifique – Institut Armand Frappier (Université du Québec, CANADA)

#### **Autre encadrement**

- Isabelle BUCHET (soutenance prévue en 2006), thèse CNAM  
« Etude structurale par Résonance Magnétique Nucléaire et Modélisation Moléculaire de deux neuropeptides stimulant l'appétit : le 26RFa et le 43RFa ».

#### **Modélisation moléculaire dans l'enseignement à l'Université**

L'université a mis en place depuis octobre 2004 la réforme L.M.D. (Licence-Master-Doctorat) des diplômes et des formations. Ces offres sont étroitement liées aux thématiques de recherche puisque rattachées aux Ecoles Doctorales à partir des masters. Les enseignements de Modélisation Moléculaire, mis en place depuis plusieurs années par les enseignants-chercheurs de l'ECOBIS (L. Guilhaudis, C. Mayer et I. Milazzo) et directement en rapport avec les activités de recherche de l'équipe, y ont conservé une place importante.

Les logiciels utilisés pour l'enseignement sont gérés par l'Université de ROUEN. Une exception est faite pour les logiciels employés lors des enseignements de RMN de l'Ecole Doctorale qui se déroulent au sein de notre laboratoire (FELIX et INSIGHTII (Accelrys)).

Les filières concernées pour la période octobre 2004 - septembre 2005 ont été les suivantes :

- Master 2 Chimie Organique – Parcours Spectrochimie (9 étudiants)  
UE (Unité d'Enseignement) Structure Dynamique de Biomolécules  
- RMN et Modélisation de molécules bio-organiques (11h)
- Master 1 de Biochimie (37 étudiants)

UE Biophysicochimie cellulaire et moléculaire(32h).

- Structures 3D des biomolécules. Analyse et propriétés.
- Méthodes de Modélisation Moléculaire.
- Master Professionnel de Bioinformatique : Etude de Génomes Outils Informatiques et Statistiques (EGOIST) (10 étudiants).  
UE Modélisation Moléculaire (35h)  
- Analyse structurale des protéines par RMN et RX.  
- Prédiction de structures secondaires et tertiaires de molécules biologiques.  
- Outils de visualisation et simulation de structure.  
- Méthodes de modélisation moléculaire.
- Ecole doctorale Chimie-Biologie (8 étudiants)  
Analyse structurale de biomolécules : RMN et Modélisation Moléculaire (15h)



## 11. CNRS UMR 6614 - CORIA, Rouen

**Université de Rouen,  
Alain Berlemont, directeur de recherche**

**2003008 : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray**

**Responsable, Alain Berlemont**

(rédacteur : Alain Berlemont)

### Thèse

- S. Tanguy Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques, Thèse, Université de Rouen, UMR 6614- CORIA, 2004

### Publications

- S. Tanguy, A. Berlemont Development of a Level Set Method for interface tracking: applications to droplet collisions, Int. J. Multiphase Flows, Vol 31, Issue 9, pp 1015-1035, 2005
- S. Tanguy, T. Ménard, A. Berlemont, J. L. Estivalezes, F. Couderc, Level Set method for interface tracking: development and applications. 177ème Session du comité scientifique et technique de la Société Hydrotechnique de France "Advances in the modeling methodologies of two-phase flows", Lyon, France, November 24-26, 2004
- S. Tanguy, T. Ménard, A. Berlemont Droplet collisions using a Level Set method: comparisons between simulation and experiments, 3rd Int. Conf. on Computational Methods in Multiphase Flow, Portland, Maine, USA, November 2005
- T. Ménard, P.A. BEAU, S. Tanguy, F.X. DEMOULIN, A. Berlemont : Primary break-up :DNS of liquid jet to improve atomization modelling, 3rd Int. Conf. on Computational Methods in Multiphase Flow, Portland, Maine, USA, November 2005

(rédacteur Thierry Girasole)

2004 :

- G. Gouesbet, L. Méès, C. Rozé, T. Girasole and G. Gréhan. Diagnostic par laser pulsé femtoseconde en diffusion simple et multiple : application aux diagnostics particuliers. Conférence plénière invitée, Congrès SFT, Presqu'île de Giens, France, 25-28 mai 2004.
- C. Rozé, T. Girasole, G. Gréhan, L. Méès, L. Hespel and A. Delfour. Time-resolved propagation of femtosecond pulses in a dense scattering media : Monte Carlo direct method. Proceedings of the 7th international congress on Optical Particle Characterization. Kyoto (Japan), 1-5 august 2004.
- L. Hespel, A. Delfour, C. Rozé, T. Girasole, G. Gréhan and L. Méès. Time-resolved propagation of femtosecond pulses in a dense scattering media : particle sizing by inversion of spatio-temporal diagrams. Poster. Proceedings of the 7th international congress on Optical Particle Characterization. Kyoto (Japan), 1-5 august 2004.
- C. Calba. Interaction entre une impulsion lumineuse ultra-brève et un nuage dense de particules: simulations

numériques et expériences. Rapport de DEA UMR 6614 CORIA, Septembre 2004.

C. Calba, C. Rozé et T. Girasole. Interaction entre une impulsion laser et un nuage dense de particules : paramétrages de configurations expérimentales optimales. Rapport de contrat 2004, ONERA DOTA/QDO Toulouse, novembre 2004.

2005 :

- C. Calba. Interaction entre une impulsion laser ultra-brève et un nuage de particules : simulations numériques et expériences. Thèse en cours à l'UMR 6614 CORIA.
- L. Méès, C. Calba, T. Girasole and C. Rozé. Interaction entre impulsions femtosecondes et un milieu fortement diffusif. 7ème journées des phénomènes ultra-rapides (JPU 2005), Université des Sciences et Technologies de Lille, Villeneuve d'Ascq, 5-7 décembre 2005.
- C. Calba, L. Méès, C. Rozé and T. Girasole. Interaction entre une impulsion laser ultra-brève et un milieu fortement diffusif : comparaisons-simulations-expériences. 21ème congrès français sur les aérosols CFA 2004, Paris, 14-15 décembre 2005.
- C. Calba, C. Rozé, T. Girasole and L. Méès. Monte Carlo simulation of the interaction between an ultra short pulse and a dense scattering medium: case of large size particles. A paraître dans Opt. Comm.

## 12. LMFN, CORIA - UMR CNRS 6614, Rouen

**1998022 : Ecoulements turbulents compressibles**

**Responsable, Abdellah Hadjadj**

(rédacteur : Abdellah HADJADJ )

### Publications dans des revues internationales

- Mouronval, A.-S., Hadjadj, A., Lefrançois, E. (2005) Shock induced oscillations in supersonic nozzles with flexible walls. AIAA J. (soumis).
- Hadjadj, A., Kudryavtsev, A. (2005) Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. J. of Turbulence, Vol. 6, No. 16, pp. 1-25.
- Mouronval, A.-S., Hadjadj, A. (2005) Numerical study of the starting process in a supersonic nozzle. J. of Propulsion & Power, 21(2): 374-378.
- Hadjadj, A., Kudryavtsev, A., Ivanov, M.S. (2004) Numerical Investigation of Shock-Reflection Phenomena in Overexpanded Supersonic Jets. AIAA Journal, 42(3): 570-577.

