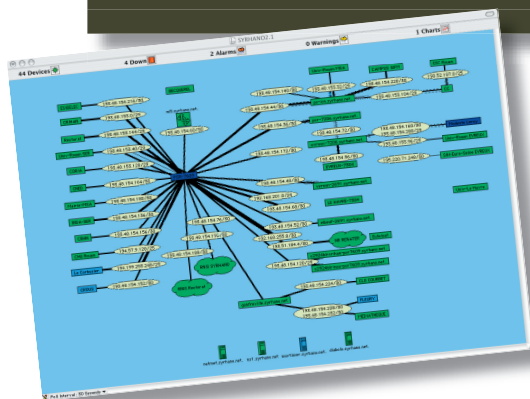
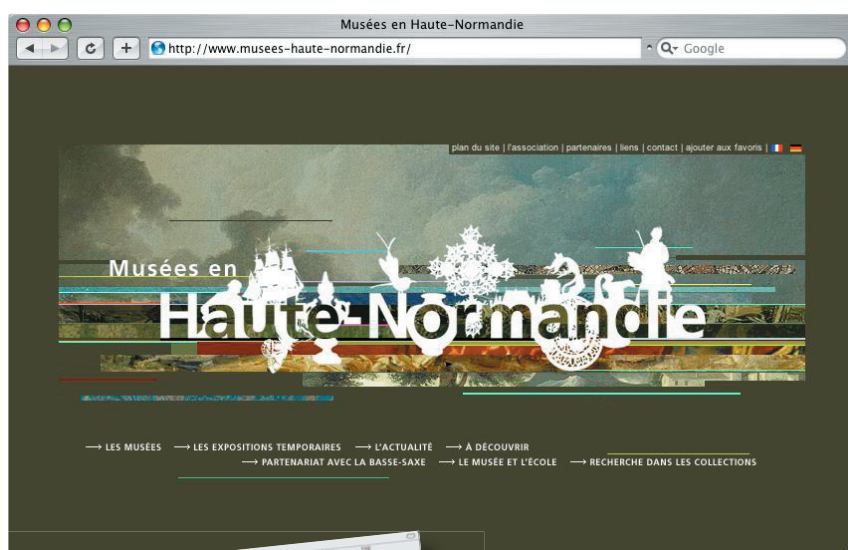




Rapport d'activités 2004



Panorama

L'année 2004 marque à nouveau des nouveautés significatives, que ce soit sur les thématiques fondamentales, que sont les domaines du calcul scientifique et des réseaux, que sur les activités induites représentées par le support aux projets innovants et la formation.

- Sur la thématique "calcul scientifique", le pôle de modélisation numérique continue sa progression, tant en niveau d'équipements qu'en variété d'utilisateurs :
 - La poursuite de la veille technologique avec une campagne d'évaluation des solutions du marché et la mise en place d'un nouveau cluster Apple en test,
 - Un supercalculateur exploité par plus de 100 utilisateurs représentant une quarantaine de laboratoires ou entreprises et affichant sur l'année quelques 336 000 heures-processeurs de fonctionnement,
 - De nouveaux projets d'industriels (Bassin d'Essais des Carènes, CNPP de Vernon, TRIBVN),
 - Une ouverture vers le monde des PME/PMI avec le démarrage d'une activité de service en modélisation adaptée à leurs besoins spécifiques,
- Sur la thématique "réseaux", plusieurs nouveautés :
 - Un nouveau point de présence du réseau SYRHANO à Gonfreville l'Orcher,
 - L'empreinte IPv6 sur l'ensemble du réseau (formations, diffusion sur la boucle optique de Gonfreville l'Orcher, participations aux groupes de travail dans ce domaine, projet interrégional Haute et Basse-Normandie ...),
 - Progression constante du raccordement des Lycées et Collèges. La collecte xDSL est passée de 130 établissements en 2003 à 190 aujourd'hui. Il faut y ajouter 17 raccordements par satellite. Le service RNIS étant maintenu pour les 102 sites encore non desservis par la technologie xDSL,
 - De nouveaux services communautaires sur SYRHANO avec une messagerie centralisée sécurisée, associée à de gros espaces de stockages, et, de façon imminente, un service de visioconférence de très bonne qualité,
 - Deux nouveaux chantiers autour du réseau rouennais InterCampus, avec l'arrivée de l'IUFM et celle de l'ESIGELEC désormais implantée sur le technopôle du Madrillet,
- Au niveau formation :
 - Deux formations sur le protocole réseau IPv6 ont été organisées, la première rassemblant six personnes concernées par le déploiement de services IPv6 sur le réseau optique de Gonfreville l'Orcher, la deuxième avec dix personnes des milieux universitaires de Caen, Rouen et le Havre,
 - Les personnels du CRIHAN participent cette année aux enseignements d'un nouveau Master mis en place par l'Université de Rouen dans le cadre de la réforme LMD,
 - de même qu'aux enseignements en réseau en quatrième année du département ASI de l'INSA de Rouen,
 - Trois formations de stagiaires, avec un élève ingénieur de l'EPSI pendant six mois, une élève ingénieur de l'INSA de Rouen durant trois mois et un BTS informatique de gestion durant deux mois,

- Côté projets innovants, la richesse et la variété ne sont pas en reste avec :
 - Une foison de nouveaux projets en matière de télé médecine,
 - La mise en œuvre du portail des musées de Haute-Normandie dont la gestion par le CRIHAN a permis l'embauche d'une personne à plein temps. Un sujet qui va générer dans les années à venir une importante activité de numérisation des fonds culturels régionaux,
 - L'accueil temporaire, dans les locaux du CRIHAN, d'une entreprise régionale innovante spécialisée dans l'imagerie spatiale,
 - L'association, au côté de la Région Haute-Normandie, dans un programme de mise en place de ressources pour les Espaces Publics Numériques,
 - Sans oublier les traditionnels "coups de main" aux différentes manifestations et associations régionales.

Table des matières

1	Pôle de modélisation numérique	6
1.1	Panorama sur le service rendu par le CRIHAN dans le cadre du pôle de modélisation numérique	7
1.2	Les évolutions du pôle de modélisation	8
1.2.1	Un complément de financement	8
1.2.2	Veille technologique	9
1.2.3	Tests et comparaisons des solutions de différents constructeurs	9
1.2.4	Une "cible" plus large	10
1.2.5	Des ressources humaines supplémentaires	11
1.2.6	Impact auprès des entreprises	11
1.3	Support aux PME-PMI	11
1.4	Réseau Normand en Modélisation Moléculaire	12
1.4.1	Etat des logiciels disponibles en 2004	12
1.4.2	Niveaux d'utilisation des logiciels du réseau	14
1.4.3	Niveaux d'utilisation des machines du réseau	16
1.4.4	Publications	18
1.4.5	Vie du réseau	18
1.4.5.1	Comité de pilotage	18
1.5	Le calcul scientifique	19
1.5.1	Les projets scientifiques en 2004	19
1.5.2	Les niveaux de consommation	25
1.5.2.1	Répartition thématique	25
1.5.2.2	Répartition géographique	25
1.5.2.3	Comptabilité mensuelle	26
1.5.3	Codes de calcul industriels	32
1.5.3.1	Bassin d'Essais des Carènes	32
1.5.3.2	TRIBVN	32
2	Le réseau régional SYRHANO	34
2.1	De nouveaux points d'accès au « backbone »	35
2.1.1	Un PoP SYRHANO à Gonfreville l'Orcher	35
2.1.1.1	Contexte	35
2.1.1.2	Mise en œuvre	35
2.1.1.3	Expérimentations technologiques avancées et nouveaux usages	37
2.1.1.4	Formation associée	37
2.2	SYRHANO et les stratégies des collectivités locales	37
2.3	De nouveaux services sur SYRHANO	38
2.3.1	Un « pont » de visioconférence	38
2.3.1.1	Description technique	38
2.3.2	Un service communautaire d'urgence	40
2.3.2.1	Courrier électronique fiabilisé	40
2.3.2.2	Un espace disque à distance	40
2.3.2.3	Environnement technique	40
2.3.2.4	Utilisateurs	41
2.4	De nouvelles extensions sur InterCampus	41
3	Formations Enseignements	42
3.1	Formations IPv6	43
3.2	Participation au Master SSSI de l'Université de Rouen	43
3.3	Participation aux enseignements réseau de ASI4 pour l'INSA de Rouen	43
3.4	Formation au calcul parallèle	43
3.5	Stagiaires encadrés au CRIHAN	44

4	Activités de support aux projets innovants	45
4.1	Un portail des musées en Haute-Normandie	46
4.1.1	La genèse	46
4.1.2	La portée du projet.....	46
4.1.3	Partenaires et prestataires	46
4.1.4	Constitution des comités et réunions.....	47
4.1.4.1	Comité de pilotage pour le plan de numérisation.....	47
4.1.4.2	Comité éditorial	48
4.1.5	Avancement du portail	48
4.2	Télémédecine.....	53
4.2.1	Plateforme ADICAP	53
4.2.2	Dossier médical partagé	54
4.2.3	Serveur d'identités patients.....	54
4.2.4	SOPHIE.....	54
4.2.5	Plan cancer	54
4.2.6	Compte-rendu assisté par ordinateur, en ligne.....	55
4.2.6.1	Outil de standardisation.....	55
4.2.6.2	Le principe	56
4.2.6.3	Le fonctionnement.....	56
4.2.7	Images "grands champs" en pathologie	57
4.2.8	Projet Techno-Vision/Messidor	57
4.2.8.1	Objectifs visés	58
4.2.8.2	Résultats attendus.....	59
4.2.8.3	Rôle du CRIHAN	59
4.3	Accueil de structures innovantes	60
4.3.1	Science-Action Haute-Normandie.....	60
4.3.2	GeosTech.....	60
4.4	Les "coups de main".....	61
4.4.1	Science en Fête	61
4.4.2	Forum des métiers	61
4.4.3	EPN	61
5	A N N E X E S.....	62
Annexe A -	Publications des utilisateurs du pôle de modélisation numérique.....	63
Annexe B -	Compte-rendu du comité de pilotage RNMM du 13 mai 2004.....	91
Annexe C -	Comptabilité mensuelle des projets scientifiques sur le cluster IBM.....	94
Annexe D -	Service aux PME-PMI.....	107
Annexe E -	Services mutualisés sur SYRHANO	108
Annexe F -	Cahier des charges "Pont de visioconférences".....	109
Annexe G -	Tracé de l'infrastructure InterCampus en 2004	116
Annexe H -	Présentation aux CESRx, Caen, septembre 2004	117
Annexe I -	Schéma de principe "CRAO"	122
Annexe J -	Autres publications du CRIHAN.....	123

1 Pôle de modélisation numérique

1.1 Panorama sur le service rendu par le CRIHAN dans le cadre du pôle de modélisation numérique

Une composante importante du développement de la recherche scientifique dans la région Haute Normandie est liée à la modélisation numérique des phénomènes physiques. Au-delà des activités de recherche dans les domaines de l'informatique, tous les laboratoires ont maintenant développé une activité importante de simulation numérique. Les disciplines concernées initialement étaient essentiellement les sciences pour l'ingénieur (mécanique et énergétique). Néanmoins, les investissements faits autour du CRIHAN depuis le début des années 90 ont permis d'ouvrir de nouveaux champs disciplinaires comme la modélisation moléculaire pour la chimie et la biologie, la bioinformatique ou même l'intelligence artificielle et les systèmes d'information. Les principaux laboratoires de la région actifs dans ces domaines sont les laboratoires de :

- Mécanique (Université du Havre, INSA de Rouen),
- Enseignement (Université et INSA de Rouen),
- Physique des Matériaux (Université de Rouen),
- Chimie fine et organique (IRCOF - Université et INSA de Rouen),
- Biologie (Université de Rouen),
- Mathématiques et Informatique (Universités de Rouen et du Havre, INSA de Rouen),
- Génie Electrique (Université du Havre),
- Acoustique (Université du Havre),
- Synthèse des polymères (INSA de Rouen).

Au-delà du support des laboratoires régionaux, la mise en place de moyens informatiques puissants au CRIHAN a permis également de lui donner un rôle central dans le pôle interrégional de modélisation numérique, qui dessert les huit régions faisant partie du Grand Bassin Parisien. Dans le cadre de ce pôle, il convient alors d'ajouter des laboratoires de :

- Chimie organique (Université de Reims),
- Chimie – Physique des matériaux (Université de Caen),
- Informatique (Université d'Orléans),
- Milieux réactifs (Université d'Orléans),
- Informatique (Université de Technologie de Compiègne),
- Mécanique (Université de Technologie de Compiègne),
- Chimie-Biologie (Université d'Angers),
- Mécanique (Université de Lille),
- Hydrodynamique (Université et Ecole Centrale de Nantes),
- ainsi que des collaborations pour les laboratoires régionaux avec d'autres laboratoires à Marseille, Toulouse, Montpellier, Sophia-Antipolis, Manchester, Novossibirsk, Palo-Alto, etc....

Par ailleurs, la disponibilité des moyens de calcul, associée à une équipe technique de support de haut niveau, a également permis la participation à deux projets européens autour du calcul distribué (METODIS dans ESPRIT, et DAMIEN dans le 5ème PCRD-IST). Le

CRIHAN a également bénéficié d'un cofinancement en 2002 du Ministère de la Recherche, dans le cadre de la mise en place du réseau des centres de calcul régionaux (Mésocentres). La Haute-Normandie est ainsi identifiée comme l'une des toutes premières régions en France pour les moyens informatiques à la disposition de la recherche publique, immédiatement après les centres nationaux (IDRIS pour le CNRS, CINES pour l'enseignement supérieur et TERA pour le CEA). Ces moyens de calculs ont également permis, à partir de 1997, une collaboration pluriannuelle avec le groupe SNECMA-Moteurs. Un second partenariat est actuellement en cours de développement avec le Bassin d'Essais des Carènes (DGA/DCN). De son côté, le CNPP de Vernon utilise ces moyens pour des simulations d'impact de feux.

Enfin, une activité en cours de développement, qui est en discussion dans le cadre de la révision du CPER en cours, vise à rendre accessible aux PMI/PME, ces moyens de calcul assorti d'un accompagnement technique liés aux logiciels « métiers » qui leur sont nécessaires. Cet accompagnement consiste essentiellement en une assistance pour analyser et formaliser un problème ainsi que la mise en adéquation avec une palette de logiciels adaptés. Ces moyens de calcul entreront pleinement dans une action nouvelle de globalisation des ressources informatiques régionales, qui sera poursuivie de concert avec le développement du réseau informatique régional SYRHANO, avec pour objectif de mutualiser via une infrastructure commune toutes les ressources de calcul et de stockage disponibles (Grille de calcul et de données). Cette action de déploiement d'une grille de calcul complètera les initiatives nationales et européennes (GRIF, e-Toile, etc....).

1.2 Les évolutions du pôle de modélisation

1.2.1 Un complément de financement

Les financements des puissants moyens de calcul concentrés au CRIHAN pour la communauté scientifique ont eu pour origine, tout d'abord des fonds Région et Etat dans le cadre du Contrat de Plan du Bassin Parisien, abondés par des fonds de la Communauté européenne, puis, par tranches pluriannuelles, le CPER 2000-2006.

Fin 2003, une demande de financement de fonds FEDER a été déposée et acceptée en avril 2004. Elle s'inscrit dans le Complément de programmation Objectif 2- Mesure 4, pour le renforcement de la mise en place de grands équipements de recherche.

Cette demande a pour objet de compléter l'équipement en place (processeurs supplémentaires, mémoire vive, maintien en configuration opérationnelle, licences logicielles). La configuration actuelle comporte deux nœuds de 32 processeurs, auxquels sont associés 1 Go de mémoire par processeur. Il est prévu de rajouter un ou deux nœuds supplémentaires pour amener la puissance de la machine près du seuil du Teraflop/s. Par ailleurs, les logiciels de modélisation (en particulier pour la modélisation moléculaire et les outils « métiers » à usage du support technologique pour les PMI-PME) sont des produits sous licences, lesquelles doivent être mises à jour tous les ans.

1.2.2 Veille technologique

Afin de préparer une consultation pour l'acquisition d'un complément d'équipements, des contacts ont été pris avec les constructeurs pour tester les solutions proposées.

D'autre part, la société Apple France nous a proposé le prêt d'un cluster expérimental composé de cinq nœuds bi-processeurs et d'une station frontale.

1.2.3 Tests et comparaisons des solutions de différents constructeurs

La suite de tests, dite "benchmark", consiste en la comparaison des performances des solutions proposées par les constructeurs à l'aide de codes de calculs développés pour certains par le service scientifique du CRIHAN. Ces codes ont jusqu'ici été testés sur les architectures proposées par APPLE, BULL, CRAY, HP, IBM, NEC et SGI.

- Apple : cluster de 5 nœuds Xserve bi-processeur, processeur PPC 970 2GHz (8.0GFlops crête) - 2Go RAM par nœud,
- BULL : NovaScale 5160 SMP 16 processeurs (4 QBB), processeur Itanium2 1.3GHz(3Mo L3) (5.2GFlops crête) - 4Go par processeur,
- Cray : Cray XD1, nœud SMP NUMA à base de processeurs AMD Opteron 2.4 GHz,
- HP : cluster de 4 nœuds DL585 quadri-processeur, processeur AMD Opteron 2.2GHz (4.4GFlops crête) - 2x4Go RAM par nœud,
- IBM : p690 SMP 32 processeurs, processeur Power4 1.3GHz (5.2GFlops crête) - 1Go par processeur,
- NEC : cluster de nœuds quadri processeurs Opteron 2.2 GHz,
- SGI : configuration non précisée.

Six applications ont été proposées à ces constructeurs :

- Application 1 : DNS

Il s'agit d'un code séquentiel, écrit en Fortran 77, vectorisable, concernant la mécanique des fluides. Elle touche à la résolution des équations de Navier Stokes compressibles avec des approximations de Pade (précision spectrale) en espace dans un domaine 3D.

L'intégration temporelle est explicite, ainsi il n'y a pas de système linéaire à résoudre. Trois différents maillages sont considérés (33^3 , 65^3 et 129^3 points). Le cœur des algorithmes peut être vectorisé. Nous utilisons ce code pour tester la capacité de la plate forme à exploiter ce potentiel afin de remplir les files des FPU.

- Application 2 : F90

Il s'agit d'un code Fortran 90 séquentiel qui utilise explicitement des algorithmes classiques issus de BLAS (saxpy, multiplication matricielle) afin de comparer entre elles, les fonctions intrinsèques Fortran90 et les versions faites "à la main". Nous comparons les performances pour 3 tailles de tableaux, de telle sorte que les données soient présentes à différents endroits de la hiérarchie mémoire.

- Application 3 : SSF

Il s'agit d'une application MPI / Fortran90. Ce code modélise la propagation d'un soliton dans une fibre optique avec l'équation 1D de Schroedinger non linéaire. Ces algorithmes utilisent de manière intensive des transformées de Fourier (FFT) 1D assez grosses. Ces FFT sont implémentées comme des FFT 2D pour la parallélisation, de manière à tester différents schémas de communication de type ALL to ALL. La FFT employée est générique (Numerical recipes) afin d'avoir la même sur les différentes plates formes.

- Application 4 : OMP

Il s'agit d'une application OpenMP / Fortran90. Ce code modélise la croissance d'agrégats de Palladium sur surface graphite. Les équations de Newton pour un ensemble d'atomes et les potentiels d'interaction (TB-SMA) sont employés dans cette application. Le volume de calcul augmente exponentiellement avec le nombre d'atomes. Ainsi le nombre de threads OpenMP est géré dynamiquement en fonction du nombre d'atomes. Pratiquement tout le code est parallélisé. Comme OpenMP nécessite des machines à mémoire partagée (SMP), tous les constructeurs n'ont pu réaliser l'ensemble des exécutions.

- Application 5 : P3D

Cette application écrite en Fortran90 possède des versions séquentielles, OpenMP et MPI.

Elle résout l'équation de Poisson en utilisant Gauss-Seidel sur le domaine $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ par une méthode aux différences finies avec jacobi comme solveur pour le système linéaire.

Cette application permet de tester les plates formes proposées pour les trois situations suivantes :

- toute la mémoire d'un nœud pour le test séquentiel
- toute la mémoire et tous les processeurs d'un nœud pour le test OpenMP
- toute la mémoire et tous les processeurs de tout le cluster pour le test MPI.

La comparaison des résultats obtenus n'est pas directe en raison de l'hétérogénéité des plates formes évaluées. On s'intéresse aux performances par processus.

- Application 6 : PC3D

C'est une application MPI / Fortran90 particulière. Ce code est séquentiel mais MPI est employé pour lancer plusieurs instances identiques simultanément afin d'examiner les dégradations de performances en augmentant le nombre de processeurs employés. Ce test est réalisé au sein d'un seul nœud. L'algorithme séquentiel résout l'équation de la chaleur en 3D avec un schéma d'avancement en temps implicite qui nécessite la résolution d'un système linéaire à chaque pas de temps par le gradient conjugué.

1.2.4 Une "cible" plus large

Le service profite en priorité aux laboratoires de recherche publique de la région Haute-Normandie, mais il déborde en direction des régions voisines et conforte également l'effort de transfert de technologie des laboratoires publics vers le tissu industriel.

Le renforcement des moyens de calcul permettra également l'intensification du transfert de technologies à destination des grands groupes industriels comme des petites structures (les équipementiers automobiles sont par exemple une cible prioritaire pour l'activité de transfert technologique).

1.2.5 Des ressources humaines supplémentaires

Autour de ces moyens de calcul, le CRIHAN pérennise plusieurs emplois qui sont associés à leur exploitation (2 personnes) ainsi qu'au support et à l'assistance des utilisateurs (1 personne). Par ailleurs l'activité de transfert technologique va permettre la mise en place d'une équipe de 1 à 3 personnes pour assurer le dialogue et les missions d'expertise auprès des industriels (PMI-PME).

1.2.6 Impact auprès des entreprises

Les moyens de calcul mis en place au CRIHAN ont un effet majeur sur le développement des NTIC au sein des entreprises. Ils permettent la virtualisation des bureaux d'étude et des gains très importants au niveau de la conception et du développement des nouveaux produits. Par ailleurs, ils renforcent les possibilités d'échange et de partage entre les entreprises. L'illustration la plus courante est par exemple les maquettes numériques dans l'industrie automobile qui sont le principal outil de dialogue entre un constructeur et ses sous-traitants. Un autre exemple serait l'économie faite par l'utilisation d'une simulation numérique en remplacement d'une approche expérimentale comme pour la combustion dans un moteur automobile. Un dernier exemple est la possibilité de concevoir et manipuler des éléments physiques hors d'échelle pour un travail expérimental (une molécule par exemple).

1.3 Support aux PME-PMI

Comme il a été indiqué ci-dessus, le CRIHAN envisage la création d'un service d'accès à ses moyens de calcul aux PMI/PME et d'accompagnement technique liés aux logiciels «métiers» qui sont les leurs ou dont ils manifestent le besoin. Assistance à l'analyse et à la formalisation d'un problème, mise en adéquation avec une palette de logiciels adaptés en constituent l'essentiel.

Après avoir travaillé avec des partenaires comme l'ANVAR, l'Université de Rouen, le CRITT Analyses & Surfaces, les CCI de Rouen et de Fécamp, la DRIRE, le réseau HNT, le CRIHAN a pu commencer à prendre des contacts directs avec quelques entreprises. Cette démarche, initiée au début de l'automne, a produit déjà deux échanges constructifs qui ont permis de commencer à appréhender la problématique "métier" à laquelle les ingénieurs du CRIHAN auront à se confronter dans le cadre de cette prestation. Des contacts sont en cours avec deux éditeurs de logiciels consacrés à la modélisation des phénomènes de coulée en fonderie.

On retrouvera en Annexe D - , page 107, la plaquette réalisée pour la promotion de ce service. Elle a été distribuée à tous nos partenaires mais également diffusée dans le cadre de manifestations auxquelles le CRIHAN est amené à participer, le plus souvent à l'initiative de l'Association du Technopôle du Madrillet, comme la Convention Moteur, les Rencontres Technologiques du Madrillet ou encore le Forum de l'Innovation.

1.4 Réseau Normand en Modélisation Moléculaire

1.4.1 Etat des logiciels disponibles en 2004

Logiciels disponibles pour les stations de travail "O2" des laboratoires ou les PC sous Windows/Linux :

Accelrys

Licences disponibles jusqu'au 30 mars 2005 : Catalyst 4.9 (Linux/IRIX) Cerius2 4.9 (IRIX) CNX 2002 (Linux/IRIX/IBM) Felix 2002 (Windows/IRIX) InsightII 2000.1 (IRIX) Material Studio Modeling 3.0 (Windows/Linux/IRIX) Discovery Studio 1.1 (Windows/Linux/IRIX)	août 2004 : signature d'un nouveau contrat avec Accelrys avec suppression de quelques modules non utilisés : Suppressions : <ul style="list-style-type: none"> - Search Compare - De Cipher - Homology - C2 DB Access - C2 MFA - C2 MMFF - C2 Receptor - C2 Blends - C2 Polymer Properties - C2 Amorphous Builder - C2 Synthia - C2 RMMC 	Ajouts : <ul style="list-style-type: none"> - DS Mod Visualizer - DS Mod Biopolymer - DS Mod CHARMM lite - DS Mod Delphi - DS Mod Modeler - DS Mod Protein Families - DS Mod Protein Health - DS Mod CHARMM - DS Mod CNX Xray - DS Mod LigandFit - DS Mod LigandScore - MS QSAR - MS Discover - MS Forcite - Delphi
Récapitulatif global des modules : Cerius2 : C2 Alignment C2 Conformers C2 Crystal Builder C2 Descriptor + C2 Diffraction-Crystal C2 Discover C2 Dynamics C2 Force Field Editor C2 Gaussian Interface C2 HP Morphology C2 Interface Builder C2 LigandFit C2 Mechanical Properties C2 Minimizer C2 MOPAC Interface C2 Morphology C2 Open Force Field C2 Polymer Builder C2 Powder Indexing	Catalyst : Catalyst Compare Catalyst Confirm Catalyst DB Server Catalyst HipHop Catalyst HypoGen Catalyst Info Catalyst Shape Catalyst Visualizer CHARMM CNX Delphi Discover LS Discovery Studio (PC) : DS Modeling Biopolymer DS Modeling CHARMM DS Modeling CHARMM Lite DS Modeling CNX X-ray DS Modeling DELPHI DS Modeling LigandFit DS Modeling LigandScore	Felix Analytical Felix Model Felix-Assign Felix-Autoscreen Felix-ND Insight II Modeler Material Studio (PC) : MS Compass MS Discover MS Forcite MS QSAR MS Reflex MS Reflex Plus MS VAMP MS VAMP interface MS Visualizer NMR X PLOR Profiles 3D Sketcher Binding Site Analysis

C2 QSAR + C2 SBF C2 Sorption C2 Surface Builder C2 Visualizer	DS Modeling MODELER DS Modeling Protein Families DS Modeling Protein Health DS Modeling Visualizer	Biopolymer
---	---	------------

Tripes

Sybyl 6.9.1 (Linux/IRIX) Unity 4.4.1 (Linux/IRIX) Bookshelf 6.9.1 (Documentation en ligne)	Expiration des licences au 30 novembre 2004. Négociations en cours pour les mêmes modules que les années précédentes plus les modules Concord sketch, FlexX et CSCore.
---	---

Schrödinger

Jaguar 5.0 (Linux/IRIX) (Aussi disponible pour IBM) Maestro (Linux/IRIX)	Maintenance expirée : les versions plus récentes ne sont donc plus disponibles. Jaguar 5.0 reste utilisable. Achat de la maintenance en cours.
---	---

Gaussian

g98 (Unix)	Achat en cours de G03. G98 reste utilisable. NB : Certains utilisateurs font de Gaussian un usage intensif : dans ce cas, ils possèdent leur propre licence ou bien utilisent celle d'un laboratoire partenaire pour un projet donné. L'achat de licence par le CRIHAN reste néanmoins nécessaire (même si ce produit n'est pas en haut de la liste des priorités) pour les utilisateurs occasionnels mais également pour servir dans la panoplie des outils consacrés au calcul scientifique qui l'utilise également.
-------------------	---

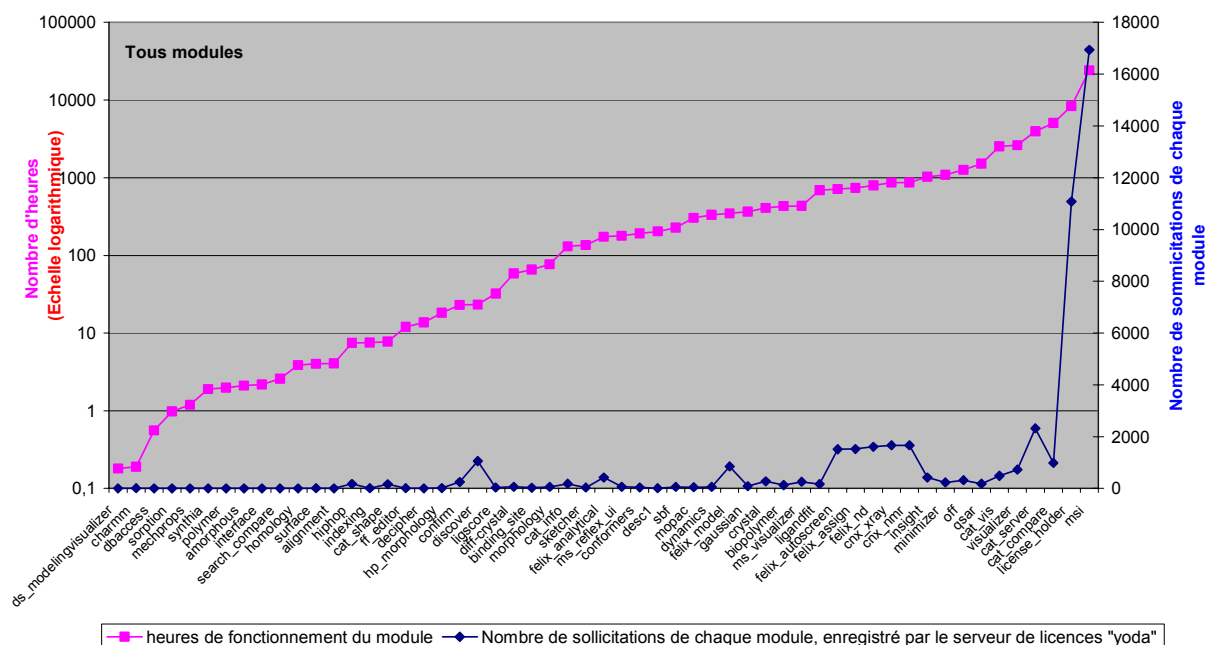
Logiciels libres

Divers logiciels du domaine public ont été installés sur les stations clientes, à la demande des utilisateurs (CNS, RMNPipe, NMRView, Sparky...)

1.4.2 Niveaux d'utilisation des logiciels du réseau

Tous les logiciels n'autorisent pas une comptabilité "fine" de leur utilisation par l'ensemble des membres du réseau : les graphiques ci-après concernent exclusivement ceux de la famille Accelrys.

Réseau Normand de Modélisation Moléculaire :
Utilisation des modules "Accelrys" par l'ensemble des utilisateurs
(période octobre 2003 à Octobre 2004)



Le premier graphique 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. Certes, comme il est indiqué plus haut, il existe davantage de modules disponibles que ceux représentés ici, mais cela s'explique par le fait que les modules souhaités par les utilisateurs sont négociés dans le cadre de "packages" complets.

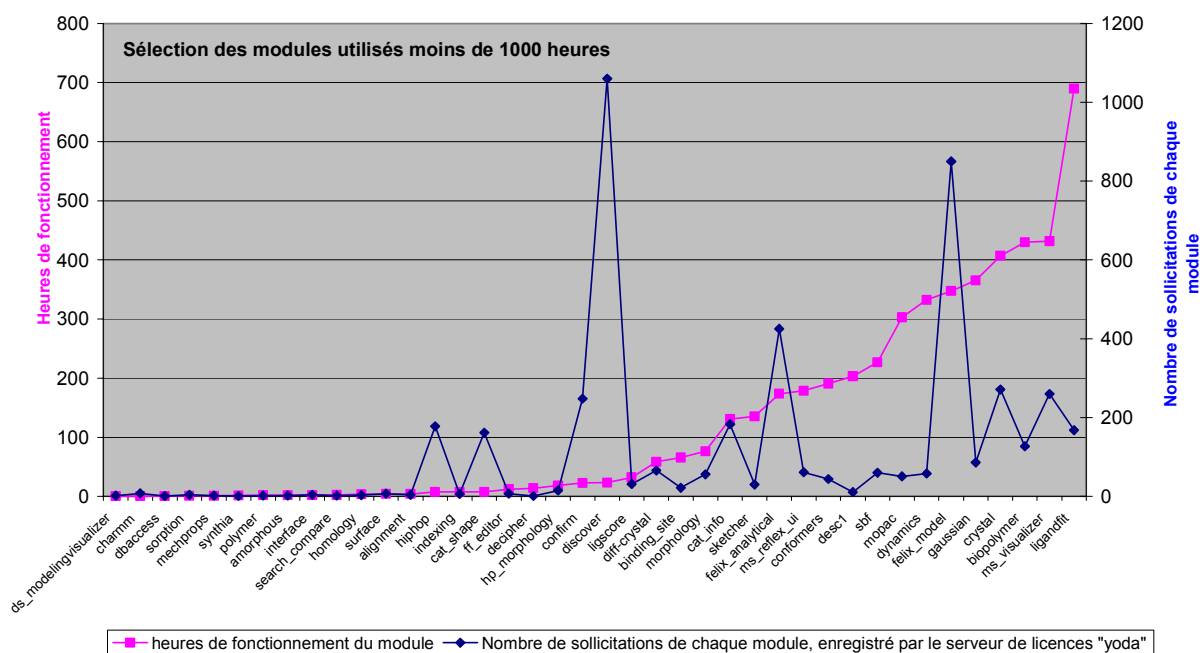
La courbe mauve indique le nombre d'heures de fonctionnement de chaque module. En raison de la prééminence de deux ou trois modules qui sont systématiquement actifs en "amont" des autres, la courbe suit une échelle logarithmique (celle de gauche sur le graphique).

