

**CRIHAN**  
**Rapport d'activité 2007**  
**Volet technique**

© CRIHAN 2007  
info@crihan.fr



# ***Table des matières***

<b><i>1. Support et services “CRIHAN” aux utilisateurs régionaux</i></b>	<b><i>3</i></b>
<b><i>2. Pôle Régional de Modélisation Numérique</i></b>	<b><i>5</i></b>
<b><i>3. Réseau régional pour l’Enseignement et la Recherche</i></b>	<b><i>36</i></b>
<b><i>4. Support à projets et actions vers les entreprises</i></b>	<b><i>44</i></b>
<b><i>5. Encadrement de stagiaires et formations dispensées</i></b>	<b><i>47</i></b>

# 1. Support et services "CRIHAN" aux utilisateurs régionaux

\_\_\_\_\_ **Support de proximité, service sur mesure**

\_\_\_\_\_ **Assistance au quotidien**

\_\_\_\_\_ **Nouveau service régional : dispositif de sauvegarde mutualisée sur SYRHANO**

\_\_\_\_\_ **Veille technologique, échanges et communications**

## 1.1. Support de proximité, service sur mesure

Les ressources matérielles rassemblées et mutualisées au profit des utilisateurs régionaux ne seraient rien sans le travail au quotidien des équipes d'ingénieurs du CRIHAN qui les mettent en œuvre. Leur savoir faire, dans le montage de services informatiques et réseaux souvent complexes, détermine la qualité du service rendu.

Qu'il s'agisse de ressources en calcul, de services réseaux avancés, d'hébergement d'applications ou de serveurs, de formations, d'expertise, d'assistance à maîtrise d'ouvrage, d'accueil de structures innovantes etc., la disponibilité et la proximité du support du CRIHAN marquent chacune de ses actions et rencontrent auprès des utilisateurs un satisfecit évident.

A coté des grands partenaires traditionnels du CRIHAN, essentiellement ceux du monde académique ou les grands industriels, se manifestent de plus en plus des utilisateurs ou porteurs de projets issus des mondes de la culture, de la santé voire des administrations, ainsi que de petites entreprises innovantes. Ceux-ci s'adressent naturellement au CRIHAN en raison des compétences dont il fait preuve depuis plus de quinze ans et également en raison de l'environnement technique qu'il est en mesure de mettre en œuvre. Ces moyens sont toujours proposés dans un esprit de mutualisation, autant pour réduire les coûts globaux que pour alléger la charge de chaque utilisateur afin qu'il se consacre plus pleinement à son cœur de métier.

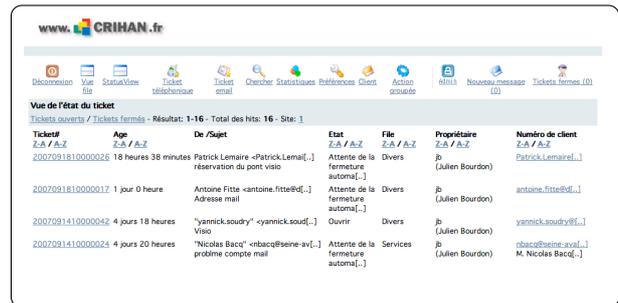
Dans le même esprit, le CRIHAN conçoit et déploie des outils adaptés voire personnalisés pour assurer fluidité, qualité et suivi des services qu'il propose .

## 1.2. L'assistance au quotidien

Les appels d'assistance sont saisis et dirigés vers un ingénieur du CRIHAN, différent chaque jour afin que toute l'équipe puisse être confrontée à la variété des problèmes soumis. Néanmoins, les demandes très spécifiques sont acheminées vers les services concernés.

Pour aider à la gestion de ces appels, la mise en production début 2007, de l'outil libre OTRS, spécialisé dans la gestion des demandes d'assistance, a permis de formaliser et d'améliorer la relation "client" avec les utilisateurs, notamment en y associant des procédures de suivi plus efficaces. A titre d'exemple, entre janvier et mi-septembre 2007, 101 personnes ont été inscrites à ce service et 321 tickets d'assistance traités.

Exemple de l'interface de gestion des appels d'assistance (OTRS)



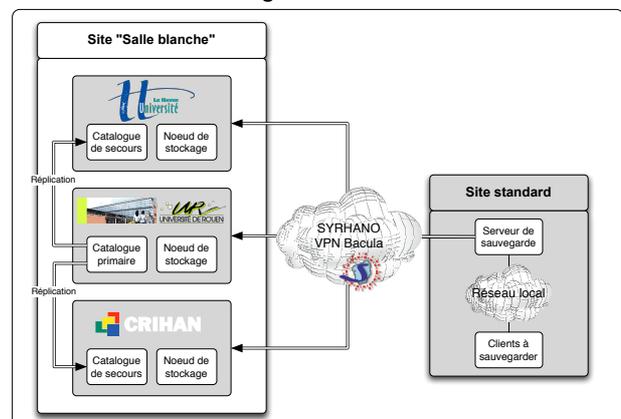
## 1.3. Etudes préliminaires pour un service de sauvegarde mutualisé

Dans le cadre des directives nationales sur la sauvegarde du patrimoine numérique, et dans une optique de mutualisation de service autour du réseau SYRHANO, une étude de faisabilité vers une solution de sauvegarde régionale a été menée.

Sur la base du logiciel libre BACULA, le CRIHAN a pu établir plusieurs maquettes de réalisations. Ces maquettes ont confirmé son bon fonctionnement, son utilisation possible sur toutes les plateformes logicielles, la sécurité et l'intégrité des données (réplication des sauvegardes, chiffrement des transferts).

Un déploiement est donc à présent possible après études de dimensionnement et choix techniques concernant la typologie de la solution de stockage.

Schéma de la maquette de sauvegarde mutualisée



## 1.4. Veille technologique, échanges et communications

### HPC User Group (Paris)

Organisé par le constructeur IBM, cette manifestation s'est déroulée à Paris La Défense le 30 mai 2007. Elle est l'occasion de rencontres d'acteurs d'horizons variés allant du milieu académique au monde industriel.

Participant au titre de présentateur, le CRIHAN a pu mettre en avant le travail de réflexion axé sur l'optimisation de l'utilisation de la solution de calcul et son intégration avec son système d'information.