### Conférences invitées

- Hadjadj, A. (2005) Numerical Study of the Starting Process in a Supersonic Nozzle. Invited Seminar at the Technische Universität München, Garching, 03 May, Germany.

### Congrès avec comité de lecture et actes

- Mouronval, A.-S., Hadjadj, A., Lefrançois, E. (2005), Aeroelasticity and side-loads analysis in rocket nozzles. 6th International Symposium on launcher technologies. , Munchen, 8-11 November, Germany.
- Perrot, Y., Hadjadj, A. (2005), Numerical simulation of shock/boundary layer interaction in supersonic nozzles. AIAA paper 2005-4309. The 41st AIAA Propulsion Conference & Exhibit, Tucson, Arizona, 10-13 July, US.
- Perrot, Y., Hadjadj, A. (2004), Numerical validation of the N3S-Natur code for supersonic nozzles and afterbody flows. The 5th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, 8-11 November, DLR, Collogne.

### Congrès sans actes

- Hadjadj, A. (2005) SGE d'une interaction onde de choc/ couche limite, Assemblée Générale du Groupe Scientifique et Technique (GST) "Mécanique des Fluides et Turbulence", Association Française de Mécanique, Courbevoie - La Défense.

### Rapports de contrat

- Perrot, Y., Hadjadj, A. (2005), Modélisation stationnaire du décollement dans les tuyères et arrière-corps. Rapport d'avancement annuel contrat SNECMA/CORIA-CNRS N° 2005-019 G.
- Perrot, Y., Hadjadj, A. (2004), Modélisation stationnaire du décollement dans les tuyères et arrière-corps. Rapport d'avancement annuel contrat SNECMA/CORIA-CNRS N° 2004-019 G.

### Thèses de doctorat

- Perrot, Y. (2005). Modélisation du décollement de jet dans les tuyères propulsives. Thèse de doctorat (en cours), INSA de Rouen.
- Dubos, S. (2005). Simulation des grandes échelles d'écoulements turbulents supersoniques. Thèse de doctorat, INSA de Rouen.
- Mouronval, A.-S. (2004). Etude numérique des phénomènes aéroélastiques en aérodynamique supersonique. Application aux tuyères propulsives. Thèse de doctorat, INSA de Rouen.

### 13. SIFCOM, UMR6176 CNRS /ENSICAEN, Caen

#### 2003009 : Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.

**Responsable, Gérard Nouet**

(rédacteur : G Nouet)

#### Thématique :

« Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures »

#### Publications

- Atomic structure and energy of threading screw dislocations in wurtzite GaN  
I.BELABBAS, M.A. BELKHIR, Y. H. LEE, P. RUTERANA, J. CHEN, G. NOUET  
Phys. stat. sol.(c), 2005, 2, 2492-2495
- Density-functional tight-binding calculations of electronic states associated with grain boundaries in GaN  
BÉRÉ, P. RUTERANA, G. NOUET, A.T. BLUMENAU, S.SANNA, T. FRAUENHEIM, J. CHEN, J. KOULIDIATI  
Phys.Rev. B, 2005, 71, 125211, 1-5
- Atomistic modelling of point defects in [0001] tilt boundaries in GaN  
A.BÉRÉ, J. CHEN, G. NOUET, P. RUTERANA, J. KOULIDIATI  
Phys. stat. sol.(c), 2005, 2, 2496-2499
- Atomic simulations and HRTEM observations of a sigma 18 tilt grain boundary in GaN  
J. KIOSEOGLOU, A. BÉRÉ, Ph. KOMNINOU, G.P. DIMITRAKOPULOS, G. NOUET, E. ILIOPOULOS, A. SERRA, Th. KARAKOSTAS  
Phys. stat. sol.(a), 2005, 202, 799-803
- New core configuration of the c-edge dislocation in wurtzite GaN  
I. BELABBAS, G. NOUET, M.A. BELKHIR, J. CHEN, A. BÉRÉ  
6th International Conference on Nitride Semiconductors, Bremem, Allemagne, August 29-September 2, 2005
- Energy and electronic structure of gallium and nitrogen interstitials in <0001> GaN tilt boundaries  
A. BÉRÉ, P. RUTERANA, G. NOUET  
E-MRS, Varsaw, Poland, September 5-9, 2005
- Atomic structure of dislocations in nitride semiconductors  
J. CHEN, A. A. BÉRÉ, S. PETIT, I. BELABBAS, P. RUTERANA, G. NOUET  
6th International Conference on Nitride Semiconductors, Bremem, Allemagne, August 29-September 2, 2005
- The atomic configuration of tilt grain boundaries around <0001> in GaN  
J. CHEN, P. RUTERANA, G. NOUET  
E-MRS, Varsaw, Poland, September 5-9, 2005

- Electronic states associated with grain boundaries in GaN using a density-functional based tight-binding method  
A. BERE, A.T. BLUMENAU, S. SANNA, T. FRAUENHEIM, J. CHEN, P. RUTERANA, G. NOUET, J. KOULIDIATI  
GDR-DFT, Cap d'Agde, 18-20 Mai 2005
- Dislocations dans GaN  
I. BELABBAS, M.A. BELKHIR, J. CHEN, G. NOUET  
GDR-DFT, Cap d'Agde, 18-20 Mai 2005
- A. BERE (Diplôme d'habilitation à diriger des recherches) (12 Juillet 2005)  
Structure atomique et électronique des défauts étendus dans les matériaux de symétrie hexagonale

#### 14. UMR 6180, Faculté. Sciences, Marseille

**2001003 : Chimie organométallique : réactions d'insertions**

**Responsable, Stéphane Humbel**

(rédacteur : Stéphane Humbel)

##### Thématique

Chirotechnologies

E. Derat, M. Linares, S. Humbel\*

##### Publications

- Reactivity of Dialkylzirconium Species and Solvent Polarity, E. Derat, J. Bouquant, P. Bertus, J. Szymoniak, S. Humbel Int. J. of Quant. Chem. sous presse (2006?)
- A Lewis based Valence Bond scheme : Application on the Allyl Cation, M. Linares, B. Braïda, S. Humbel, J. Phys. Chem. A soumis

##### Thèses

- Thèse de Etienne Derat : Etude théorique de la formation et de la réactivité de complexes organométalliques à base de zirconium, Reims décembre 2004
- Thèse de Mathieu Linares : Résonances : une approche en schéma de liaison, Marseille, soutenance prévue en décembre 2005

##### Communications (conférences)

Conférences:

- Oct 05 Conférence à Nancy (UMR 7565) : Traitement VB de la résonance.
- Nov 05 Conférence à Oran (7° JCT) : Résonance: Approche Valence Bond ou Modèle de Lewis?

##### Communications (orales)

- Avr 05 18° SFC PACA (Lagarde), M. Linares, B. Braïda, & S. Humbel, Approche Numérique de la Résonance.
- Avr 05 Fédération Chimie (Marseille), M. Linares, B. Braïda, & S. Humbel, Approche Numérique de la Résonance.