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.

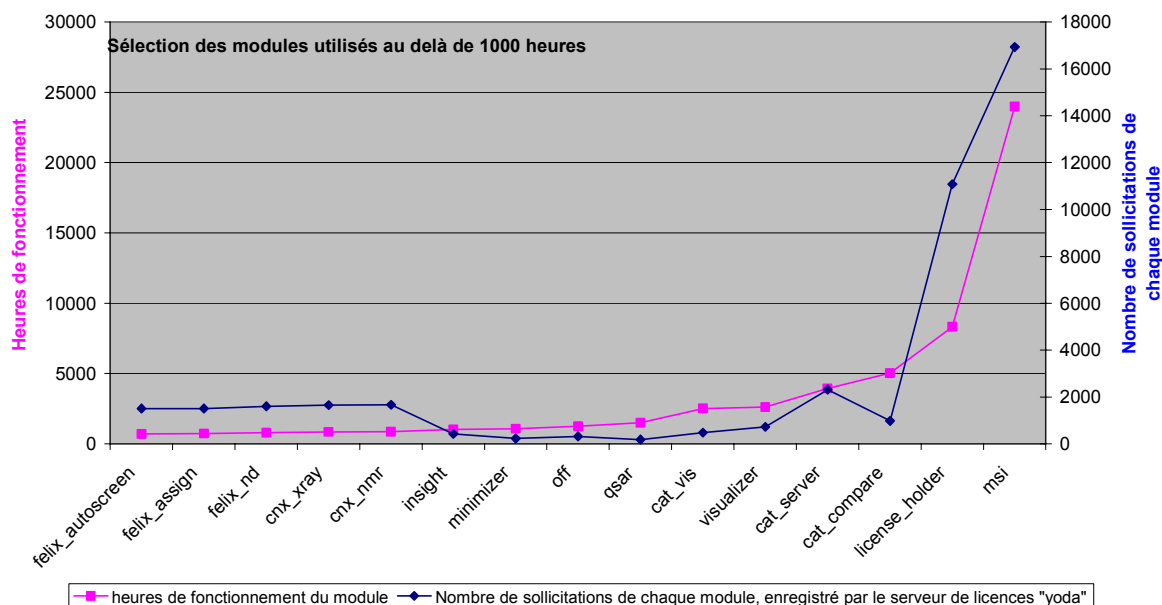
Pour une meilleure représentation visuelle du graphique précédent, on l'a re-découpé en deux groupes ci-après et en n'utilisant pas d'échelle logarithmique.

- Le premier concerne les modules ayant fonctionné moins de 1000 heures.
- Le deuxième, les modules ayant fonctionné de 1000 à 17000 heures.

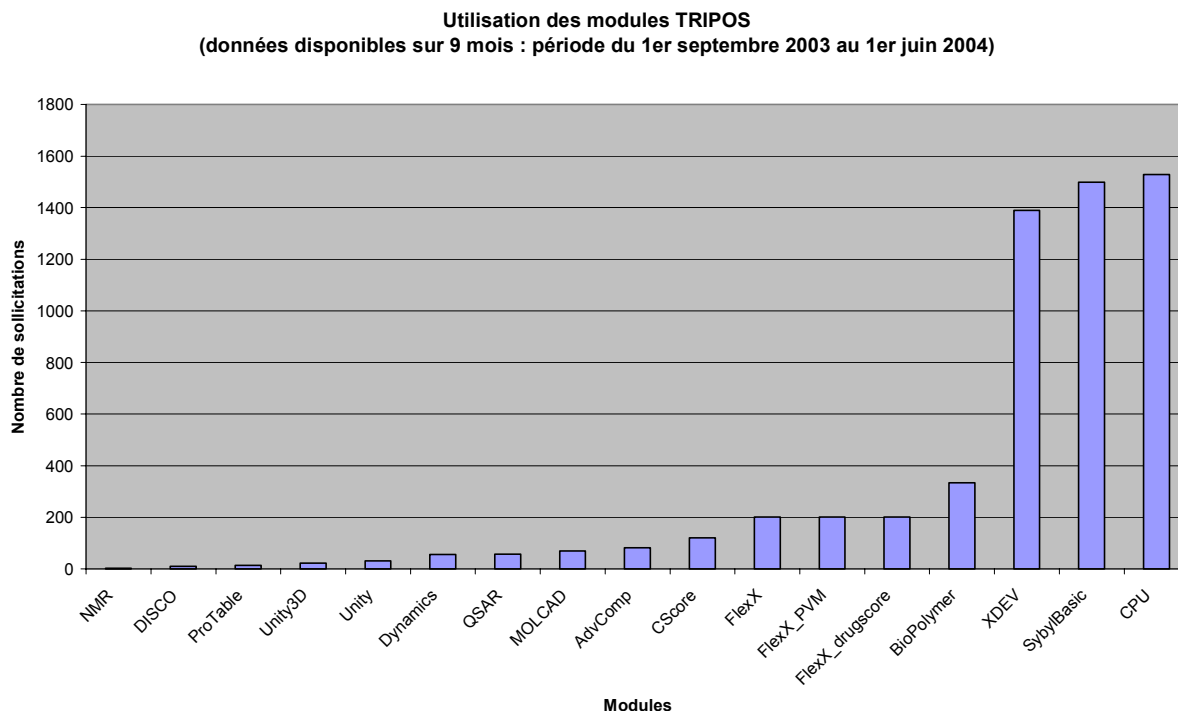
Réseau Normand de Modélisation Moléculaire :
Utilisation des modules "Accelrys" par l'ensemble des utilisateurs
(période octobre 2003 à Octobre 2004)



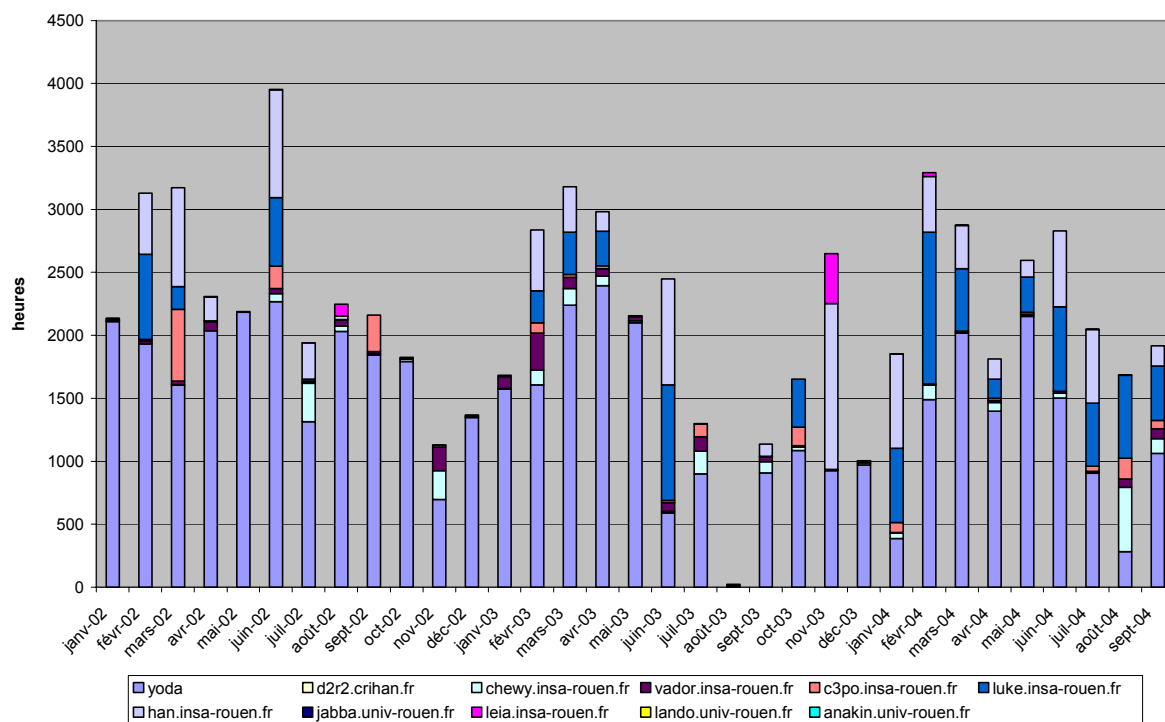
Réseau Normand de Modélisation Moléculaire :
Utilisation des modules "Accelrys" par l'ensemble des utilisateurs
(période octobre 2003 à Octobre 2004)



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.

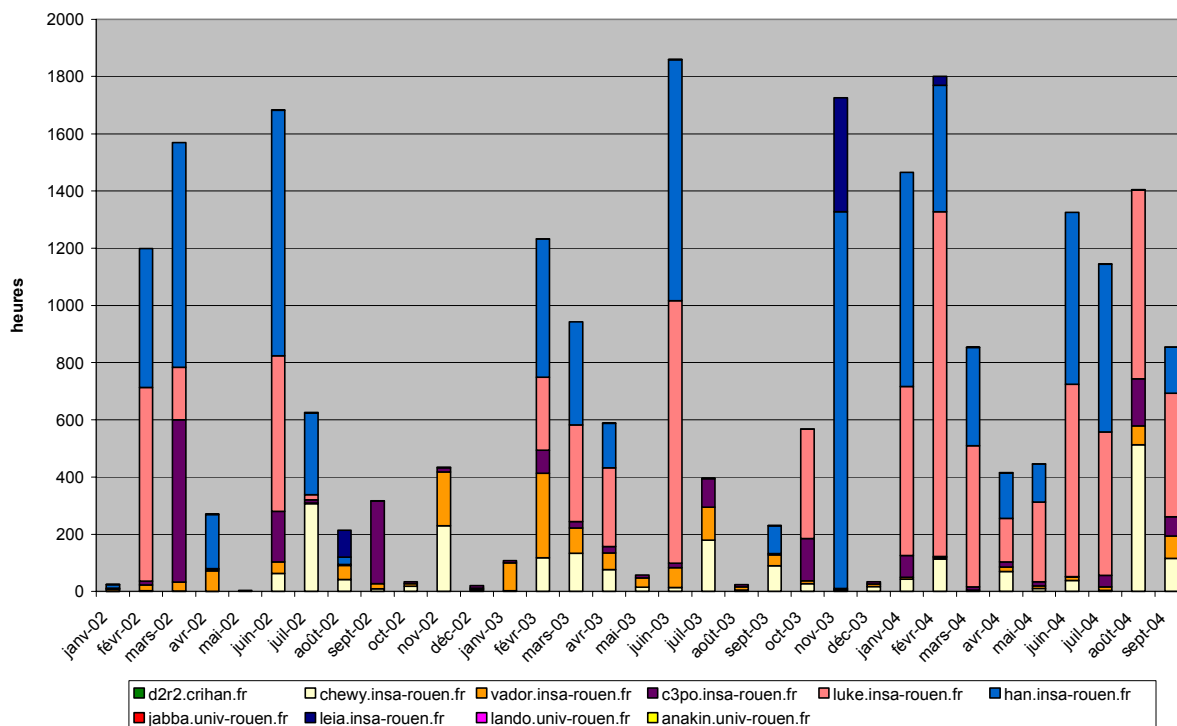


1.4.3 Niveaux d'utilisation des machines du réseau

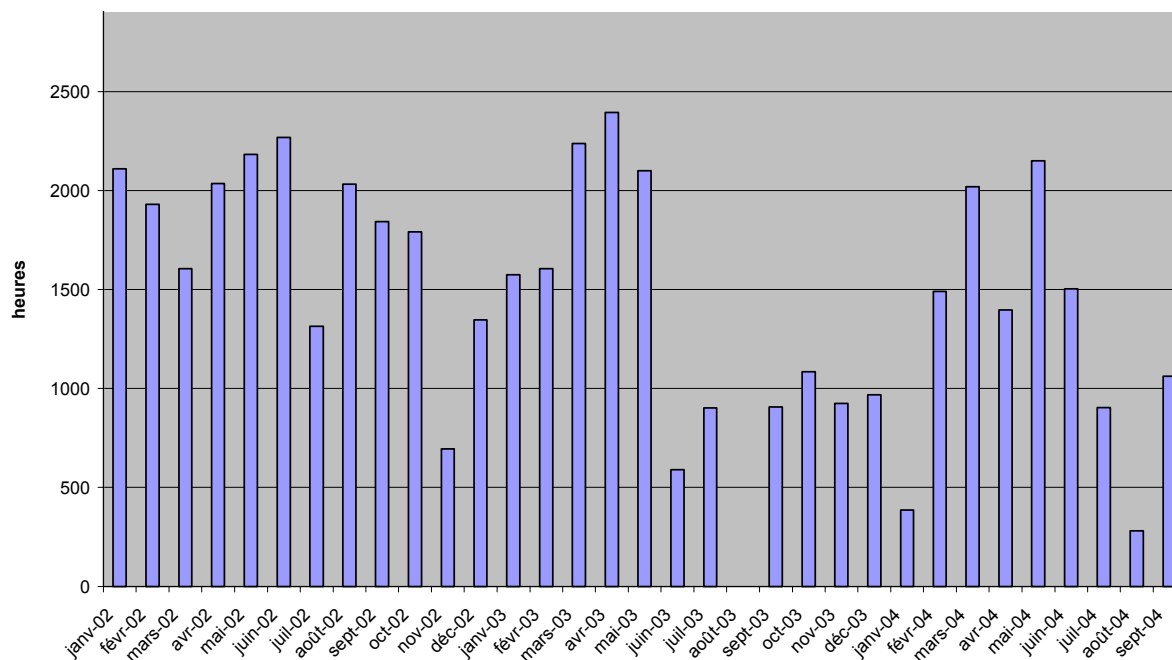


Le graphique précédent représente les temps de calcul de chaque machine utilisateur (quand la collecte de ces données est possible), "empilés" sur les temps de calcul du serveur "yoda" (en bleu clair à partir de la base du graphique).

Là encore, le graphique étant peu lisible dans le détail, il est repris en deux fois ci-après, en séparant les données du serveur "yoda", de celles des machines clientes :



Heures de fonctionnement des machines clientes



Heures de fonctionnement du serveur "yoda"

1.4.4 Publications

Les publications effectuées par les différents laboratoires sont regroupées, dans ce rapport, avec l'ensemble des publications issues de l'utilisation des ressources en calcul consacrées au pôle de modélisation numérique.

On les consultera en Annexe A - , page 63, "Publications des utilisateurs du pôle de modélisation numérique".

1.4.5 Vie du réseau

1.4.5.1 Comité de pilotage

Une réunion du comité de pilotage a été organisée au CRIHAN le 13 mai 2004.

Le compte rendu de ce comité est consultable en Annexe B - , page 91, "Compte-rendu du comité de pilotage RNMM du 13 mai 2004".

L'après-midi de ce 13 mai a été consacrée à un échange avec deux scientifiques de la société Accelrys invité par le CRIHAN à débattre autour des modules proposés par Accelrys et à évaluer les besoins des chercheurs Normands. L'objectif était de faire connaître les modules déjà mis à disposition par le CRIHAN dans le cadre d'une discussion non commerciale.

Une rencontre similaire sera organisée avec Tripos sur l'année 2005.

1.5 Le calcul scientifique

1.5.1 Les projets scientifiques en 2004

Le tableau suivant reprend l'exhaustivité de tous les projets actifs en octobre 2004 :

Domaine général	Laboratoire	Affiliation / Adresse	N° Dossier	Titre du projet	Nb de comptes utilisateurs	Heures attribuées	Heures consommées à ce jour
Industriel	Hispano-Suiza	Le Havre	1997002	Calculs aérodynamiques	1	10	729
Industriel	Bassin d'Essais des Carènes	Val de Reuil	1997017	Optimisation du code Icare	2	100	714
Mathématiques appliquées	Laboratoire de Mathématiques	INSA de Rouen	1998007	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique.	4	4500	5329
Mathématiques appliquées	LMI	INSA de Rouen	1998008	Calcul numérique des zéros de polynômes ou fonction analytique sur machine parallèle.	1	200	629
Mécanique des fluides	LMFN (Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques)	UMR 6614 CORIA INSA	1998022	Écoulements turbulents compressibles.	9	60000	73138
Chimie	IRCOF	Mt St Aignan	1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	5	12000	17146
Mathématiques appliquées	Laboratoire de Mathématiques de l'INSA	INSA de Rouen	1998042	Modélisation et optimisation des systèmes d'ingénierie.	2	3000	242
Mécanique des fluides	CORIA/LMFN	UMR 6614 CNRS Université & INSA de Rouen	1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent.	2	40000	53121

Domaine général	Laboratoire	Affiliation / Adresse	N° Dossier	Titre du projet	Nb de comptes utilisateurs	Heures attribuées	Heures consommées à ce jour
Chimie	Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire	FRE 2718 CNRS Univ. Paris V Fac. de Médecine PARIS	1998053	Étude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique moléculaire.	1	10000	5894
Physique des matériaux	Groupe de Physique des Matériaux	UMR 6634 CNRS St Et du ROUVRAY	1999006	Étude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires NiAlV.	6	6000	5847
Chimie	GSMA UMR CNRS 6089	Équipe de Chimie Théorique UFR Sciences-URCA REIMS	2000005	Études cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique.	2	4000	5985
Physique des matériaux	Groupe de Physique des Matériaux	UMR 6634 CNRS St Et. du ROUVRAY	2000006	Propriétés Magnétiques de Nanoparticules.	4	2000	5985
Physique des matériaux	GREMI UMR 6606 Université d'Orléans	Groupe de Recherche sur l'énergéti-que des milieux ionisés ORLÉANS	2000011	Sources plasmas de traitement de matériaux.	1	5000	6
Chimie	Laboratoire Synthèse Catalyste Chiralité	UMR 6516 EGIM Campus Saint Jérôme Marseille	2001003	Chimie organométallique, réactions d'insertion.	3	5000	5204
Mécanique des fluides	CR2 CNRS	Laboratoire de mécanique de Lille Villeneuve d'Asq	2002001	Etude des écoulements forcés stratifiés à grand Reynolds par simulation directe et simulation grandes échelles	1	25000	2631
Diffusion limineuse	CORIA	UMR 6614 CORIA St Et du ROUVRAY	2002003	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multi diffusifs denses.	3	2000	3195

Domaine général	Laboratoire	Affiliation / Adresse	N° Dossier	Titre du projet	Nb de comptes utilisateurs	Heures attribuées	Heures consommées à ce jour
Chimie	Laboratoire des Fonctions Azotées et Oxygénées Complexes	IRCOF Université de Rouen	2002004	Étude de la structure électronique en phase gazeuse d'anions de complexes soufrés du molybdène et du vanadium.	3	8000	11605
Chimie	Laboratoire de Synthèse Organique	UMR CNRS 6011 Université du Maine LE MANS	2002005	Modélisation des états de transition de réactions de Diels-Alder asymétriques.	1	3000	7469
Physique des matériaux	Centre de Recherche sur la Matière Divisée	CNRS Université d'Orléans ORLÉANS	2003002	Étude par simulation Monte Carlo de l'adsorption d'eau sur des surfaces de silice.	1	10000	11071
Physique des matériaux	Laboratoire de Chimie Théorique	UPMC PARIS	2003003	Étude Car-Parrinello des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en synthèse asymétrique : rôle de micro-environnement réactionnel.	4	45000	37741
Chimie	LCS	ISMRA CAEN	2003005	Etude théorique des propriétés superficielles d'oxydes métalliques : sondes de basicité	1	3000	571
Mécanique des solides	Laboratoire de Mécanique de Rouen	LMR-UMR6138 INSA de Rouen	2003006	Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide.	1	10000	231

Domaine général	Laboratoire	Affiliation / Adresse	N° Dossier	Titre du projet	Nb de comptes utilisateurs	Heures attribuées	Heures consommées à ce jour
Mécanique des fluides	LMFN (Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques)	LMFN / CORIA-UMR 6614 INSA de Rouen	2003007	Simulation de la combustion mono- et diphasique.	1	15000	1
Mécanique des fluides	CORIA	UMR 6614 St Et. Du ROUVRAY	2003008	Suivi d'interfaces par une méthode Level Set.	4	50000	42361
Physique des matériaux	Laboratoire Structure des Interfaces et Fonctionnalité des Couches Minces	UMR 6176 ENSICAEN CAEN	2003009	Énergie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	7	36000	10691
Mécanique des solides	Laboratoire des Systèmes Mécaniques et d'Ingénierie Simultanée	Université de Technologies de Troyes	2003010	Grandes déformations Micro-macro avec Zébulon.	0	1000	0
Informatique	Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans	Université d'Orléans	2003011	Evaluation du parallélisme pipeliné lors du traitement des requêtes complexes sur architecture distribuée.	1	2000	1
Chimie	UMR 6551 CNRS Mort neuronale, Neuro-protection et Neuro-transmission	Université de Caen Basse-Normandie CAEN	2003012	Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-Terminal de NR1.	2	5000	1448
Mécanique des fluides	Laboratoire de Mécanique, Physique et Géoscience du Havre	Faculté des Sciences et Techniques LE HAVRE	2003013	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	3	15000	17422
Physique des matériaux	Groupe de Physique des Matériaux UMR CNRS 6634	Université de Rouen UFR Sciences et Techniques	2003014	Simulation de la relaxation de polymères.	1	7000	9786

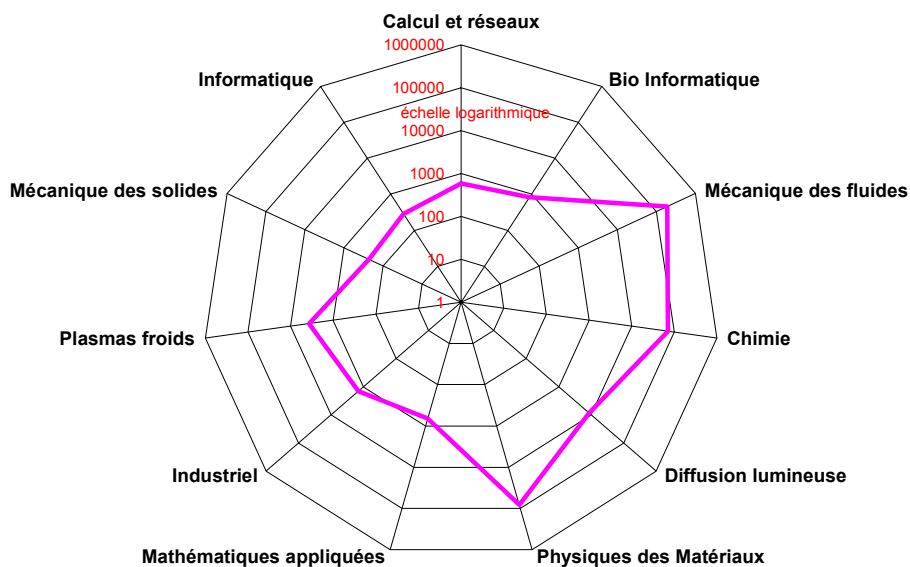
Domaine général	Laboratoire	Affiliation / Adresse	N° Dossier	Titre du projet	Nb de comptes utilisateurs	Heures attribuées	Heures consommées à ce jour
Mécanique des fluides	UMR 6614-CORIA	Techno-pôle du Madrillet St Et. du ROUVRAY	2003015	Modélisation de décharges impulsives.	1	13000	3660
Chimie	RESO (Réactivité et Synthèse Organique)	UMR Symbio, Faculté Saint-Jérôme Marseille	2004001	Complexation et Réactivité des Cétènes Silylés.	1	4000	255
Physique des matériaux	Groupe de Physique des Matériaux UMR CNRS 6634	Université de Rouen UFR Sciences et Techniques	2004002	Étude par simulation numérique du comportement magnétique de tricouches Fe/Dy/Fe.	4	5000	2516
Mécanique des fluides	Laboratoire de Mécanique de Lille	UMR 8107 Villeneuve D'ASCQ	2004003	Étude de la turbulence de paroi sous gradient de pression adverse.	1	15000	1
Chimie	Laboratoire des Fonctions Azotées et Oxygénées complexes	IRCOF/UMR 6014 CNRS Université de Rouen Faculté des Sciences et Techniques Mt St AIGNAN	2004004	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	4	12000	14032
Chimie	Laboratoire Catalyse et Spectrochimie	UMR CNRS 6506 – ISMRA CAEN	2004005	Spectroscopie infrarouge d'espèces adsorbées.	1	1000	670
Chimie	IRCOF (UMR6014)	Université et INSA de Rouen Mt St AIGNAN	2004006	Génération automatique de structures de protéines.	1	5000	1
Informatique	LIFAR (Laboratoire d'Informatique Fondamentale et Appliquée de Rouen)	Université de Rouen Faculté des Sciences et Techniques Mt-St AIGNAN	2004007	Étude des schémas cryptographiques et étude de fonctions booléennes.	0	1000	0

Domaine général	Laboratoire	Affiliation / Adresse	N° Dossier	Titre du projet	Nb de comptes utilisateurs	Heures attribuées	Heures consommées à ce jour
Bio-Informatique	ABISS Faculté des Sciences Université de Rouen	Atelier Biologie Informati-que Statistique Sociolinguistique	ABISS	Détection, caractérisation et modélisation des répétitions exactes et approximatives dans les génomes.	1	50	830
Industriel	CNPP	VERNON	CNPP	Modélisation du début d'incendie	2	100	370
Imagerie médicale	Laboratoire QUANT I F	Faculté de Médecine ROUEN	FNCLCC	Quantification en imagerie fonctionnelle	1	100	1
Physique des matériaux	GANIL (Grand Accélérateur National d'Ions Lourds)	CAEN	GANIL	Partage code simulation numérique	1	100	4
Industriel	Stage CRIHAN	Rouen	Stage	Stagiaire parallélisation	1	100	28
Industriel	taow			Test du produit FUJITSU TAOW auprès des utilisateurs en modélisation moléculaire	6	2000	300
	Totaux		44		102	447260	358861

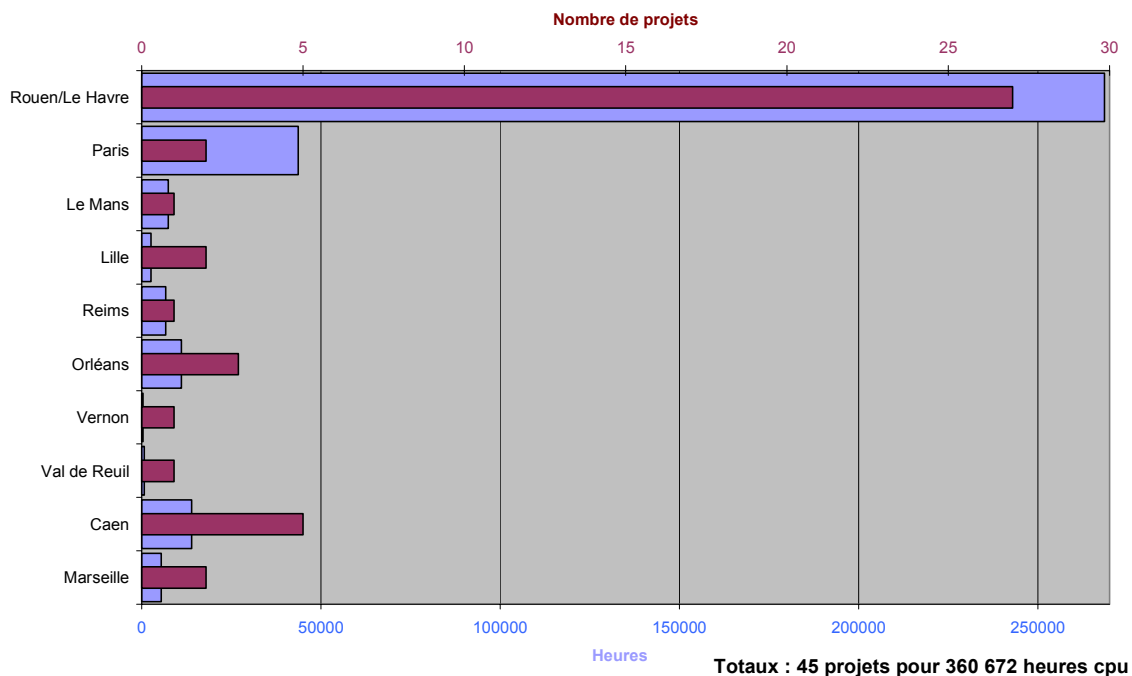
1.5.2 Les niveaux de consommation

1.5.2.1 Répartition thématique

Supercalculateur parallèle "joe" :
consommations globale en heure/processeur,
par thème scientifique d'octobre 2003 à mi-octobre 2004



1.5.2.2 Répartition géographique



Ce graphe représente, en bleu, les heures/cpu consommées par secteur géographique : en superposition en violet, le nombre de projets qui représentent cette consommation.

1.5.2.3 Comptabilité mensuelle

La comptabilité des utilisateurs du calculateur IBM est examinée chaque mois par le CRIHAN.

On y remarque (voir l'exemple de cet état page suivante),

- la charge moyenne mensuelle,
- le nombre d'heure/processeur total,
- le cumul de l'année en cours,
- le graphique du taux d'occupation de la machine jour par jour. Pour ce dernier, certains jours de début de mois apparaissent à 100%. Cela s'explique par un choix délibéré de type de représentation : en effet, dans un système d'exploitation UNIX, on ne peut connaître le temps d'exécution d'une tâche que lorsqu'elle est terminée (on ne peut pas faire de lecture "à la volée"). En conséquence, lorsqu'une tâche dépasse la journée, le surplus de temps par rapport aux 24h00 qui servent de pas d'abscisses à ce graphique, est reventilé dans les journées précédentes à concurrence de 100% : la surface globale en bleu reste significative sur le mois considéré,
- un "top 10" des plus gros projets consommateurs, par thème comme par projet qui facilite un coup d'œil général sur la vie du service,
- le graphique central représente la consommation journalière sur la période (ici du 1er septembre 2003 au 30 septembre 2004) soit les treize derniers mois. Pour en faciliter la lecture, deux courbes dites de "moyenne mobile" (chaque point représente la moyenne des x derniers jours) sont tracées, l'une avec x= 30 jours (en rouge), l'autre avec x = 60 jours (en bleu).