### Rencontres scientifiques Inter régionales (Reims)

La Ville de Reims et ses partenaires organisent chaque année en octobre le mois de la création et de l'innovation. L'Université de Reims Champagne-Ardenne y propose un colloque sur le calcul scientifique. Elle y présente cette année, entre autres son projet ROMEO II.

Certains laboratoires de cette région sont aussi des utilisateurs du CRIHAN depuis plusieurs années. Ce dernier a été invité à venir présenter ses activités et plus largement à échanger sur son expérience en matière de service de calcul.

Le CRIHAN s'est joint à la manifestation en y proposant également une journée "modélisation moléculaire" et en y invitant les laboratoires des deux régions pour échanger sur les projets, les méthodes et les moyens des deux réseaux.

### Journée éditeur Accelrys (Paris)

Le distributeur de logiciels Accelrys a organisé en octobre une journée consacrée aux utilisateurs dans le domaine pharmacologie/biotechnologie et chimie.

Les intervenants sont des laboratoires publics ou privés, des centres de calcul et les équipes d'Accelrys.

Le CRIHAN y a présenté le Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire en développant les choix retenus en matière de gestion des ressources logicielles et matérielles pour les participants.

### Premières Rencontres Régionales de l'Innovation (Rouen)

Ces premières Rencontres Régionales de l'Innovation ont été organisées fin juin par le réseau des CCI au Palais des Consuls de Rouen. Dédiée aux entreprises régionales soucieuses de s'informer en matière d'innovation, cette journée rassemblait une palette d'experts dans chaque domaine, c'est à dire aussi bien l'innovation technologique que financière, marketing, Recherche et Développement, ressources humaines, etc. Le CRIHAN y présentait les ressources qu'il souhaite mettre à disposition des entreprises en matière d'outils pour la modélisation numérique, notamment dans le cadre de son projet AMON (voir au chapitre "Support à projets, actions vers les entreprises").

### Premières rencontres du Calcul et de la Simulation" (Paris)

Cette manifestation organisée par l'éditeur Harvest visait à rassembler un certain nombre de témoignages et d'expériences d'entreprises en matière de simulation numérique. Chaque intervention était bâtie sur le même schéma : comment les techniques de simulation s'insèrent-elles dans le processus industriel et comment se mesurent les bénéfices en gain de temps, d'efficacité, et de reproductibilité. Un grand nombre d'éditeurs de logiciels étaient présents et le CRIHAN a pu y établir des contacts dans le cadre du projet AMON.

### Fête de la Science 2007 (Rouen)

Présent comme chaque année sur le Village des Sciences rouennais dans le cadre des manifestations régionales de la Fête de la Science, le CRIHAN a choisi d'illustrer le service régional de visioconférence à travers une collaboration avec la Cité des Métiers et le Rectorat de Rouen. La Cité des Métiers organisait en ses locaux une série de conférences sur le thème "la science au féminin". Ces conférences ont été relayées en visioconférences interactives avec le village des sciences sur le technopôle de Saint Etienne du Rouvray, le lycée Jeanne d'Arc de Rouen, le lycée Pablo Neruda de Dieppe et l'IUT du Havre. Simultanément, ces conférences étaient diffusées sur l'ensemble du réseau SYRHANO.

### Python dans le calcul scientifique (Paris Poincaré)

Journée consacrée au langage Python.

### IDRIS (Orsay)

Formation sur MPI2.

### INRIA (Rocquencourt)

Formation Analyse numérique et algorithmique.

### Capitoul (Toulouse)

Capitoul1, rassemble des informaticiens de l'enseignement et de la recherche de la région Midi-Pyrénées. Le CRIHAN a été invité à y présenter l'expérimentation de téléphonie sur IP réalisée sur le réseau régional SYRHANO.

### RENATER (Paris)

Participation au groupe de travail "téléphonie sur IP" qui rassemble des techniciens des établissements de la communauté RENATER tels que l'INRIA, l'UREC, le GIP RENATER et des universités. Les objectifs de ce groupe sont la mise en place d'un service de téléphonie sur RENATER, la rédaction d'un document destiné à cette communauté et le partage de connaissances dans ce domaine.

---

<sup>1</sup> Communauté d'Administrateurs Pour l'Informatique TOULousaine

## 2. Pôle Régional de Modélisation Numérique

### \_\_\_\_\_ *Un pôle "régional"*

### \_\_\_\_\_ *Assistance scientifique*

### \_\_\_\_\_ *Expertise et aide à l'optimisation de codes de calcul*

### \_\_\_\_\_ *Veille technologique*

### \_\_\_\_\_ *Outils de gestion de la grappe de calcul IBM p575*

### \_\_\_\_\_ *Outils de gestion des utilisateurs*

### \_\_\_\_\_ *Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire*

### \_\_\_\_\_ *Bilans chiffrés 2007 - Typologie des thèmes et des utilisateurs*

#### 2.1. Un pôle "régional"

Le service de calcul régional est conçu en fonction des besoins exprimés et avec le concours des utilisateurs. Si les ressources matérielles sont d'une taille plus réduite que celles des centres de calcul nationaux, l'assistance technique et scientifique apporte des réponses de proximité appréciées des laboratoires utilisateurs. Par des actions régulières de formation, le service d'assistance scientifique sensibilise régulièrement les utilisateurs à l'optimisation de leurs programmes ce qui permet ensuite d'être plus efficace dans la résolution de tel ou tel problème particulier sur l'exécution des travaux.

#### 2.2. L'assistance scientifique

L'assistance propose une palette de services aux utilisateurs du Pôle Régional de Modélisation Numérique :

- Assistance au quotidien : connexion aux calculateurs au travers des réseaux d'établissement et de SYRHANO (voire de RENATER), environnement de travail sur le poste client et sur les calculateurs, compilation, soumission des travaux. Il s'agit de traiter les problèmes mineurs que rencontrent les utilisateurs dans leur "vie de tous les jours". C'est notamment le cas des nouveaux utilisateurs, qui parfois ont une connaissance limitée des systèmes d'exploitation, voire de l'informatique en général. De plus, chaque centre de calcul étant spécifique, les utilisateurs doivent s'adapter à leurs caractéristiques particulières : ceci est bien sûr également vrai pour ce qui concerne le CRIHAN.
- Résolution des problèmes d'exécution : problèmes de bogues, interaction avec le fournisseur de la solution en cas de problème logiciel. Certains logiciels de simulation numérique peuvent poser des problèmes d'exécution dans l'environnement de calcul (architecture des machines, compilateurs, bibliothèques scientifiques) du CRIHAN.
- L'expertise calcul consiste à travailler en profondeur sur une application utilisateur (code de calcul). Elle comprend l'utilisation d'outils logiciels pour analyser la distribution de consommation de ressources au sein des codes et l'utilisation de techniques d'optimisation pour améliorer les performances des programmes de calcul. La parallélisation de codes de calcul est longue et fastidieuse ; le choix des stratégies de programmation dépend des algorithmes mis en œuvre et des structures des données du code de calcul. Un transfert

de compétences a souvent lieu pour permettre à l'utilisateur final de continuer à développer son application.