- Sept 05 QSCP-X (Carthage), M. Linares, B. Braïda, & S. Humbel A Lewis based Valence Bond approach.
- Posters:
- Sept 04 9° RCTF (Pau) E. Derat, J. Bouquant, P. Bertus, C. Laroche, J. Szymoniak, S. Humbel, Transformation des Nitriles en Cyclopropylamines : Analyse Théorique
- 9° RCTF (Pau) M. Linares, H. Gérard, S. Humbel, A propos de la formation de chlorophosphines chirales
- Nov 05 7° JCT (Oran) E. Derat, J. Bouquant, & S. Humbel, : On the Link Atom Distance in the ONIOM Scheme.: An Harmonic Approximation Analysis

##### -Collaborations

- UMR 7616 (Jussieu) Dr B. Braïda
- UMR 6519 (Reims) Pr J. Bouquant

#### 15. Laboratoire de Mécanique de Rouen (LMR), Rouen

**INSA EA 3828**

**2003006 : Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide**

**Responsable Fabrice Barbe**

(rédacteur : Lakhdar Taleb)

##### Equipes de recherche

- Comportement Non Linéaire des Matériaux et des Structures.
- Fiabilité et Incertitudes en Mécanique Expérimentale et Numérique

Effectif global (Octobre 2005) 30 dont :

- 12 enseignant(s)-chercheur(s) dont un PAST attendu courant 4e trimestre 2005
- 1 ingénieur(s)
- 15 doctorant(s) dont 5 en cotutelle
- 1 technicien(s)
- 1 administratif(s)

##### Appartenance à une école doctorale

Ecole Doctorale "Sciences Physiques et Mathématiques pour l'Ingénieur"

##### Axes de recherches

Comportement des structures mécaniques en conditions statique ou dynamique

- Fiabilité et Incertitudes en Mécanique Expérimentale et Numérique
- Comportement Non Linéaire relatif à l'analyse et au développement de lois de comportement non-linéaires avec ou sans transformations de phase solide-solide.

Les travaux expérimentaux constituent une source essentielle au développement des activités de modélisation dans les deux axes ci-dessus. Des investigations expérimentales sont notamment menées en vue de :

(a) développer des techniques photomécaniques de mesure sans contact de champs (déplacements, formes 3D);

(b) analyser le comportement dynamique des structures;

(c) analyser le comportement non linéaire des matériaux et des structures sous sollicitations complexes : caractères cyclique et multiaxial des chargements, interactions thermomécanique-métallurgie, .... Les différents membres du LMR entretiennent de nombreuses collaborations de haut niveau avec des chercheurs nationaux et internationaux dans les sujets mentionnés. Un équilibre entre recherche fondamentale et recherche appliquée est constamment recherché, de nombreuses études sont menées avec le soutien de partenaires industriels.

### Equipements spécifiques

- Equipements d'essais thermomécaniques sous sollicitations multiaxiales
- Laboratoire de photomécanique
- Laboratoire vibro-acoustique

### Partenariats régionaux

ACCO, CEVAA, CHU, Knorr-Bresme, Renault

### Partenariats nationaux

- Industriels: CEA, EDF, Framatome, IRSID, PSA, Renault
- Universitaires: ECL, ENSMSE, ENSAM Châlons, ENSMP, IFMA, LMARC, UTT

### Partenariats internationaux

ALGERIE, ALLEMAGNE, BRESIL, CANADA, MAROC, NORVEGE, ROUMANIE, USA

### Les thèses et HDR

- KOSCIANSKI André Modèles de Mécanique pour le Temps Réel. E SOUZA de CURSI, Maryvonne PELLAY. Soutenue le 17/11/2004.124p.
- LUERSEN Marco GBNM : Un Algorithme d'Optimisation par Recherche Directe- Application à la Conception de Monopalmes de Nage.E.SOUZA DE CURSI.Soutenue le 01/12/2004.190p.
- SARSRI Driss Contribution à l'analyse des structures comportant des paramètres incertains par les méthodes de synthèse modale. Abdelkhalak EL HAMI, M. JABBOURI. Soutenue le 21/10/2004.187p. Co-tutelle Maroc.

### Publications avec comité de lecture

2004 :

- G. KHARMANDA, N. OLHOFF, A. EL HAMI Optimum safety factor approach for reliability-based design optimization with extension to multiple limit state case accepted for publication in the journal Structural and Multidisciplinary Optimization, N°27 pp421-434, 2004
- A. EL HAMI, P. MINOTTI Design and modelling of a linear piezoelectric travelling wave motor " International Journal of Design and Innovation Research, 2004

- G. KHARMANDA, A. EL HAMI, N. OLHOFF Global Reliability Based Design Optimization, Journal Frontiers in global optimization, eds C.A.Floudas and Pardalos Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands,,19pp., 2004
- A. ELHAMI, D. SARSRI, A. JABBOURI Conception d'une structure à variables incertaines soumise à une excitation déterministe : Application des méthodes de synthèse modale, " International Journal of Design and Innovation Research, 2004.
- D. BORZA VIBRATION-BASED IDENTIFICATION OF ISOTROPIC MATERIAL PROPERTIES BY QUASIBINARY ELECTRONIC HOLOGRAPHY AND FINITE ELEMENT MODELLING, revue "Inverse Problems in Science and Engineering", (Gordon and Breach - Taylor & Francis journals) Vol. 12, 1, pp. 45 58, 2004
- M. BOUHADI, R. ELLAIA, JE. SOUZA DE CURSI Global Optimization under nonlinear restrictions by using stochastic perturbations of the projected gradient accepted, à paraître dans Non convex optimisation and applications
- JE. SOUZA DE CURSI Representation and numerical determination of the global optimizer of a continuous function on a bounded domain accepted, à paraître dans Non convex optimisation and applications
- LC. GALVÃO, AG. NOVAES, JC. SOUZA DE CURSI, JE. SOUZA DE CURSI A multiplicatively-weighted Voronoi diagram approach to logistics districting accepted, à paraître dans Computers and Operations Research
- L. TALEB, S. PETIT New Investigations on Transformation Induced Plasticity and its Interaction with Classical Plasticity". International Journal of Plasticity. (submitted in May, 2004).
- L. TALEB, G. CAILLETAUD Numerical Simulation of Complex Ratcheting Tests With 2M1C type Model. International Journal of Plasticity (Submitted in March, 2004).
- L. TALEB, S. PETIT, JF. JULLIEN, Prediction of Residual Stresses in the Heat Affected Zone. J. Phys. IV, 120 (2004), 705-712
- S. GROSTABUSSAT, L. TALEB, JF. JULLIEN, Experimental Results on Classical Plasticity of Steels Subjected to Structural Transformations". International Journal of Plasticity. 20/8-9, 1371-1386.

### Les conférences internationales avec actes

2004 :

- G. GOUVEIA, D. LEMOSSE, E PAGNACCO, E SOUZA DE CURSI Dynamic efforts in the hip joint, proposée pour Congrès de Paris 2004 de la société de Biomécanique, 8-10 Septembre 2004, Créteil, France.
- G. GOUVEIA, D. LEMOSSE, E PAGNACCO, E SOUZA DE CURSI Temporal identification in a flexible multi-body system: application to biomechanics, proposée pour XI Diname 2004, Minas Gerais, Brésil.
- MA. LUERSEN, R. LE RICHE, D. LEMOSSE Identification of a 3D shape from 2D design: application to a swimming monofin, accepté pour The Fourth International Conference on Engineering Computational Technology, 7-9 Septembre 2004, Lisbon, Portugal.