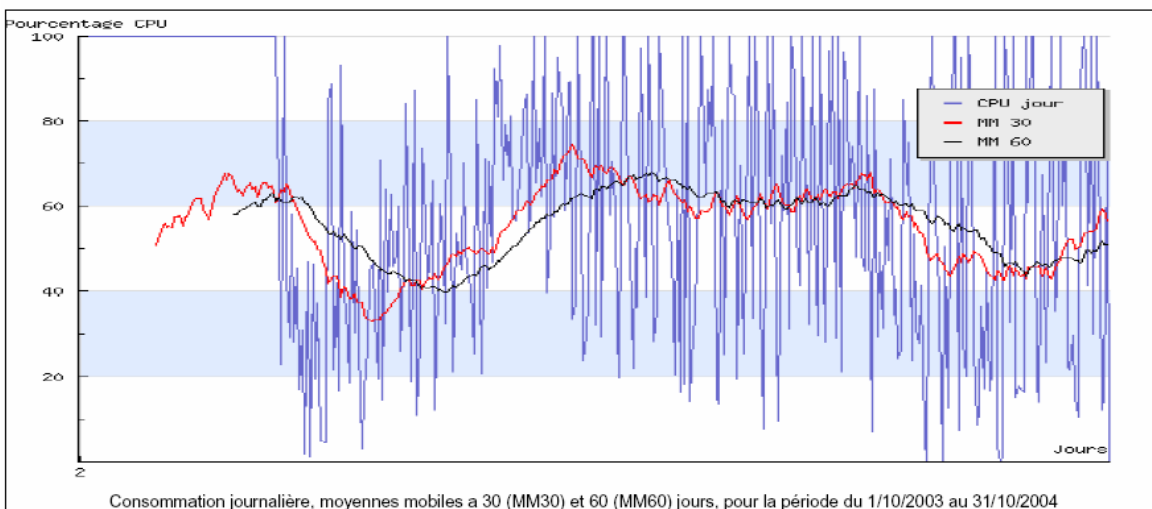
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de octobre 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	33643 heures
Charge machine moyenne	75.36 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	35
Nombre de comptes actifs	66

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	282009 heures
Charge machine moyenne pour 2004	64.79 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	9527
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	9443
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	6335
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en	1477
1999006	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V	1374
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	994
2002003	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	988
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	925
2000005	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	720
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	637

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	19962
Chimie	7884
Physiques des Matériaux	4721
Diffusion lumineuse	988
Industriel	66
Informatique	19
Plasmas froids	1
Mathématiques appliquées	1
Calcul et réseaux	1
Mécanique des solides	1

Octobre 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de HAute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>


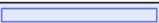
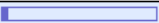

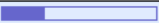

Par ailleurs, un détail de chaque compte utilisateur actif dans un projet donné est produit à la suite du document précédent. Il permet, entre autres, de mesurer l'avancée du projet dans le quota horaire attribué à l'origine (les barres rouges dans l'exemple ci-dessous traduisent un dépassement et une réattribution probable de quota) :



Detail des consommations par projets et par compte			
1997002	Calculs aérodynamiques	0 %	729 h 19 mn
	Monsieur x		729 h 19 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1997005	Expérimentation code SEP : THESEE	0 %	0 h 0 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1997017	Optimisation code Icare	0 %	475 h 25 mn
	Monsieur x		443 h 4 mn
	Monsieur x		32 h 20 mn
1998007	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	71.74 %	3228 h 10 mn
	Monsieur x		2230 h 19 mn
	Monsieur x		771 h 12 mn
	Monsieur x		145 h 13 mn
	Monsieur x		80 h 35 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1998008	Calcul numérique des zéros de polynômes ou fonction analytique sur machine parallèle	314.65 %	629 h 10 mn
	Monsieur x		629 h 10 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	70.64 %	42384 h 1 mn
	Monsieur x		29770 h 28 mn
	Monsieur x		5532 h 21 mn
	Monsieur x		4212 h 13 mn
	Monsieur x		1548 h 3 mn
	Monsieur x		1180 h 32 mn
	Monsieur x		122 h 19 mn
	Mademoiselle x		9 h 10 mn
	Monsieur x		7 h 15 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	0 %	11461 h 5 mn
	Madame x		9366 h 25 mn
	Madame x		1511 h 0 mn
	Monsieur x		325 h 6 mn
	Madame x		258 h 8 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1998042	Optimisation d.c. pour le problème de conformation moléculaire. Algorithmes parallèles pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire.	7.15 %	214 h 13 mn
	Madame x		214 h 13 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	93.83 %	37531 h 10 mn
	Monsieur x		37531 h 10 mn
1998053	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	51.99 %	5199 h 7 mn
	Monsieur x		5199 h 7 mn
1999006	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V	74.21 %	4452 h 26 mn
	Monsieur x		3690 h 26 mn
	Madame x		728 h 0 mn
	Monsieur x		30 h 26 mn
	Monsieur x		2 h 19 mn
	Monsieur x		0 h 24 mn
	Madame x		0 h 0 mn
	Madame x		0 h 0 mn
1999022	Modélisation de l'atomisation secondaire dans THESEE	0 %	0 h 0 mn
	Monsieur x		0 h 0 mn

2000005	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	82.11 %		3284 h 11 mn
	Monsieur x			1784 h 2 mn
	Monsieur x			1500 h 9 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2000006	Propriétés magnétiques des nanoparticules	132.98 %		2659 h 24 mn
	Monsieur x			1557 h 3 mn
	Monsieur x			744 h 6 mn
	Monsieur x			280 h 31 mn
	Monsieur x			77 h 19 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2000011	Sources plasmas de traitement de matériaux	0.12 %		5 h 33 mn
	Monsieur x			5 h 33 mn
2001003	Chimie organométallique : réactions d'insertions	87.91 %		4395 h 21 mn
	Monsieur x			2790 h 29 mn
	Monsieur x			1094 h 12 mn
	Monsieur x			510 h 14 mn
2002001	Etude des écoulements forcés stratifiés à grand Reynolds par simulation directe et simulation grandes échelles	0 %		0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2002003	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	56.1 %		2243 h 33 mn
	Madame x			1553 h 19 mn
	Monsieur x			358 h 33 mn
	Monsieur x			331 h 16 mn
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	37.33 %		2986 h 7 mn
	Madame x			2337 h 33 mn
	Monsieur x			648 h 10 mn
	Madame x			0 h 0 mn
2002005	Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques	80.75 %		2422 h 22 mn
	Monsieur x			2422 h 22 mn
2003001	Modélisation de la combustion turbulente supersonique non prémélangée par une approche MIL	0 %		0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	62.45 %		6245 h 2 mn
	Monsieur x			6245 h 2 mn
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en synthèse asymétrique	75.5 %		33976 h 7 mn
	Madame x			25535 h 21 mn
	Monsieur x			5543 h 12 mn
	Madame x			2897 h 9 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2003005	Etude théorique des propriétés superficielles d'oxydes métalliques : sondes de basicité	0 %		0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2003006	Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide	0 %		0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2003007	Simulation numérique des écoulements réactifs monophasiques et diphasiques	0 %		0 h 1 mn
	Monsieur x			0 h 1 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn

2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	55.59 %	<div><div></div></div>	27795 h 17 mn
	Monsieur x			13510 h 1 mn
	Monsieur x			8845 h 3 mn
	Monsieur x			5440 h 12 mn
	Mademoiselle x			0 h 0 mn
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	27.4 %	<div><div></div></div>	9864 h 27 mn
	Monsieur x			2830 h 34 mn
	Monsieur x			2740 h 7 mn
	Monsieur x			2709 h 21 mn
	Monsieur x			858 h 28 mn
	Monsieur x			499 h 27 mn
	Monsieur x			188 h 19 mn
	Monsieur x			36 h 31 mn
2003010	Grandes déformations Micro-macro avec Zébulon	0 %	<div><div></div></div>	0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2003011	Evaluation du parallélisme pipeliné lors du traitement des requêtes complexes sur architecture distribuée.	0.04 %	<div><div></div></div>	0 h 29 mn
	Monsieur x			0 h 29 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2003012	Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-Terminal de NR1.	26.91 %	<div><div></div></div>	1345 h 10 mn
	Monsieur x			1321 h 1 mn
	Madame x			24 h 9 mn
2003013	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	115.49 %	<div><div></div></div>	17323 h 9 mn
	Monsieur x			14194 h 12 mn
	Monsieur x			2995 h 8 mn
	Monsieur x			133 h 23 mn
2003014	Simulation de la relavation des polymères.	81.3 %	<div><div></div></div>	5690 h 31 mn
	Madame x			5690 h 31 mn
2003015	Modélisation de décharges impulsionnelles	27.81 %	<div><div></div></div>	3615 h 6 mn
	Monsieur x			3615 h 6 mn
2004001	Complexation et réactivité des cétones silylés.	6.38 %	<div><div></div></div>	255 h 4 mn
	Madame x			255 h 4 mn
2004002	Étude par simulation numérique du comportement magnétique de tricouche Fe/Dy/Fe.	47.05 %	<div><div></div></div>	2352 h 24 mn
	Monsieur			1978 h 1 mn
	Monsieur x			281 h 24 mn
	Monsieur x			92 h 34 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2004003	Étude de la turbulence de paroi sous gradient de pression adverses.	0 %	<div><div></div></div>	0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
2004004	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	113.72 %	<div><div></div></div>	13646 h 10 mn
	Monsieur x			4580 h 9 mn
	Madame x			4535 h 19 mn
	Monsieur x			3455 h 18 mn
	Madame x			1074 h 35 mn
2004005	Spectroscopie infrarouge d'espèces adsorbées.	67.06 %	<div><div></div></div>	670 h 22 mn
	Monsieur x			670 h 22 mn
2004006	Génération automatique de structures de protéines	0 %	<div><div></div></div>	0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn
	Madame x			0 h 0 mn
ABISS	Projet ABISS : tests de calculs	530.74 %	<div><div></div></div>	265 h 13 mn
	Monsieur x			265 h 13 mn
CERFACS	Projet CERFACS	0 %	<div><div></div></div>	0 h 0 mn
	Monsieur x			0 h 0 mn

CNPP	Modélisation du début d'incendie	0 %		251 h 29 mn
	Monsieur x			204 h 16 mn
	Monsieur x			47 h 12 mn
FNCLCC	Quantification en imagerie fonctionnelle	0 %		0 h 0 mn
	Mademoiselle x			0 h 0 mn
GANIL	Partage code simulation numérique	4.38 %		4 h 13 mn
	Monsieur x			4 h 13 mn
crihan	Comptes CRIHAN	5.73 %		458 h 4 mn
gm	Monsieur Guy MOEBS			453 h 3 mn
hd	Monsieur Hervé DEGROOT			2 h 28 mn
bg	Madame Béatrice GATTO			1 h 25 mn
				0 h 15 mn
lv	Monsieur Laurent VERVERSCH			0 h 1 mn
stage	Projet stages CRIHAN	27.75 %		27 h 27 mn
jleber01	Mademoiselle Jessica LEBERTOIS			27 h 27 mn
taow	Tests du produit FUJITSU TAOW auprès des utilisateurs du Réseau de Modélisation Haut Normand	13.66 %		273 h 4 mn
ctaow01	Monsieur c taow			258 h 25 mn
eondam01	Monsieur Eric CONDAMINE			11 h 29 mn
imilaz01	Madame Isabelle MILAZZO			1 h 24 mn
gmoeb02	Monsieur Guy MOEBS			0 h 21 mn
ahouly01	Monsieur Hassan OULYADI			0 h 9 mn
cmayer01	Madame Catherine MAYER			0 h 3 mn
				0 h 0 mn
				0 h 0 mn
				0 h 0 mn

Enfin, chaque laboratoire reçoit tous les deux mois un état des lieux de sa "comptabilité projet". Il y visualise l'état d'avancement de son quota d'heures consommées, et le niveau de consommation de chacun des comptes utilisateurs encore actifs sur les calculateurs. Ce dernier point lui permet de vérifier si ces comptes correspondent bien à des utilisateurs encore en place dans sa structure (notamment pour gérer les départs des doctorants).

Date d'ouverture du projet : 20040101

Nombre d'heures attribuées : 8000 h

Nombre d'heures utilisées : 458.24 h soit 5.73 %

Nombre d'heures restantes : 7541.76 h

login	consommation	utilisateur	
hp	0.00	Hervé	PRIGENT
hd	2.81	Hervé	DEGROOT
bg	1.73	Béatrice	GATTO
gm	453.22	Guy	MOEBS
tc	0.00	Thomas	CARLU
ev	0.00	Eric	VIELET
lv	0.06	Laurent	VERVISCH
ab	0.00	Alain	BIDAUD

Exemple de relevé bi-mestriel pour une structure (extrait concernant l'utilisateur spécifique "CRIHAN")

1.5.3 Codes de calcul industriels

1.5.3.1 Bassin d'Essais des Carènes

Un partenaire industriel du CRIHAN, le Bassin d'Essais des Carènes de Val de Reuil, utilise un code de simulation numérique pour application navale, appelé « ICARE ».

Le service offert par le CRIHAN porte sur une prestation de parallélisation, optimisation et portage de plusieurs codes de calculs. Il représente six mois et demi de temps homme.

Pour un sous ensemble de ce programme, le service d'assistance scientifique a encadré un stagiaire dans le cadre de sa formation en deuxième année de cycle ingénieur à l'INSA (Institut National des Sciences Appliquées) de Rouen (département Energétique et Propulsion). L'objet de ce stage concernait la parallélisation du code ICARE dans le cas d'un maillage symétrique.

Les simulations numériques demandant de plus en plus de ressources pour étudier des phénomènes de plus en plus complexes, il est nécessaire d'avoir recours à des techniques d'optimisation afin de rendre les codes de calculs plus efficaces. Une contrainte importante repose sur le temps de restitution des résultats qui est souvent très long : la parallélisation du code permet de réduire ce temps.

Le parallélisme consiste à exécuter simultanément sur des processeurs différents des instructions relatives à un même programme. Cela se traduit par le découpage de l'application en plusieurs tâches qui seront traitées par des processeurs différents, dans le but de gagner en temps de restitution. Pour cela, on effectue une décomposition de domaine, c'est-à-dire que l'on découpe le domaine de calcul initial en plusieurs sous domaines auxquels on fait correspondre une grille de processus.

Ainsi chaque processus détermine les nouvelles valeurs des inconnues des cellules du maillage qu'il traite. Les calculs sont donc effectués simultanément à l'intérieur de chaque sous domaine.

Les nouvelles valeurs au sein d'une maille exigent la connaissance des valeurs des mailles voisines qui peuvent appartenir à un sous domaine adjacent et sont donc inaccessibles directement. Il est alors nécessaire d'échanger très régulièrement des informations entre les processus à l'aide de communications point à point ou collective. Chaque sous domaine est ainsi entouré d'une ou plusieurs couches de cellules "fantômes" pour stocker ces valeurs voisines.

Pour ce projet, il a été choisi d'utiliser la bibliothèque de communication MPI (Message Passing Interface) car elle présente des avantages en termes de portabilité.

Le service scientifique doit compléter la prestation pour le Bassin d'Essais des Carènes pour la fin de l'année 2004.

1.5.3.2 TRIBVN

Cette prestation, réalisée pour le compte de la société TRIBVN, spécialisée dans les applications à destination des laboratoires de pathologie, a concerné le traitement du signal pour l'analyse d'images issues de l'analyse des lames dans ces laboratoires et vise à constituer un véritable microscope numérique virtuel pour des lecteurs distants.

Il s'agit de développer des fonctionnalités de visualisation spécifiques comme l'extension à la demande de la profondeur de champ pour les images diagnostiques à fort grossissement. Il faut en effet permettre à un expert distant, d'examiner une lame virtuellement avec des fonctionnalités se rapprochant de l'examen direct dans lequel il maîtrise habituellement les paramètres de grossissement et de navigation sur le champ de la lame. Le praticien peut alors définir sa zone d'intérêt, son rapport de grossissement et même obtenir une image

moyenne dans les profondeurs de champ représentant les parties les plus nettes dans chaque couche. Il reste ainsi maître de son analyse dans l'ensemble de la lame au lieu de n'avoir à sa disposition que les images fixes sélectionnées par l'auteur de l'analyse.

Cela suppose des moyens de calcul importants et des algorithmes évolués. Le service d'assistance scientifique du CRIHAN a assuré la transposition des codes de calcul pour les adapter aux calculateurs du centre de ressources.

Les images de très grande taille qui nous parviennent par le réseau (le très haut débit est nécessaire en l'état actuel des techniques de compression utilisées) sont stockés sur des machines à forte capacité.

2 Le réseau régional SYRHANO

2.1 De nouveaux points d'accès au « backbone »

Fin janvier 2004 s'est tenu le dernier comité technique de la fiche 65 du CPER pour le réseau SYRHANO.

Dans le cadre des cofinancements FEDER, une demande déposée en septembre 2003 a été acceptée et va permettre, de 2004 à 2006, de compléter l'infrastructure régionale, c'est à dire notamment :

- de permettre une meilleure couverture du territoire régional par l'extension de la couverture existante (liaisons et équipements) sur de nouveaux points de présence en fonction des besoins. Le besoin le mieux identifié reste celui du réseau de périnatalité, Périn@t, ce qui met l'accent sur des villes comme Bernay, Pont-audemer, Fécamp, Dieppe, Petit-Quevilly, etc.
- d'interconnecter et faciliter le raccordement d'autres réseaux de collecte sur l'infrastructure à haut débit de SYRHANO, en particulier les projets des Conseils Généraux, des agglomérations, voire des villes.

Dans le cadre du CPER, des rapports précis ont été fournis sur ces sujets et par ailleurs, des courriers de sensibilisation à la mutualisation de certaines actions ont été adressés aux présidents de plusieurs collectivités locales affichants des projets d'infrastructures ou de services (voir plus loin "SYRHANO et les stratégies des collectivités locales").

2.1.1 Un PoP SYRHANO à Gonfreville l'Orcher

2.1.1.1 Contexte

La mairie de Gonfreville-l'Orcher a équipé depuis plusieurs années la plupart des rues de la ville en fourreaux. Un cœur de réseau optique est déjà opérationnel et interconnecte les sites dépendant de la mairie (écoles, médiathèque, mairie, etc.) avec un accès Internet via une offre Boucle Locale Radio à bas débit (1Mbit/s) de l'opérateur régional Altitude Télécom.

La mairie va compléter ce plan "fourreaux" dans le cadre d'un projet "numérique haut débit" ambitieux. La formule choisie, une Délégation de Service Public, doit fournir au grand public des services numériques multiples : télévision privée et publique, « chaîne » d'urgence (eu égard au grand nombre de sites SEVESO sur la commune et aux alentours), etc.

De plus, la mairie souhaite orienter le projet vers les technologies nouvelles, en particulier IPv6. Des contacts ont été pris avec le secteur R&D d'EDF pour l'équipement domotique des nouveaux logements sociaux (zones pavillonnaires et habitat vertical), la mairie mettant l'accent sur le contenu du projet et le soutien à la population.

Étant donné l'aspect innovant de la démarche, le CRIHAN a été associé en tant que conseiller et partenaire potentiel. Il a été décidé de déployer un point de présence sur le réseau SYRHANO assurant la jonction avec ce réseau de ville avec plusieurs objectifs :

- Donner un accès à haut débit sur SYRHANO aux écoles, au collège et aux structures éducatives par un lien Ethernet (10 puis éventuellement 100Mbit/s).
- Expérimenter en grandeur nature certaines techniques avancées liées au protocole IPv6 (mécanismes de transition) ou aux nouveaux usages (exemple : mobilité entre écoles, médiathèque et domiciles).

2.1.1.2 Mise en œuvre

Concernant le lien avec SYRHANO, deux solutions ont été étudiées :

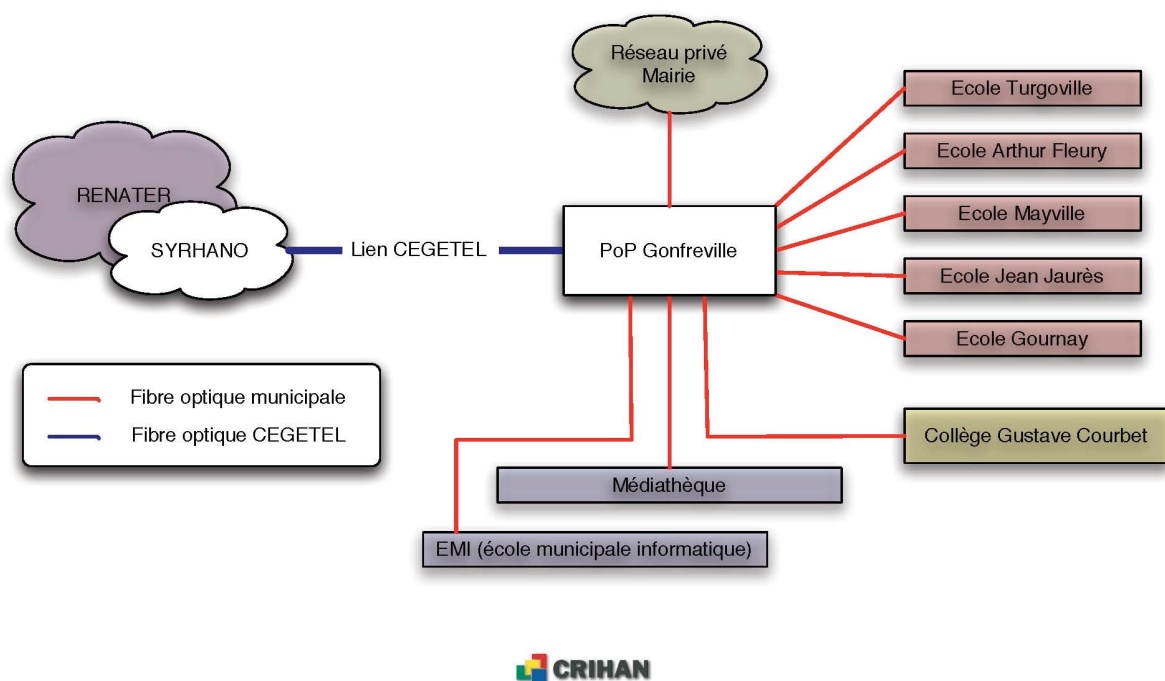
- Une offre de l'opérateur régional Altitude Télécom basée sur l'augmentation du débit du lien existant (10Mbit/s vers le point de présence SYRHANO du Havre)
- Une offre de l'opérateur national Cégétel (ex Télécom Développement) basée sur la location d'une liaison optique vers Le Havre ou Rouen.

Pour des raisons techniques, la deuxième offre a été retenue et le lien créé sur Rouen.

Les sites utilisateurs (voir le schéma ci-après) du monde de l'enseignement n'ont pas de frais, ni pour SYRHANO ni pour RENATER, ces frais étant pris en charge par leur tutelle (Rectorat, Ministère). Pour sa part, le CRIHAN prend en charge les frais de raccordement qui comprennent les frais de mise en place et l'abonnement pour la liaison.

Les équipements mis en place (armoire télécom avec équipements actifs) bénéficient, comme pour les autres PoP¹, d'un local technique sur un site du réseau, mis à disposition du CRIHAN. Cela concerne le routeur PoP (Cisco 7200 NPE1G), les routeurs d'écoles (6WIND 6100), le routeur du collège (6WIND 6200) et les 4 routeurs Cisco (829).

Un maquettage complet du réseau de Gonfreville a été réalisé avec ce matériel avant déploiement sur le site.



Principe du PoP de Gonfreville l'Orcher et sites raccordés

¹ Point de présence : acronyme informatique tiré de l'anglais (Point of Presence)

2.1.1.3 Expérimentations technologiques avancées et nouveaux usages

Le réseau optique de Gonfreville l'Orcher forme un terrain très favorable au déploiement d'une infrastructure IPv6 pilote, destinée à expérimenter de nouveaux usages parmi lesquels :

- La « mobilité », en particulier dans l'optique de la classe mobile,
- Les mécanismes de transition entre IPv4 et IPv6,
- La préfiguration du déploiement massif d'IPv6 lié par exemple à la notion de « maison intelligente »,
- Le thème de l'environnement numérique de travail, qui sera abordé en partenariat avec le Rectorat de Rouen.

Des serveurs et services d'intérêt général vont pouvoir être déployés comme :

- Le courrier électronique, l'hébergement de serveur web, la mise à disposition d'espaces de stockage, etc,
- La préfiguration ou le maquettage des services numériques de ville ,
- Les services de proximité.

2.1.1.4 Formation associée

Le personnel de la mairie ainsi que deux personnes d'un cabinet conseil ont bénéficié d'une formation au protocole Ipv6, adaptée au contexte : dérivé de la formation « standard » proposée régulièrement au CRIHAN, le programme a été revu pour correspondre aux besoins locaux, notamment en matière de mobilité.

2.2 SYRHANO et les stratégies des collectivités locales

Dans notre région, les deux départements ont entamé une politique interventionniste en matière de couverture territoriale en réseau dit « haut débit ».

Le Conseil Général de l'Eure a comme objectif, par affermage, la fourniture de services pour le grand public avec une bonne couverture du territoire. Une DSP est en cours d'élaboration. Une infrastructure optique (lot de la consultation précédente attribué à Altitude Télécom) est en cours de déploiement.

Le Conseil Général de Seine-Maritime a présenté en février 2004 son schéma directeur numérique qui vise à :

- Connecter à court terme les établissements départementaux de son territoire,
- Construire une armature de collecte "neutre", ouverte à tous les opérateurs, axée principalement sur les pôles économiques et les zones à fort potentiel télécom. Une DSP sera étudiée pour fin 2004,
- Lancer une étude en vue d'un schéma départemental des usages des TIC.

Le CRIHAN a entamé des contacts avec les Conseils Généraux pour examiner les opportunités de mutualisation d'infrastructures dans le cadre de ces politiques.

Des contacts du même ordre ont été pris avec la CODAH¹ et la mairie de Gonfreville l'Orcher. Cette démarche pourrait également être entamée prochainement avec la

¹ Communauté d'Agglomération du Havre

Communauté de l'Agglomération Rouennaise qui exerce désormais une compétence "réseaux de communications".

2.3 De nouveaux services sur SYRHANO

2.3.1 Un « pont » de visioconférence

Afin de répondre aux besoins exprimés par certains utilisateurs de SYRHANO, le CRIHAN a engagé la mise en place d'un service de visioconférence multipoint H.323 de grande qualité. Ce service permettra à toute personne disposant, depuis un site SYRHANO, d'un terminal compatible H.323, d'organiser simplement une visioconférence 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).

À court terme, ce service a vocation à s'intégrer dans une architecture H.323 nationale.

Une consultation a été lancée à l'automne 2004 pour la fourniture, l'installation et la maintenance des éléments indispensables à la mise en place du service de visioconférence H.323 : elle porte sur un pont multipoint, des passerelles vers d'autres protocoles, «gatekeeper» (sorte d'autocom pour la visioconférence), un système de réservation des ressources et de supervision, etc. Dans cette consultation, l'accent est mis sur l'intégration de ces différents éléments, la modularité et l'évolutivité de la solution proposée.

Le service sera opérationnel dès les premières semaines de l'année 2005.

2.3.1.1 Description technique

(On reprend ici l'essentiel du cahier des charges émis : l'intégralité est consultable en 0Annexe F - , page 109, "Cahier des charges "Pont de visioconférences"").

Le pont de visioconférence, ou MCU, est le point central du dispositif. C'est un logiciel et/ou matériel qui permet de mettre en relation 3 terminaux de visioconférences ou plus, dans une même session de travail.

L'équipement, pour fonctionner correctement, doit être capable de mettre en relation plusieurs utilisateurs avec des codecs son et vidéo différents (capacité de transcoding) mais aussi à des débits différents (capacité de ré-encodage) de manière à offrir aux utilisateurs une qualité de service la plus élevée possible.

Le pont de visioconférence supportera donc un certain nombre de fonctionnalités pour pouvoir offrir le service sur le réseau SYRHANO avec la qualité attendue :

- Support des codecs audio/vidéo les plus courants,
 - pour l'audio : G.711, G.722, G.723, G.728,
 - pour la vidéo : H.261, H.263, H.264,
 - pour les résolutions : CIF, QCIF, 4CIF.
- Le pont devra supporter la norme T.120 pour les échanges de documents,
- Interopérabilité avec la majeure partie des terminaux H.323 matériels et logiciels existants sur le marché aujourd'hui (Falcon IP de chez VCON, ViewStation et VSX 7000 de chez Polycom, les terminaux Tandberg, etc.) et compatibilité avec les autres systèmes de visioconférence multipoint (notamment interopérabilité avec des gatekeepers comme GNUGK),
- Capacité de transcoding (par exemple de permettre aux participants d'une conférence multipoint d'utiliser chacun différents codecs audio mais sans nivellement par le bas de la qualité du codec pour suivre le participant le moins performant),

- Acceptation des débits asymétriques (permettre, dans une même conférence multipoint, la présence de participants avec des vitesses d'accès différentes : ceci suppose un ré-encodage de l'image finale différent suivant le débit de chaque participant à la conférence),
- Présence continue/commutation à la voix,
 - En mode commutation à la voix, le site qui a la parole apparaît en plein écran,
 - En mode présence continue, l'écran est scindé en plusieurs parties pour permettre de voir tout ou partie des sites participant à la conférence simultanément,
- Support de multi conférences (Le pont doit supporter la tenue de plusieurs conférences disjointes simultanément avec des configurations distinctes pour chacune),
- Une interface d'administration accessible à distance permettant de,
 - vérifier le bon fonctionnement de celui-ci (état des composants, disponibilité des ressources),
 - créer les conférences permanentes ou à la demande,
 - administrer les conférences en cours (déconnexion d'un utilisateur, invitation d'un terminal, etc.),
 - éventuellement permettre aussi de déléguer certaines parties de la gestion (création de conférences par exemple) à un groupe d'utilisateurs pré-défini.
- une API de développement permettant l'accès aux informations (ressources disponibles, conférences en cours, etc.) et aux fonctions d'administration (création de conférences, etc),
- Le support IPv4/IPv6.

Coté évolutif, nous avons prévu que le pont puisse supporter les futures normes de la visioconférence, comme SIP (alternative à la norme H.323) ou H.264 (nouveau codec vidéo), ou toute autre norme par simple mise à jour logicielle.

Outre ces fonctionnalités le pont aura une capacité minimum d'accès simultanés de :

- 20 sites IP connectés à un débit de 768kbit/s, ou 20 sites IP et/ou RNIS connectés à un débit allant de 384 Kb/s à 768Kb/s,
- 3 conférences, aussi bien en présence continue qu'en commutation à la voix).

Coté évolutif, il est prévu que le pont puisse évoluer aisément en capacité d'accueil suivant les besoins du service, soit par l'intermédiaire d'une mise à jour logicielle ou matérielle, soit par la possibilité de cascader plusieurs équipements pour augmenter le nombre de sites utilisateurs.

2.3.2 Un service communautaire d'urgence

Dans le cadre de SYRHANO, le CRIHAN et ses partenaires définissent ensemble des services mutualisés qu'ils proposent à leurs utilisateurs et personnels.

Face aux problèmes de plus en plus tendus de sécurité en matière de réseau, le besoin d'un service centralisé et mutualisé de courrier électronique fiabilisé est clairement apparu comme une urgence. Le CRIHAN a donc mis en place à la fin de l'été 2004 un tel service, assorti d'un espace disque de grande capacité, disponible à distance. (<https://rackcata.crihan.fr>).

2.3.2.1 Courrier électronique fiabilisé

Le service de courrier mis en place est un système fiabilisé, utilisable en tout lieu : au travail, à son domicile ou à distance via Internet. Les adresses électroniques des utilisateurs restent identiques à ce qu'elles étaient auparavant. Pour en bénéficier, gratuitement, chaque utilisateur peut s'enregistrer auprès de son établissement de tutelle.

- Lutte anti-virus et anti-spam sont confiées à un serveur dédié qui 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" est utilisé. Sa base de signatures est mise à jour toutes les deux heures. "Spamassassin" est quant à lui utilisé pour réduire le niveau de spam,
- Concernant le chiffrement et l'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,
- Enfin, 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, sous WebMail.

2.3.2.2 Un espace disque à distance

Le deuxième service concerne la mise à disposition de chaque utilisateur enregistré, d'un vaste espace disque, qu'il peut utiliser comme espace de stockage et/ou pour partager ses données avec d'autres utilisateurs. Aujourd'hui, la capacité d'accueil est de 1,2To (Teraoctets).

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 ou d'un Macintosh, le serveur est accessible à haut débit grâce à une connexion en Gigabit Ethernet sur SYRHANO. Le transfert de fichiers via "scp" (secure copy) est aussi possible.

2.3.2.3 Environnement technique

Ces services, situés sur les machines du CRIHAN, bénéficient, bien entendu, de l'environnement technique de ses locaux eux-mêmes sécurisés : alimentation électrique secourue, supervision des locaux 24h/24, 7j/7, salles techniques climatisées avec équipements protégés par des onduleurs ainsi que par un groupe électrogène.

Les serveurs ont un haut niveau de disponibilité, les machines étant également supervisées en permanence et un serveur de rechange étant disponible à tout moment en cas de défaillance de l'un des composants du service.

2.3.2.4 Utilisateurs

Quelques semaines après le démarrage de ce service, les utilisateurs sont essentiellement, le CORIA, l'INSA de Rouen et l'Université du Havre. Les responsables réseaux d'autres structures devraient « ouvrir » prochainement ces services à leurs utilisateurs.

Une communication a été faite par envoi d'une plaquette vers tous les sites SYRHANO (voir page l'Annexe E - , page 108, "Services mutualisés sur SYRHANO").

2.4 De nouvelles extensions sur InterCampus

2004 a vu la réalisation de deux nouveaux chantiers autour d'InterCampus :

- Les conventions établies entre le CRIHAN et la Communauté d'Agglomération Rouennaise, ont pour but de faciliter l'emprunt des infrastructures de transport en commun. Celle du TEOR a permis en 2004 de raccorder le site de l'IUFM, à Mont Saint Aignan, membre du "GFU" InterCampus depuis 2000 mais pas encore raccordé en fibre optique. Ce chantier a été terminé en juin et la jonction fut opérationnelle dès la rentrée universitaire.
- Par ailleurs, le tracé initial du réseau construit en 2000 comprenait une section de deux kilomètres en domaine SNCF, depuis la gare rive droite jusqu'au pied de la côte dite "du Panorama" menant au campus universitaire de Mont Saint Aignan. Le coût de la redevance due à la SNCF pour cette partie a amené les membres du GFU à rechercher une solution de contournement. Avec l'achèvement du réseau TEOR dans ce secteur et grâce à la mise en place d'équipements dans le bâtiment de la faculté "Pasteur", une solution entièrement "TEOR" a pu être trouvée : les travaux dans la suite de ceux de l'IUFM. La convention avec la SNCF s'achève donc au 31 décembre 2004.

On retrouvera en Annexe G - , page 116, le "Tracé de l'infrastructure InterCampus en 2004".

3 Formations Enseignements

3.1 Formations IPv6

Deux sessions de formation sur le protocole IPv6 ont été organisées cette année.

La première a été montée spécifiquement, en juin, pour les personnels concernés par le déploiement de ce protocole sur la boucle optique de la commune de Gonfreville l'Orcher. Les six stagiaires auront à implémenter ce protocole et notamment dans le but de tester des applications IPv6 en grandeur nature.

La deuxième session, en octobre, a réuni dix stagiaires issus des milieux universitaires de Rouen et du Havre mais également de Caen.

3.2 Participation au Master SSSI de l'Université de Rouen

Dans le cadre de la mise en place des LMD, l'Université de Rouen propose désormais le "Master Sciences et Technologie, Santé, mention Informatique, Génie de l'Information et des Systèmes, Spécialité Sécurité des Systèmes Informatiques, Fiabilité Qualité et maîtrise du Risque".

A sa demande, deux ingénieurs du CRIHAN interviennent pour les travaux dirigés et les travaux pratiques, dans l'unité d'enseignement 5 (1ère année) "Administration système".

La période et les horaires,

- à compter du lundi 25 octobre 2004,
- le lundi après-midi de 14h00 à 18h30 ,
- horaire total,
 - 18 heures en TD,
 - 18 heures en TP 1er groupe,
 - 18 heures en TP 2ème groupe.
- le tout réparti en 12 semaines,
- fin de période prévue, mi/fin janvier 2005.