- Des formations, théoriques (environnement de travail sur le cluster du CRIHAN) ou pratiques (optimisation, parallélisation par MPI) sont organisées sous la forme de journées ou demi-journées dans les locaux du CRIHAN. Plusieurs sessions ont lieu chaque année selon la demande et le calendrier des appels à projets. Par ailleurs, des actions d'introduction au calcul parallèle sont menées auprès des filières universitaires régionales, sous la forme de séminaires ou de formation pratique.

#### 2.3. Expertise et aide à l'optimisation de code de calcul

##### Université Paris V

Un important projet de parallélisation est en cours depuis décembre 2006 : il concerne un programme de simulation en chimie développé par le directeur de recherche CNRS Nohad Gresh. (Laboratoire de Pharmacochimie moléculaire et cellulaire de Paris V). Cet ensemble de routines (plus de 1000 fichiers source, plus de 270000 lignes d'instructions) est un gros consommateur de ressources en mémoire vive. Lorsqu'il s'exécute dans un nœud (ensemble de huit processeurs) il ne laisse plus beaucoup de mémoire pour tous les autres processeurs du nœud et certains d'entre-eux deviennent inutilisables, faute de mémoire disponible. La technique de parallélisation mise en œuvre repose sur le partage de la mémoire entre les processeurs afin de minimiser les communications et les synchronisations. Une partie du travail est déjà réalisée et les résultats sont très encourageants (100% d'efficacité jusqu'à 8 processeurs : l'accélération est de 8 sur 8 processeurs).

##### Entreprises

En septembre, dans le cadre d'une convention établie avec l'entreprise HydrOcean (voir chapitre "Support à projets, Actions vers les entreprises"), des prestations d'ingénierie ont été assurées sur la problématique de l'amélioration des performances des applications développées.

La société INCKA a réservé deux nœuds p575 pour environ 3500 heures afin d'honorer une prestation pour le groupe aéronautique SAFRAN.

## 2.4. Veille technologique

L'activité de veille technologique permet de suivre l'évolution du marché et de se tenir informé des dernières avancées technologiques. Ainsi, l'utilisation des processeurs multicœurs associée à un niveau de programmation basé sur les processus légers (ou tâches, threads en anglais) permettent d'obtenir de gros gains en performances. Toutefois, des progrès sont encore nécessaires pour permettre une utilisation industrielle massive dans le domaine du calcul haute performance.

### Ajout d'une nouvelle architecture

Le CRIHAN a acquis une petite grappe de calcul basée sur des matériels à usage généraliste : huit serveurs HP équipés de processeurs double-cœur Xeon d'Intel associés au système d'exploitation Linux. Un ensemble d'outils logiciels d'administration complète la configuration. Cette démarche a plusieurs objectifs :

- tester ce type de plateforme en vue du prochain renouvellement des moyens de calcul du CRIHAN, prévu au printemps 2009 (performances, facilité d'utilisation et d'administration) ;
- mettre à disposition de partenaires publics ou privés un ensemble de ressources compatibles avec les logiciels métier qu'ils utilisent, qu'ils soient du domaine public ou du domaine commercial ;
- fournir une puissance de calcul non négligeable (330 GFlops) pour les laboratoires et PME PMI régionales.

Vue arrière des 8 nœuds de la grappe



Venant donc élargir la palette de l'offre en calcul du CRIHAN, cette grappe est composée de 8 nœuds bi-processeurs Xeon 3,06 GHz double cœur, chacun disposant de 2 Go de mémoire, soit 8 Go par nœud. La puissance crête théorique est de 336 Gflops. Dans un environnement Linux RedHat Enterprise, la gestion de la grappe est essentiellement assurée par des logiciels libres (Rocks, Torque, Maui) qui permettent une vision globale de la grappe et de l'outil de soumission de traitement des travaux par lots.

### Decryphon et le CRIHAN

Decryphon est un programme de collaboration lancé à l'initiative de l'AFM (Association Française contre la Myopathie), le CNRS et IBM. L'objectif est la mise en place d'une plateforme technologique de calcul en grille. Les internautes et les centres de calcul universitaires sont associés pour permettre à des équipes de chercheurs d'effectuer d'importants volumes de calculs. En mai 2004, une convention entre l'AFM, le CNRS et IBM a été signée pour affirmer les volontés communes de mener à

bien ce projet. Cette action fait suite au projet Decryphon I de mars 2002.

Le CRIHAN joue un rôle essentiel dans ce projet en tant que serveur de données et espace de stockage pour l'ensemble de la grille de calcul. Au 1 juin 2007, 1,8 To de données sont servies au travers d'un serveur de base de données et d'un espace de stockage de 750 Go pour la grille.