- A. MOHSINE, A. EL HAMI Couplage des méthodes de synthèse modale et d'optimisation fiabiliste : (Théorie & application, XIV Colloque Vibrations Chocs et Bruit Lyon, Juin 2004
- F. TREYSSÉD, A. EL HAMI Une méthode couplée de sous-structuration dynamique/Sous-domaine acoustiques pour des problèmes d'interaction fluide-structure de grandes tailles, XIV Colloque Vibrations Chocs et Bruit Lyon, Juin 2004
- B. RADI, A. EL HAMI Etude fiabiliste du contact dynamique au sein d'un moteur piézo-électrique, XIV Colloque Vibrations Chocs et Bruit Lyon, Juin 2004
- D. SARRIS, A. EL HAMI, A. JABBOURI Utilisation du chaos polynomial pour l'analyse stochastique de la réponse d'un système à variables incertaines: application des méthodes de synthèse modale, XIV Colloque Vibrations Chocs et Bruit Lyon, Juin 2004
- G. KHARMANDA, A. MOHSINE, A. EL-HAMI Reliability-based optimal design for free vibrated structures, Conference international NT2F 19-12 mai, Allepe, Syrie , 2004
- G. KHARMANDA, A. EL HAMI, A. MAKHLOUFI, M. BAKIR, T. AL AKLA, T Probabilistic distribution variability in reliability based optimum design Conference international NT2F 19-12 mai, Allepe, Syrie , 2004
- L. KHALIJ, A. MOHSINE, A. EL HAMI Formulation d'un problème d'optimisation fiabiliste avec prise en compte de la durée de vie pour la conception des structures, 3ème JET 04 Marrakech, Maroc, 2004
- A. MOHSINE, A. EL HAMI Optimisation fiabiliste des méthodes de synthèses modales en dynamique des structures Congrès de Maîtrise des risques et de Sécurité de Fonctionnement (Im14), 11-15 octobre, Bourges 2004
- G. KHARMANDA, N. OLHOFF, A. EL HAMI Recent developments in reliability-based design optimization, World Congress on Computational Mechanics (WCM IIV), Chine 5-10 September, 2004
- D. BORZA, D. LEMOSSE, E. PAGNACCO Static behaviour of compression-type piezoelectric multilayer actuators - a hybrid, experimental-numerical analysis, ICEM 12, EURASEM 12th International Conference on Experimental Mechanics, Bari 2004
- D. BORZA Steady-State Mechanical Vibration Measurement by Quasi-binary and High-Resolution Time-average Electronic Holography, ICEM 12, EURASEM 12th International Conference on Experimental Mechanics, Bari 2004
- R. LACHAT, D. BORZA, W. CHARON Manufacture of smart composite panels for the industry and verification of their structural properties with holographic methods, ICEM 12, EURASEM 12th International Conference on Experimental Mechanics, Bari 2004
- A. MOREAU, E. PAGNACCO, D. BORZA, D. LEMOSSE, C. GAUTRELET Identification de propriétés d'amortissement matériau d'une plaque par mesure optique de champ dynamique, Proceedings of the Cinquième colloque francophone, "Contrôles et Mesures Optiques pour l'Industrie", Saint-Etienne, S.F.O., 15-19 novembre 2004
- E. BEZ, MB. GONÇALVES, JE. SOUZA DE CURSI A Global Optimization Hybrid method for the parameter determination in a gravitational model - XIII Pan-American Conference of Traffic and Transportation Engineering, Albany (USA), 2004
- A. EL HAMI, D. BORZA, E. SOUZA DE CURSI Vibroacoustic analysis of cyclic structures, accepté, DIN091, XI DINAME, 11th International Symposium on Dynamic Problems of Mechanics, Ouro Preto, Brazil, 28 février 4 march 2005
- JE. SOUZA DE CURSI Geometrical discontinuities in stress-unilateral strings, accepté, DIN091, XI DINAME, 11th International Symposium on Dynamic Problems of Mechanics, Ouro Preto, Brazil, 28 février 4 march 2005
- L. TALEB, S. PETIT-GROSTABUSSIAT Analyses of TRIP Constitutive Equations Using a New Type of Experiments. Euromech, Colloquium-458, Moscow, Russia, September 21-23, 2004.
- F. BARBE, R. QUEY, L. TALEB Numerical Determination of Diffusional Transformation Induced Plasticity From Computations of Random Microstructures". 21st ICTAM International Conference, Warsaw, Poland, August 15-21, 2004.
- S. MEFTAH, F. BARBE, L. TALEB, F. SIDOROFF Numerical analyses of the interaction classical plasticity - TRIP. 21st ICTAM International Conference, Warsaw, Poland, August 15-21, 2004.

#### Les conférences nationales et régionales avec actes

2004 :

- L. TALEB Sur quelques interrogations relatives au comportement thermo-métallo-mécanique de l'acier 16MND5. Journée Simulation Numérique du Soudage Multipasses. Paris le 25 mars 2004.
- L. TALEB Développement d'une Plateforme d'Essais sur le Comportement Thermomécanique des Matériaux et des Structures. Colloque Centre National de la Recherche Technologique/Combustion et Moteurs. Rouen le 8 octobre 2004.
- F. BARBE, R. QUEY, L. TALEB Modélisation numérique de la plasticité induite par transformation de phase diffusionnelle dans les métaux : une approche par calculs éléments finis sur microstructures aléatoires". Colloque Centre National de la Recherche Technologique/Combustion et Moteurs. Rouen le 8 octobre 2004.
- N. MASSUE, H. KHANFIR, L. TALEB Simulation numérique du process de galetage des vilebrequins. Colloque Centre National de la Recherche Technologique/Combustion et Moteurs. Rouen le 8 octobre 2004.
- S. MEFTAH, F. BARBE, L. TALEB, F. SIDOROFF Contribution à la modélisation des effets mécaniques d'une transformation martensitique dans un acier". Colloque Centre National de la Recherche Technologique/Combustion et Moteurs. Rouen le 8 octobre 2004.
- R. RAJHI, L. TALEB, A. EL HAMI Calcul des structures en thermo-élasto-plasticité cyclique, fiabilité et sensibilité aux paramètres matériaux". Colloque Centre National de la Recherche Technologique/Combustion et Moteurs. Rouen le 8 octobre 2004.