3.3 Participation aux enseignements réseau de ASI4 pour l'INSA de Rouen

L'INSA de ROUEN Madrillet a sollicité le concours des ingénieurs du CRIHAN dans le cadre des enseignements "réseau" du département ASI 4ème année. Deux ingénieurs interviennent en novembre, décembre 2004 et janvier 2005 sur différents protocoles réseaux auprès d'une quarantaine d'étudiants, en travaux dirigés et travaux pratiques.

3.4 Formation au calcul parallèle

Une seule session a été nécessaire en 2004 pour les utilisateurs du service de calcul.

Elle a eu lieu en février et a réuni six participants issus du CORIA, de l'UMR 6185 de CAEN, du CERMN de CAEN, du laboratoire PSI de l'INSAR, et du laboratoire Mécanique, Physique et Géoscience.

3.5 Stagiaires encadrés au CRIHAN

- Un élève ingénieur de l'EPSI¹ de Paris a travaillé durant six mois sur la plateforme de test du protocole IPv6 du CRIHAN. A l'issue du stage, en octobre, un contrat à durée déterminée de six mois lui a été proposé,
- Une élève ingénieur de l'INSA de Rouen a été encadrée durant trois mois par le service d'assistance scientifique. Le thème concernait l'adaptation d'un code de calcul parallèle (voir le chapitre "calcul scientifique"),
- Un élève du Lycée Technique Professionnel de la Châtaigneraie, en BTS informatique de gestion, durant deux mois.

¹ Ecole Privée des Sciences Informatiques

4 Activités de support aux projets innovants

4.1 Un portail des musées en Haute-Normandie

4.1.1 La genèse

Les Conservateurs de Collections Publiques de France sont représentés en région par la Section Fédérée de Haute-Normandie (SFHN).

Durant l'année 2003, les deux associations avaient collaboré pour établir le cahier des charges de ce que devrait être un « portail des musées en Haute-Normandie ».

En réponse à l'appel d'offres de la DATAR de mars 2002 relatif aux « Portails Culturels Régionaux », la SFHN a présenté le projet élaboré avec le CRIHAN, projet qui s'est vu doté d'un financement FNADT de 30 000 euros.

Pour des raisons pratiques, tant financières que logistiques, la SFHN et le CRIHAN ont établi une convention (en septembre 2003) de sorte à permettre au projet de démarrer dès le mois de janvier 2004. Le CRIHAN a présenté la demande de financement FNADT en octobre et la convention attributive entre l'Etat et le CRIHAN a pu être signée le 11 décembre.

Un poste de chef de projet a ainsi pu être doté dès janvier 2004, après des sélections de candidats effectuées en concertation avec la SFHN fin décembre.

La dotation FNADT couvrait environ la moitié du plan de financement pour le démarrage de l'opération (plan établi sur douze mois). De son côté, le Conseil Régional de Haute-Normandie avait souhaité, dès octobre 2003, apporter sa contribution au titre des dispositions prévues dans le contrat de plan en matière muséographique et notamment au vu de la fiche 50. Une convention entre la Région et le CRIHAN a donc été signée le 30 décembre 2003, confortant le projet à hauteur de 30 000 euros supplémentaires.

4.1.2 La portée du projet

Cette portée est double :

- Le premier rôle du portail concerne la mise en valeur des musées de la région : c'est ce qui forme l'essentiel de ce développement en cours au CRIHAN durant l'année 2004.
- Le deuxième rôle est de préparer une structure d'accueil et de fédération des fonds qui seront numérisés dans les années à venir dans le cadre du vaste programme que constitue le « plan pluriannuel d'informatisation, numérisation et mise en réseau des collections des musées de Haute-Normandie ». Ce plan a fait l'objet d'une réunion de restitution du projet le 27 novembre 2003 auprès des élus et des personnels des musées. Ensuite, début avril 2004, devant le même public, a été organisée une journée de présentation des modalités d'un appel à projets en la matière. La version définitive de cet appel à projets, pour la période 2004-2006, leur a été envoyée en juin.

Le portail représente donc également le cœur d'un service de mise en valeur des contenus issus du plan de numérisation. Il est donc important de maintenir l'effort déjà engagé, sur la durée, et des contacts ont donc été pris avec les Conseils Généraux pour envisager leur contribution financière à ce dispositif déjà mis en place.

4.1.3 Partenaires et prestataires

La mise en place du portail des musées de Haute-Normandie, sous l'égide de la SFHN, repose sur d'étroites collaborations avec des partenaires institutionnels et des prestataires indépendants.

Les partenaires institutionnels que sont le Conseil Régional et la DRAC de Haute-Normandie, participent à la coordination générale du projet et assurent, grâce à leur appui financier, sa continuité.

L'appui des institutions publiques est très sensible sur la partie concernant le plan d'informatisation et de numérisation des collections : le site portail qui apporte une valeur ajoutée à ce plan, devrait lui aussi voir se confirmer cette aide. L'ensemble vise la constitution d'une base de données régionale des collections publiques pour permettre de valoriser le patrimoine régional et de faciliter les reversements sur la base de données nationale Joconde.

La contribution des prestataires indépendants est, à l'heure actuelle, exclusivement liée à la réalisation du portail (Conception graphique et traduction).

4.1.4 Constitution des comités et réunions

4.1.4.1 Comité de pilotage pour le plan de numérisation

Le plan de numérisation et d'informatisation des collections est encadré par un comité de pilotage. Ce comité permet de conjuguer l'action des différents partenaires institutionnels.

Y sont représentés :

- Le Conseil Régional de Haute-Normandie (Solange Claquin, Catherine Coppalle, Bénédicte Duthion, Christine Rambaud),
- La Direction des Musées de France (Bernadette Goldstein, Florence Vielfaure, Laurent Manœuvre),
- Le musée départemental des Antiquités de Rouen (Geneviève Sennequier, Cécile Colonna),
- Le rectorat de Rouen (Philippe Thénot),
- Le CRIHAN (Judith Panijel, Hervé Prigent, Jean-Christian Cordier),
- La Préfecture de Haute-Normandie (Michel Le Stum, Marc Lelièvre),
- Le musée municipal de Fécamp (Marie-Hélène Desjardins),
- La DRAC de Haute-Normandie (Véronique Chatenay-Dolto, Sylvie Le Ray-Burimi, Yannick Loué),
- Le musée de Dieppe (Pierre Ickowicz),
- Le musée d'Evreux (Gilles Leblond),
- Le musée de Vernon (Anne Labourdette).

Ainsi ont été abordés dans les différentes réunions du comité de pilotage :

- 9 Janvier, une synthèse générale et un bilan de l'étude confiée à la société GRAHAL pour l'informatisation et la numérisation des collections,
- 6 Février, la préfiguration de l'appel à projet pour l'informatisation et la numérisation des collections,
- 5 Mars, la validation de l'appel à projet pour l'informatisation et la numérisation des collections,
- 9 Avril, présentation/formation des personnels concernés pour répondre à l'appel à projet pour l'informatisation et la numérisation des collections (et l'assemblée générale de la section fédérée des conservateurs de Haute-Normandie).

4.1.4.2 Comité éditorial

La réalisation concrète du portail a nécessité la mise en place d'un comité éditorial permettant d'assurer la coordination et le suivi de l'avancement du site. Ce comité se réunit sur une base mensuelle et 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.

Membres de ce comité :

- Le Conseil Régional de Haute-Normandie (Bénédicte Duthion),
- La Direction des Musées de France (Bernadette Goldstein, Florence Vielfaure, Laurent Manœuvre),
- Le musée départemental des Antiquités de Rouen (Geneviève Sennequier, Cécile Colonna),
- Le rectorat de Rouen (Claire Quenehen, Philippe Thénot),
- Le CRIHAN (Judith Panijel, Jean-Christian Cordier),
- La DRAC de Haute-Normandie (Sylvie Le Ray-Burimi),
- Le musée de Dieppe (Pierre Ickowicz),
- Le musée Corneille de Petit-Couronne (Sophie Fourny-Dargère),
- Le musée Malraux du Havre (Jean-Pierre Melot),
- Le musée des Beaux Arts de Rouen (Christine Germain).

À ce jour, cinq réunions ont eu lieu :

- 5 Mars, Validation du nom de domaine et de ses extensions, définition des grandes lignes du graphisme pour le portail et sélection du graphiste,
- 4 Mai, Validation des titres des rubriques,
- 24 Mai, Validation du graphisme et des principes généraux d'administration et de gestion du portail par le comité éditorial,
- 7 Juin, Validation des principaux gabarits du portail,
- 22 Juillet, définition des grandes lignes de la base de données régionale :
 - Quels publics ?,
 - Quelles fonctionnalités ?,
 - Quelles données essentielles ?,
 - Élaboration des recommandations techniques pour l'appel à projet,
 - Mise au point de l'export type depuis les musées.

4.1.5 Avancement du portail

L'ouverture au public a eu lieu le 20 Octobre 2004 et fut l'occasion d'une présentation dans la salle du conseil de la Région Haute-Normandie en présence des représentants de la Région, de la DRAC, des Conseils Généraux de l'Eure et de Seine-Maritime et bien entendu de tous les conservateurs des musées concernés. Le nom de domaine demandé par la SFHN étant musees-haute-normandie.fr, le site sera visible sous <http://www.musees-haute-normandie.fr>.

normandie.fr mais également <http://musees-haute-normandie.fr>. Des réservations de noms de domaine d'orthographe voisine et d'extensions communes sont prévues.

Le portail est physiquement hébergé au CRIHAN.

Son administration générale repose sur SPIP (acronyme de Système de Publication pour l'Internet), distribué sous licence de logiciel libre (General Public Licence). Il s'agit d'un C.M.S. (Content Manager System) permettant la gestion collective d'un site Internet à partir d'une base de données MySQL. SPIP propose deux niveaux d'accès :

- Un pour les administrateurs, qui gèrent la structure du site et la validation des articles,
- Un pour les rédacteurs, qui proposent des articles.

Le choix de SPIP comme plateforme logicielle a été fait pour permettre de séparer entièrement, et de distribuer entre différentes personnes, trois types de tâches :

- la composition graphique,
- la contribution rédactionnelle,
- la gestion éditoriale du site (tâche qui comprend l'organisation des rubriques, la validation des articles proposés...).

Cela permet aussi de dispenser les participants à la vie du site d'un certain nombre d'aspects fastidieux de la publication sur le Web, ainsi que de connaissances techniques trop longues à acquérir.

Une partie privée permet donc de gérer le site via une interface graphique complète, très simple d'utilisation.

Cette interface s'adapte en fonction des activités de chaque rédacteur ou administrateur, et en fonction de l'activité du site. Utilisé par plusieurs rédacteurs, SPIP devient un outil de travail coopératif autorisant également des débats autour des articles, un système de validation, et le travail à plusieurs sur un même article.

Sur le plan du suivi éditorial du site, plusieurs options sont offertes :

- suivi de l'activité éditoriale ; si le site est le fruit d'une équipe de rédacteurs, on peut signaler automatiquement les annonces importantes de l'activité éditoriale à une adresse email (dans l'idéal, une liste de diffusion). Ainsi, lorsqu'un article est publié ou proposé à la publication, cette liste en est informée,
- annonce des nouveautés ; SPIP peut envoyer automatiquement, selon une fréquence fixée par les administrateurs, un courrier électronique recensant les dernières publications sur le site.

Les rubriques principales du portail souhaitées par le comité éditorial sont les suivantes :

- Les musées (fiches signalétiques des musées par thèmes et par villes),
- L'ensemble des fiches signalétiques (qui a été validé et intégré à fin août 2004),
- Les expositions temporaires,
- L'agenda des expositions temporaires, animations et activités propres aux musées,
- L'actualité mensuelle, avec les conférences, les ateliers [adultes/enfants],
- Un mensuel « À découvrir »,
- Une « mise en lumière » d'un tableau, d'un objet insolite, d'une nouvelle acquisition, une vidéo ...avec archives mensuelles,
- Les expositions en ligne : par exemple, « Normandie & Amériques, Cinq cents ans d'histoire commune »,
- Le partenariat avec la Basse-Saxe,
- Le musée et l'école (module déjà intégré mais en attente de dossiers pédagogiques) qui présentera les annuaires des services éducatifs, les dossiers et fiches pédagogiques, les animations scolaires,
- Recherche dans les collections (sur la base de données de l'ensemble des collections muséographiques de la région dont l'embryon est prévu en 2005).

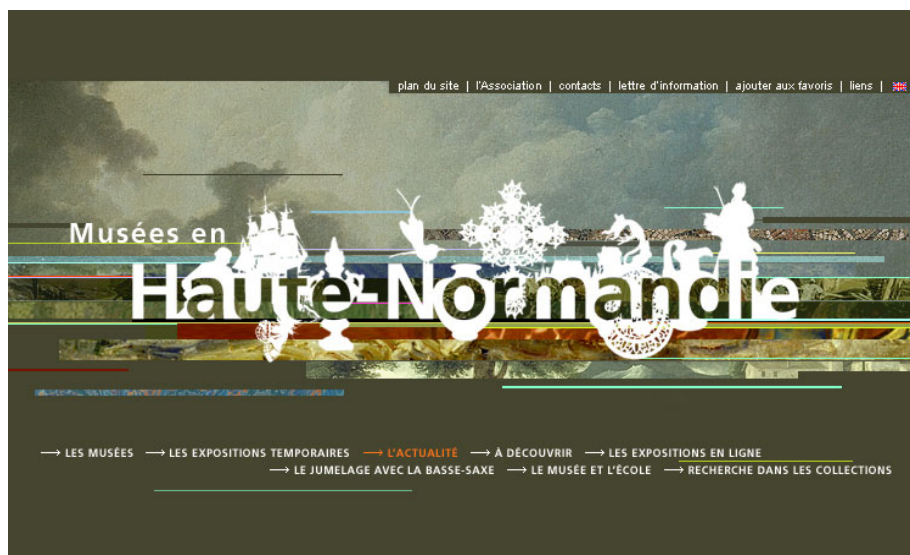
Le module de recherche dans les collections en ligne sera conçu pour un large public, souvent curieux et néophyte, qui souhaite pouvoir resituer et interpréter des œuvres. Plusieurs niveaux d'information seront donc accessibles. Un niveau très général à partir des textes introductifs aux différentes collections, un niveau plus développé à partir des différents axes abordés, un niveau très précis à partir des fiches existantes dans les logiciels utilisés par les musées. À terme, l'ensemble des collections publiques de Haute-Normandie sera accessible en ligne et cette base de données constituera un outil de mise en valeur du patrimoine régional et de mise en évidence de ses spécificités. Pour accélérer le processus (et ne pas doubler le travail des conservateurs) il a été convenu de « récupérer » les fiches déjà couramment exportées par les musées vers les services du ministère en charge de la base Joconde. Cette opération se fera donc en aval du processus de numérisation et d'informatisation : les fiches non dotées d'images seront également intégrées, ce qui aura comme avantage de favoriser la numérisation du fonds associé puis son rattachement à chaque fiche. Les conditions d'export des données à partir de la base Joconde seront fixées en accord avec la DMF.

Plusieurs niveaux d'interrogation seront proposés aux visiteurs du portail :

- Consultation de corpus d'œuvres reflétant des thématiques transversales,
- Recherche simple à partir des auteurs, des titres des œuvres, du type des objets, de périodes historiques, du lieu de conservation,
- Recherche libre (plein texte) dans les collections,
- Recherche multicritères permettant de croiser plusieurs critères de recherche comme le lieu de conservation, l'origine géographique de l'objet, le sujet, les périodes historiques, les matières et techniques utilisées, les spécificités régionales.

Des thématiques transversales et spécificités des collections pouvant être valorisées à partir de la base régionale seront proposées par la SFHN. Il pourrait s'agir de thème comme La Normandie vue par les artistes Normands (Vallée de la Seine et École de Rouen), la céramique, l'histoire de la Normandie, les saints locaux, l'art sacré, la marine et la navigation, la mythologie, les ivoires, le mobilier

Les rubriques et fonctionnalités annexes classiques d'un site web sont bien entendu prévues (L'association, Lettre d'information, Contacts, Plan du site, Liens, Ajouter aux favoris).



Le graphisme de la page d'accueil validé par le comité éditorial



Répartition des musées de Haute-Normandie

Le portail des musées de Haute-Normandie constituera, grâce au module de recherche dans les collections, une vitrine immédiate du travail de numérisation et d'informatisation des collections régionales. La visibilité des collections et la représentativité des musées étant instantanées, la base de données ne peut qu'inciter les musées à participer activement au processus de numérisation et d'informatisation des collections.

De plus, en privilégiant la mise en valeur de thématiques et de spécificités régionales, la mise en ligne des collections régionales doit permettre aux conservateurs de mettre en place une politique régionale cohérente de numérisation et de saisie des collections.

La consultation de cette base de données régionale permettra aussi aux conservateurs de mieux s'approprier l'ensemble des collections régionales, de les aborder à partir d'un nouveau point de vue et de faire apparaître de nouvelles transversalités.

4.2 Télémédecine

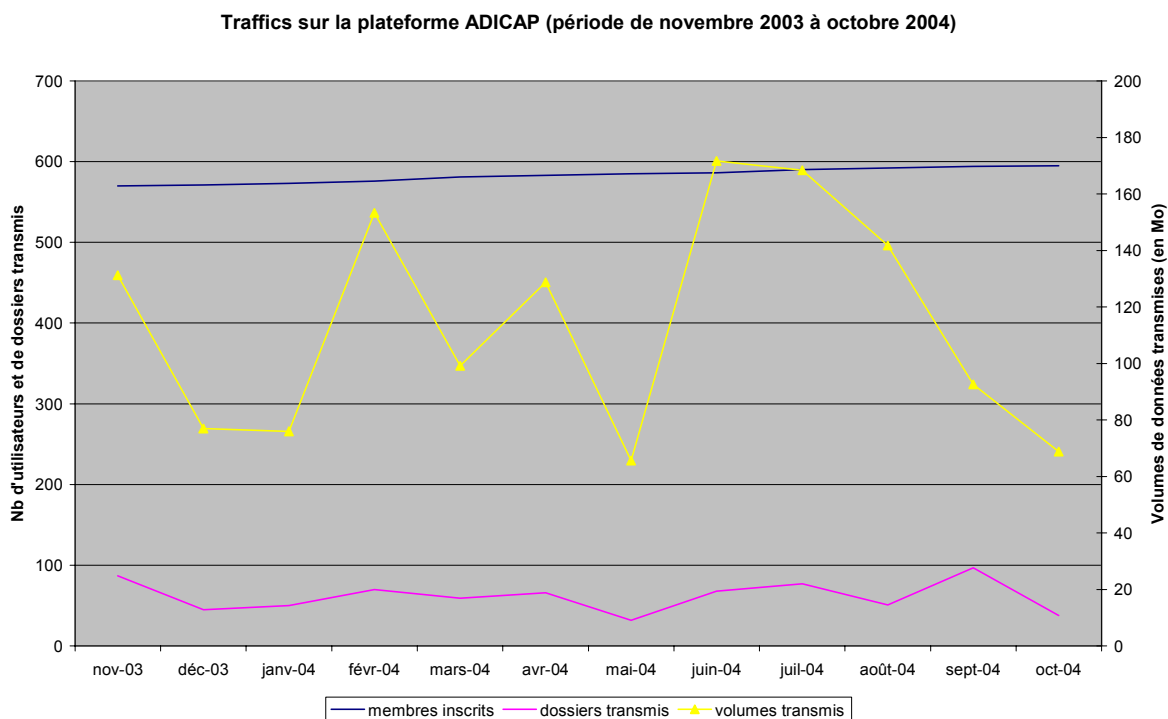
Depuis plusieurs années, le CRIHAN a été mis à contribution pour assurer un rôle de conseiller et développer des applicatifs dans le domaine de la télésanté (plateforme ADICAP, CRAO, dossier médical partagé etc).

Plusieurs de ces actions impliquent d'ailleurs des partenariats avec la région Basse-Normandie. A la demande du CESR¹ de Basse-Normandie, une présentation a été organisée à Caen en septembre, dans le cadre du groupe de travail "Communications" des CESR de Basse et Haute-Normandie sur la thématique "Santé et stratégies réseaux de communications".

Voir l'Annexe H - , page 117, "Présentation aux CESRx, Caen, septembre 2004".

4.2.1 Plateforme ADICAP

Fonctionnant depuis 1996, le service d'échange de cas médicaux en anatomopathologie est désormais bien rodé. Entre 2003 et 2004, on observe une certaine stabilité des utilisateurs de la plateforme comme l'indique le graphique ci-après (trait bleu, échelle de gauche) :



Activités sur la plateforme ADICAP

En nombre de dossiers transmis (trait rouge, échelle de gauche) le mois de septembre est significatif d'un nouveau type d'utilisation du service : dans le cadre du CRAO (voir plus loin) des dossiers sont acheminés vers le serveur, non pas en tant que demande de coexpertise (qui est la finalité première de cette plateforme) mais en tant que dossier d'aide contextuelle à ce nouveau produit.

En quantité de données (trait jaune, échelle de droite), le mois de septembre, par contre, n'est pas le plus élevé : cela s'explique par le fait que les dossiers d'aide au CRAO sont des dossiers expurgés pour en faciliter la lecture : ils ne contiennent en général que des images significatives, triées, en nombre limité.

¹ Conseil Economique et Social Régional

4.2.2 Dossier médical partagé

A la demande du GERDOSS (Groupe d'Études et de Recherche sur le Dossier Médical Partagé) le CRIHAN héberge sur ses installations, depuis 2003, une application développée par la société THETIS. Cette application concerne le partage en ligne, par l'ensemble des médecins, des données relatives à un patient, de quelque source médicale qu'elles viennent. Il s'agit de tester les fonctionnalités de l'application avant d'entamer une phase dite de VSR (Vérification de Service Régulier) à l'issue de laquelle le service a vocation à être implanté dans un environnement adapté.

4.2.3 Serveur d'identités patients

En matière de dossiers médicaux partagés en ligne, l'un des problèmes techniques informatiques les plus importants consiste à savoir rapprocher les données concernant un même individu lorsqu'elles sont réparties sur plusieurs serveurs. En effet, chaque serveur peut avoir son propre codage pour construire l'identifiant d'un patient : dès lors, il importe de définir des procédures et de mettre en œuvre les systèmes permettant à coup sûr d'éviter de croiser des données étrangères et d'obtenir l'exhaustivité des informations concernant un même individu.

Si le besoin d'une démarche nationale sur ce thème semble évident, les acteurs concernés et les stratégies se déclinent différemment au niveau des régions : pour la Haute-Normandie, le CRIHAN a été associé à différentes réunions, en tant que support informatique éventuel, dont une fut organisée en ses locaux avec l'ARH¹, à la demande du SGAR².

4.2.4 SOPHIE

SOPHIE est le nom d'un projet ayant fait l'objet d'un appel d'offre émanant du Réseau Onconormand, dont les partenaires de maîtrise d'ouvrage sont le CHU de Rouen, le centre Henri-Becquerel et d'autre établissements de soins impliqués en cancérologie.

Il s'agit d'un système de santé partagé grâce auxquels les praticiens pourront mettre à disposition et consulter tous les éléments afférents aux concertations pluri-disciplinaires.

Ce système est composé de logiciels clients et d'un logiciel serveur pour l'hébergement duquel le CRIHAN est sollicité.

4.2.5 Plan cancer

Dans le cadre du Plan Cancer, la SFP (Société Française de Pathologie) a été missionnée par le Ministère de la Santé, pour diriger une étude très large sur les différentes étapes nécessaires à la production systématique de données fiables en matière d'études épidémiologiques.

Deux d'entre ces étapes concernent des domaines sur lesquels le CRIHAN a acquis une expérience certaine :

- La collecte de données anatomopathologiques et hématologiques dans le cadre de l'étude CRISAP réalisée par le CRIHAN en 2003 (cf rapport d'activités précédent),
- La standardisation des comptes rendus médicaux (voir ci-après le projet CRAO).

C'est pourquoi la SFP a souhaité que le CRIHAN soit associé à cette réflexion, pour ce qui concerne les mécanismes techniques de collecte et de traitement des données.

¹ Agence Régionale de l'Hospitalisation, (Groupement d'Intérêt Public associant l'Etat et l'assurance maladie)

² Secrétariat Général aux Affaires Régionales (service de la Préfecture)

Le CRIHAN a donc apporté les éléments nécessaires dans le cadre d'un des groupes de travail de ce programme, le groupe "informatique" : un document préliminaire à un cahier des charges a été achevé début octobre. La SFP devrait le rendre publiable prochainement.

4.2.6 Compte-rendu assisté par ordinateur, en ligne

A l'initiative de l'ADICAP (Association pour le Développement de l'Informatique en Anatomie et Cytopathologie), le CRIHAN a développé en 2004 un nouvel outil, le CRAO "Compte-Rendu Assisté par Ordinateur".

Le concept avait déjà été développé par une société privée mais pas dans un environnement "en ligne" ni dans une version adaptable à toutes les pathologies nécessitant la production d'un compte-rendu.

4.2.6.1 Outil de standardisation

La standardisation des comptes-rendus anatomopathologiques est une réponse aux besoins exprimés par les oncologues et les épidémiologistes des organismes de tutelle. Basée sur la mise en ligne d'un outil unique de référence, alliant interactivité et coopération, elle autorise en effet l'exploitation centralisée des informations réparties dans l'ensemble des services de pathologie de l'hexagone et prépare ainsi l'accueil des programmes nationaux d'évaluation des soins et du dépistage des affections tumorales.

Articulé autour du serveur de l'association ADICAP, ce service doit permettre à l'ensemble des pathologistes français :

- de pratiquer une interprétation sécurisée des lésions tumorales s'appuyant sur les mêmes mots et les mêmes codes lésionnels pour les mêmes lésions,
- de bénéficier en ligne d'une aide contextuelle, par images ou textes de référence, pour les diagnostics difficiles,
- d'utiliser un référentiel dont la mise à jour sera permanente,
- de fournir aux tutelles les informations pertinentes pour les enquêtes de santé publique.

Le CRAO peut en outre :

- permettre la déclinaison du concept de compte-rendu standardisé pour toute pathologie et/ou organe,
- favoriser la collecte et la valorisation des données issues de ces comptes-rendus,
- améliorer sensiblement les mécanismes d'assurance de qualité.

Il satisfait simultanément deux types de demandes :

- Celle des responsables des activités territoriales dans le domaine de la santé qui expriment leur besoin d'identification de certaines populations et de réactivité par rapport aux études épidémiologiques,
- Celle des professionnels de santé en matière de standardisation de l'information pour favoriser l'amélioration de l'assurance de qualité des soins.

4.2.6.2 Le principe

Le schéma de principe est présenté en Annexe I - , page 122, Schéma de principe "CRAO".

Dans ce schéma on distingue les deux ensembles distincts mais liés :

- La création des référentiels en ligne. Tout d'abord (partie droite du schéma), un ou plusieurs experts désignés, spécialisés dans une pathologie donnée, disposent d'un outil en ligne qui va permettre la constitution d'un référentiel unique et reconnu. Ce référentiel comporte en lui-même un système de codification des lésions (ADICAP ou autre) ainsi qu'une logique de cheminement dans un jeu de questions-réponses. Il comprend en outre un jeu de fichiers d'aide contextuelle, en mode texte aussi bien qu'en mode graphique avec images de référence,
- L'outil de rédaction en ligne. De l'autre côté (partie gauche du schéma), les utilisateurs distants disposent d'un outil de rédaction proprement dit qui s'appuie sur ce référentiel. Il est prévu que seul le référentiel, comme son nom l'indique, reste un support incontournable (il pourra cependant être dupliqué au sein des structures anatomopathologiques, pour peu qu'elles en garantissent la mise à jour régulière par rapport au référentiel centralisé). L'outil de rédaction en ligne, lui, pourra être personnalisé au gré des choix des utilisateurs (certains souhaiteront qu'il soit intégré dans leur chaîne logicielle locale) : cependant, il ne pourra jamais s'écarter de la logique d'exploitation du référentiel (qui comme on l'a vu possède en lui-même cette logique). C'est ceci qui garantit la production des comptes-rendus selon un même standard.

Enfin, puisque les comptes rendus sont produits par rapport à un référentiel comportant un système de codification, les codes font partie intégrante de ces comptes-rendus : leur collecte ultérieure aux fins d'études épidémiologiques produit un ensemble directement exploitable par des outils statistiques ou analytiques.

4.2.6.3 Le fonctionnement

Un questionnaire interactif reproduit la démarche logique de l'interprétation pratiquée par le pathologiste.

- La démarche s'appuie sur un ensemble de séquences thématiques dont la chronologie reproduit l'ordre logique de l'interprétation :
- Les premières séquences concernent la motivation de l'examen, éventuellement le contexte clinique, la topographie, les conditions de l'examen et la qualité du prélèvement,
- Les séquences suivantes sont celles qui décrivent les faits pathologiques,
- Les dernières séquences expriment d'éventuelles recommandations conformes aux directives des organismes professionnels ou le résultat d'une possible relecture.

Chaque séquence contient plusieurs propositions ou réponses qui s'excluent mutuellement. Chaque réponse appelle :

- le texte pré rédigé destiné à l'édification du compte-rendu et établi d'après la nomenclature en vigueur,
- le code ADICAP,
- et conduit vers une nouvelle séquence liée à la réponse choisie, ce qui oblige à suivre le déroulement complet des séquences établies jusqu'à la fin du compte rendu.

A certaines étapes difficiles de la construction du compte-rendu, il est possible de consulter des commentaires et des images illustrant la pathologie sélectionnée et qui peuvent constituer une aide au diagnostic ou une contribution à l'enseignement. Lorsque le déroulement des séquences est terminé, un compte-rendu complet est généré, que l'utilisateur peut encore modifier s'il le juge utile.

4.2.7 Images "grands champs" en pathologie

Les progrès de la représentation numérique en anatomopathologie et en hématologie entraînent la production d'images de qualité et de taille de plus en plus grandes. Les applications s'en enrichissent : l'une d'elles, proposée par une société privée, concerne leur agencement en tant que véritable microscope virtuel.

Les moyens à mettre en œuvre restent cependant importants : c'est pourquoi le CRIHAN a participé à la mise au point de cette application. On en retrouvera plus haut le descriptif à la fin du chapitre sur le pôle de modélisation numérique, au paragraphe "TRIBVN".

4.2.8 Projet Techno-Vision/Messidor

MESSIDOR (Méthodes d'Evaluation de Systèmes de Segmentation et d'Indexation Dédiées à l'Ophtalmologie Rétinienne) est le nom donné par son porteur au projet déposé dans le cadre de TECHNO-VISION : TECHNO-VISION est un appel à projets du Ministère de la Recherche, service DTA3- Technologies de l'information et de la communication.

Le porteur principal est le CMM Armines, Centre de Morphologie Mathématique de l'association de recherche contractuelle Armines, partenaire de grandes Ecoles d'Ingénieurs, en particulier de l'Ecole des Mines de Paris.

Un consortium a été formé qui comprend :

CMM/ARMINES	Centre de Morphologie Mathématique	Fontainebleau
ADCIS	PME	Hérouville Saint-Clair
ISI	Image Sciences Institute	University Medical Center Utrecht
L3I	Laboratoire Informatique Image Interaction	La Rochelle
LATIM	Dpt ITI ENST Bretagne	Brest
SIC	Signal Image et Communications	Futuroscope Chasseneuil
CHU NANCY- BRABOIS	Service d'Ophtalmologie	Vandœuvre-lès-Nancy
DAVIEL - CHU BREST	Service d'ophtalmologie	Brest
EA 3063	EA 3063 / ophtalmologie	St Etienne
SOL	Service d'Ophtalmologie Hôpital Lariboisière	Paris
CRIHAN	Centre de Ressources Informatiques	Rouen

Le thème général de MESSIDOR porte sur l'imagerie médicale dans le domaine des pathologies rétinienues et principalement de la rétinopathie diabétique.

Cette pathologie est la principale cause de malvoyance acquise, pouvant conduire à la cécité totale. Son diagnostic et son traitement précoces peuvent permettre d'en ralentir, voire limiter, les effets.

Les initiateurs du projet MESSIDOR ont développé des algorithmes pour l'aide au diagnostic, c'est-à-dire au dépistage et au suivi de cette pathologie.

Les participants associés à des fournisseurs de données et à un évaluateur industriel intéressé par le transfert technologique de ces algorithmes, ont décidé de mettre leurs compétences en commun pour l'étude et la réalisation d'un système performant d'évaluation et de comparaison des résultats obtenus par deux méthodes déjà explorées et par les algorithmes développés à l'intérieur de chacune d'elles.

Ces deux méthodes peuvent, en effet, être toutes deux utilisées pour un diagnostic automatique de l'état de la rétine à un moment donné. Elles peuvent donc être comparées dans cette application

Dans les systèmes de télémedecine, tels qu'ils ont été présentés et évalués récemment, les images sont prises dans des centres de dépistage et télétransmises dans des centres de lecture. Cette séparation des tâches de prise de vue et d'analyse des clichés a l'avantage principal de ne plus nécessiter la présence d'un spécialiste en ophtalmologie pour l'acquisition des images. Il existe, en effet, depuis quelques années des rétinographes non mydriatiques (systèmes de prise de l'image sans dilatation de la pupille) qui ne nécessitent pas la présence d'un médecin.

Cependant, le problème du grand nombre de clichés à analyser n'est toujours pas résolu ; si la télémedecine ophtalmologique se généralise, les centres de lecture seront rapidement surchargés. Une assistance par ordinateur, consistant en une analyse automatique des clichés, pourrait aider à surmonter ce problème. Il s'agit d'un dépistage automatique qui peut être vu comme un premier tri d'images pour réduire la quantité de clichés restant à traiter par les spécialistes. Ce dépistage assisté par ordinateur serait basé, soit sur la détection automatique des lésions caractéristiques de la Rétinopathie Diabétique, soit sur la comparaison de l'image requête avec des images renseignées d'une base de données. Il semble représenter la seule solution pour permettre de mettre en place un dépistage systématique dans un contexte de stagnation, voire de diminution du nombre des ophtalmologistes ou dans des régions présentant un manque chronique de spécialistes.