## 2.5. Outils de gestion de la grappe de calcul



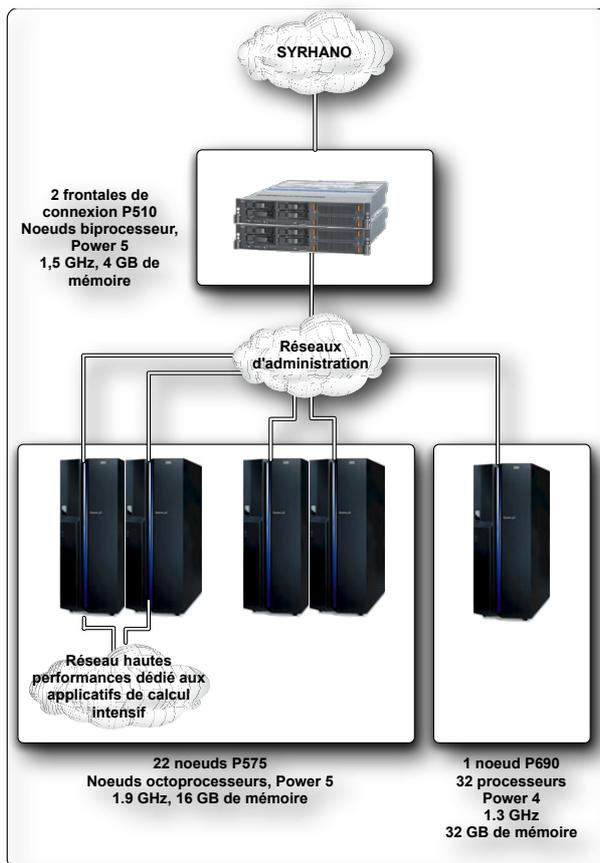
### Une solution de calcul hétérogène

Les calculateurs de type "grappe" ou "cluster" autorisent une grande souplesse. Ils sont le résultat d'un assemblage à la fois logiciel et matériel d'éléments simples. Cette principale caractéristique permet de mettre en adéquation les besoins des codes de calculs et les ressources. En contrepartie, la gestion technique de la solution et la configuration des outils à disposition de nos utilisateurs sont complexes.

La configuration en production est hétérogène à trois titres :

- Deux générations de nœuds de calcul coexistent. Composée de 22 nœuds p575 et 2 nœuds p690, la grappe de calcul du CRIHAN est forte de 240 processeurs ( l'arrêt, depuis mi-mars 2007, d'un des nœuds p690 ramène cette valeur à 208 processeurs). La complexité d'exploitation réside dans la différence de performance des deux plateformes et la disponibilité des logiciels sur ces deux architectures ;
- La plateforme p575 est elle-même non homogène : sur 22 nœuds interconnectés, seuls 16 le sont à haute performance (par un commutateur IBM FEDERATION). Ce réseau FEDERATION est nécessaire pour offrir aux travaux nécessitant l'utilisation simultanée de plusieurs nœuds, le même niveau de performance qu'à ceux pouvant être contenus dans un seul nœud ; ces derniers sont exécutés de préférence sur un des 6 autres nœuds ;
- L'accès au données se fait au travers du réseau d'administration ou d'un réseau dédié (SAN). Ce réseau est composé d'équipements spécifiques (fibres optiques et carte associées, commutateurs spécialisés) et de tiroirs de disques. Les performances de ces équipements permettent, pour les machines connectées via ce SAN, de soutenir de forts volumes de lecture et d'écriture de données. Cette composante est indispensable pour le calcul parallèle, très consommateur en ressources et performances disques.

## Architecture de la grappe de calcul en 2007.



Ce schéma ne représente qu'un seul nœud p690, le deuxième ayant cessé sa production le 14 mars 2007.

Ce dernier nœud p690 a lui-même été retiré de la production courante début juillet 2007. Il a pu cependant être encore utilisé par un doctorant du Centre de Lutte Contre le Cancer Henri Becquerel ayant besoin de ressources importantes pendant une longue période. A l'issue de cette thèse, ce nœud a été définitivement arrêté.

L'administration de la grappe de calcul présente deux difficultés :

- L'hétérogénéité des matériels implique de spécialiser les opérations de maintenance et de mise à jour du système d'exploitation ainsi que de ses appendices (compilateurs, codes spécialisés dans les cartes électroniques, compilateurs, bibliothèques scientifiques à disposition des utilisateurs, etc.) ;
- Parvenir à simplifier pour l'utilisateur la soumission de travaux au travers de Load Leveler2. Quel que soit le niveau de complexité de ses travaux, l'utilisateur doit décrire :
  - le type de travail qu'il exécute (parallèle, séquentiel, logiciel spécifique) ;
  - le nombre de processeurs à réserver ;
  - l'occupation mémoire de son logiciel ;
  - le temps nécessaire à la bonne fin de son travail.

En fonction de ces informations, un filtre, développé par le CRIHAN, établit un profil et attribue une file d'attente

au travail. La configuration de cette file ouvre droit ou non à certaines ressources ou privilèges. C'est au travers de ce script, couplé au système d'information CRIHAN, que l'hétérogénéité de notre solution de calcul est gérée.

Depuis sa mise en production, ce mode de soumission a permis d'utiliser au mieux les ressources de la grappe tout en offrant un temps d'attente faible aux utilisateurs. C'est ainsi que sur un mois, 80% des ressources processeurs sont disponibles pour les utilisateurs. Cette valeur constitue un plafond, l'ordonnement des travaux générant naturellement des creux de production. La réservation des ressources pour un utilisateur oblige parfois à attendre leur libération par un ou plusieurs travaux actifs. Ces périodes de pics de production sont riches d'enseignements et permettent de valider les configurations et les tests préalables effectués.

## Supervision de la grappe de calcul

La supervision des machines regroupe plusieurs aspects. Elle concerne notamment les ressources, la sécurité et le matériel.

La surveillance de l'utilisation des ressources (processeurs et mémoire) permet de s'assurer, quasiment en temps réel, de la bonne utilisation de la grappe. C'est également un moyen de déceler une anomalie et de détecter des contentions pouvant être résolues par modification de certains paramètres systèmes ou logiciels. Le logiciel libre GANGLIA répond parfaitement à cette problématique.

### Outils de surveillance de l'utilisation des ressources



## Optimisation et équilibrage des ressources

La soumission des travaux se fait au travers de procédures visant à simplifier l'appréhension de la grappe par les utilisateurs. Il leur faut toutefois décrire leur demande en termes de ressources. Une fois leurs travaux terminés, les utilisateurs disposent d'indications leur permettant de

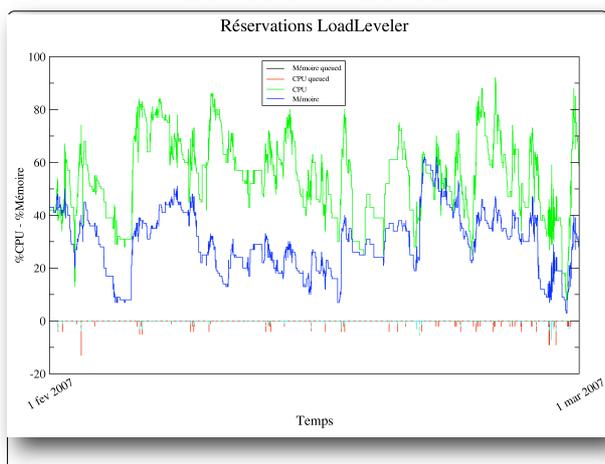
2 Load Leveler est un logiciel IBM de gestion de travaux par lots. Ses fonctionnalités permettent d'ordonner la présence des travaux utilisateurs en machines et potentiellement d'optimiser l'utilisation des ressources.

faire mieux correspondre la réservation aux ressources réellement utilisées. Un courrier électronique de fin de travail fait apparaître la consommation réelle des ressources consommées. Les informations fournies sont primordiales, principalement la quantité maximum de mémoire utilisée qui est le paramètre de soumission le moins aisé à déterminer.