## 16. Equipe de Chimie Théorique Appliquée, Reims

**Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique  
UMR CNRS 6089 UFR Sciences Exactes et Naturelles**

**2005009 : Etudes théoriques de processus  
atmosphériques : études cinétiques de réactions  
élémentaires et capture d'un composé organique volatil  
par une goutte d'eau**

(rédacteur : Sébastien Canneaux)

### Thèse

- Doctorat de l'Université de Reims Champagne-Ardenne en Chimie Informatique et Théorique

Mention très honorable avec les félicitations du jury

Thèse effectuée au sein de l'équipe de Chimie Théorique Appliquée du Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique (GSMA) à la faculté des Sciences Exactes et Naturelles de Reims, sous la direction du Professeur F. Bohr

Titre : Etude théorique de processus atmosphériques : réaction du radical OH avec l'acétone et capture d'un composé organique volatil par une goutte d'eau

Thèse soutenue le 7 décembre 2004

### Articles

- Theoretical study of the reaction OH + acetone : a possible kinetic effect of the presence of water ?  
S. Canneaux, N. Sokolowski-Gomez, E. Henon, F. Bohr and S. Dobé  
Phys. Chem. Chem. Phys., 6, 5172-5177 (2004)
- Theoretical study of the reactivity of hydrocarbon and oxygenated alkoxy radicals : Comparison of the isomerisation and the beta-C-H and dissociation pathways  
E. Thiriot, S. Canneaux, E. Henon and F. Bohr  
React. Kinet. Catal. Lett., 85, 123-129 (2005)
- Accommodation of ethanol, acetone and benzaldehyde by the Liquid- Vapor Interface of Water : A Molecular Dynamics Study  
Sébastien Canneaux, Jean-Christophe Soetens, Eric Henon and Frédéric Bohr  
Phys. Chem. Chem. Phys. (en préparation)
- Features of the potential energy surface for the reaction of HO2 radical with acetone  
Sébastien Canneaux and Thibaud Cours  
Phys. Chem. Chem. Phys. (en préparation)

### Communications orales

- Modélisation Moléculaire et Ressources Informatiques  
S. Canneaux  
Congrès INRA Transversalité MODMOL, Reims, 21-22 octobre 2004
- Etude de l'insertion de trois composés Organiques Volatil dans une goutte d'eau atmosphérique

S. Canneaux, J. -C. Soetens, E. Henon et F. Bohr

5ème Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Reims, 10 juin 2005

### Communication sous forme de Poster

- Etude théorique du mécanisme de la réaction Acétone + HO2 --> Produits

S. Canneaux et T. Cours

5ème Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Reims, 10 juin 2005

## 17. Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire, Paris

**FRE 2718 CNRS, U648 INSERM, IFR Biomédicale.  
Directeur, Pr Christiane Garbay,**

**1998053 : Etude des interactions moléculaires par une  
approche parallèle de chimie quantique et de mécanique  
polarisable**

Responsable du projet: Nohad Gresh, Directeur de Recherche au CNRS.

(rédacteur Nohad Gresh)

### Publications

- Conformation-dependent intermolecular interaction energies of the triphosphate anion with divalent metal cations. Applications to the ATP-binding site of a binuclear bacterial enzyme. A parallel quantum-chemical and polarizable molecular mechanics investigation.  
N. Gresh, et G.-B. Shi, J. Comput. Chem., 25, 160-168 (2004)
- Intramolecular interactions in model alanine and glycine tetrapeptides. Evaluation of anisotropy, polarization, and correlation effects. A parallel ab initio HF/MP2, DFT and polarizable molecular mechanics study.  
N. Gresh, S. Kafafi, J.-F. Truchon, et D. R. Salahub, J. Comput. Chem., 25, 823-834 (2004)
- Representation of Zn(II) complexes in polarizable molecular mechanics. Further refinements of the electrostatic and short-range contributions. Comparisons with parallel ab initio computations.  
N. Gresh, J.-P. Piquemal, et M. Krauss, J. Comput. Chem., 26, 1113-1130 (2005)
- Complexes of thiomandelate and captopril mercaptocarboxylate inhibitors to metallo- $\beta$ -lactamase by polarizable molecular mechanics. Validation on model binding sites by quantum-chemistry.  
J. Antony, J.-P. Piquemal, et N. Gresh, J. Comput. Chem., 26, 1131-1147 (2005)

### Communications

Invitations à des Congrès:

- Nohad Gresh, Jean-Philip Piquemal, Jens Antony.  
Parallel quantum-chemical and anisotropic molecular mechanics studies of intermolecular interaction energies.



From small molecular complexes to ligand-protein interactions.

Congres organise par la 'Molecular Modeling and Graphics Society' (MMGS) en l'honneur du Professeur Ian Hillier et intitulé 'Towards Accurate Calculation of Biomolecular Recognition and Reactivity'

Manchester, 4-10 Septembre 2004

- Nohad Gresh, Jean-Philip Piquemal, Jens Antony.

Refinements and validations of anisotropic polarizable mechanics. Applications to inhibitor-metalloenzyme complexes.

Workshop on 'Modeling Interactions in BiomoleculesII', Prague, République Tchèque, 5-9 Septembre 2005

#### Collaborations internationales:

- Morris Krauss, Center for Advanced Research in Biotechnology, Rockville, Maryland, USA.
- Jens Antony, Institut für Mathematik, Freie Universität Berlin, Allemagne.
- Jean-Philip Piquemal, Laboratory of Structural Biology, National Institute of Environmental and Health Science, Research Triangle Park, 27707 North Carolina, USA.

### 18. IRCOF-INSA de Rouen

**ECOFH, groupe de Chimie Biomimétique**  
**Responsable : Pr Georges DUPAS**

#### 2005006 : Modélisation de complexes ternaires entre le cuivre (II) et deux acides aminés.

(rédacteur Georges Dupas)

Dans notre laboratoire, les Doctorants reçoivent une formation qui leur permet d'utiliser les outils de modélisation moléculaire pour leur travail de recherches. En 2004-2005, trois séances de formation ont été programmées en raison du plus grand nombre de Doctorants et permanents intéressés (environ 15). Les outils utilisés par les Doctorants sont MS-Modeling sur PC et Cerius2 sur O2. Des résultats de calculs ont été exploités en particulier dans la thèse de Doctorat de Mlle Anne-Laure Bonneau.

Deux projets particuliers ont nécessité des outils plus performants :

- Collaboration avec le LASOC : Calculs sur les DALTON

Ce projet correspond à une collaboration entre le laboratoire du Professeur Paul-Louis Desbène (LASOC) à Evreux et le groupe de Chimie Biomimétique de l'IRCOF (CBI) dirigé par le Professeur Georges Dupas.

Le LASOC a acquis une expertise reconnue mondialement dans le domaine de l'électrophorèse capillaire (EC). La séparation par cette méthode des énantiomères d'acides aminés non dérivés pose de nombreux problèmes. En effet, la majorité des approches développées jusqu'à présent ont trait à l'énantioséparation des acides aminés dérivés (par une réaction chimique supplémentaire). Les travaux relatifs à des acides aminés non dérivés sont beaucoup plus rares et concernent surtout les acides aminés aromatiques.

Le LASOC a tenté d'élargir la gamme des acides aminés non dérivés pouvant être séparés énantiomériquement par cette méthode. Des résultats encourageants ont été obtenus par l'échange de ligands qui est fondée sur la présence d'un complexe chiral constitué d'un cation métallique (cation cuivrique) et un sélecteur chiral la L-proline ou la trans-4-hydroxyproline.

Afin de tenter de rationaliser les résultats obtenus (décrits dans la thèse de A. Ait-Adoubel), il est nécessaire d'évaluer la stabilité de la structure tridimensionnelle du complexe sélecteur chiral/métal/acide aminé L ou D. Elle est déterminée par toutes les interactions inter et intramoléculaires entre ces trois espèces et par leurs interactions avec le milieu environnant (solvant). Le sélecteur chiral et l'acide aminé étant tous deux chiraux, les complexes avec le cuivre sont des diastéréoisomères d'énergies différentes selon que l'acide aminé est L ou D.