4.2.8.1 Objectifs visés

- Constituer d'importantes bases d'images de la rétine obtenues au moyen de rétinographes numériques. Ces bases de données qui comporteront à terme plusieurs milliers d'images rendues anonymes, dont des images non pathologiques, seront constituées par les équipes ophtalmologiques participant à ce programme. Une fois le programme MESSIDOR réalisé, ces bases de données seront mises à disposition de la communauté scientifique après signature de conventions.
- Préciser les critères d'évaluation pour :
 - Les algorithmes de détection et de quantification des lésions élémentaires de la rétine,
 - Les algorithmes de dépistage (classement des images en catégories comme «Rétinopathie Diabétique absente», «Rétinopathie Diabétique minime», «Rétinopathie Diabétique avancée»).
- Intégrer, sur une plateforme de test, des procédures d'indexation, de recherche et de traitement automatique des images de la rétine. Ces procédures ont déjà été

développées par les participants à ce programme. Elles devront être adaptées pour être utilisées pour des formats variés d'images essentiellement en termes de définition. Elles devront être également adaptées aux contraintes logicielles de la plateforme de test et aux objectifs du programme.

- Développer et intégrer des procédures permettant de mettre en œuvre l'évaluation des algorithmes, leur comparaison et la diffusion des résultats.

4.2.8.2 Résultats attendus

Dans le domaine médical, l'utilisation d'un système automatique ne peut se faire qu'après avoir été validé rigoureusement. Le programme MESSIDOR offrira la possibilité d'évaluer des méthodes d'analyse automatique et d'aide au diagnostic d'une manière incontestable en fournissant des bases de données et des critères d'évaluation communs. Il favorisera la comparaison impartiale entre des méthodes concurrentes. Il devrait favoriser également la synergie entre les participants pour développer et industrialiser la ou les méthodes les plus performantes.

4.2.8.3 Rôle du CRIHAN

En tant que centre de ressources pour le calcul intensif et pour la modélisation numérique, le CRIHAN apporte au projet les moyens techniques appropriés sous formes de calculateurs et supercalculateurs de haut niveau, eux-mêmes associés à des capacités de stockage importantes dont auront besoin les bases de données hébergées.

En tant que maître d'œuvre et d'ouvrage pour le déploiement des réseaux pour la recherche, il apporte des infrastructures de communications à très haut débit qui seront utilisées par l'ensemble des partenaires du projet, tant pour produire les bases de données que pour exploiter les algorithmes de calcul.

Ces deux composantes forment un potentiel qui permet au CRIHAN d'intervenir en soutien technique aux projets innovants tels que celui-ci.

Enfin, un service d'assistance scientifique assure le lien entre les utilisateurs et ces infrastructures et architectures spécifiques.

Le CRIHAN participera donc au développement d'une plateforme sécurisée pour l'hébergement des données produites dans le cadre du projet. Le site sera également utilisé comme plateforme de travail collaboratif pour l'échange des informations et données entre les partenaires et avec le monde scientifique extérieur. Cette tâche comprend :

- La rédaction des spécifications,
- La sécurisation du site (l'une des tâches importante sera la sécurisation des images),
- Le développement d'une interface utilisateur pour le téléchargement des images et leur visualisation (elle permettra également le téléchargement des fichiers d'annotation des images),
- La création d'un forum privé,
- La maintenance de la plateforme pendant la durée du projet.

4.3 Accueil de structures innovantes

4.3.1 Science-Action Haute-Normandie

Science Action Haute-Normandie dispose depuis 2003 de deux bureaux au CRIHAN. L'un d'eux est en fait un véritable studio d'enregistrement dans lequel sont filmées chaque mois des interventions d'un chercheur régional sur un thème donné. L'intervention est retransmise simultanément par le CRIHAN sur tout son réseau. Elle est ensuite "montée" et le film est alors mis à disposition des internautes sur le serveur web, également hébergé au CRIHAN.

Par ailleurs, le CRIHAN continue à apporter son support technique aux manifestations extérieures organisées par Science Action, quand celles-ci ont recours à l'usage des nouvelles technologies.

4.3.2 GeosTech

Geos-Tech est une société récemment créée en Haute-Normandie (décembre 2003), spécialisée dans les domaines de la géographie numérique, de l'environnement et de l'imagerie spatiale. Les premiers contacts avec le CRIHAN remontent, eux, à novembre 2003.

Le plan de montée en puissance de la société prévoit en 2004, 7 personnes, en 2005, 12 personnes et en 2006, 18 personnes : Géos-Tech envisage donc une implantation sur le site du Madrillet et souhaite l'aide du CRIHAN pour la phase de démarrage.

Une convention d'hébergement, a été conclue au titre de la mission du CRIHAN en matière d'aide et de soutien aux activités innovantes liées à l'utilisation des nouvelles technologies et à l'utilisation de moyens informatiques performants. Outre l'utilisation de ressources calcul et réseau du CRIHAN, la convention prévoit l'attribution de deux bureaux dans la partie technique du bâtiment.

Les activités de Geos-Tech en recherche et développement dans les domaines de la géographie de l'environnement et de l'imagerie spatiale, dans le domaine de la gestion et de l'anticipation des risques industriels et environnementaux, ses besoins en ressources de calcul, notamment pour les services SIG distants, le couplage avec l'environnement 3D, les modèles cellulaires ou le parallélisme multi-agents, le besoin de portage de ces services sur une plateforme IPv6 généralisée, justifient pleinement de ce support.

Par ailleurs la société reçoit le soutien du Conseil Régional de Haute-Normandie, du Conseil Général de Seine-Maritime et de l'ANVAR Haute-Normandie,

Géos-Tech négocie des aides, sous forme de subventions, de l'ACCRES, du Conseil Général, de Normandie Entreprendre, du Conseil Régional, de l'ANVAR et du RNTL.

Les partenariats envisagés sont de plusieurs ordres :

- Industriels : Alcatel Space, Thalès Comm., Thalès Avionics, Spot Image, Eurimage, Fleximage, ...,
- Etatiques : Mindef-DGA (CTA, CELAR, SPOTI, STTC), RNRT, RNTL, ONERA, IGN, CNES, ANVAR, ...,
- PME : GéoDéveloppement, 6Wind, ...,
- Universitaires (Rouen, Paris, Marne-la-Vallée, Toulouse),
- Grandes écoles (INSA Rouen, Telecom Brest), LIP6, LAAS, Eurecom, LSIIT, Ensimag, ENSG, ...,

- CRIHAN pour des actions de formations portant sur différents thèmes dont les solutions logicielles de SIG (Systèmes d'Informations Géographiques).

4.4 Les "coups de main"

4.4.1 Science en Fête

Cette semaine annuelle de diffusion scientifique grand public, menée, pour notre région, par le CCSTI Science Action Haute-Normandie, continue de recevoir l'aide du CRIHAN, notamment pour la partie mise en ligne des manifestations à travers le village des sciences virtuel, "online", mis en place pour l'édition 2003.

4.4.2 Forum des métiers

Ce forum se tient cette année au Parc des Expositions. Sollicité par le Conseil Régional pour assurer la connectivité Internet" de la manifestation, le CRIHAN a prévu (le forum a lieu fin novembre) d'y déployer le matériel nécessaire et d'effectuer le raccordement via une fibre optique mise à disposition par France Télécom, dans les mêmes conditions que celles de la manifestation Odyssée 21 qui s'était tenue en 2001 sur le même site.

4.4.3 EPN

La Caisse des Dépôts et Consignations (CDC) a lancé un appel d'offre pour le développement des EPN (Espaces Publics Numériques). Les propositions doivent être validées par chaque Conseil Régional.

Pour la Haute-Normandie, le Conseil Régional a souhaité être lui-même le porteur de projet avec le concours de certaines associations.

Les missions dévolues à la structure sont :

- De dresser un état des lieux des EPN en région,
- D'assurer la coordination technique et l'animation du réseau des EPN,
- De constituer une représentativité des EPN au niveau régional et national.

Le CRIHAN avait déjà constitué, en association avec Science Action Haute-Normandie, un dossier en réponse à l'appel à propositions de la CDC. La Région envisage donc d'intégrer dans ces partenaires, pour les missions les concernant, dans son propre dossier.

5 A N N E X E S

Annexe A - Publications des utilisateurs du pôle de modélisation numérique

CNPP Entreprise

Centre National de Prévention et de Protection Laboratoire du Feu et de l'Environnement

Pôle Européen de Sécurité, CNPP VERNON

Contributeur à ce rapport : Raphael Thiery

Résumé :

Pour ses activités de modélisation en incendie, le CNPP utilise les ressources informatiques du CRIHAN, depuis novembre 2003. Un code de calcul dédié aux applications incendie permet au CNPP de réaliser des simulations détaillées de feux qui rendent compte de la dynamique des phénomènes de combustion. Ces simulations sont utilisées par le CNPP essentiellement dans le cadre d'études d'ingénierie incendie, mais aussi pour la reconstitution de départ de feu dans le cadre d'expertises après sinistre. Ces modélisations permettent aussi d'extrapoler ou de compléter les essais feu en grandeur réelle réalisés par le CNPP sur son site de VERNON. Sur la base d'une description précise de la géométrie et de la nature des combustibles, sont évalués dans le temps les montées en température, la propagation des flammes, les mouvements de fumées et éventuellement le refroidissement par un système d'extinction automatique de type sprinkler.

Un code de CFD (Computational Fluid Dynamics), basé sur une modélisation de la turbulence par la technique LES (Large Eddy Simulation) est utilisé sur le cluster IBM du CRIHAN. Il permet la résolution des équations classiques de la mécanique des fluides pour les écoulements à faible nombre de Mach, de la thermique ainsi que des équations simplifiées de combustion turbulente et de rayonnement. La consommation CPU du CNPP au CRIHAN depuis novembre 2003 est proche de 370 heures.

UMR6614-CORIA, Technopôle du Madrillet

Contributeur à ce rapport : Alain Berlemont

Etudiants en Thèse :

Sébastien Tanguy Boursier MRT soutenance le 08/11/2004

Thibaut Ménard Boursier MRT 2ème année de thèse

Publications :

Tanguy S., Berlemont A. 2003

Development and applications of a Level Set

Method for interface tracking, ICLASS ' 03, Sorrento, Italie, CDrom.

Tanguy, S. Ménard T., Berlemont,A., Estivalezes,J.L., Couderc,F. 2004

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

Tanguy S., Berlemont A.
Development of a Level Set Method for interface tracking: applications to droplet collisions.
Soumise à Int. J. Multiphase flows.

Thèse :

Ecole Doctorale S.P.M.I.I.
"Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques", Sébastien Tanguy, soutenue le 8 novembre 2004
Discipline Physique, Spécialité Energétique, Dr Thèse : Alain BERLEMONT

**Laboratoire de Synthèse Organique/UMR-CNRS-6011
Faculté des Sciences & Techniques, Université du Maine, Le Mans**

Contributeur à ce rapport : Dr Pascal Gosselin

Dossier scientifique 2002005

Conférences : interprétation de la réactivité de molécules soufrées par modélisation moléculaire

P. Gosselin, "Journée Scientifique Serge Masson", ENSICAEN, Caen, 16 juillet 2004.

P. Gosselin, "21st International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS XXI)", Madrid, 4-9 juillet 2004

The origin of endo and ¹-facial diastereoselectivities in the hetero-diels-alder reactions of (+)-(S)-3-p-tolylsulfinyl-3-buten-2-one with styrenes: first evidence of C-H...O bonds involving the sulfinyl oxygen

Groupe de Physique des Matériaux, UMR 6634 CNRS - Université de Rouen, Site universitaire du Madrillet

Contributeur à ce rapport : Denis Ledue

- propriétés magnétiques des nanoparticules
- multicouches magnétiques

PUBLICATIONS

"Monte Carlo study of the thermally activated magnetisation reversal in a single nanoparticle"

D. LEDUE, P.E. BERCHE and R. PATTE J. Magn. Magn. Mater. 272-276, 683 (2004)

"Magnetization switching in a ferromagnetic Heisenberg nanoparticle with uniaxial anisotropy : A Monte Carlo investigation"

D. LEDUE, P.E. BERCHE and R. PATTE Physica B 348, 410 (2004)

"Magnetic properties of helimagnetic - ferromagnetic superlattices : A

Monte Carlo study"

P. VERDIER, D. LEDUE and R. PATTE J. Magn. Magn. Mater. 271, 355 (2004)

CONGRES

Conférences orales

"Retournement d'aimantation thermiquement activé d'un agrégat de cobalt :

Etude par simulations numériques Monte Carlo"

D. LEDUE, R. CHENNA et R. PATTE Journées de la Matière Condensée, Nancy
(30/08-3/09/2004)

"Simulation Monte Carlo du retournement d'aimantation d'un agrégat de
cobalt"

D. LEDUE, R. CHENNA et R. PATTE Journées "Simulation Numérique, Matière
Condensée et Désordre : Interface Simulation / Expérience", Jussieu, Paris (24-25/05/2004)

Présentation par poster

"Simulation Monte Carlo du retournement d'aimantation d'un agrégat de
cobalt"

D. LEDUE 9ème Colloque Louis Néel, Autrans (17-19/03/2004)

Equipe Réactivité en Synthèse Organique (RéSo), UMR-CNRS SymBio, Faculté de St-Jérôme, Marseille

Contributeur à ce rapport : Anouk Siri

Personnes participant au projet:

- Jean-Marc Pons (PR2 / UMR SymBio)
- Anouk Siri (MCF / UMR SymBio)

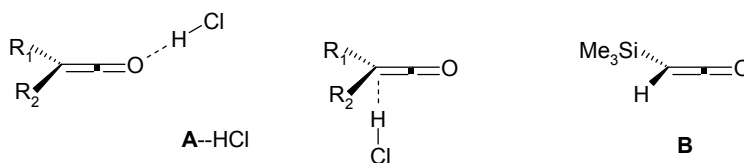
Complexation et Réactivité des Cétènes Silylés

RESUME :

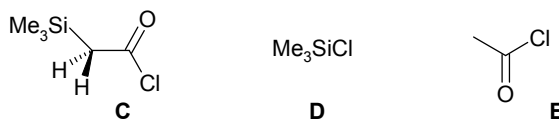
Dans le cadre de l'étude des états de transition et en relation avec le laboratoire PIIM du Pr. J.-P. Aycard (UMR-CNRS 6633), nous avons entrepris une étude de la réactivité des cétènes silylés en phase gaz et sur matrice d'argon. Ce projet a pour but de contribuer à l'étude du mécanisme de réactions des cétènes silylés en présence de HCl. L'étude est effectuée au niveau B3PW91/6-31++G(d,p) afin de déterminer le chemin réactionnel

complet menant des réactifs aux produits détectés par spectrométrie FTIR, les barrières d'activation devant être en accord avec la température de l'expérience (20 K).

BILAN 2003-2004



Nous avons effectué l'étude de la réaction entre le triméthylsilylcétène B et HCl. Pour cela, nous avons mené une étude théorique en DFT, à la suite d'une étude par spectrométrie FTIR sur matrice cryogénique, montrant qu'il se produit plusieurs réactions d'addition successives de molécules de HCl sur le cétène silylé ou plus exactement sur le complexe cétène-HCl qui peut prendre l'une des deux formes indiquées. Différents composés (C, D, E) détectés par spectrométrie infrarouge (FTIR) au cours de la réaction ont servi de guide dans la recherche de profils réactionnels.



Publication : Cette étude a fait l'objet d'une publication qui est soumise au *J. Phys. Chem.*

Aucun étudiant n'ayant pu être impliqué dans le projet, nous n'avons pas pu élargir notre étude expérimentale et théorique à l'effet de substituant sur la réactivité des cétènes silylés vis-à-vis de HCl. Nous allons proposer à nouveau ce sujet en 2005. L'investigation portera sur les deux cétènes suivants, le bistriméthylsilylcétène et le vinyltriméthylsilylcétène:



CORIA

Contributeur à ce rapport : Thierry Girasol

Dossier scientifique 2002003

Publications

C. Rozé, T. Girasole, L. Méès, G. Gréhan, L. Hespel and A. Delfour, Optics Communications, 2003, 220(4-6), 237-245.

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

With an enough short pulse incident to an individual particle, elementary scattering modes can be observed : internal or external reflection, refraction and diffraction. Simulation of pulse propagation in dense scattering medium is usually computed for large observation time, so that time delays of pulse interaction with the particles are negligible compared to propagation times between particle. A Monte Carlo method is proposed to compute the propagation of an incident 100 fs laser pulse in dense medium taking into account time dependent scattering characteristics of particle : observation time of scattered light is less than 5000 fs. Two extreme cases are exemplified : predominance of direct and single scattered photons appears in a thin time window for small particles (1 μm). On the contrary multiple scattering is always predominant and scrambles the transmitted signal for large particles (100 μm).

Communications

G. Gouesbet, L. Méès, C. Rozé, T. Girasole et G. Gréhan, Conférence plénière invitée, Congrès SFT, Presqu'île de Giens, France, 25-28 mai 2004.

“Diagnostic par laser pulsé femtoseconde en diffusion simple et multiple : application aux diagnostics particuliers”

C. Rozé, T. Girasole, G. Gréhan, L. Méès, L. Hespel and A. Delfour, 7th international congress on Optical Particle Characterization, Kyoto, Japan, 1-5 august 2004.

“ Time-resolved propagation of femtosecond pulses in a dense scattering media : Monte Carlo direct method”

Thèse (en cours) :

Cécile Calba : « Interaction entre une impulsion laser ultra-brève et un nuage de particules : simulations numériques et expériences ».

IRCOF Equipe de Chimie Organique et Biologie Structurale (ECOBS) UMR 6014 CNRS

Contributeur à ce rapport : Isabelle Milazzo

Dossier scientifique n°2004006

L'ECOBS est constituée de deux groupes, RMN et Modélisation Moléculaire d'une part, et Spectrométrie de Masse d'autre part.

7 doctorants, 2 docteurs, 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 CERIUS2 (Accelrys) et SYBYL (Tripos) des interactions RMN sur les modèles obtenus dans les études structurales en chimie organique

Le groupe de RMN et de Modélisation Moléculaire de l'ECOBS (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'ECOBS 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

Multinuclear NMR study of the aggregates between methyllithium and lithium bromide in toluene

S. DESJARDINS, K. FLINOIS, H. OULYADI, D. DAVOUST, C. GIESSNER-PRETTRE, O. PARISEL AND J. MADDALUNO.

Organometallics, 2003, 22, 4090-4097.

Intramolecular hydrogen bonding in depsipeptides containing endo-3 ,6-tricyclo[6.2.1.02,7]undeca-4,9-diene-3,6-endo-diol.

M. AXT, H. OULYADI, X. PANNECOUCKE, J.C. QUIRION, A. R. POHLMAN AND V.E.U. COSTA.

Current Drug Discovery Technologies, 2004, 1, 155-164.

Peptide analogs containing the pentacyclo[5,4,0,0²,6,0³,6,0⁵,9]undecane scaffold: conformational analysis in solution.

M. AXT, H. OULYADI, X. PANNECOUCKE, J.C. QUIRION, A. R. POHLMAN AND V.E.U. COSTA.

J. Mol. Struc., 2004, 689, 49-60.

Structure-activity relationships and structural conformation of a novel urotensin-related peptide.

D. 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, sous presse.

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

Y. YUAN, S. DESJARDINS, A. HARRISON-MARCHAND, H. OULYADI, C. FRESSIGNE, C. GIESSNER-PRETTRE AND J. MADDALUNO.

Tetrahedron, 2004, accepté pour publication.

PUBLICATIONS SOUMISES

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

Soumis à Peptides.

THESES SOUTENUES

Karine COURCHAY (thèse soutenue le 1er septembre 2004)

«Etude des relations structure-activité paradoxales au sein du système opioïdergique de peptides chimériques de la beta-endorphine et du peptide E de bœuf».

Michel AUVRAY (Mémoire CNAM, soutenu le 24 septembre 2004)

«Etude structurale par RMN et Modélisation Moléculaire du signal d'adressage basolatéral du récepteur de la TSH (Thyroid Stimulating Hormone)».

THESES EN COURS

Au laboratoire :

Didier RIVIERE (soutenance prévue en 2004)

«Etude du domaine de reconnaissance à l'ADN de la protéine v-myb par RMN et Modélisation Moléculaire».

Anne LAUTRETTE (soutenance prévue en 2005)

«Synthèse et étude par Résonance Magnétique Nucléaire $^6\text{Li}/^{13}\text{C}/^1\text{H}$ et Modélisation Moléculaire de complexes mixtes entre la 1-benzyl-3-(S)-diphénylméthylaminopyrrolidine et des composés organolithiens contenant un carbone sp^2 ».

Franck PATE (soutenance prévue en 2005)

«Synthèse, étude par Résonance Magnétique Nucléaire à haut champ $^6\text{Li}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}/^1\text{H}$ et modélisation moléculaire de complexes mixtes amidures de lithium/alkyllithiens».

Ludovic CARLIER (soutenance prévue en 2006)

«Caractérisation structurale par Résonance Magnétique Nucléaire et Modélisation Moléculaire de la Proline déshydrogénase. Analyse de l'effet de la mutation L441P sur l'activité enzymatique».

Romain THUAAU (soutenance prévue en 2006)

«Caractérisation structurale par RMN et Modélisation Moléculaire du domaine ($\square+\square$) des facteurs de croissance (mIDGF) chez l'huître creuse».

Thomas VINCENT (soutenance prévue en 2006)

« Relations hôte-invité dans les supramolécules « coronands » ».

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)

MODELISATION MOLECULAIRE DANS L'ENSEIGNEMENT A L'UNIVERSITE

Les enseignements de Modélisation Moléculaire ont été mis en place depuis plusieurs années par les enseignants-chercheurs de l'ECOBS (C. Mayer, I. Milazzo). Ces enseignements sont directement liés aux activités de recherche de l'ECOBS (Equipe de Chimie Organique Biologique et Structurale) de l'I.R.C.O.F.

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 2003- septembre 2004 ont été les suivantes :

- Maîtrise de Chimie (16 étudiants)
- Module Modélisation Moléculaire (38h)
- Spectrochimie Structurale (RMN, Masse et Modélisation Moléculaire).
- Maîtrise de Biochimie (80étudiants)
- Modélisation moléculaire (10h)
- Structures 3D des biomolécules. Analyse et propriétés.
- D.E.S.S. : Etude de Génomes Outils Informatiques et Statistiques (EGOIST) (16 étudiants).
- Module de Biologie Structurale et Modélisation Moléculaire (35h)
- Prédiction de structures secondaires et structures 3D de molécules biologiques. Méthodes de modélisation moléculaire.
- Ecole doctorale Chimie-Biologie (27 étudiants)
- Analyse structurale de biomolécules : RMN et Modélisation Moléculaire (14h)

L'université s'engage actuellement dans une réforme des diplômes et des formations avec la mise en place des L.M.D. (Licence-Master-Doctorat). Les offres de formation sont étroitement liées aux thématiques de recherche puisque rattachées aux Ecoles Doctorales à partir des masters. Dans l'état actuel des projets, la modélisation moléculaire conserve une place importante. Ceci permettra aux étudiants, futurs chercheurs, formés à la modélisation moléculaire, d'appliquer cette discipline à leurs recherches dans le domaine très large de la Chimie-Biologie.

"Génération automatique de structures de protéines à partir de données de Résonance Magnétique Nucléaire"

(Depuis mai 2004. Etape de tests de compatibilité entre les logiciels souhaités et le cluster IBM).

IRCOF – LASOC Laboratoire d'Analyse des Systèmes Organiques Complexes, UPRES EA 2659 (SMS)

Université de Rouen EVREUX

Contributeur à ce rapport : Nadine Mofaddel

Utilisation de Sybyl sur O2 et de MS Modeling sur PC pour aborder les phénomènes observés expérimentalement en électrophorèse capillaire.

Thèse soutenue

29 septembre 2004, Mr Aitadoubel Abderrahim :

"Séparation Chirale d'acides aminés natifs en Electrophorèse Capillaire

Publications en cours

Trois publications sont en cours de rédaction (deux portant sur les chapitres de thèse) et une autre sur les complexes formés entre des phosphonates et les cations K⁺ et NH₄⁺.

IRCOF – LASOC Laboratoire d'Analyse des Systèmes Organiques Complexes, UPRES EA 2659 (SMS) Université de Rouen EVREUX

Contributeur à ce rapport : Paul-Louis Desbène

Recherches en Sciences Séparatives

Projet de recherche en cours d'élaboration Paul-Louis Desbène et G. DUPAS sur les thématiques suivantes :

- pour rationaliser le comportement paradoxal des acides aminés non dérivés tant en Electrophorèse Capillaire d'Echange de Ligand qu'en électrochromatographie en présence de cyclodextrines natives ou dérivées (anioniques)

Thèse

"NOUVELLES APPROCHES EN ELECTROPHORESE CAPILLAIRE POUR L'ENANTIOSEPARATION D'ACIDES AMINES AROMATIQUES OU ALIPHATIQUES NON DÉRIVÉS" Dr. A. Aït Adoubel, *soutenue le 29 Septembre 2004, les deux publications afférentes étant en cours de rédaction*

- pour appréhender les phénomènes de complexation des cations alcalins par des arylsulfonates, en fonction du degré de substitution de ceux - ci, complexation mise à profit dans le cadre d'un concept original pour la séparation des cations alcalins, alcalino

- terreux et des métaux de transition en Electrophorèse Capillaire: "le tout en un" (l'aryl sulfonate jouant le rôle d'électrolyte, de complexant et d'agent de visualisation en UV), recherche réalisée en partenariat avec le Professeur D. VILLEMIN (Université de Caen) dans le cadre du programme PUNCHOrga.

Publication

"UTILIZATION OF AROMATIC PHOSPHONIC ACIDS FOR THE ANALYSIS OF INORGANIC CATIONS BY CAPILLARY ZONE ELECTROPHORESIS"

C.J. Morin, M. Carli, N. Mofaddel, R. Al Rifaï, P.A. Jaffrès, D. Villemin, P.L. Desbène, soumise pour publication à Chromatographia

Thèse

En cours sur ce thème par M. CARLI (soutenance prévue second semestre 2005)

IRCOF – UPRES EA 3233 Université de ROUEN Mont Saint Aignan

(SMS) Sciences et Méthodes Séparatives UPRES EA 2659

Contributeur à ce rapport : Dr Samuel Petit

Parmi nos activités de recherche, les principales thématiques concernées par la modélisation moléculaire sont :

- La description et l'analyse des structures cristallines
- Les études de croissance cristalline et de prédiction de morphologie
- L'analyse et la prédiction du polymorphisme
- L'étude des mécanismes de désolvatation de cristaux organiques
- L'analyse de la reconnaissance supramoléculaire et chirale.

Trois doctorants de SMS concernés par ces travaux utilisent les outils de modélisation moléculaire disponibles à l'IRCOF et les logiciels mis à disposition par le CRIHAN :

- Franck Mallet : « Etude critique d'un modèle de déshydratation des composés moléculaires », soutenance prévue en 2004
- Arnaud Grandeury : « Etude des interactions supramoléculaires lors de la formation de complexes de type hôte-invité », soutenance prévue en 2004
- Morgan Pauchet : « Germination et croissance cristalline en gels. Développement du modèle structural de DCP », soutenance prévue en 2005

PUBLICATIONS

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, accepté

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, accepté

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, accepté

Stereoselective synthesis of new classes of atropisomeric compounds through the tandem imine Michael reaction-azacyclization process. Part 2

S. Le Gac, N. Monnier-Benoit, L. Doumampouom Metoul, S. Petit, I. Jabin
Tetrahedron: Asymmetry, 2004, 11, 139-145

A Priori Assessment of the Maximum possible entrainment effect attainable during preferential crystallization. The case of the simultaneous resolution of (\pm) ephedrine and (\pm) mandelic acid.

F. Dufour, G. Perez, G. Coquerel

Bull. Chem. Soc. Japan, 2004, 77(1), 79-86

Chiral resolution by crystallization of host-guest supramolecular complexes. A paradoxal situation with an efficient discrimination despite structural similarities

A. Grandeury, L. Renou, F. Dufour, S. Petit, G. Gouhier, G. Coquerel

J. Therm. Anal. & Calor., 2004, 77, 377-390

SIFCOM, UMR CNRS 6176 CNRS /ENSICAEN CAEN

Contributeur à ce rapport : Gérard Nouet

Dossier scientifique 2003009

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

Thèse

(Nos calculs portant sur cette thématique ont permis en 2004 la soutenance de la thèse d'un étudiant de l'Université de Thessalonique (Grèce)) :

"Extended Defects In Semiconductors" PhD Thesis, Aristotle University of Thessaloniki, Department of Physics, Solid State Section, Electron Microscopy Laboratory, Joseph Kioseoglou, Thessaloniki 28/6/2004,

Publications (4 publications sur cette même thématique) :

Atomistic modelling of point defects in [0001] tilt boundaries in GaN

A. Béré, J. Chen, G. Nouet, P. Ruterana and J. Koulidiati Phys.stat.sol. (b) 2004, in press

Electronic states associated with [0001]/(1320) $\Sigma = 7$ grain boundary in GaN

Béré, A.T. Blumenau, J. Chen, P. Ruterana, G. Nouet and J. Koulidiati

J.Computer. Mater., 2004, in press

Analysis of facetting of grain boundaries in GaN

J. Chen, A. Béré, G. Nouet, P.Ruterana Superlattices and Microstructures, 2004, in press

Atomic simulations and hrtem observations of a $\Sigma = 18$ tilt grain boundary in GaN

J. Kioseoglou, A. Béré, Ph. Komninou, G.P. Dimitrakopoulos, G. Nouet, E. Iliopoulos, A.Serra, Th. Karakostas

Phys.stat.sol. (c) 2004, in press

Les matériaux à base de GaN sont caractérisés par une large bande interdite directe et sont maintenant utilisés pour la production de dispositifs optoélectroniques émettant dans le bleu et l'ultra violet, de transistors hautes fréquences et hautes températures. La croissance de ces matériaux s'accompagne de la formation d'un taux très élevé de défauts cristallins. Le but de cette activité de recherche est l'analyse structurale et énergétique des défauts étendus présents dans les couches de GaN. L'analyse énergétique est réalisée en utilisant une adaptation du potentiel empirique de Stillinger et Weber afin de prendre en compte les liaisons Ga-Ga et N-N qui se forment au cœur des défauts étendus. L'énergie des domaines d'inversion, des fautes d'empilement basales et prismatiques a ainsi été calculée, et la structure atomique de la dislocation partielle délimitant les fautes basales I1 a été modélisée, douze configurations stables sont obtenues pour chaque polarité. Les interactions entre fautes basales et domaines d'inversion ont aussi été analysées.

L'utilisation de ce même potentiel empirique a permis d'analyser la formation de facettes dans les joints de grains de GaN. Le calcul de la structure atomique de différentes périodes de référence montre qu'elles sont formées par un nombre limité de cycles atomiques et que les facettes observées expérimentalement présentent une énergie minimale.

Bien que ce potentiel empirique puisse être utilisé pour optimiser des structures atomiques et calculer des énergies, il ne permet pas d'aborder la structure électronique des défauts. L'implantation du code SCC-DFTB fourni par le Département de Physique (Prof. T. Frauenheim) de l'Université de Paderborn (Allemagne) nous a ouvert cette possibilité. Trois joints de grains en orientation de coïncidence ont ainsi été calculés, selon leur structure atomique des niveaux apparaissent au centre et dans le haut de la bande interdite, cycles à 4 ou 8 atomes, ou seulement au voisinage de la bande de conduction, cycle à 5/7 atomes. De même, il est montré que la lacune d'azote introduit un niveau occupé et deux niveaux non occupés. L'un de ces deux derniers niveaux pourraient agir comme source ou piège à électrons et contribuer de ce fait à la luminescence jaune qui constitue un parasite dans ces dispositifs émettant dans le bleu.

CERMN département de modélisation moléculaire, Université de Caen, UPRES EA2126 CAEN

Contributeur à ce rapport : Ronan Bureau

Responsable : Pr. R. Bureau

Directeur du CERMN : Pr S. Rault.

Encadrants : Dr J. Sopkova (MCU)

et Dr N. Saettel (MCU, nomination 2004)

Thématiques principales :

- Conception et études structures activités de ligands sérotoninergiques.
- Conception de nouveaux ligands de kinase.
- Conception de nouveaux ligands d'acétyl cholinestérase.
- Exploitation des chimiothèques (screening virtuel sur la base des pharmacophores, docking).
- Participation à la mise en place de la chimiothèque nationale (GDS – CNRS).
- Analyses des données issues de diffraction RX.

Publications

New Benzo[h] [1,6]naphthyridine and Azepino[3,2-c]quinoline Derivatives as selective Antagonists of 5-HT₄ Receptors: Binding Profile and Pharmacological Characterization.

Hinschberger, A.; Butt, S.; Lelong, V.; Boulouard, M.; Dumuis, A.; Dauphin, F.; Bureau, R.; Pfeiffer, B.; Renard, P. and Rault, S. . *J. Med. Chem.* 2003, 46, 138–147.

2-[3-(6-bromo)pyridin]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3-dioxaborolane and 6-bromopyridin-3-yl-boronic acid, new bifunctional building blocks for combinatorial chemistry

Sopkova-de Oliveira Santos J., Lancelot J.-C., Bouillon A. et Rault S.. *Acta Cryst. C* 2003 , C59, 111-113.