En effet, afin de satisfaire dans les meilleurs délais les travaux soumis en continu aux calculateurs, il est primordial que chaque utilisateur ne réserve que les ressources nécessaires à son travail. Or, cette réservation s'applique à deux ressources distinctes qui se révèlent indissociables en exploitation : le nombre de processeurs et la quantité de mémoire. Les processeurs sont assemblés par groupes de huit dans chaque nœud. Pour les travaux nécessitant plus d'un nœud, la performance optimale est obtenue en les faisant s'exécuter sur un ensemble de nœuds de la grappe interconnectés par un réseau à haute performance (Federation) : il y a 16 nœuds ainsi interconnectés. Les travaux qui peuvent être contenus dans un seul nœud bénéficient du même niveau de performance. Pour ces derniers, 6 nœuds sont disponibles.

Une bonne répartition des travaux sur la grappe en fonction des réservations demandées est donc primordiale, tant pour l'exploitation optimale de la machine que pour minimiser les délais d'attente d'exécution. Le travail réalisé en ce sens pour équilibrer la grappe de calcul est satisfaisant comme l'indiquent les états ci-après.

#### Réservations de ressources



Les courbes ci-dessus expriment toute la problématique du concept de traitement par lots des travaux soumis à la grappe de calcul : elles représentent l'évolution dans le temps (ici sur le mois de février 2007) des travaux soumis et de ceux en attente de l'être. Elles sont exprimées en pourcentage de la capacité machine exploitée, à savoir, en vert, le pourcentage de capacité processeurs et en bleu, le pourcentage de capacité mémoire.

Que ces ressources soient utilisées ou non, elles sont réservées et non utilisables par les autres travaux.

Lors du lancement d'un programme, si les ressources demandées ne sont pas disponibles, celui-ci reste en attente jusqu'à ce qu'il reçoive l'autorisation de s'exécuter (ces programmes en attente sont représentés sur le graphique par la courbe en négatif). Ce lancement peut être retardé par un manque de disponibilité de mémoire, de processeurs ou de nœuds spécifiques (par exemple ceux qui sont reliés par le réseau haute performance).

On constate que, même s'il reste des ressources mémoires et processeurs disponibles, des travaux demeurent régulièrement en attente. En effet, la grappe étant consti-

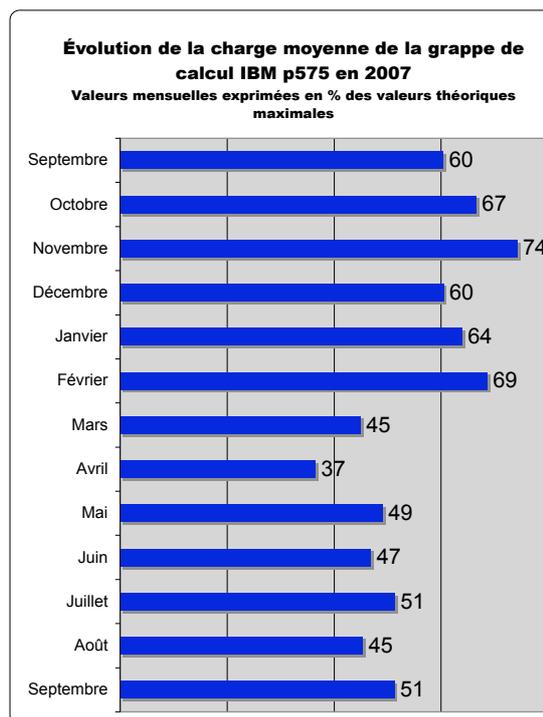
tuée de 22 nœuds distincts, si un nœud a des processeurs libres mais plus assez de mémoire disponible, il ne peut pas utiliser celle d'un nœud voisin.

Pour avoir une vision réelle des ressources utilisées sur la grappe dans le temps, il faudrait réaliser ce même graphe pour chacun des nœuds, soit 22 graphes. C'est ce que nous utilisons pour la surveillance journalière de la grappe de calcul à travers l'outil LLview.

A noter que le fait d'indiquer un pourcentage d'utilisation processeur n'est pas suffisant pour expliquer la charge de la grappe. D'autres critères rentrent en ligne de compte comme l'utilisation de la mémoire, la différence entre les ressources réservées et réellement consommées, la répartition des travaux sur les nœuds hétérogènes, etc.

Pour conforter cette analyse, le niveau de satisfaction des utilisateurs est régulièrement évalué à travers des questionnaires ou lors de leur demande de support. Les commentaires sont très positifs et les rares critiques sont toujours prises en compte ou discutées avec eux. Nous essayons de coller au plus proche des besoins des utilisateurs et de rendre un service équitable : ceux qui soumettent peu de travaux alors que d'autres lancent plusieurs occurrences à la fois, ceux qui utilisent peu de ressources alors que d'autres ont besoin d'un pourcentage élevé de la grappe à chaque lancement.