Les techniques de la modélisation moléculaire permettent d'évaluer l'énergie de tels systèmes. Cependant l'utilisation de la mécanique moléculaire (environnement MS-Modeling) s'est révélée insuffisante pour expliquer les résultats expérimentaux obtenus (thèse de A. Ait-Adoubel).

Quelques articles très récents montrent qu'il est possible d'évaluer ces énergies par des méthodes ab-initio implémentées dans Gaussian 98 et dans certains cas de reparamétriser le champ de forces utilisé en mécanique moléculaire. Le cuivre impose l'utilisation de la base LANL2DZ et le nombre d'intégrales biélectroniques à évaluer est considérable. Par ailleurs, le nombre d'atomes dans ces structures est élevé. Il faut de plus pouvoir apprécier des différences d'énergie parfois minimes entre les différents complexes diastéréoisomériques. La convergence des méthodes de calcul est souvent laborieuse et il est nécessaire dans ce cas de relancer le calcul en effectuant des modifications minimales de la géométrie du complexe.

Les géométries suivantes ont été optimisées dans le vide et dans l'eau (modèle Onsager) avec des temps de calcul entre 40 et 90 h

- Proline+ D ou L alanine+Cu
- Proline+ D ou L isoleucine+Cu
- Proline + D ou L Thréonine+Cu
- Hydroxy-proline+ D ou L alanine+Cu
- Hydroxy-proline + D ou L isoleucine+Cu
- Hydroxy-proline + D ou L Thréonine+Cu

Chaque calcul s'est déroulé en trois phases : optimisation de la géométrie dans le vide, calcul du volume moléculaire, optimisation de la géométrie dans l'eau. Il nous reste à optimiser la géométrie des complexes avec les D et L tryptophanes) et pour chaque complexe optimisé à calculer les paramètres thermodynamiques.

Ces résultats, très originaux, feront l'objet d'une publication commune.

- Nouveaux catalyseurs nucléophiles

Des calculs ab-initio nous ont permis de concevoir de nouveaux types de catalyseurs nucléophiles à base de 4-diméthylaminopyridine. Un étudiant de Master a travaillé

sur ce sujet. L'un des composés obtenus a donné lieu à une publication :

Single-Step Preparation of a 4-(Dimethylamino)pyridine Analogue Bearing a Sulfoxide as New Chiral Inducer. Preliminary Evaluation as Nucleophilic Catalyst T. Poisson, M. Penhoat, C. Papamicaël, G. Dupas, V. Dalla, F. Marsais, V. Levacher Synlett, N°15, 2285-2288 (2005)

#### **Bilan global :**

- Thèse de A. Ait Adoubel (LASOC) soutenue en Septembre 2004
- Thèse de Mlle Anne-Laure Bonneau (IRCOF), soutenance en Décembre 2005.
- Doctorat en cours de Melle Lénaïg Foucout (IRCOF) qui utilise des calculs de lipophilie par modélisation moléculaire
- Master de Mr Thomas Poisson soutenu en Juin 2005
- 1 publication parue citée ci-dessus et une en cours avec le LASOC
- Elaboration d'un projet de collaboration internationale type COST avec plusieurs universités européennes (Suède, Royaume Uni, France, Suisse, Allemagne). Le but est d'élaborer de nouveaux ligands ditopiques pour la catalyse asymétrique. La conception de ces ligands fait fortement appel aux outils de modélisation moléculaire.

#### **19. Groupe de Physique de Matériaux, Université de Rouen**

**UMR 6634 CNRS Université de Rouen-Madrillet**

#### **1999006 : Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V**

**responsable : D. Blavette**

(rédacteur : MC Hélène Zapolsky)

#### **Publications- Articles**

- Nicolas Lecoq, Helena Zapolsky, Renaud Patte « Three-dimensional phase field simulations of coarsening kinetics of  $\gamma$  particles in ternary Al-Zr-Sc alloys » Proceeding of PTM, Phoenix-2005, USA, pp. 1-6.(accepted)
- H.Zapolsky, S. Ferry, R.Patte, L-Q. Chen « Selective Variant Growth of Coherent DO19 (Ni<sub>3</sub>V) Precipitates in Ni-V Alloys » Proceeding of PTM, Phoenix-2005, USA, 6p. (accepted).

#### **Thèses en cours**

- S. Ferry « « Simulation numérique de la cinétique de transformation de phases dans des alliages Ni-Al et Ni-V » (Co-directeur de thèse H. Zapolsky)
- J. Boisse « Simulation numérique à base de champ de phase de la cinétique de précipitation dans un alliage ternaire Al-Sc-Zr » (Co-directeurs N. Lecoq et H. Zapolsky)
- Stage de Master O. Cojocar « Description microscopique de la microstructure dans un alliage Al-Li. (Responsable H. Zapolsky)

#### **Communications orales :**

- N. Lecoq « Three-dimensional phase Field simulations of coarsening kinetics of  $\gamma$  particles in ternary Al-Zr-Sc alloys » PTM, Phoenix-2005, USA.
- H. Zapolsky « NUMERICAL CALCULATION AND ATOM PROBE ANALYSES OF KINETICS IN Ni-BASED ALLOYS » invited lecture, TMS, San-Francisco, février 2005.
- H. Zapolsky « Simulations and atom probe studies of kinetics in Ni-based alloys », EUROMAT-2005, Prague, septembre 2005.
- N. Lecoq « Three-dimensional Phase-field Simulations of Coarsening Kinetics of Gamma' Particles in Ternary Al-Zr-Sc Alloys. EUROMAT-2005, Prague, septembre 2005.

#### **Collaborations éventuelles**

- Rutgers University, USA, prof. A. Khachaturyan
- Penn State University, USA, prof. L.Q. Chen

## **Annexe E : Modélisation moléculaire : logiciels disponibles**

Liste des licences logicielles disponibles en octobre 2005, pour les stations de travail "O2" ou pour les PC sous Windows/Linux :

### **Accelrys**

(Expiration fin 2006)

- Catalyst 4.10 (Linux/IRIX).
- Cerius2 4.10 (IRIX)
- CNX 2005 (Linux/IRIX/IBM)
- Felix 2004 (Windows/IRIX). Sans changement depuis 2004.
- InsightII 2005 (IRIX)
- Material Studio Modeling 3.2 (Windows/Linux/IRIX)
- Discovery Studio 1.1 (Windows/Linux/IRIX)

Expiration des licences fin décembre 2006.

### **Tripes**

(Expiration fin 2006)

- Sybyl 7.1 (Linux/IRIX).
- Unity (Linux/IRIX)
- Bookshelf (Documentation en ligne). Sans changement depuis 2004.