Synthesis, Pharmacological Study and Modelisation of 7-Methoxyindazole and Related Substituted Indazoles as Neuronal Nitric Oxide Synthase Inhibitors

Collot, V.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Schumann-Bard, P.; Colloc'h, N.; MacKenzie, E.T. and Rault, S.. *J. Enzyme Inhibit. Med. Chem.*, 2003, 18, 195-199.

Synthesis and biological evaluation of five-Membered heterocycles fused to cyclopenta[c]thiophene as new antitumor agents.

Dallemagne, P.; Pham Khanh, L.; Alsaïdi, A.; Varlet, I.; Collot, V.; Paillet, M.; Bureau R. and Rault, S. *Biorg. Med. Chem.* 2003, 11, 1161-1167.

Synthesis, Biological Evaluation and SAR Study of Thienopyrrolizines, a New Family of CDK/GSK-3 Inhibitors

Rochais, C.; Lescot E.; Lisowski, V.; Lepailleur, A.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Bureau, R.; Dallemagne, P.; Meijer, L.; Rault, S.. *J. Enz. Inh. Med. Chem.*, 2004, *acceptée*.

Assembly of benzene-1,3,5-tris(methylenephosphonic acid) and guanidinium salt: Single crystal-X-ray characterisation and ³¹P solid state NMR investigations. *New Journal of Chemistry*

Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Montouillout, V.; Fayon, F.; Fernandez, C.; Delain-Bioton, L.; Villemin, D.; Jaffres, P.A.. 2004, 28, 1244-1249.

2-(6-Bromopyridin-2-yl)-6-methyl-[1,3,6,2]dioxazaborocane, a new stable (pyridin-2-yl)boronic acid derivative

Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Bouillon, A.; Lancelot, J.C.; Rault, S.. *Acta Cryst. C* 2004 , C60, 584-585.

Molecular design based on 3D-Pharmacophores. Applications to 5-HT₇ receptors.

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Contesse, V.; Delarue, C.; Vaudry, H. and Rault, S. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2004, 44, 1148-1152.

Communications (orales et affiches)

Conception de nouveaux ligands sur la base d'un pharmacophore 3D. Application aux récepteurs 5-HT₇

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Contesse, V.; Lenglet, S.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S.. VIII^{ème} Journée Scientifique du Réseau LARC-Neurosciences, Paris, 15 Octobre 2004.

Comparison of the 5-HT₇ / 5-HT_{1A} pharmacophores. Implication in the design of selective ligands

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S.. XIII^{èmes} Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, Rennes, 16-17 Septembre 2004.

Etude de la sélectivité de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques 5-HT₇. (partie 2).

Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepailleur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. XIII^{èmes} Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, Rennes, 16-17 Septembre 2004.

Screening virtuel d'une chimiothèque. Application à la découverte de nouveaux ligands 5-HT₇

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Fabis, F.; Paillet-Loilier, M.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S.. XL^{èmes} Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Bordeaux, 30 Juin-2 Juillet 2004.

Synthèse et Evaluation Biologique de nouvelles tripentones en série pyrrole

Rochais, C.; Lisowski, V.; Lescot, E.; Sopkova-De Olivera Santos, J.; Bureau, R.; Meijer, L.; Dallemagne, P.; Rault, S.. XL^{èmes} Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Bordeaux, 30 Juin-2 Juillet 2004.

Etude de la sélectivité de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques 5-HT₇. (partie 1).

Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepailleur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. XL^{èmes} Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Bordeaux, 30 Juin-2 Juillet 2004.

Similarity searching performed on a chemolibrary. Application to new 5-HT₇ ligands discovery

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Fabis, F.; Paillet, M.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S.. VIIth Anglo-Norman Organic Chemistry Colloquium, Cabourg, 2-4 Mai 2004.

Conception de nouveaux antagonistes des récepteurs sérotoninergiques de type 7 (5-HT₇).

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Contesse, V.; Lenglet, S.; Delarue, C.; Vaudry, H.; Rault, S. VII^{ème} Journée de l'Ecole Doctorale Normande Chimie-Biologie, Caen, 19 Mars 2004. *Communication récompensée par le Premier Prix de chimie.*

Synthèse et évaluation pharmacologique de nouveaux ligands des récepteurs 5-HT₇. (partie 3).

Paillet, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepailleur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. VII^{ème} Journée de l'Ecole Doctorale Normande Chimie-Biologie, Caen, 19 Mars 2004.

Recherche de nouveaux inhibiteurs de GSK-3 : Implications dans le traitement de la maladie d'Alzheimer.

Lescot, E.; Bureau, R.; Sopkova-De Olivera Santos, J.; Rochais, C.; Lisowski, V.; Dallemagne, P.; Rault, S. 11^{ème} journée Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutiques, 30 Janvier 2004 Paris, France.

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

Synthèse et évaluation pharmacologique de nouveaux ligands des récepteurs 5-HT₇. (partie 2).

Paillet, M.; Fabis, F.; Lecoutey, C.; Bureau, R.; Lepailleur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. XII^{èmes}

Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, La Rochelle, 1-3 Octobre 2003.

Design, Synthesis and in vitro Biological Evaluation of series of 3-[(1-benzylpiperazin-4-yl) acetamido]indan-1-ones as Acetylcholinesterase inhibitors.

Cailly, T.; Omran, Z.; Lescot, E.; Fabis, F.; Sopkova-De Olivera Santos, J.; Lisowski, V.; Dallemagne, P.; Rault, S. XII^{èmes} Conférences Européennes du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, La Rochelle, 1-3 Octobre 2003.

Molecular design based on 3D pharmacophores. Applications to 5-HT₇ receptors.

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Rault, S. XXXIX^{èmes} Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Beaune, 1-4 Juillet 2003.

Design, Synthesis, and in vitro Biological Evaluation of series of 3-[(1-benzylpiperazin-4-yl) acetamido] indan-1-ones as Acetylcholinesterase inhibitors.

Cailly, T.; Lescot, E.; Fabis, F.; Sopkova-De Olivera Santos, J.; Lisowski, V.; Dallemagne, P.; Rault, S. XXXIX^{èmes} Rencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, Beaune, 1-4 Juillet 2003.

Conception de ligands 5-HT₇ sur la base d'un pharmacophore 3D.

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Rault, S. XVII^{èmes} Journées Franco-Belges de Pharmacochimie, Bruxelles, 22-23 Mai 2003.

Synthèse et évaluation pharmacologique de nouveaux ligands des récepteurs 5-HT₇. (partie 1).

Paillet, M.; Fabis, F.; Bureau, R.; Lepailleur, A.; Dauphin, F.; Rault, S. XVII^{èmes} Journées Franco-Belges de Pharmacochimie, Bruxelles, 22-23 Mai 2003.

Modélisation, Synthèse et Evaluation Biologique d'inhibiteurs "donepezil Like" de l'Acetylcholinesterase.

Sopkova-De Olivera Santos, J.; Lescot, E.; Cailly, T.; Fabis, F.; Lisowski, V.; Lelong, V.; Boulouard, M.; Dallemagne, P.; Rault, S. 13^{ème} colloque du Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire, 5 au 7 mai 2003, Cabourg, France.

Analyse d'une chimiothèque sur la base d'un pharmacophore 3D. Application aux récepteurs 5-HT₇

Lepailleur, A.; Bureau, R.; Lemaître, S.; Fabis, F.; Paillet, M.; Dauphin, F.; Lancelot, J.C.; Rault, S. X^{ème} Journée des Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, Paris, 31 Janvier 2003.

Master/DEA

Détermination de nouveaux ligands sélectifs ALK-5. Application dans le cadre du traitement de la myopathie. M. Denis Levrat (2004 – 2005).

Analyse des interactions tPA – récepteur au glutamate (sous unité NR1). Implication dans le cadre de l'ischémie cérébrale. M. Thibault Varin (2004 – 2005).

Conception de nouveaux Inhibiteurs GSK-3 : Analyse des données actuelles, définition de relations structures activités, analyse par docking virtuel, détermination de pharmacophores. Mlle Elodie Lescot (2003 – 2004).

Thèse

Conception d'antagonistes de l'urotensine

Mlle Elodie Lescot (début 2004). Financement du Ministère de la Recherche et de la Technologie

Synthèse rationnelle, criblage, modélisation moléculaire, évaluation pharmacologique et applications thérapeutiques potentielles de ligands des récepteurs sérotoninergiques de type 7 (5-HT₇).

M. Alban Lepailleur (début 2002). Financement région – industrie.

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-HT₇).

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 "Centre for Molecular Design" de l'Université de Portsmouth (Royaume-Uni) dirigé par le Professeur M. Ford :

Etudes structure-activité sur les ligands 5-HT₇. Conception, synthèse, pharmaco-cinétique d'une nouvelle classe de pro-insecticides.

Collaboration avec l'Université St Joseph De Beyrouth, Professeur K. Sahakian :

Etudes structure-activité sur les ligands 5-HT6. Thèse de modélisation moléculaire actuellement en collaboration directe avec notre laboratoire.

Enseignements

Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de la MST "traitement et acquisition de données, mention neurosciences" : 20 étudiants (44 heures).

Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmaceutiques. Mise en place cette année d'un nouveau laboratoire de modélisation moléculaire avec une orientation enseignement (3 stations SGI, 12 PCs).

IRCOF UMR 6014 CNRS Université de Rouen.

Contributeur à ce rapport : Jacques Maddaluno

Dossier scientifique 2004004

ARTICLES

"Solvent effects on the mixed aggregates between chiral 3 aminopyrrolidine lithium amides and alkyllithiums."

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

Résumé : The condensation of n-butyllithium on o-tolualdehyde in the presence of a chiral 3-aminopyrrolidine lithium amide led to the expected alcohol with e.e. strongly dependant on the solvent (THF, diethylether and toluene). A NMR and theoretical study of this effect was undertaken to rationalize these results. The addition of two equivalents of methyllithium to 3-aminopyrrolidine 6 led, in THF-d8 and at -90°C, to an exo aza-norbornyl-type mixed aggregate (3b), similar to that characterized previously between lithium amide 6-Li and n-butyllithium (3a) in the same solvent. In diethyl ether, a non-covalent complex presenting a comparable exo topology was obtained despite a ~1ppm high-field drift of the chemical shift of one of its two 6Li nuclei (Li2). The progressive addition of THF to the medium brought the Li2 signal back to its original value, suggesting that this atom could also be the target of the incoming aldehyde. In toluene, the amine 6 is hardly deprotonated by an excess of methyllithium until THF is added to the medium, probably because of kinetic problems linked to alkyllithium solubility and aggregation in aromatic hydrocarbon solvents. Reacting 6 with n-butyllithium, which is more soluble in toluene, led to a comparable complex. Finally, a discussion on the interaction between a mixed aggregate and the aldehyde, based on a theoretical analysis of the solvation energies of the two lithium atoms by three different ethers, is proposed.

Mots-clés : NMR, DFT, mixed aggregate, solvent effects, conformation, asymmetric hydroxyalkylation

Statut : sous presse à Tetrahedron, special issue on « functionalized organolithium compounds ».

“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

Résumé : A theoretical study of the docking of o-tolualdehyde on mixed aggregates involving chiral lithium amides derived from 3-aminopyrrolidines and methyllithium has been undertaken using DFT. A first set of calculations shows that the docking of the aldehyde takes place preferentially on the lithium cation coordinated by only one nitrogen (Li2). In a second step, three molecules of THF have been added to mimic the aggregate first solvation shell. The interaction energies associated to the docking of the aldehyde replacing selectively one of the two THF's on Li2 have been compared. The results show that this approach accounts for the observed enantioselectivities that seem to be mainly controlled by this pre-transition docking step.

Mots-clés : DFT, enantioselectivity, mixed aggregates, docking, solvation.

Statut : en cours de révision pour Journal of Organic Chemistry.

“A DFT theoretical study of the condensation of formaldehyde on homogeneous and mixed aggregates involving sp2 organolithium compounds.”

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

Résumé : The interaction between three different sp2 organolithium compounds and formaldehyde has been investigated using DFT theoretical methods. The cases of the unsolvated monomers, the homogeneous and heterogeneous (with lithium dimethylamide) dimers have been considered. In all cases, the separate entities, as well as their docking complexes, their transition state and the condensation products have been characterized and compared to the corresponding situations involving methyllithium, taken as a prototypic sp3 nucleophile. Regarding the monomeric form of the nucleophiles, this study shows that a small energy barrier (≤ 2.1 kcal.mol⁻¹) brings from the original complex to the transition state. Then, all the nucleophiles considered follow a similar trajectory, combining some σ and π character, when approaching the carbonyl of the formaldehyde. The homogeneous dimers considered in a second step lead to complexes with HCHO exhibiting a relatively identical pattern. The geometry of the attacks by the dimers are somewhat similar and tend to exhibit a π character, particularly pronounced in the case of phenyllithium, and to go through later TS's. The heterogeneous dimers have been finally examined. In these cases, the aldehyde can orientate either toward the carbon or toward the nitrogen. Whatever the orientation, the complexes present characteristics close to that calculated for the homogeneous dimer complexes. These similitudes are conserved at the transition state.

Mots-clés : DFT, vinylolithium, 2-methoxyvinylolithium, phenyllithium, lithium amide, mixed aggregates, homogeneous aggregates, condensation.

Statut : en phase finale de préparation pour Organometallics.

COMMUNICATIONS

"Mixed aggregates between chiral lithium amides and organolithium compounds: a NMR and molecular modeling characterisation."

A. Lautrette, H. Oulyadi, A. Harrison-Marchand, C. Fressigné, J. Maddaluno et D. Davoust.

Statut : presentation par affiche à la 3rd International Conference on the Alkali and Alkaline Earth Metals (Alkchem-3), Würzburg (Allemagne), 28 septembre - 2 octobre 2003.

"Mixed aggregates involving chiral lithium amides: a new class of reagents in asymmetric synthesis".

J. Chen, S. Desjardins, N. Duguet, C. Fressigné, C. Giessner-Prettre, A. Harrison-Marchand, A. Lautrette, J. Maddaluno, H. Oulyadi, O. Parisel, J.-Y. Valnot et Y. Yuan.

Statut : communication au 7ème International Symposium on Carbanion Chemistry (ISCC-7), Alicante (Espagne), 11 juillet 2004.

THESES EN COURS

Complexes mixtes entre amidures chiraux et organolithiens sp^2 (aryllithium et vinyllithium). Caractérisation par RMN et modélisation moléculaire

Mlle Anne Lautrette (en cours depuis 2000).

"Etude par Résonance magnétique nucléaire $^6Li/^{13}C/^1H/^{15}N$ à haut champs de complexes mixtes non-covalents entre amidures chiraux et divers partenaires lithiés."

M Franck Paté (en cours depuis 2001).

IRCOF Equipe des Fonctions Azotées et Oxygénées Complexes

Labo de Chimie Théorique UMR 7616 Université P et M Curie Paris

Contributeur à ce rapport : Catherine Fressigné

Dossier scientifique 2002004

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

Résumé : The gas phase fragmentations of a family of three anionic complexes of molybdenum (V), $[\text{Mo}_2(\text{O})_2(\mu\text{-S})_2(\eta^2\text{-S}_2)_2]^{2-}$, $[\text{Mo}_2(\text{O})_2(\mu\text{-S})_2(\eta^2\text{-S}_2)(\eta^2\text{-S}_2\text{C}_2\text{H}_2)]^{2-}$, $[\text{Mo}_2(\text{O})_2(\mu\text{-S})_2(\eta^2\text{-S}_2)(\eta^2\text{-S}_2\text{C}_2(\text{C}_6\text{H}_5)_2)]^{2-}$ were studied as a function of the collision energy used in the collision cell of a triple quadrupole analyser. The main fragment ion for the three anions was $\text{Mo}_2\text{S}_4\text{O}_2^-$ at low collision energies, while higher collisional activation lead to cleavage of the metal-metal bond. Topological analyses of the electronic domains using the electron localisation function (ELF) showed that non-symmetric fragmentation behaviour could be interpreted according to the least topological change principle. Fragmentation induced a slight shift of the electron density towards the remaining ligands and an increase of the electron population on the Mo atom that undergoes a diminution of its coordination sphere.

Mots-clés : Energy-resolved mass spectrometry, electrospray ionisation, DFT calculations, electron localisation function, Mo(V) dithiolene complexes

Statut : en phase finale de préparation pour « International Journal of Mass Spectrometry » .

COMMUNICATION

“ Caractérisation par MS/MS et calculs théoriques de complexes anioniques thiomolybdiques .”

H. Lavanant, C. Fressigné , C. Simonnet-Jégat, R. Dessapt, A. Mallard, F. Sécheresse, N. Sellier.

Statut : presentation par affiche aux 21^{èmes} journées françaises de spectrométrie de masse à Strasbourg (France), 14 Septembre -17 Septembre 2004.

CR1 CNRS, CNRS UMR 6185, Université de Caen

Contributeur à ce rapport : Nathalie Colloc'h

Dossier scientifique 2003012

Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-terminal de NR1

Chercheurs impliqués :

SOPKOVA Jana, MC, CERMN , Université de Caen

Algorithme utilisé, compilé sur le cluster d'IBM du CRIHAN, pour notre seul usage

CHARMM version 29b1

Martin Karplus, Harvard University, Cambridge, USA

Licence accordée à Jana Sopkova, CERMN

5000 heures demandées

830 heures utilisés à ce jour

La simulation est en cours et son analyse va débiter très prochainement.

Ces travaux n'ont pas encore donné lieu à des publications ou présentations dans des congrès.

Groupe de Physique des Matériaux, UMR CNRS 6634 UFR Sciences Université de Rouen, Site du Madrillet

Contributeur à ce rapport : Cristelle Pareige

Pour le projet 1999006 :

Présentation orale

H. Zapolsky, S. Ferry, R. Patte and Long-Qing Chen

"NUMERICAL SIMULATION OF THERMODYNAMICS AND KINETICS IN Ni-Al-V SYSTEM",

TOFA-2004, Vienne, Autriche, Septembre 17-19, 2004.

Posters

S. Ferry, H. Zapolsky, R. Patte and L.Q. Chen

"Influence des effets élastiques sur la précipitation et réaction d'ordre dans les alliages Ni-Al"

SF2M, Paris, 29 octobre, 2003

S. Ferry, H. Zapolsky, R. Patte, D. Blavette and L.Q. Chen

"Simulation numérique de la coalescence d'Ostwald 2D dans les régimes à hautes et basses fractions volumiques",

JMC9 (Journées de la matière condensée), Nancy, 31 Aout-3 Septembre, 2004.

Publications

S. Ferry, H. Zapolsky, R. Patte, D. Blavette and L.Q. Chen

" Numerical simulations of 2-D Ostwald ripening in the high and low volume fraction regime"

en cours de rédaction pour Acta.met.

Pour le projet 2003014:

Poster

C. Pareige, H. zapolsky, A.G. Khachaturyan,

"A new approach to simulate the relaxation in polymers",

Workshop on dynamics in viscous liquids, Mars 2004, Munich

Groupe de Physique des Matériaux UMR CNRS 6634

Université de Rouen, UFR Sciences et Techniques, Site du Madrillet

Contributeur à ce rapport : Pierre-Emmanuel Berche

Communication orale

"Propriétés magnétiques de trilocales Fe/Dy/Fe : simulations numériques confrontées à l'expérience"

P.E. Berche, A. Tamion et C. Bordel

Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre 2004, Paris les 24-25/05/04.

Poster

"Comparaison des propriétés magnétiques de trilocales Fe/Dy/Fe entre simulations Monte Carlo et études expérimentales"

E. Talbot, A. Tamion, P.E. Berche et C. Bordel

9èmes Journées de la Matière Condensée, Nancy du 30/08 au 3/09/04.

Rapport de DEA

"Etude des propriétés des tricouches Fe/Dy/Fe par simulation Monte Carlo"

Etienne Talbot, encadré par P.E. Berche.

Thèse

Projet en cours avec Etienne Talbot qui bénéficie d'un financement ministériel (allocation de recherche). Cette thèse sera co-encadrée par P.E. Berche et D. Ledue.

Laboratoire de Chimie Théorique, UPMC Jussieu PARIS

Contributeur à ce rapport : Hélène Gérard

Stage DEA

" Evaluation de la constante de couplage $1J(\text{Li}, \text{C})$ dans les agrégats de méthyllithium : étude DFT statique et dynamique"

Aurélien De La Lande, soutenu en juin 2004, direction Hélène Gérard

Article

"Revisiting $(\text{LiX})_n$ Model Aggregates ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{Me}$) Using Car-Parrinello Molecular Dynamics. Part I: Stability of Optimized Structures. "

Hélène Gérard, Claude Giessner-Prettre, Jacques Maddaluno, Mark Tuckerman and Olivier Parisel.

En préparation pour soumission fin 2004

Communication

"journée "lithium" : chimie / spectroscopie / théorie "

Journée thématique informelle organisée à l'IRCOF à Rouen :

LMFN, Laboratoire de Mécanique des Fluides Numériques INSA de Rouen

Contributeur à ce rapport : Abdellah Hadjadj

Thèse

"Couplage fluide-structure appliqué à l'étude des charges latérales dans les tuyères de propulseurs"

A.-S. Mouronval,

Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, mars 2004.

Article

"Numerical study of the starting process in a supersonic nozzle"

A.-S. Mouronval, A. Hadjadj,

Journal of Propulsion & Power (à paraître) 2004.

"Numerical Investigation of Shock-Reflection Phenomena in Overexpanded Supersonic Jets"

A. Hadjadj, A. Kudryavtsev and M.S. Ivanov,

AIAA Journal, Vol. 42, No. 3, pp. 570-577, 2004.

Communication

"Turbulence modeling and validation for afterbody flows"

Y. Perrot, A. Hadjadj,

5th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, 8-11 Nov., DLR, Köln, 2004.

Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen

Contributeur à ce rapport : Jean-Guy Caputo

Dossier scientifique 1998007

Thèse (en cours)

"Statique et dynamique de dispositifs nonlinéaires ponctuels",

Lionel Loukitch (3ème année)

Publications en cours

- Dynamics of point Josephson junctions in a microstrip line

- Statics of a small array of point Josephson junctions in a microstrip line

"Ondes nonlinéaires confinées et magnétoélasticité",

Eric Belloni (1ère année), rapport en cours de rédaction

Publications

- "[[zgscm04]]" "Importance of the internal shape mode in magnetic vortex dynamics",

J. P. Zagorodny, Y. Gaididei, D. Sheka, J. G. Caputo and F. Mertens, Phys. Rev. Lett. {bf 93}, (2004).

- [[cgsc03]] ``Kink propagation and trapping in a two-dimensional curved Josephson junction", C. Gorria, Y. Gaididei, M. P. Soerensen P. Christiansen et J. G. Caputo, Phys. Rev. B, {\bf 69}, 134506, (2004).
- [[cg03]] ``Two point Josephson junctions in a superconducting stripline: static case", J. G. Caputo et Y. Gaididei, Physica C {\bf 402}, 160-173, (2004).
- [[szc04]] ``Vortex motion in a nanomagnet: a simple model", D. Sheka, J. P. Zagorodny, J. G. Caputo, Y. Gaididei et F. Mertens, Sept 2004. (soumis a Phys Rev. B) <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0410779>
- [[mc031]] ``Propagation of extremely short pulses in non-resonant media: the total Maxwell-Duffing model" , A. Maimistov et J. G. Caputo, Physica D {\bf 189}, 107-114, (2003).
- [[cgmz03]] ``Deflection of a vortex pair by an interface in easy-plane ferromagnets" , J.-G. Caputo, J.-P. Zagorodny, Yu. Gaididei et F. G. Mertens, J. Phys. A, Math. and Gen., {\bf 36}, 4259-4267, (2003).
- [[mc03]] ``Extremely short electromagnetic pulses in a resonant medium with a permanent dipole moment" , A. Maimistov et J. G. Caputo Opt. Spectroscopy, {\bf 94} (2), 245-250, (2003).
- [[cs02]] ``Bore formation, evolution and disintegration into solitons in shallow inhomogeneous channels", J.G. Caputo et Y. Stepanyants, Nonlinear processes in geophysics, {\bf 10}, 407-424, (2003).
- [[ackm02]] ``Resonances in the dynamics of the Bose-Einstein condensate with varying scattering length", F. Abdullaev, J.G. Caputo, R. Kraenkel and B. Malomed, Phys. Rev. A, {\bf 67}, nb. 1, 013605, 2003.
- [[cft01]] ``Analysis of a semi-linear pde for modeling static solutions of Josephson junctions", J. G. Caputo, N. Flytzanis, A. Tersenov and M. Vavalis, SIAM J. of Math. Analysis, {\bf 34}, 1356-1379, (2003).

Conférences

"Traveling wave solutions for the Richards equation",

Juin 2004 J. G. Caputo et Y. Stepanyants, présenté dans le cadre d'un minisymposium "Nonlinear waves in mechanics" a Advanced Problems in Mechanics 2004, Conference Internationale à St Petersburg

<http://www.eng.abdn.ac.uk/~apm/2004>

Organisation de Séminaires et Conférences

"Futurs dispositifs supraconducteurs terahertz", journée Observatoire de Paris, 29-1-2004. co-organisateur avec P. Febvre et M. Salez (voir <http://sefira.univ-savoie.fr/nouveau.htm>)

"Confined nonlinear waves",

Organisateur du mini-symposium (4 conférenciers) lors de la conférence internationale SIAM "nonlinear waves and coherent structures", Orlando, 2-5 Octobre 2004.

Principales collaborations internationales

A. Maimistov, Engineering Physics Moscow, 2 fois professeur invité à l'INSA de Rouen

F. Mertens, Dept de Physique, Universite de Bayreuth, Allemagne,

Contrat bilatéral Procope (3ème année)

Y. Gaididei, Inst. Bogoliubov de Physique theorique, Kiev, Ukraine, Contrat en cours.

M. P. Soerensen, Dept de Mathematiques, Universite Technique du Danemark

Bourse de l'ambassade de France en 2002 et 2003

Annexe B - Compte-rendu du comité de pilotage RNMM du 13 mai 2004

Etaient présents : Hassan Oulyadi, Laure Guilhaudis, Isabelle Milazzo, Catherine Mayer, Nadine Mofaddel, Georges Dupas, Nathalie Colloc'h, Alban Lepailleur, Elodie Lescot, Hervé Prigent et Béatrice Charton.

Exposé de la part du CRIHAN sur la situation financière :

Une partie des financements prévus pour prolonger les licences des logiciels de modélisation a été supprimée dans le cadre des réductions budgétaires (Etat) pour l'année 2004. Des dossiers de financement complémentaires ont été déposés à la préfecture (FEDER).

Une nouvelle ventilation des dépenses est en cours d'étude et permettra l'achat de droits d'utilisation dans les semaines et mois à venir.

Propositions d'achats dans la perspective d'allocation des crédits :

Accelrys : achat d'une licence permanente pour les modules des années précédentes sauf certains modules non utilisés et de 30 jetons jusqu'en décembre 2006. A partir de janvier 2007, pour renouveler les licences Accelrys, il suffira d'acheter 30 jetons par an.

Modules supprimés : Search Compare, Homology, Profiles-3D, Modeler, C2 DB Access, C2 Blends, C2 Polymer Properties, C2 Amorphous Builder, C2 Synthia, C2 RMMC

Deux modules supprimés seraient susceptibles d'être utilisés par l'équipe de C. Mayer : Modeler et Homology. Ils pourraient remplacer 4 autres modules non utilisés : MFA, MMFF, Decipher, Receptor. Demande d'ajout des modules Profile3D et Delphi.

I. Milazzo et L. Guilhaudis indiquent un problème de réservation de licences lors de l'utilisation des logiciels Felix ou CNX : deux utilisateurs simultanés bloquent les autres utilisateurs en utilisant trop de jetons. Un call sera ouvert chez Accelrys. On peut envisager aussi d'augmenter le nombre de jetons.

Une alternative à CNX peut être utilisée : CNS, la version académique du logiciel. Les utilisateurs concernés se renseignent.

Tripes : achat des jetons jusqu'en décembre 2006 en maintenant la liste des modules. Les licences FlexX et Cscore ont expiré il y a deux mois.

Schrödinger : achat de la maintenance pour Jaguar-Maestro jusqu'en décembre 2006.

Gaussian : achat éventuel de Gaussian 03. Aucune demande explicite pour le moment.

Evolution du matériel mis à disposition dans les laboratoires :

Les stations de travail "O2" sont obsolètes et non maintenues. L'évolution logique actuelle, pour une utilisation des logiciels Accelrys-Tripos, serait de choisir des plates-formes PC pour des achats de nouveaux matériels (sauf contraintes autres qui feraient choisir des stations SGI).

Le choix entre Windows et Linux n'est pas simple et dépend des logiciels utilisés. Pour Tripos, Sybyl et Unity sont disponibles uniquement sous Linux. Pour Accelrys, Material Studio (MS) et Discovery Studio (DS) sont disponibles uniquement sous Windows alors que InsightII et Catalyst fonctionnent sous RedHat Entreprise, la version payante de RedHat. Cerius2 devrait être disponible à terme sous Linux également.

Certaines fonctionnalités des logiciels Accelrys ne sont disponibles que sur SGI.

Le PC Spectro à l'IRCOF est équipé d'un double démarrage Linux-Windows et de tous les logiciels disponibles sous cette plate-forme pour Accelrys et Tripos. Son usage montre quelques difficultés d'utilisation car il faut rebooter la machine pour passer d'un environnement à l'autre.

Le problème d'espace de stockage partagé a été évoqué. La solution serait l'achat d'un serveur de disques, permettant l'accès à ses fichiers à partir des SGI, des PC de Modélisation et des ordinateurs de bureau.

Hervé Prigent a demandé une synthèse des besoins des utilisateurs expliquant comment ils imaginaient le service sans rentrer dans des termes techniques. Celle-ci pourrait servir de base pour demander un financement complémentaire.

Divers :

Diverses questions montrent des problèmes d'utilisation des logiciels Accelrys : problème de reconnaissance de fichiers entre les machines PC et SGI, problème de réservation de jetons lors de l'utilisation de Felix et CNX ou plus généralement problèmes d'utilisation des logiciels.

Le CRIHAN rappelle que l'achat des logiciels comprend une maintenance qui peut répondre à toutes ces questions. Elle est accessible en direct à support-eu@accelrys.com en précisant que les licences utilisées sont celles du CRIHAN ou en transmettant les questions à crihan-tech@crihan.fr. Les mails devront être rédigés de préférence en anglais pour une réponse plus rapide.

Le reste de la journée fut consacré à une rencontre avec Katia Dekimeshe, Anne Goupil et Marc Meunier Accelrys. Une rencontre similaire est prévue avec la société Tripos.