Quant à la charge de travail assurée par rapport à la capacité maximale théorique de la grappe, le graphique suivant la représente sur une plage mensuelle :

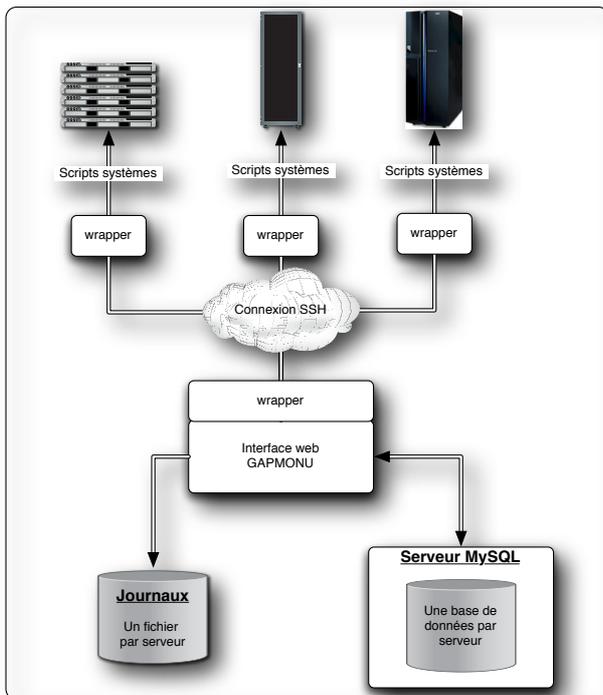


## 2.6. Gestion des utilisateurs

La gestion des utilisateurs se fait au travers d'un portail web développé par le CRIHAN : GAPMONU existe maintenant depuis la mise en production de la première grappe de calcul IBM et s'enrichit fonctionnellement. Deux évolutions majeures sont en production depuis cette année.

- Le périmètre fonctionnel de l'application est désormais multiplateforme. Jusqu'à présent réservé uniquement à la gestion administrative et système de la grappe de calcul IBM, le portail peut désormais gérer autant de serveurs ou solutions de calcul hétérogène que désirés ;
- La connexion entre le portail et les systèmes est désormais faite en temps réel et fortement sécurisée. Elle a été l'occasion de développements spécifiques laissant aux administrateurs une entière liberté quant aux spécificités techniques de connexion entre le portail et les serveurs qu'ils ont en gestion.

#### Outils de gestion des utilisateurs



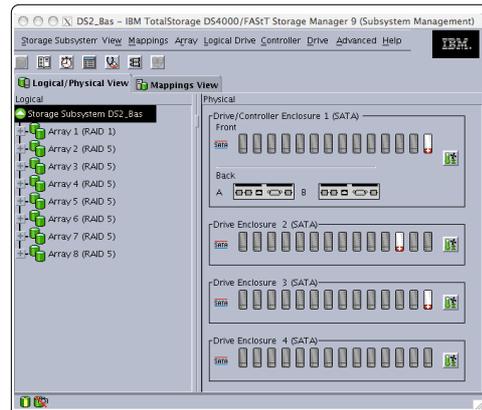
Ces outils continueront à être développés dans le sens de l'amélioration des fonctionnalités "utilisateurs". Un portail web sera réalisé à destination des utilisateurs, experts scientifiques et responsables scientifiques des projets. L'objectif est de tendre vers une automatisation des formats électroniques pour la gestion des relations utilisateurs (lettres de sommation mensuelles, ouverture de compte, gestion des dossiers scientifiques et des expertises, etc.).

#### Capacités de stockage offertes aux utilisateurs

Les données utilisateurs sont hébergées sur une baie de disques. Cet espace de stockage, composé de 112 disques, permet d'offrir un espace de 20To (ce qui équivaut à 21500 milliards de caractères). Des mécanismes de redondances permettent d'assurer l'intégrité des données et la continuité de la production en cas de panne disque. Enfin, la sécurité des informations est assurée par la gestion des droits d'accès, fonctionnalité assurée par le système d'exploitation d'IBM, AIX.

Les pannes sont signalées par courrier électronique. Parallèlement à ce mécanisme, une interface graphique permet également de gérer les incidents, la configuration et de superviser l'activité des espaces disques utilisateurs. Cet outil est un logiciel IBM fourni avec la solution de stockage. Ci après une vue de cet outil de monitoring de disques :

#### Outil de monitoring de la baie de disques



#### Sécurité

La sécurité, d'un point de vue administration système, consiste notamment à vérifier qu'aucune malveillance n'a été commise, que les logiciels installés sont à jour et ne comportent pas de faille connue (documentée), que les mots de passe des utilisateurs ne présentent pas de vulnérabilité évidente.

La plupart des malveillances peuvent se détecter à la lecture des journaux système. Elles consistent principalement à essayer d'obtenir illégalement des droits étendus sur la machine pour, par exemple, exécuter des logiciels visant à récupérer les mots de passe des utilisateurs.

L'utilisation de failles logicielles requiert une bonne connaissance du matériel, une veille "technologique" spécifique sur ce domaine et dans la majorité des cas un compte sur la machine. Enfin, il faut que la version du logiciel ne contienne pas le correctif. Ce dernier point, sur lequel nous apportons toute notre attention, est le garant de l'intégrité du système.

Par ailleurs, nous disposons de mécanismes permettant d'alerter les utilisateurs ayant choisi des mots de passe particulièrement vulnérables et nous les incitons alors à en changer.

## 2.7. Bilans chiffrés 2007 - Typologie des thèmes et des utilisateurs

### La comptabilité mensuelle

Chaque utilisateur du centre de calcul est informé régulièrement par un état récapitulatif de ses consommations par projet référencé. Cet état lui permet de se situer dans son avancement par rapport au quota d'heures attribué en début de projet par les experts indépendants. En cas de dépassement important, l'utilisateur est invité à renouveler son dossier pour faire une demande de réattribution d'heures de calcul.

Ci-dessous un exemple de cet état mensuel :

**Comptabilité détaillée par projet**  
Extrait du bilan mensuel généré automatiquement

RÉF. ET NOM DU PROJET LISTE DES UTILISATEURS	CONSO. PAR RAPPORT AU VOLUME ATTRIBUÉ	HEURES CONSOMMÉES	
1998022	Écoulements turbulents compressibles	39.9 %	27827 h 28 mn
yperr01	Monsieur Yohann PERROT		24674 h 28 mn
anodr01	Monsieur Alfonso RODRIGUEZ		1903 h 27 mn
coone01	Monsieur Céline COFFIENT		1201 h 4 mn
gaur01	Monsieur Gaylors JAUNIN		91 h 16 mn
ahadq01	Monsieur Abdellah HADJADI		56 h 4 mn
dchar01	Monsieur Didier CHARLEY		0 h 15 mn
grib01	Monsieur Guillaume RIBERT		0 h 0 mn
amou002	Mademoiselle Anne-Sophie MOURONVAL		0 h 0 mn
adu0001	Monsieur Samuel DUBOS		0 h 0 mn
chass01	Monsieur Olivier HASSAMBAÏV		0 h 0 mn
larcho1	Monsieur Tristan LARCHEVEQUE		0 h 0 mn
1998051	Modélisation d'écoulement compressible turbulent	138.49 %	27687 h 6 mn
anab001	Monsieur Abdelmalik NEBACHIE		27597 h 6 mn
1998053	Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	34.7 %	6940 h 22 mn
ngresh01	Monsieur Nohad GRESH		6926 h 18 mn
loboc001	Monsieur Benoit LOBOURCY		14 h 5 mn
1998066	Etude des phénomènes de transformation dans les alliages	68.91 %	6895 h 54 mn