### **Schrödinger**

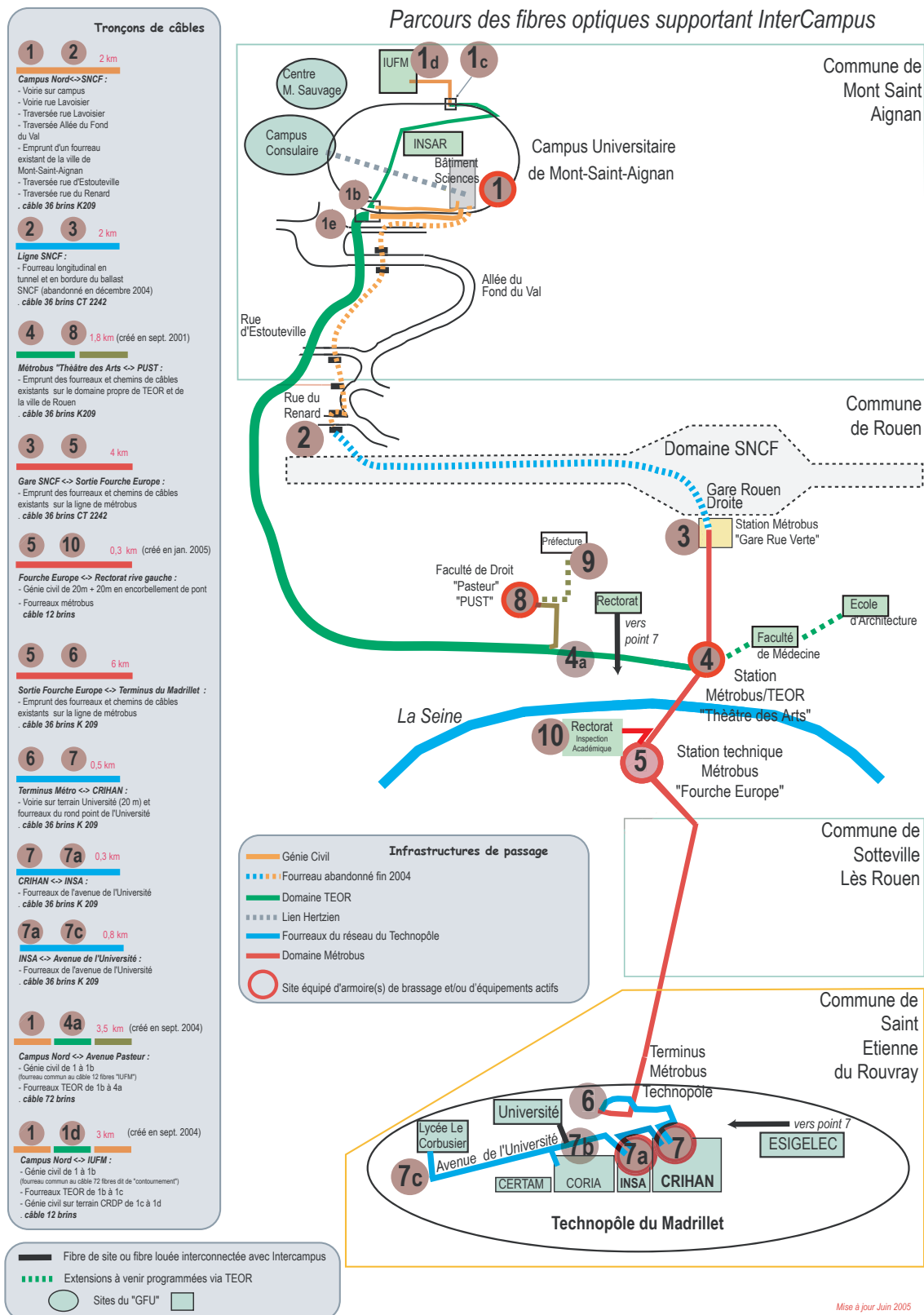
(Expiration mars 2008)

- Jaguar 6.0 (Linux/IRIX/IBM).
- Maestro (Linux/IRIX)

### **Gaussian**

- g98 (Unix)
- g03 (Unix)

## Annexe F : Réseau InterCampus en 2005



## Annexe G : Plaquette de présentation du service régional de visioconférence

REGION HAUTE-NORMANDIE

### Mutualisation des outils et des services sur SYRHANO

## service régional de visioconférence

Dans le cadre du réseau régional pour l'Enseignement et la Recherche SYRHANO, le CRIHAN et ses partenaires définissent **ensemble** des **services mutualisés** qu'ils proposent à leurs utilisateurs et personnels. Le **service de visioconférence régional**, ouvert depuis janvier 2005, permet à tout utilisateur de SYRHANO de réserver et de mettre en œuvre les ressources nécessaires à la réalisation d'audioconférences et de visioconférences multipoints via IP et RNIS. Les participants peuvent s'y connecter simplement, à l'aide d'un équipement spécialisé, un logiciel embarqué sur leur ordinateur ou en utilisant un téléphone conventionnel, GSM ou UMTS.

### Le pont multipoint H.320 et H.323

Le cœur du service de visioconférence repose sur un pont multipoint H.320 et H.323 et sur des équipements spéciaux de transcodage qui permettent, quel que soit le mode de raccordement des utilisateurs, la réalisation de visioconférences et d'audioconférences de grande qualité auxquelles peuvent participer jusqu'à environ 8 personnes.



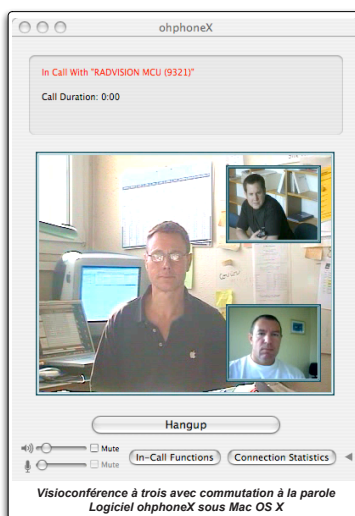
**Personnalisation** : chaque utilisateur peut bénéficier de paramétrages spécifiques à ses besoins : commutation de l'image à la voix ou mosaïque des participants (présence continue).

**Salles virtuelles** : plusieurs visioconférences peuvent se dérouler simultanément sans altération de la qualité des sessions. Chaque session peut être personnalisée et programmée à l'avance, voire même automatiquement reconduite régulièrement.

**Planification et réservation des ressources** : la réservation des ressources pour les visioconférences se fait via le courrier électronique en adressant un message à <mailto:visio-res@crihan.fr>.



**Assistance et mode d'emploi** : les services spécialisés des établissements d'enseignement et de recherche peuvent assister les utilisateurs. Un mode d'emploi est également consultable en ligne à l'URL : <http://www.crihan.fr/services/visioconference>. Enfin, l'équipe technique du CRIHAN est disponible pour des formations personnalisées, pour une assistance à l'utilisation du service et pour un rôle de régie lors des conférences (passage de la parole, ajout ou suppressions de participants, etc.).