Annexe : Proposition de Modules Accelrys à renouveler :

Insight II	Catalyst HypoGen	C2 SBF
DeCipherSketcher	Catalyst Shape	C2 MOPAC Interface
Biopolymer	Catalyst DB Server	C2 Gaussian Interface
CHARMm	Catalyst Info	C2 Crystal Builder
Binding Site Analysis	C2Visualizer	C2 Surface Builder
Felix-ND	C2Minimizer	C2 Interface Builder
Felix Model	C2Dynamics	C2 Morphology
Felix-Assign	C2Open Force Field	C2 Powder Indexing
Felix Analytical	C2Force Field Editor	C2 Diffraction-Crystal
Felix-Autoscreen	C2Conformers	C2 HP Morphology
Discover	C2 Alignment	C2 Mechanical Properties
CNX	C2 Descriptor +	C2 Polymer Builder
NMR X PLOR	C2 LigandFit	C2 Sorption
Catalyst Visualizer	C2 MFA	C2 Discover
Catalyst Confirm	C2 MMFF	MS Visualizer
Catalyst Compare	C2 QSAR+	
Catalyst HipHop	C2 Receptor	

Annexe C - Comptabilité mensuelle des projets scientifiques sur le cluster IBM



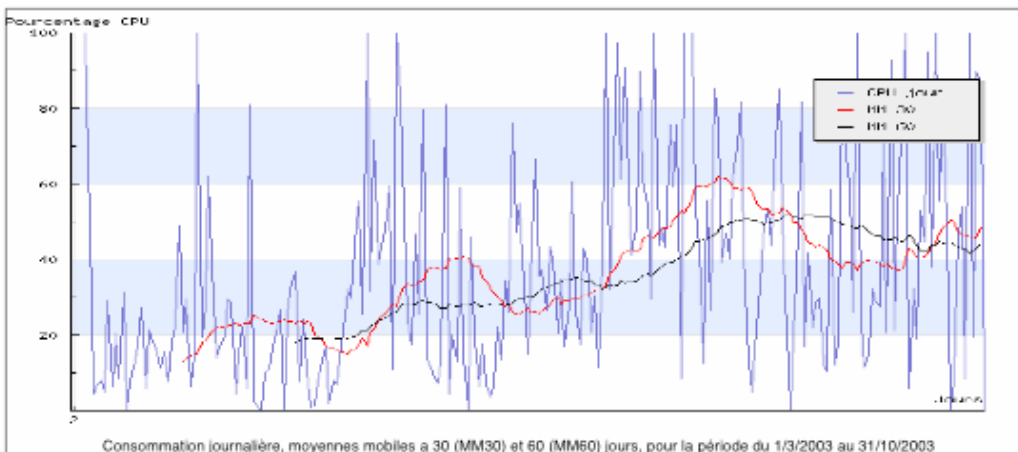
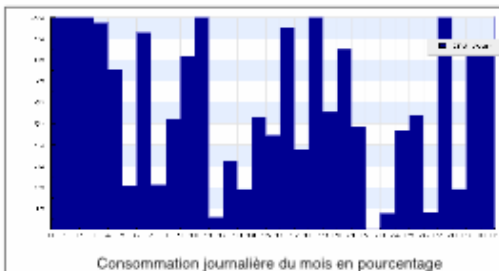
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de octobre 2003

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	26361 heures
Charge machine moyenne	59,1 %
Heures d'arrêt	36 heures
Nombre de projets actifs	28
Nombre de comptes actifs	63

Cumul pour 2003

Heures de calcul pour 2003	136973 heures
Charge machine moyenne pour 2003	39,48 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	7783
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	5463
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	2131
2002001	Etude des écoulements forcés stratifiés à grand Reynolds par simulation directe et simulation grandes échelles	1973
2000005	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	1602
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	1362
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	1145
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	1137
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en	1035
2003014	Simulation de la relaxation des polymères.	897

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	17352
Chimie	5244
Physiques des Matériaux	3325
Mécanique des solides	231
Industriel	141
Calcul et réseaux	62
Diffusion lumineuse	2
Bio Informatique	1
Mathématiques appliquées	1
Plasmas froids	1

Octobre 2003

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>



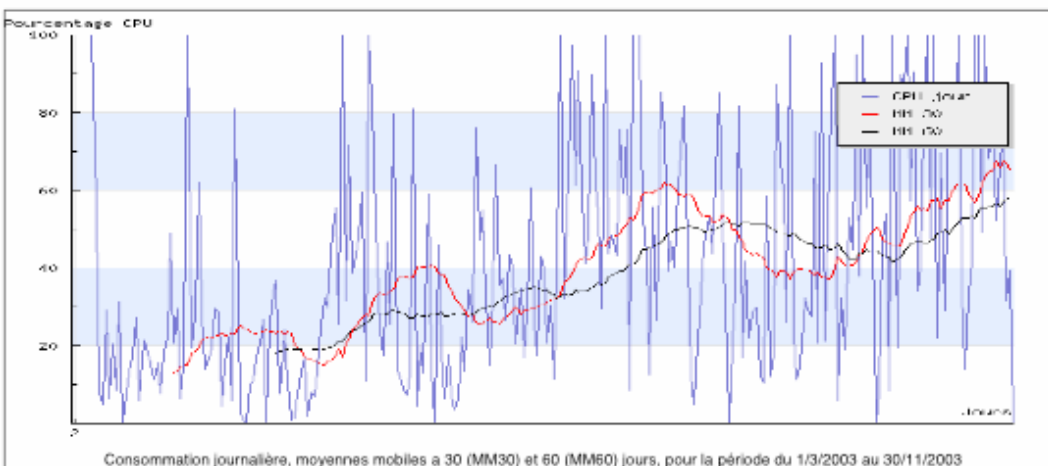
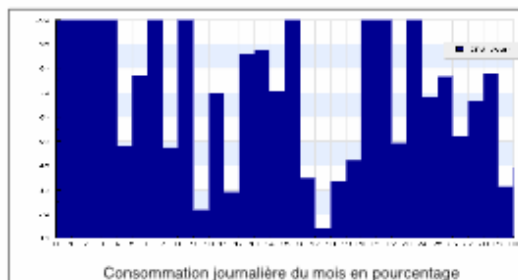
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de novembre 2003

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	29136 heures
Charge machine moyenne	67.44 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	29
Nombre de comptes actifs	60

Cumul pour 2003

Heures de calcul pour 2003	166109 heures
Charge machine moyenne pour 2003	42.58 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	8148
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	3926
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	3748
2002005	Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques	2367
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	2333
2003014	Simulation de la relaxation des polymères.	1551
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	1497
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	1327
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en	1252
2000005	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	1098

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	15941
Chimie	7752
Physiques des Matériaux	4366
Bio Informatique	564
Diffusion lumineuse	405
Calcul et réseaux	51
Plasmas froids	45
Industriel	8
Mécanique des solides	1
Informatique	1

Novembre 2003

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>



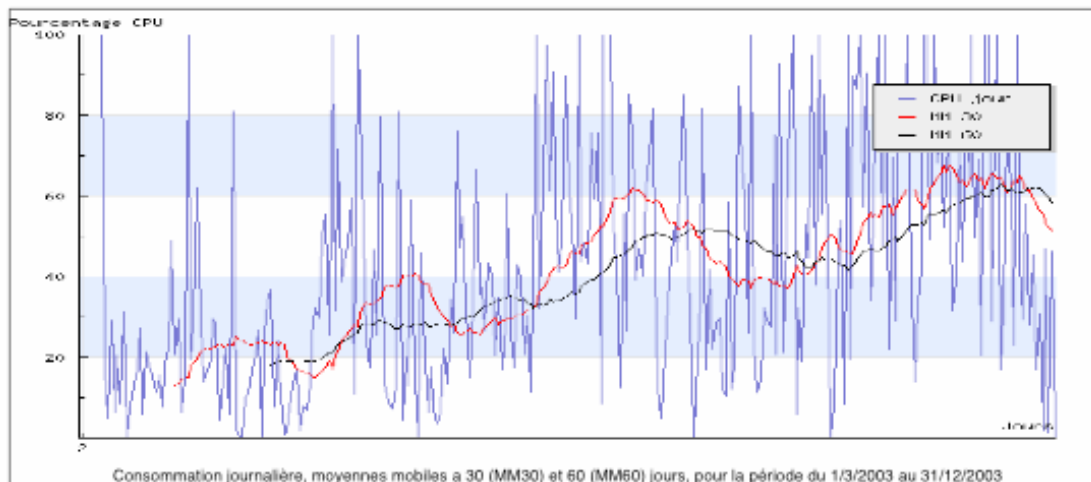
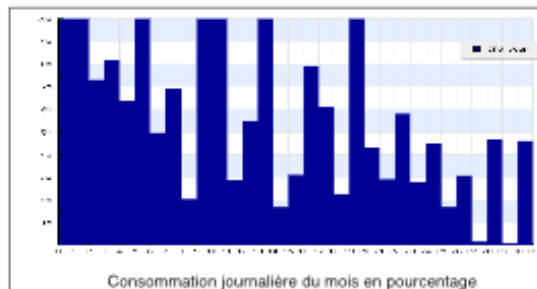
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de décembre 2003

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	94939 heures
Charge machine moyenne	78.29 %
Heures d'arrêt	10 heures
Nombre de projets actifs	24
Nombre de comptes actifs	48

Cumul pour 2003

Heures de calcul pour 2003	201048 heures
Charge machine moyenne pour 2003	46.31 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	11977
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	6741
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	3531
1998007	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	2669
2002005	Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques	2086
2003014	Simulation de la relaxation des polymères.	1994
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	1249
2002001	Etude des écoulements forcés stratifiés à grand Reynolds par simulation directe et simulation grandes échelles	1072
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	1000
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	783

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	20086
Chimie	7775
Physiques des Matériaux	4299
Diffusion lumineuse	2725
Industriel	33
Calcul et réseaux	18
Mécanique des solides	1

Décembre 2003

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>



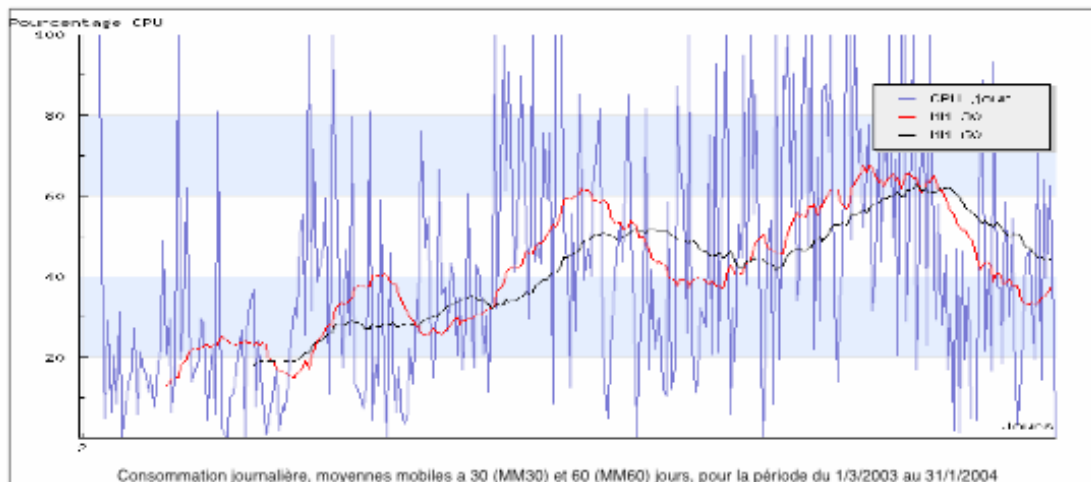
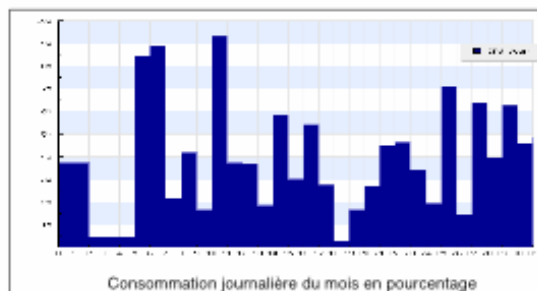
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de janvier 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	17272 heures
Charge machine moyenne	38.69 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	26
Nombre de comptes actifs	53

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	17272 heures
Charge machine moyenne pour 2004	38.69 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	4226
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	3714
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	2513
2003014	Simulation de la relaxation des polymères.	2490
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrides.	1653
2002005	Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques	1427
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	409
1998007	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	387
1997017	Optimisation code lcare	136
1997002	Calculs aérodynamiques	120

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	6623
Chimie	5572
Physiques des Matériaux	4205
Diffusion lumineuse	403
Industriel	256
Bio Informatique	8
Calcul et réseaux	1
Informatique	1
Mathématiques appliquées	1
Inconnu	1

Janvier 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>



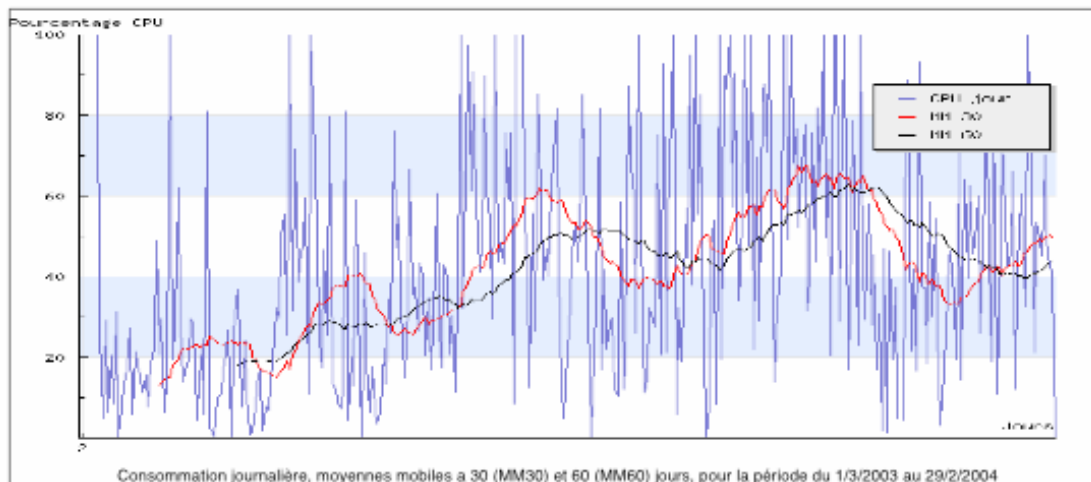
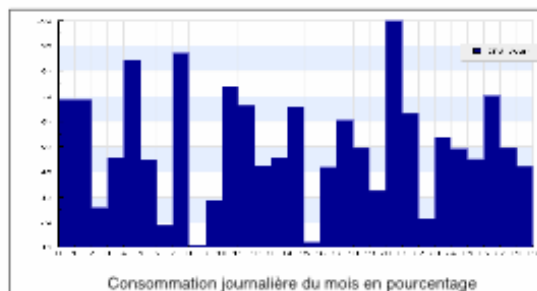
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de février 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	20746 heures
Charge machine moyenne	49.68 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	29
Nombre de comptes actifs	61

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	38018 heures
Charge machine moyenne pour 2004	44 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998034	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	5406
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	4523
2003014	Simulation de la relaxation des polymères.	1741
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	1430
2001003	Chimie organométallique : réactions d'insertions	1134
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	1014
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	1010
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	924
2003013	Calculs aérodynamiques	894
1997002		529

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Chimie	7868
Mécanique des fluides	6849
Physiques des Matériaux	4087
Industriel	851
Inconnu	583
Diffusion lumineuse	435
Plasmas froids	37
Calcul et réseaux	22
Bio Informatique	6
Informatique	2

Février 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>



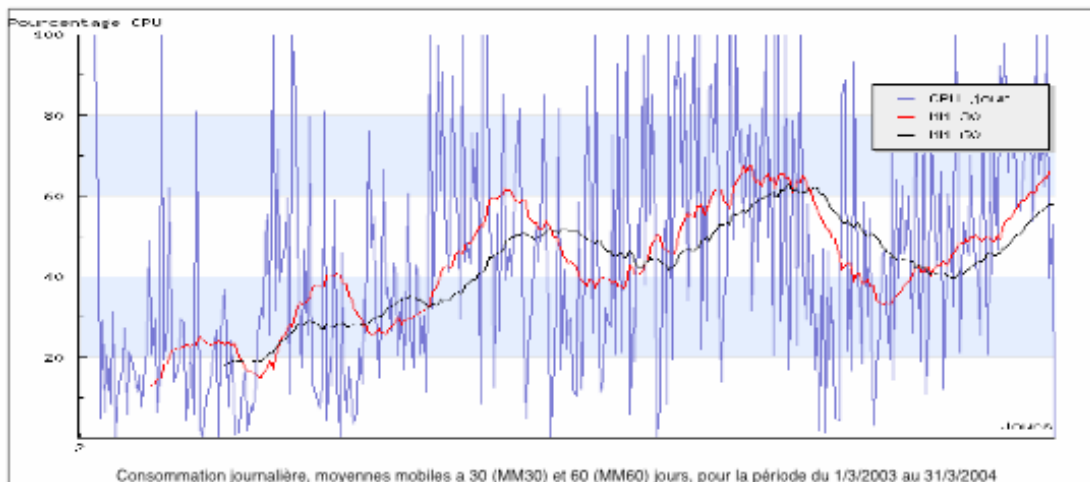
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de mars 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	90529 heures
Charge machine moyenne	68.42 %
Heures d'arrêt	18 heures
Nombre de projets actifs	27
Nombre de comptes actifs	60

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	68547 heures
Charge machine moyenne pour 2004	52.74 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	4050
2003008	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	3921
2003013	Ecoulements turbulents compressibles	3223
1998022	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	2339
2003002	Etude des agrégations compétitives amidures de lithium organolithiens	2089
1998034	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	2042
2003009	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	1712
1998051	Simulation de la relaxation des polymères.	1585
2003014	Etude par simulation numérique du comportement magnétique de trilocales Fe/Dy/Fe.	1249
2004002		1225

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	11070
Physiques des Matériaux	10761
Chimie	5940
Diffusion lumineuse	1321
Plasmas froids	1076
Calcul et réseaux	323
Informatique	34
Industriel	1

Mars 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>



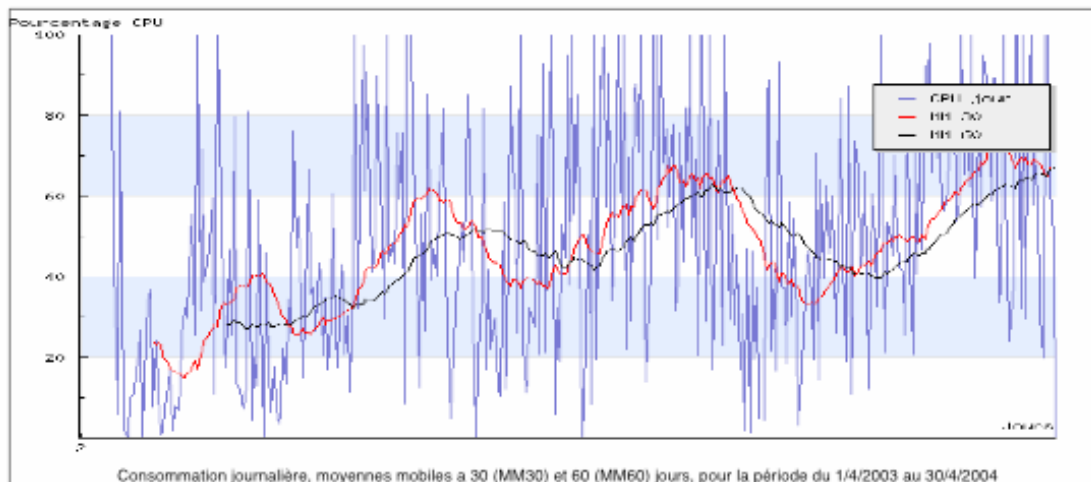
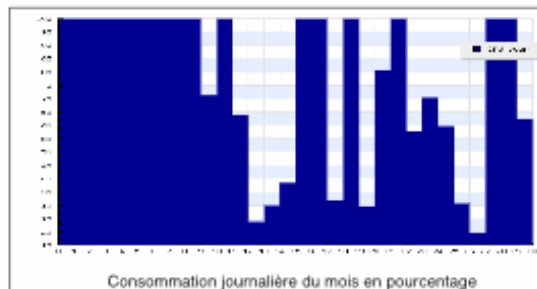
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de avril 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	31968 heures
Charge machine moyenne	74 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	33
Nombre de comptes actifs	65

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	100514 heures
Charge machine moyenne pour 2004	58.05 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Modélisation d'écoulement compressible turbulent	8037
1998051	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	5294
2003008	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	4982
2003002	Écoulements turbulents compressibles	2084
1998022	Modélisation de décharges impulsionnelles	1924
2003015	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	1776
2003009	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	1548
1998053	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	1471
1998007	Chimie organométallique : réactions d'insertions	1146
2001003		1046

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	12811
Physiques des Matériaux	12039
Chimie	3933
Plasmas froids	1776
Diffusion lumineuse	1205
Informatique	95
Industriel	83
Mathématiques appliquées	11
Calcul et réseaux	9
Bio Informatique	1

Avril 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>



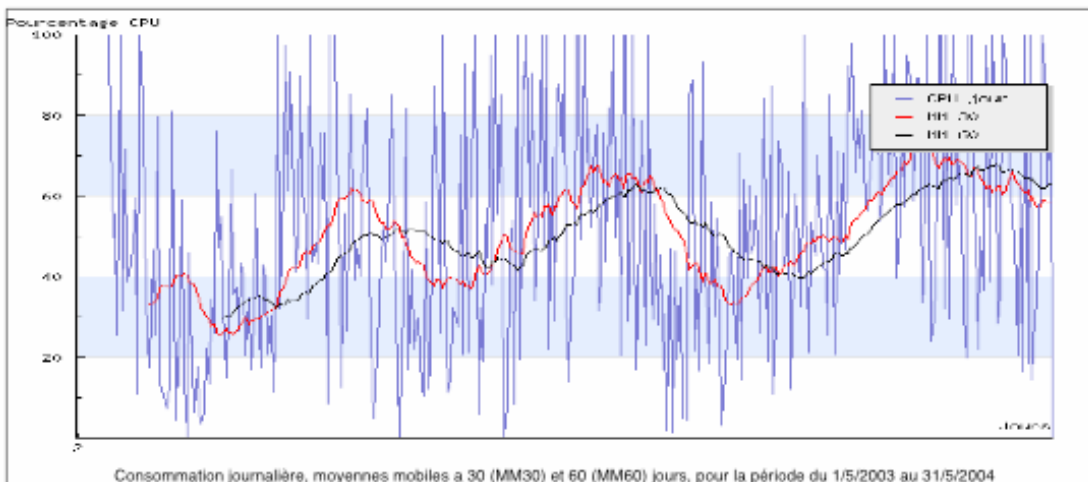
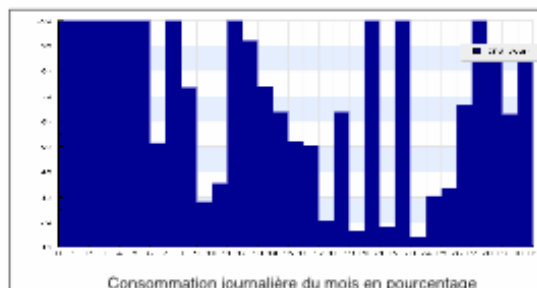
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de mai 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	90274 heures
Charge machine moyenne	67.82 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	30
Nombre de comptes actifs	60

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	130788 heures
Charge machine moyenne pour 2004	60.05 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Ecoulements turbulents compressibles	10137
1998022	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	4204
1998051	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium	3272
2004004	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	2703
2003008	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	1884
2000005	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	1095
2003002	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrides.	1051
2003009	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	992
1998053	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	860
2002003		784

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Physiques des Matériaux	13304
Mécanique des fluides	9388
Chimie	6068
Diffusion lumineuse	1222
Bio Informatique	250
Informatique	27
Industriel	12
Calcul et réseaux	1
Plasmas froids	1
Mathématiques appliquées	1

Mai 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>



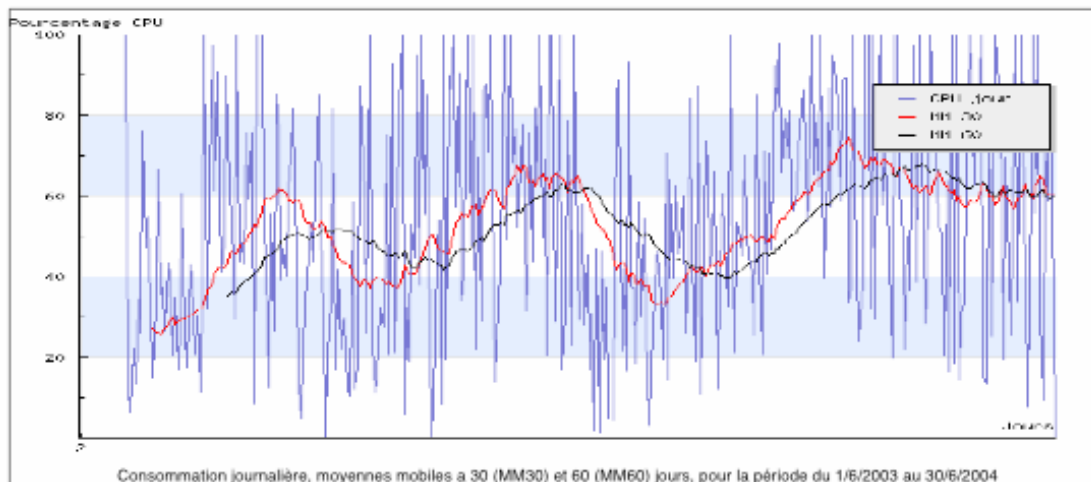
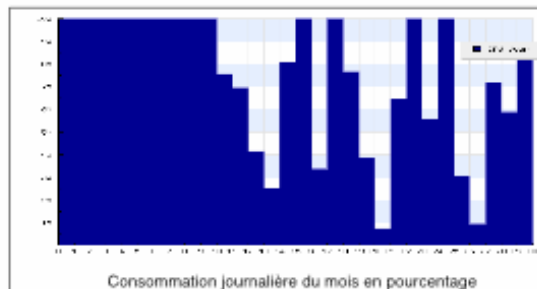
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de juin 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	31059 heures
Charge machine moyenne	71.96 %
Heures d'arrêt	36 heures
Nombre de projets actifs	31
Nombre de comptes actifs	74

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	161847 heures
Charge machine moyenne pour 2004	62.53 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	7658
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Ecoulements turbulents compressibles	5166
1998022	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	4581
2003013	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats moléculaires incluant des amides de lithium	3610
2004004	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	2365
2003009	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V	1302
1999006	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	1159
2003008	Propriétés magnétiques des nanoparticules	1114
2000006	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	1071
2002003		736

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	16987
Physiques des Matériaux	8815
Chimie	4088
Diffusion lumineuse	736
Plasmas froids	247
Informatique	97
Calcul et réseaux	85
Mathématiques appliquées	1
Industriel	1
Bio Informatique	1

Juin 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - <http://www.crihan.fr>



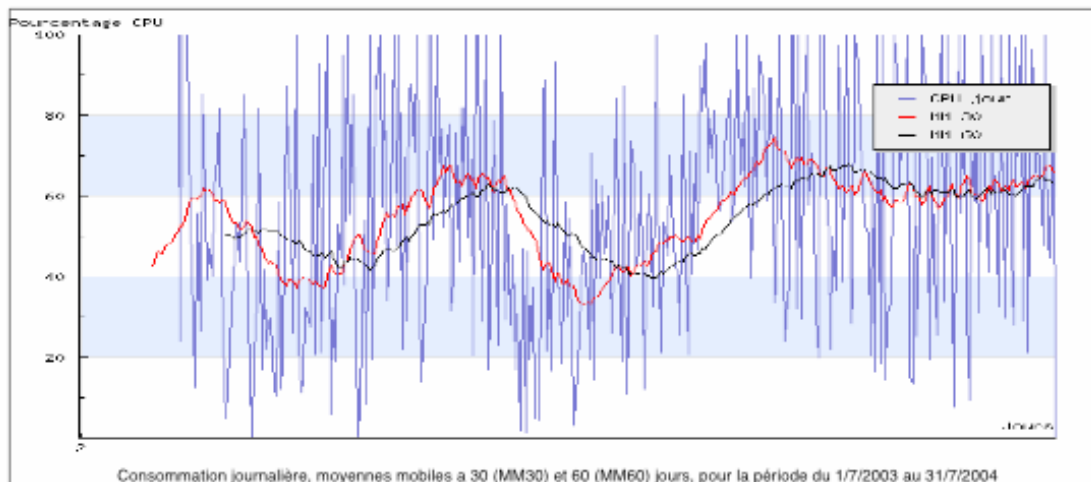
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de juillet 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	38468 heures
Charge machine moyenne	86.17 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	29
Nombre de comptes actifs	70

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	200315 heures
Charge machine moyenne pour 2004	66.01 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	9542
2003013	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	7300
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	5051
2004004	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium	4801
1999006	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V	2517
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	2339
2003008	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrides.	1562
2003009	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	969
2000005	Chimie organométallique : réactions d'insertions	762
2001003		654

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	23612
Chimie	7112
Physiques des Matériaux	6504
Mathématiques appliquées	617
Plasmas froids	475
Diffusion lumineuse	128
Informatique	15
Calcul et réseaux	1
Industriel	1

Juillet 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>



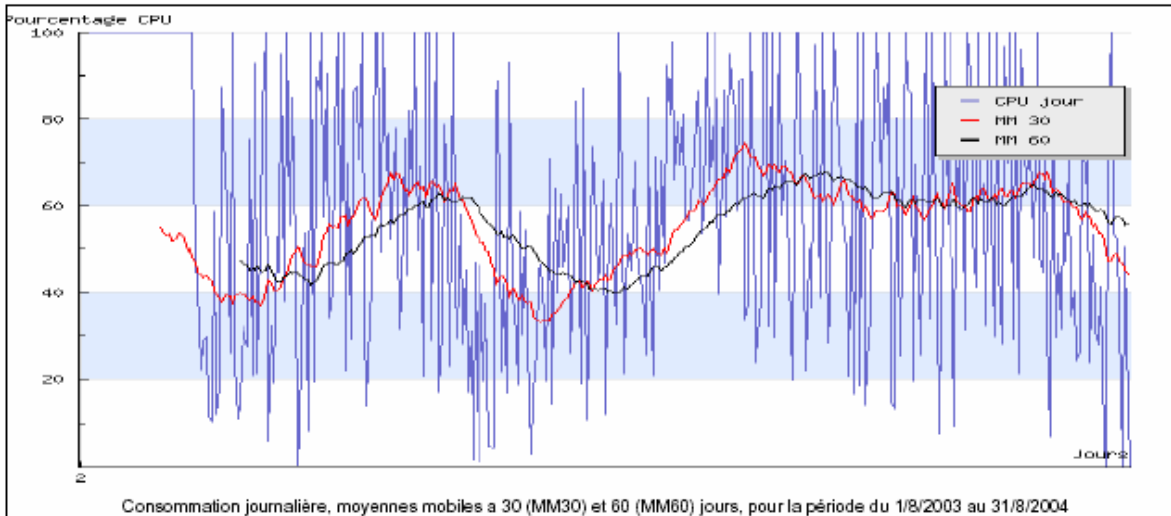
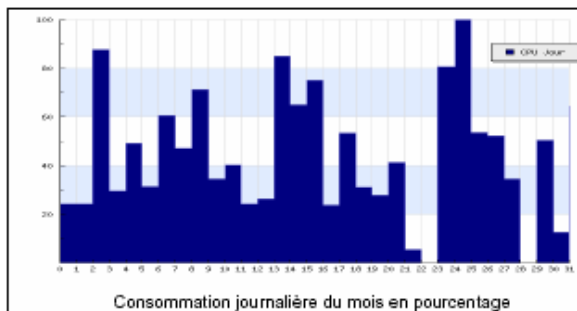
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de août 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	19906 heures
Charge machine moyenne	44.59 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	20
Nombre de comptes actifs	45

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	220221 heures
Charge machine moyenne pour 2004	63.26 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	12128
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	3281
2004004	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium	1538
2003013	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	874
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-Terminal de NR1.	838
2003012		511
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	476
2001003	Chimie organométallique : réactions d'insertions	239
1998007	Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	11
1998053	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	4

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	16285
Chimie	2294
Physiques des Matériaux	1314
Diffusion lumineuse	11
Mathématiques appliquées	1
Calcul et réseaux	1
Industriel	1

Août 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de HAute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY
 Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>



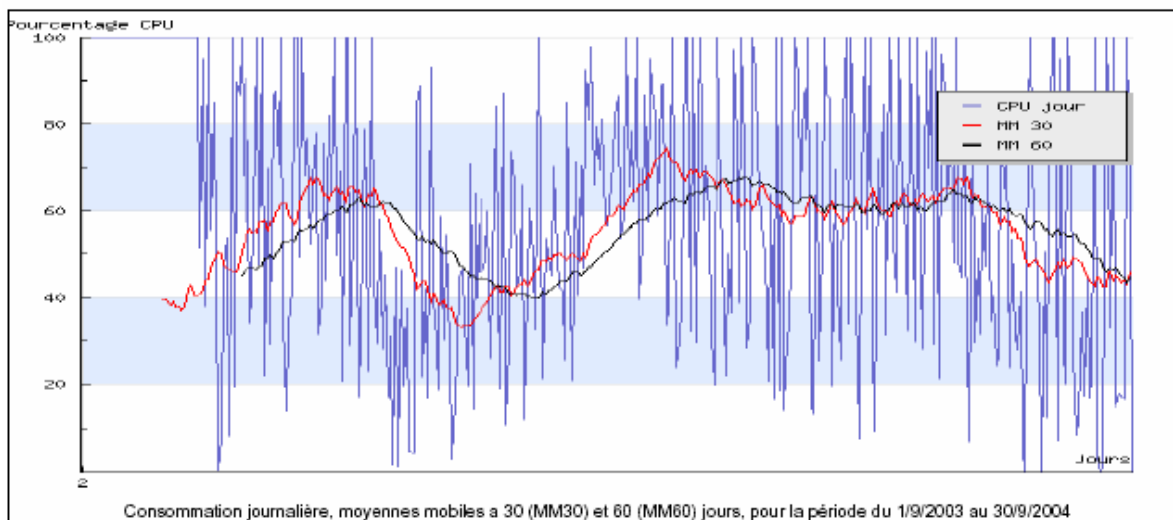
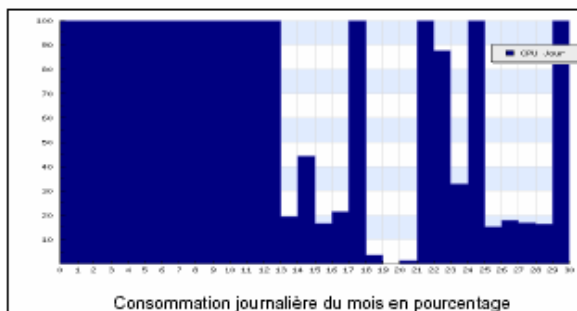
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de septembre 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	28145 heures
Charge machine moyenne	65.17 %
Heures d'arrêt	12 heures
Nombre de projets actifs	28
Nombre de comptes actifs	57

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	248366 heures
Charge machine moyenne pour 2004	63.59 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	10176
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	8209
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	2481
2003008	Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium	2298
2004004	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	1697
2003002	Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.	1020
2003013	Simulation par dynamique moléculaire du clivage du domaine N-Terminal de NR1.	773
2003012	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	517
2002004	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	234
1998053		210

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	21458
Physiques des Matériaux	3905
Chimie	2730
Mathématiques appliquées	26
Calcul et réseaux	15
Diffusion lumineuse	7
Informatique	1
Industriel	1
Plasmas froids	1

Septembre 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>



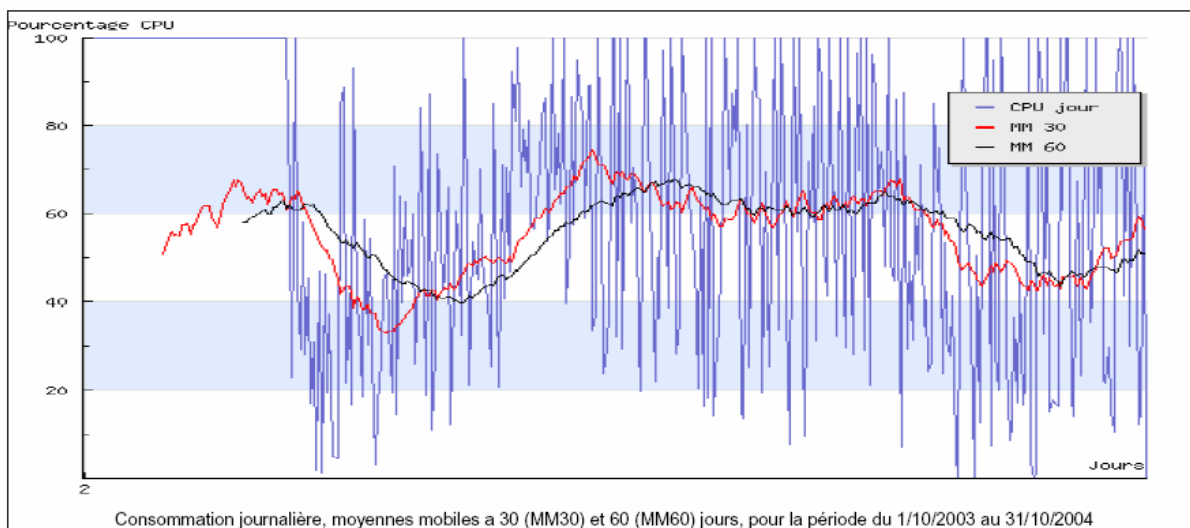
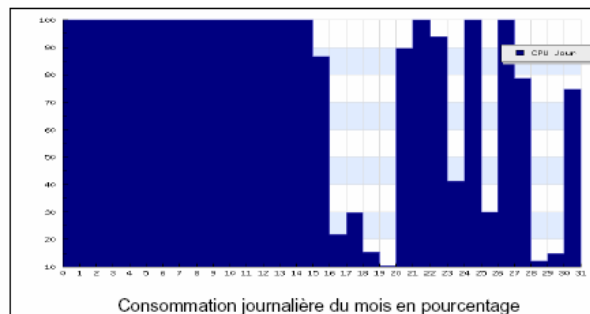
Suivi mensuel cluster 1600 IBM : compte-rendu de octobre 2004

Données mensuelles

Heures de calcul du mois	33643 heures
Charge machine moyenne	75.36 %
Heures d'arrêt	Pas d'arrêt
Nombre de projets actifs	35
Nombre de comptes actifs	66

Cumul pour 2004

Heures de calcul pour 2004	282009 heures
Charge machine moyenne pour 2004	64.79 %



TOP 10 DES CONSOMMATIONS PROJETS		
Projet	Titre du projet	Heures
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	9527
1998022	Ecoulements turbulents compressibles	9443
2002004	Etude de la structure électronique, en phase gazeuse, d'anions de complexes soufrés du molybdène	6335
2003003	Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en	1477
1999006	Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V	1374
2003002	Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice	994
2002003	Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	988
2003008	Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	925
2000005	Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	720
2003009	Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures.	637

TOP 10 DES CONSOMMATIONS PAR THEMES	
Thème	Heures
Mécanique des fluides	19962
Chimie	7884
Physiques des Matériaux	4721
Diffusion lumineuse	988
Industriel	66
Informatique	19
Plasmas froids	1
Mathématiques appliquées	1
Calcul et réseaux	1
Mécanique des solides	1

Octobre 2004

Page 1/5

CRIHAN - Centre de Ressources Informatiques de HAute-Normandie

Technopole du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ETIENNE DU ROUVRAY

Tel : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - <mailto:crihan-admin@crihan.fr> - <http://www.crihan.fr>

Annexe D - Service aux PME-PMI



Offre d'outils et de services pour les PME-PMI

Modélisation numérique et R&D

Aujourd'hui, de nombreux problèmes techniques peuvent être étudiés grâce à des logiciels de simulation.