## 2.8. Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire (RNMM)

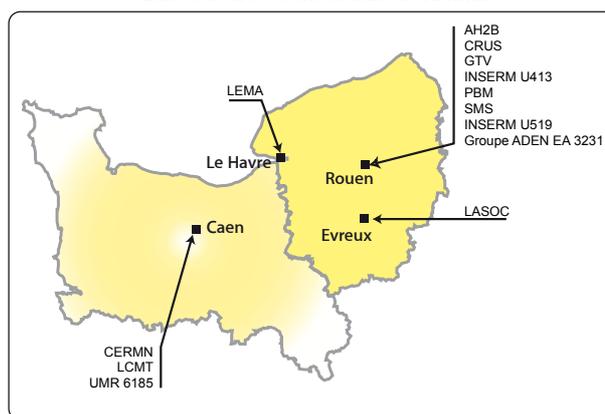
Créé en 1997 grâce à un financement du CIPBP et des fonds européens, le RNMM a bénéficié ensuite du soutien du contrat de plan État-Région 2000-2006. Le Contrat de Projet 2007-2013 en prévoit également le financement.

Le CRIHAN coordonne les aspects techniques (réseau, machines, logiciels, serveurs, bases de données, etc.), les aspects administratifs (dossiers de financements, négociations avec les éditeurs de logiciels, organisation des comités de pilotage et technique) et les utilisateurs assurent la cohérence scientifique de l'ensemble (choix des logiciels et de leurs modules, transferts de compétences, etc.).

Le service est ouvert de droit aux laboratoires publics de la Haute et de la Basse-Normandie. Les laboratoires d'autres régions et les industriels peuvent avoir accès aux logiciels moyennant une autorisation préalable des éditeurs.

Le RNMM met à disposition des chercheurs un ensemble de logiciels spécialisés (bases de données réactionnelles, outils de modélisation) et des stations de travail graphiques. Pour les calculs lourds, les chercheurs ont accès aux grappes de calcul du CRIHAN à travers les réseaux régionaux pour la recherche, comme SYRHANO en Haute-Normandie et VIKMAN en Basse-Normandie.

### Laboratoires constituant le RNMM



### pour la Haute-Normandie :

- CRUS : Centre Régional Universitaire de Spectroscopie, IRCOF, IFRMP 23, Mont Saint Aignan ;
- SMS : Sciences et Méthodes Séparatives,
- IRCOF, UPRES CNRS EA 3233, IFRMP 23, Mont Saint Aignan,
- IRCOF, UPRES CNRS EA 3233, IFRMP23, Evreux ;
- AH2B : Asymétrie, Hétérocycles, Hétérochimie, Bioorganique, IRCOF, UMR CNRS 6014, Mont Saint Aignan ;
- PBM : Polymères, Biopolymères, Membranes, UMR CNRS 6522, Université de Rouen Mont Saint Aignan ;
- LEMA : Laboratoire d'Ecotoxicologie, milieux aquatiques, EA 3222, Université du Havre ;
- GTV : Glycobiologie et Transports chez les Végétaux, UMR CNRS 6037, IFRMP 23, Université de Rouen Mont Saint Aignan ;
- Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire, INSERM U 413, IFRMP 23, Mont Saint Aignan ;
- Laboratoire de Protéines de Défense des Réponses Immune et Inflammatoire : Identification, régulation et rôles physiopathologiques, INSERM U 519, IFRMP 23, Faculté de Médecine et de Pharmacie, Rouen ;
- Laboratoire de Parasitologie Expérimentale, Groupe ADEN EA 3234, IFRMP 23, Faculté de Médecine et de Pharmacie, Rouen.

Ces quatre derniers laboratoires ont rejoint le réseau RNMM dans le courant de l'année écoulée.

### pour la Basse-Normandie :

- CERMN : Centre d'Etude et Recherche sur le Médicament, CNRS UPRES EA 3915, Université de Caen ;
- LCMT : Laboratoire de Chimie Moléculaire et Thioorganique, UMR CNRS 6507, Université de Caen ;
- Neurodégénérescence : modèles et stratégies thérapeutiques, UMR CNRS 6185, Université de Caen, Centre Cyceron, Caen.

## Les ressources logicielles du RNMM

Les licences logicielles actuellement disponibles ont été négociées fin 2006 avec les fournisseurs pour la période 2007-20083. La réunion du comité de pilotage du RNMM qui s'est tenue le 29 mars 2007 au CRIHAN a permis de faire un état des lieux des logiciels mais aussi des matériels, des services et des perspectives du réseau.

## Installation d'une nouvelle machine multi-services

Une nouvelle machine multi-services, (rmm.crihan.fr), dédiée à l'hébergement d'applications mutualisées autour du projet RNMM est opérationnelle depuis début 2007.

Le CRIHAN et les laboratoires y installent des applications à usage de l'ensemble des membres du réseau.

Trois services sont d'ores et déjà installés :

- ProGeR-CDD, développé par le laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire (INSERM U 413, IFRMP 23), pour la protéomique (Proteomic and Genomic Regulations during Cell Death and Differentiation) ;
- prims, développé par le laboratoire PBM UMR 6522, système dédié à l'analyse protéomique ;
- MASCOT, acquis par le CRIHAN fin 2006. C'est un serveur d'identification de protéines à partir de données de spectrométrie de masse.

La mise en service de MASCOT a entraîné la demande de trois nouveaux laboratoires pour rejoindre le RNMM :

- Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire, INSERM U 413, IFRMP 23, Mont Saint Aignan ;
- Laboratoire de Protéines de Défense des Réponses Immune et Inflammatoire : Identification, régulation et rôles physiopathologiques, INSERM U 519, IFRMP 23, Faculté de Médecine et de Pharmacie, Rouen ;
- Laboratoire de Parasitologie Expérimentale, Groupe ADEN EA 3234, IFRMP 23, Faculté de Médecine et de Pharmacie, Rouen.