### Contacts

**Réservations**  
[visio-res@crihan.fr](mailto:visio-res@crihan.fr)

**CORIA** (Service informatique)  
[Matthieu.Clavier@coria.fr](mailto:Matthieu.Clavier@coria.fr) - 02 32 95 36 31  
**INSA de Rouen** (SIR)  
[Philippe.Wender@insa-rouen.fr](mailto:Philippe.Wender@insa-rouen.fr) - 02 35 52 83 53  
**Université de Rouen** (CRI)  
[Cedric.Houssier@univ-rouen.fr](mailto:Cedric.Houssier@univ-rouen.fr) - 02 35 14 00 31  
**Université du Havre** (CRI)  
[Antoine.Cochet@univ-lehavre.fr](mailto:Antoine.Cochet@univ-lehavre.fr) - 02 32 74 42 51  
[Gregoire.VarinBreant@univ-lehavre.fr](mailto:Gregoire.VarinBreant@univ-lehavre.fr) - 02 32 74 49 64  
**CRIHAN** (équipe technique)  
[crihan-tech@crihan.fr](mailto:crihan-tech@crihan.fr) - 02 32 91 42 91



L'association CRIHAN a été créée fin 1991 à l'initiative du Conseil Régional de Haute-Normandie, pour aider les organismes publics et privés de la région à développer des activités d'enseignement, de recherche et de développement basées sur l'utilisation des nouvelles technologies de communication et sur l'informatique. Ses quatre thématiques sont les réseaux informatiques, le calcul scientifique, la formation et le support aux projets innovants. Pour tout renseignement complémentaire : <http://www.crihan.fr>.



Piloté par le CRIHAN dans le cadre du Contrat de Plan Etat-Région, le réseau régional Haut-Normand pour l'Education et la Recherche SYRHANO (Système Réseau de Haute-Normandie) irrigue depuis 1993 les principaux sites universitaires et les grandes écoles et depuis 1996 l'ensemble des établissements scolaires du second degré. SYRHANO constitue aujourd'hui l'épine dorsale de l'Internet non-marchand de notre région.

Version 1.0 - Septembre 2005

© CRIHAN 2005  
[mailto:info@crihan.fr](mailto:mailto:info@crihan.fr)





## Annexe H : Plaquette de présentation du service "CATA"

REGION HAUTE-NORMANDIE

### Mutualisation des outils et des services sur SYRHANO

# messaging fiabilisée & espace disque

<https://cata.crihan.fr>

Dans le cadre du réseau régional pour l'Enseignement et la Recherche SYRHANO, le CRIHAN et ses partenaires définissent **ensemble** des **services mutualisés** qu'ils proposent à leurs utilisateurs et personnels. Le premier d'entre eux est un **service de courrier électronique fiabilisé et d'espace de stockage, utilisables en tout lieu** : au travail, à son domicile ou à distance via Internet. **Les adresses électroniques des utilisateurs restent inchangées** et sont de la forme Prenom.Nom@etablissement.fr (coria.fr, univ-lehavre.fr, insa-rouen.fr, etc.). Chaque utilisateur peut s'enregistrer auprès de son établissement de tutelle pour bénéficier gratuitement de ces prestations.

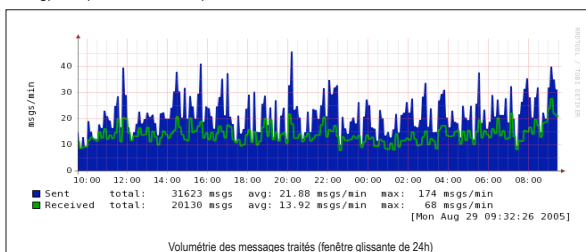
### Messagerie électronique

**Lutte anti-virus et anti-spam** : un serveur dédié traite chaque message entrant ou sortant pour stopper la propagation des virus et limiter les courriers indésirables. Pour une détection optimale, l'anti-virus libre clamav (<http://www.clamav.net> - l'un des plus efficaces) est utilisé. Sa base de signatures est mise à jour toutes les deux heures. Spamassassin (<http://spamassassin.apache.org>) est quant à lui utilisé pour réduire le niveau de spam.

**Personnalisation** : chaque établissement peut bénéficier de paramétrages spécifiques et par exemple spécifier ses propres seuils de caractérisation de spam.

**Chiffrement et authentification des échanges** : l'envoi et la réception des courriers sont chiffrés (TLS)

et requièrent une authentification de l'utilisateur (ces opérations sont transparentes si elles ont été correctement configurées dans le logiciel



de gestion des courriers électroniques). Grâce à cette authentification, le service est utilisable de manière sécurisée en tout point du globe au travers de l'Internet.

**Webmail** : pour ceux n'utilisant pas un ordinateur équipé d'un logiciel dédié de messagerie, le courrier est accessible via un navigateur web au travers d'un tunnel chiffré (<https://rackcata.crihan.fr>).

### Espace disque à distance

Chaque utilisateur possède un compte lui permettant de disposer d'un **vaste espace disque** qu'il peut utiliser comme espace de stockage et/ou pour partager ses données avec d'autres utilisateurs. Des espaces de travail peuvent également être créés à la demande, pour faciliter les échanges entre les participants à un même projet. Que ce soit à partir d'un PC sous Windows (SMB) ou d'un Macintosh sous Mac OS X (AFP, SMB), le serveur est accessible à haut débit grâce à une connexion en Gigabit Ethernet sur SYRHANO. Le transfert de fichiers via scp (secure copy) et sftp (secure ftp) est aussi possible.

### Environnement CRIHAN

**Alimentation électrique sécurisée** : les locaux techniques du CRIHAN sont supervisés 24h/24, 7j/7. Climatisés, ils

sont protégés par des onduleurs ainsi que par un groupe électrogène.

**Haute disponibilité des serveurs** : les machines sont également supervisées en permanence et un serveur de rechange est disponible à tout moment en cas de défaillance de l'un des composants du service.

### Contacts

**CORIA** (Service informatique)  
Matthieu.Clavier@coria.fr - 02 32 95 36 31  
**INSA de Rouen** (SIR)  
Philippe.Wender@insa-rouen.fr - 02 35 52 83 53  
**Université de Rouen** (CRI)  
cata@univ-rouen.fr - 02 35 14 61 00  
**Université du Havre** (CRI)  
Antoine.Cochet@univ-lehavre.fr - 02 32 74 42 51  
Daniel.Lebay@univ-lehavre.fr - 02 32 74 46 72  
**CRIHAN** (équipe technique)  
crihan-tech@crihan.fr - 02 32 91 42 91



L'association CRIHAN a été créée fin 1991 à l'initiative du Conseil Régional de Haute-Normandie, pour aider les organismes publics et privés de la région à développer des activités d'enseignement, de recherche et de développement basées sur l'utilisation des nouvelles technologies de communication et sur l'informatique. Ses quatre thématiques sont les réseaux informatiques, le calcul scientifique, la formation et le support aux projets innovants. Pour tout renseignement complémentaire : <http://www.crihan.fr>.



Piloté par le CRIHAN dans le cadre du Contrat de Plan Etat-Région, le réseau régional Haut-Normand pour l'Education et la Recherche SYRHANO (Système Réseau de Haute-Normandie) irrigue depuis 1993 les principaux sites universitaires et les grandes écoles et depuis 1996 l'ensemble des établissements scolaires du second degré. SYRHANO constitue aujourd'hui l'épine dorsale de l'Internet non-marchand de notre région.

Version 1.1 - Septembre 2005

© CRIHAN 2005

mailto:info@crihan.fr



Liberté • Égalité • Fraternité  
RÉPUBLIQUE FRANÇAISE