Quels avantages à modéliser ?

La simulation par ordinateur permet :

- Un coût moindre qu'une série d'expériences,
- Une reproductibilité à volonté.
- Le contrôle des paramètres et leur modification aisée d'un cas d'étude à l'autre (géométrie, produit, température, etc.).
- D'automatiser l'analyse des données.

Qui a intérêt à utiliser des outils de modélisation ?

Beaucoup de métiers sont concernés par ce type d'outils (construction mécanique, équipementiers automobiles, biologie-santé, plasturgie...). Cependant la modélisation reste souvent, soit méconnue des entreprises, soit considérée comme difficilement abordable. En effet, surtout lorsqu'elles sont de taille moyenne ou petite, ces entreprises peuvent avoir des difficultés à estimer la rentabilité et le niveau d'investissement matériel et humain pour y accéder.

Les moyens du CRIHAN sont accessibles à tous types d'entreprises.

L'offre de conseil s'adresse plus particulièrement aux PME-PMI qui souhaitent développer leurs moyens d'étude par ordinateur.

Des moyens existent au Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie (CRIHAN) qui offre ses services aux entreprises pour leur permettre de découvrir et d'exploiter ces nouvelles techniques de conception et d'optimisation : cette offre concerne les domaines des sciences pour l'ingénieur (écoulements, thermique, structures, ...)

Service de premier niveau, **le conseil.**

Sur une problématique donnée, répondre aux questions essentielles :

- Le problème peut-il être étudié par ordinateur ?
- Quels sont les moyens à mettre en œuvre (ordinateurs, logiciels, personnel) ?
- Comment mettre en place une solution à long terme (formation, accès aux ordinateurs du CRIHAN, etc.)

Service de second niveau, **mise en place d'une solution.** Par exemple :

- Négocier les conditions d'acquisition et de mutualisation de logiciels.
- Utiliser les moyens de calcul du CRIHAN.
- Mettre en œuvre des logiciels.
- Organiser des formations.

Les ressources proposées.

- Une équipe de sept ingénieurs dont deux spécialisés dans les logiciels dédiés aux problèmes scientifiques et techniques.
- De nombreux calculateurs, dont un supercalculateur (Cluster IBM 1600, 2 fois 32 processeurs, 330 Gflops)
- Une salle de formation avec 12 ordinateurs en réseau sur le réseau régional à très haut débit pour la recherche.

Contact : Jean-Christian.Cordier@crihan.fr
<http://www.crihan.fr>

Annexe E - Services mutualisés sur SYRHANO

REGION HAUTE-NORMANDIE

Mutualisation des outils et des services sur SYRHANO

messaginge fiabilisée & espace disque

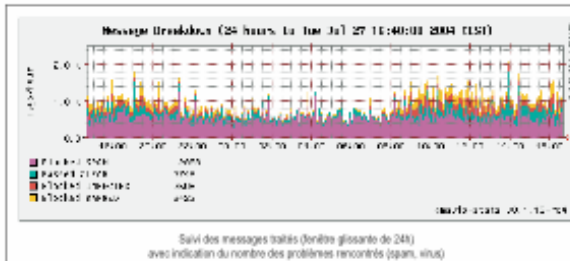
<https://rackcata.crihan.fr>

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 mis en place est un **service de courrier électronique fiabilisé, utilisable 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@site.fr* (coria.fr, univ-lehavre.fr, insa-rouen.fr, etc.). Chaque utilisateur peut s'enregistrer auprès de son établissement de tutelle pour en bénéficier gratuitement et disposer d'un espace de stockage sur disque.

Messaginge 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.

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) est aussi possible.

Environnement CRIHAN

Alimentation électrique sécurisée. Les locaux techniques du CRIHAN sont supervisés 24h/24, 7j/7. Climatés, 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.Wenden@insa-rouen.fr - 02 35 52 83 53
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'Éducation et la Recherche SYRHANO (Système Réseau de Haute-Normandie) intègre 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 - 08/09/2004

© CRIHAN 2004
<mailto:info@crihan.fr>



Annexe F - Cahier des charges "Pont de visioconférences"

**Objet de la consultation :**

Fourniture d'équipements, de logiciels et de prestations destinés à la mise en place d'un service de visioconférence H.323 sur le réseau régional SYRHANO pour l'enseignement et la recherche de la région de Haute-Normandie.

Type de procédure :

Procédure ouverte.

Dossier suivi par :
Monique BOENDER
Florence LAMI
Tél. : 02 32 91 42 91
Mail : secretariat@crihan.fr

Le présent cahier comporte 7 pages.

Cahier des Clauses Techniques Particulières (C.C.T.P.)

Version 1.1
Modifications du 13 septembre 2004
portant sur les points 2.3 et 3.2

**Le candidat doit dater, signer, parapher le présent CCTP et inscrire,
en page 2 les renseignements le concernant.**

Le Candidat

Le Président

Dany VANDROMME

ENTRE LES SOUSSIGNÉS :

Dany VANDROMME, Président du CRIHAN,
Centre de Ressources Informatiques de HAute-Normandie

Situé à SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY, Technopôle du Madrillet, 745, avenue de
l'Université

Ci-après dénommé «la Personne Responsable du Contrat»

D'UNE PART,

ET

(à remplir par le candidat)

Nom, Prénom ou Raison sociale :

Forme juridique et capital social :

Siège social :

Domicile élu :

Inscrit(e) au registre du commerce et des sociétés sous le numéro :

Représenté(e) par :

Agissant en qualité de :

Ci-après dénommé(e) «le Titulaire», «le Fournisseur» ou «l'Entreprise»

D'AUTRE PART,

IL EST CONVENU ET ARRÊTÉ CE QUI SUIT :

Fourniture d'équipements, de logiciels et de prestations destinés à la mise en place d'un service de visioconférence H.323 sur le réseau régional SYRHANO pour l'enseignement et la recherche de la région de Haute-Normandie.

1. OBJECTIF

Le réseau SYRHANO (Système Réseau de HAute-NOrmandie) est le réseau régional pour l'enseignement et la recherche de Haute-Normandie. Basé sur une infrastructure entièrement IP, il se compose de 6 points de présence sur la région, interconnectés à des débits allant jusqu'au Gb/s. Le réseau connecte principalement les établissements d'enseignement et de recherche (universités, grandes écoles, lycées et collèges, laboratoires, etc) mais aussi les quelques centres hospitaliers et certaines administrations. SYRHANO est connecté à très haut débit au réseau national RENATER et au réseau européen GEANT qui permettent l'accès aux autres réseaux de la recherche et à l'Internet commercial.

SYRHANO est un projet piloté par le CRIHAN dans le cadre du Contrat de Plan État-Région.

Afin de répondre aux besoins exprimés par certains utilisateurs de SYRHANO, le CRIHAN a décidé de mettre en place un service de visioconférence multipoint H.323 de grande qualité, destiné aux sites connectés au réseau régional. Ce service permettra à toute personne disposant sur un site SYRHANO d'un terminal compatible H.323, d'organiser simplement une visioconférence 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).

À court terme, ce service s'intégrera dans une architecture H.323 nationale.

La présente consultation porte sur la fourniture, l'installation et la maintenance des éléments indispensables à la mise en place de ce service de visioconférence H.323 (pont multipoint, passerelles, gatekeeper, systèmes de réservation des ressources et de supervision, etc.). L'accent sera mis par le soumissionnaire sur l'intégration de ces différents éléments, la modularité et l'évolutivité de la solution proposée.

2. FOURNITURE D'UN PONT DE VISIOCONFÉRENCE

2.1. Descriptif

Le pont de visioconférence ou MCU est le point central du dispositif. C'est un logiciel et/ou matériel qui permet de mettre en relation 3 terminaux de visioconférences ou plus dans une même session de travail. L'équipement, pour fonctionner correctement, doit être capable de mettre en relation plusieurs utilisateurs avec des codecs son et vidéo différents (capacité de transcoding) mais aussi à des débits différents (capacité de réencodage) de manière à offrir aux utilisateurs une qualité de service la plus élevée possible.

2.2 Fonctionnalités

Le pont de visioconférence devra supporter un certain nombre de fonctionnalités pour pouvoir offrir le service sur le réseau SYRHANO :

2.2.1. Support des codecs audio/vidéo et standards H.323

Le pont devra supporter les codecs audio/vidéo les plus courants, par exemple :

- pour l'audio : G.711, G.722, G.723, G.728,
- pour la vidéo : H.261, H.263, H.264,
- pour les résolutions : CIF, QCIF, 4CIF.

Le pont devra supporter la norme T.120 pour les échanges de documents.

Cette liste n'est pas exhaustive.

2.2.2. Interopérabilité

Le pont devra être interopérable avec la majeure partie des terminaux H.323 matériels et logiciels existants sur le marché aujourd'hui (Falcon IP de chez VCON, ViewStation et VSX 7000 de chez Polycom, les terminaux Tandberg, etc.). Il devra être compatible avec les autres systèmes de visioconférence multipoint et notamment être interopérable avec des gatekeepers comme GNUGK.

2.2.3. Transcoding

Le pont devra fournir la capacité de faire du transcoding, par exemple de permettre aux participants d'une conférence multipoint d'utiliser chacun différents codecs audio. Le pont ne devra pas niveler par le bas la qualité du codec pour suivre le participant le moins performant.

2.2.4. Débit asymétrique

Le pont devra pouvoir accepter dans une même conférence multipoint des participants avec des vitesses d'accès différentes (128Kb/s à 768Kb/s). Il devra faire un réencodage de l'image finale différent suivant le débit de chaque participant à la conférence.

2.2.5. Présence continue/commutation à la voix

Les conférences proposées par le pont devront être de 2 types :

- commutation à la voix : le site qui a la parole apparaît en plein écran,
- présence continue : l'écran est scindé en plusieurs parties pour permettre de voir tout ou partie des sites participant à la conférence simultanément.

2.2.6. Multiconférences

Le pont devra être capable de tenir plusieurs conférences disjointes simultanément avec des configurations distinctes pour chacune.

2.2.7. DiffServ

Pour prioriser les flux de visioconférence à travers le réseau, le pont doit être capable de marquer le champ diffserv des paquets émis, avec une valeur configurable.

2.2.8. Administration

Le pont devra posséder une interface d'administration accessible à distance (de préférence une interface web ou java) qui permet de :

- vérifier le bon fonctionnement de celui-ci (état des composants, disponibilité des ressources),
- créer les conférences permanentes ou à la demande,
- administrer les conférences en cours (déconnexion d'un utilisateur, invitation d'un terminal, etc.),
- éventuellement, l'interface d'administration permettra aussi de déléguer certaines parties de la gestion (création de conférences par exemple) à un groupe d'utilisateurs prédéfini.

2.2.9. API

Le pont (et ses diverses composantes) doit posséder une API de développement qui permet d'accéder aux informations de celui-ci (ressources disponibles, conférences en cours, etc.), mais aussi d'accéder aux fonctions d'administration (création de conférences, etc.). Ceci est nécessaire pour d'éventuels développements de logiciels pour offrir le service.

2.2.10. Support IPv4/IPv6

Le pont devra supporter indifféremment des clients en IPv4 et en IPv6 ou proposer (sans surcoût et dans un délai inférieur à 12 mois suivant la livraison de l'équipement) une évolution logicielle pour le support d'IPv6.

2.3. Capacité

En termes de capacité totale de participants, le pont devra pouvoir accueillir simultanément un minimum de :

- 20 sites IP connectés à un débit de 768kbit/s,
- ou 20 sites IP et/ou RNIS connectés à un débit allant de 384 Kb/s à 768Kb/s.

En termes de nombre de conférences, le pont devra pouvoir supporter au minimum 3 conférences simultanées (autant en présence continue qu'en commutation à la voix).

2.4. Évolution

2.4.1. En termes de capacité

Le pont devra pouvoir évoluer aisément en capacité d'accueil suivant les besoins du service, soit par l'intermédiaire d'une mise à jour logicielle ou matérielle, soit par la possibilité de cascader plusieurs équipements pour augmenter le nombre de sites utilisateurs.

2.4.2. En termes de fonctionnalités

Le pont devra pouvoir supporter les futures normes de la visioconférence, comme SIP (alternative à la norme H.323) ou H.264 (nouveau codec vidéo), ou toute autre norme par simple mise à jour logicielle.

Le soumissionnaire précisera les fonctionnalités du pont proposé en mettant en avant le respect des demandes formulées ci-dessus et en décrivant ses capacités d'évolution.

3. FOURNITURE D'UNE PASSERELLE H.320/H.323

3.1. Fonctionnalités

La passerelle H.320/H.323 doit permettre aux utilisateurs connectés au réseau RNIS par l'intermédiaire de terminaux H.320, de participer à des visioconférences avec des correspondants connectés au réseau IP avec des terminaux H.323. La passerelle doit aussi permettre l'agrégation d'accès BRI pour les clients se connectant en H.320 (minimum de 384Kb/s soit 3 accès BRI).

3.2. Capacités

La capacité requise pour la passerelle est au minimum d'un accès PRI.

Le soumissionnaire précisera les caractéristiques et fonctionnalités de la passerelle H.320/H.323 proposée.

Une passerelle pour les téléphones de troisième génération (protocole 3G-324M) devra pouvoir être intégrée à la solution globale proposée.

4. FOURNITURE D'UN GATEKEEPER (OPÉRATEUR DE CONTRÔLE)

Le gatekeeper proposé devra être entièrement compatible avec les gatekeepers Cisco intégrés à l'IOS et compatible avec le gatekeeper opensource GNUGK (<http://www.gnugk.org/>).

La fonction proxy devra être disponible.

Le soumissionnaire précisera les fonctionnalités du gatekeeper proposé et ce en quoi il se démarque de la version opensource GNUGK.

5. FOURNITURE D'UN LOGICIEL DE RÉSERVATION

Le logiciel de réservation associé au pont de visioconférence permet à des utilisateurs identifiés de réserver des ressources sur le pont de manière autonome. Le type d'interface privilégié pour le système de réservation sera une interface web ou une application java multi-plateformes. L'utilisateur sans connaissance technique préalable sur les systèmes de visioconférence devra pouvoir à travers l'interface de réservation :

- instancier le modèle prédéfini d'une session de visioconférence ou réserver une "salle" (définie à l'avance par l'administrateur du pont),
- définir une date de début et de fin pour la visioconférence,
- définir les participants à la visioconférence,
- éventuellement définir un mot de passe pour l'accès à la visioconférence.

Le soumissionnaire précisera les fonctionnalités du logiciel de réservation proposé.

Le soumissionnaire précisera le type et la configuration de plate-forme matérielle requise pour supporter le logiciel de réservation ainsi que son système d'exploitation (UNIX si possible). Il décrira les mesures à prendre pour sécuriser cette plate-forme destinée à être accédée au travers de SYRHANO et plus généralement de l'Internet.

6. FOURNITURE D'UN LOGICIEL DE SUPERVISION

Le logiciel de supervision permet aux administrateurs d'avoir une vue d'ensemble du fonctionnement service de visioconférence. Il collecte les informations provenant des différents composants matériels et logiciels (typiquement les alarmes, les informations sur les sessions en cours : pont utilisé, bande passante utilisée, nombre de participants, etc.).

Le soumissionnaire précisera les fonctionnalités de l'outil de supervision proposé.

Le soumissionnaire précisera le type et la configuration de plate-forme matérielle requise pour supporter le logiciel de réservation ainsi que son système d'exploitation (UNIX si possible). Il décrira les mesures à prendre pour sécuriser cette plate-forme destinée à être accédée à distance.

7. FOURNITURE D'UN SERVICE DE MAINTENANCE

Le soumissionnaire proposera une maintenance (matérielle, logicielle) sur tous les équipements qu'il propose. Il détaillera les prestations et proposera si nécessaire plusieurs scénarii (retour en atelier, intervention sur site avec garantie de temps d'intervention, etc.).

8. FOURNITURE D'UNE PRESTATION D'INSTALLATION ET DE FORMATION

Le soumissionnaire installera et configurera l'ensemble des équipements et logiciels en fonction des besoins exprimés par le CRIHAN.

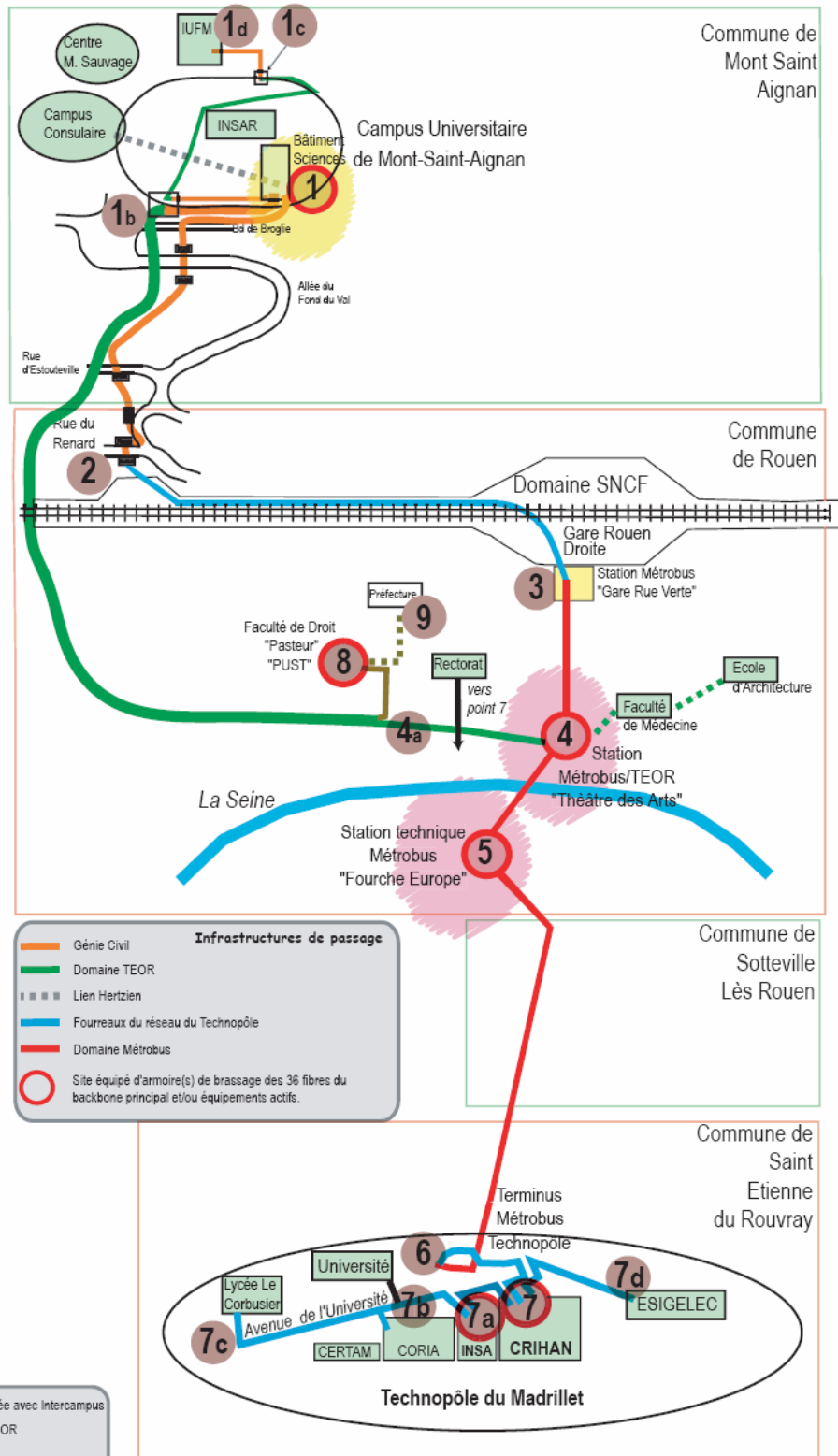
Le soumissionnaire proposera une formation destinée aux administrateurs du service de visioconférence. Cette formation portera sur l'exploitation de tous les composants inclus dans la présente offre.

Le soumissionnaire détaillera son offre d'installation et de formation.

Annexe G - Tracé de l'infrastructure InterCampus en 2004



Parcours des fibres optiques supportant InterCampus



Locaux accessibles par clefs et/ou badges : Univ Rouen Sometrar/TCAR

Mise à jour Février 2004

*Annexe H - Présentation aux CESRx, Caen,
septembre 2004*

Collaborations en cours entre les deux régions

Yvon NOEL - y.noel@cr-basse-normandie.fr
Hervé PRIGENT - Herve.Prigent@crihan.fr
Dany VANDROMME - Dany Vandromme@crihan.fr

Réseaux IPv6

Task Force Normande IPv6

- Octobre 2003 : constitution d'un groupe de travail régional avec le soutien de la Task Force IPv6 et de RENATER, avec la participation :
 - d'entreprises : (Axians, Philips, France Télécom R&D, Crédit Agricole, Netcentrex, TBS, Ingedis,...),
 - de l'Université de Caen (CRISI, GREYC, IUT - GTR, Certic), l'EnsiCaen, GANIL, CHU, CRDP de Basse-Normandie,
 - du CRIHAN
 - État, Région, Départements.

Réseaux IPv6

Objectifs de la Task Force Normande IPv6

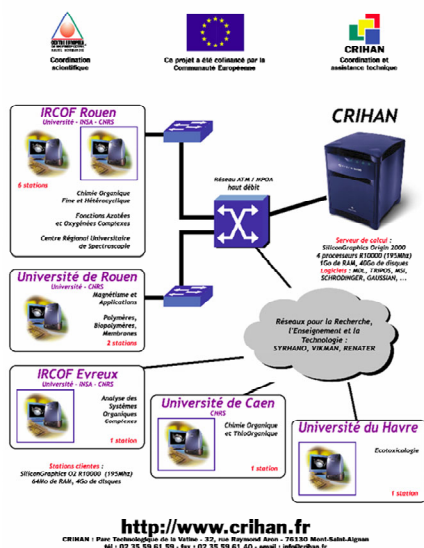
- Créer un point d'appui régional sur l'IPv6,
- Échanger et diffuser l'information concernant l'IPv6 au niveau régional,
- Favoriser l'émergence d'offres de connexion aux services IPv6 en Basse-Normandie pour les entreprises,
- Coordonner et favoriser des actions de déploiement d'IPv6 :
 - mobilité : WiFi + IPv6 sur les Campus universitaires,
 - diffusion d'images en multicast (conférences, vidéos,...),
 - création d'événements.

Formation continue

“E-learning” IPv6

- Travail réalisé dans le cadre d'un DVD produit par l'ISI (Université de Caen)
- Comprendre IPv6 : un panorama technique réalisé par le CRIHAN
 - 3 heures de formation
 - 1h de cours avec un support vidéo
 - Support de cours électronique
 - Auto-validation du savoir

Le réseau normand pour la modélisation moléculaire



Modélisation numérique

Réseau normand pour la modélisation moléculaire

- Mise à disposition des laboratoires publics (voire privés ponctuellement) de logiciels spécialisés. En Basse-Normandie :

–Centre D'études et de Recherche sur le
Médicament de Normandie (CERMN,
Caen)

–UMR 6185 - Centre Cycéron

- Financement initial FEDER (1997) puis CPER

Télésanté (1)

Plate-forme d'échanges ADICAP

- Outil de travail collaboratif destiné à faciliter les échanges entre anatomopathologistes

–Co-expertise en ligne de cas médicaux (dossiers médicaux multimédias)

- Support pour la formation des praticiens

–Mise au point de protocoles médicaux entre spécialistes

- Opérationnelle depuis 1996 - environ 700 utilisateurs

- Pilotage scientifique par l'ADICAP (Association pour le Développement de l'Informatique en Cytologie Anato-mo-Pathologique)

- Développement par le CRIHAN

Télésanté (2)

Collecte des données en cancérologie

- Objectifs : collecte des données issues des laboratoires d'analyse et transmission aux instances de veille sanitaire
- Participation du CRISAP (Centre de Regroupement Informatique et Statistiques en Anatomie et Cytologie Pathologique) de Basse Normandie
- Etude et support technique CRIHAN
- Recherche de financement pour le développement

Télésanté (3)

Compte-Rendu Assisté par Ordinateur (CRAO)

- Objectifs : standardisation et amélioration de la qualité des comptes-rendus d'analyse médicale, facilitation des enquêtes épidémiologiques
 - Bien adapté à l'anatomopathologie, potentiellement utilisable dans de nombreuses autres disciplines (hématologie, cancérologie, ophtalmologie, gastroentérologie, etc.)
- Participation du CRISAP de Basse-Normandie
- Développement (en cours) par le CRIHAN des outils génériques (création des référentiels et du moteur de rédaction interactif des comptes-rendus)

Perspectives de collaboration (1)

- Réseaux

- Nouveau protocole pour l'Internet : IPv6
- Déploiement, tests et échanges de pratiques
- Formations communes à mettre sur pied
- Groupe de travail régional sur IPv6 à promouvoir et à développer

- Télésanté

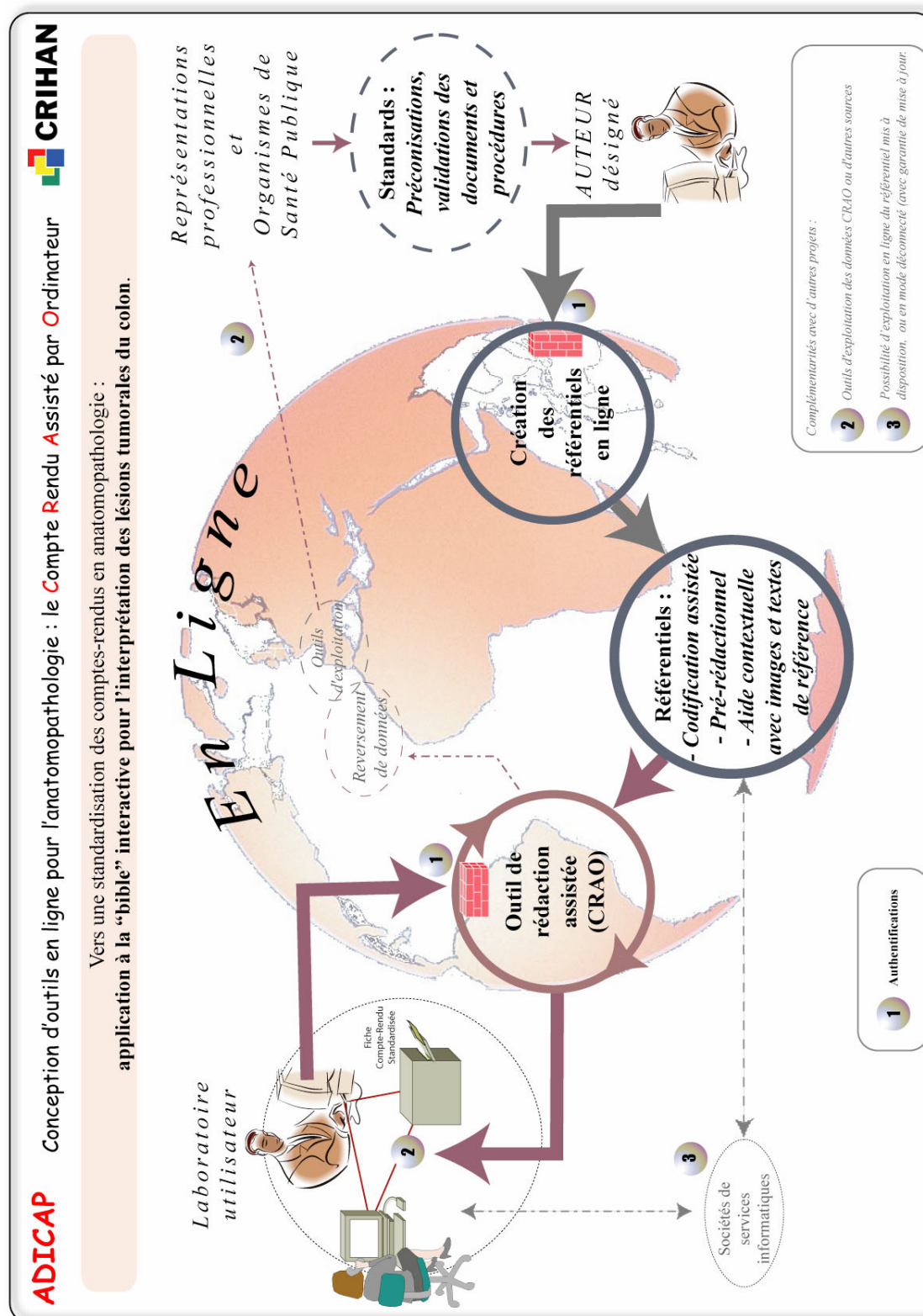
- Les actions, aujourd'hui ponctuelles, pourraient être intégrées dans une stratégie commune plus large
- VIKMAN santé et pourquoi pas SYRHANO santé ?

Perspectives de collaboration (2)

- E-Learning, avec comme thématiques :

- Technologie et stratégie IPv6
- Télésanté

Annexe I - Schéma de principe "CRAO"



Annexe J - Autres publications du CRIHAN

- Rapports annuels d'activité
 - La plupart des rapports sont disponibles sur le serveur Web du CRIHAN¹
- Rapports pour le CPER fiche 65 relatifs à SYRHANO
 - Rapport final "2002" présentant l'état du réseau à la fin 2003
 - Rapport intermédiaire "2003" portant sur les actions réalisées de janvier 2004 à septembre 2004
- Rapports pour le CPER fiche 15 relatifs au pôle de modélisation numérique
- 10 ans de vie opérationnelle pour SYRHANO. Document PDF d'octobre 2003.
- Le réseau SYRHANO 2.1 et IPv6 : transparents présentés lors de la conférence IPv6 à Caen le 13 juin 2003
- Présentation du réseau régional SYRHANO 2.1 (mai 2003)
- "10 ans déjà" (2001)
- Plaquettes de présentation
 - Présentation générale du CRIHAN (2002)
 - Les services réseau mutualisés sur SYRHANO
 - Offre d'outils et de services pour les PME-PMI
 - Service de visioconférence sur SYRHANO (en cours)
 - Plateforme de télépathologie
 - CRAO : vers une standardisation des comptes-rendus en anatomopathologie

¹ <http://www.crihan.fr>