Les utilisateurs de MASCOT demandent régulièrement l'ajout de bases de données référencées pour les besoins de leurs recherches (actuellement une vingtaine).

## Rencontres inter utilisateurs et fournisseurs

Certaines familles de logiciels sont mises à disposition dans ce projet depuis 1997. C'est le cas des logiciels édités par Accelrys et Tripos. Cependant, les fonctionnalités évoluent régulièrement. C'est pourquoi, pour la deuxième fois, le CRIHAN a convié Accelrys à une journée de présentation de ces évolutions avec des ateliers de rencontre entre le support Accelrys et les utilisateurs. Cette journée s'est déroulée le 20 mars 2007 et a réuni 16 utilisateurs et 3 intervenants d'Accelrys.

Une opération similaire avec Tripos est programmée pour la fin d'année.

## 2.9. Bilan des consommations 2007 et typologie des utilisateurs

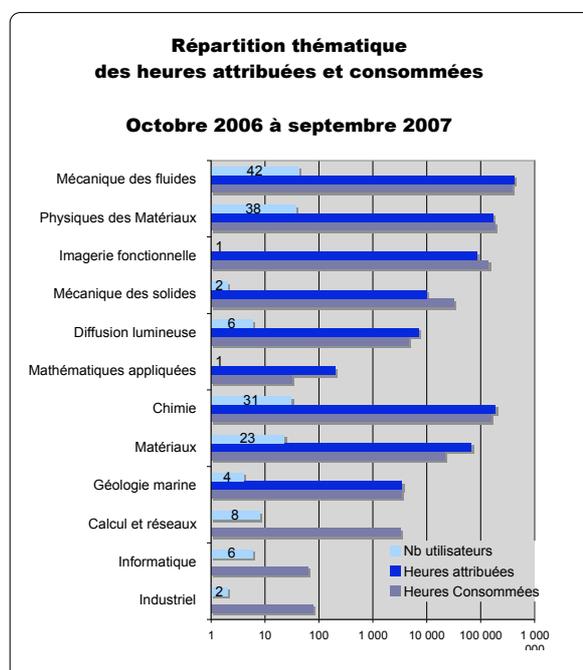
### L'année 2007 en chiffres

De septembre 2006 à octobre 2007 :

- 959 600 heures processeur attribuées ;
- 933 905 heures processeur consommées ;
- 164 comptes utilisateurs actifs (129 en Normandie) ;
- 68 projets scientifiques répartis en 12 thématiques ;
- 12 secteurs géographiques.

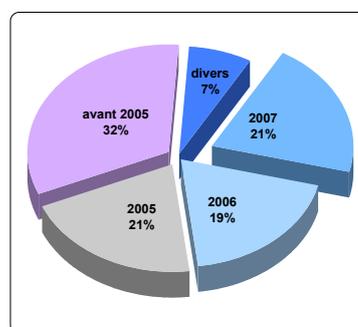
### Thématiques scientifiques

Le graphique ci-après représente, pour chaque grande thématique scientifique, le niveau de consommation atteint (en bleu foncé) par rapport au nombre d'heures attribuées pour l'année en cours (en gris-bleu). Le chiffre indiqué sur la barre bleu-clair indique le nombre d'utilisateurs dans chaque thématique.



### Durée des projets

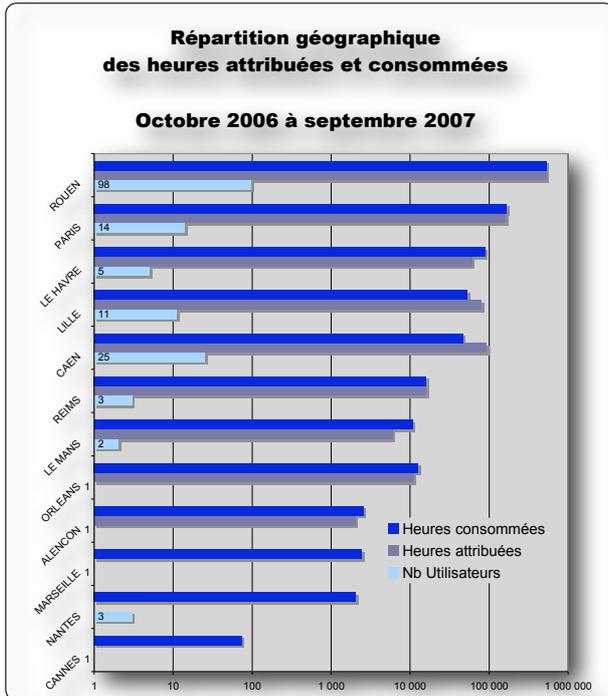
#### Répartition des projets actifs en 2007, selon leur ancienneté



21% de projets nouveaux en 2007.

3 La liste des produits, décrite dans le rapport précédent, est disponible sur <http://www.crihan.fr/calcul/tech/chimie/softs-chimie>.

## Origine géographique des utilisateurs



### 2.10. Publications scientifiques

Les données détaillées sur les projets scientifiques et les publications des laboratoires sont disponibles sur le site du CRIHAN, <http://www.crihan.fr>, rubrique "calcul".

On y trouvera le détail des données ci-après :

- 144 publications ;
- 94 communications dans des conférences ;
- 53 thèses achevées ou en cours ;
- 29 communications par affiches ;
- 38 collaborations universitaires.

#### 2.10.1. UMR 6614-CORIA

##### Projet 2003008

**Responsable : Alain. BERLEMONT**  
**Dr CNRS**

##### Appréciation du service

Dans le cadre de la rupture en gouttes de jets liquides (l'atomisation), le CORIA développe depuis quelques années, une technique numérique de suivi d'interface résultat de la combinaison de plusieurs techniques développées indépendamment, couplée à un solveur des équations de Navier-Stokes afin d'étudier précisément la dynamique de l'interface qui sépare le liquide du gaz. Un algorithme de calcul de configurations tridimensionnelles optimisé pour le calcul parallèle (sur plusieurs processeurs) est dès à présent opérationnel. Les résultats numériques obtenus par l'équipe du CORIA sont aujourd'hui les premiers du genre, permettant une réelle avancée dans la compréhension de l'atomisation. Ces résultats sont inédits et reconnus sur le plan mondial. Ces avancées sont très liées aux progrès spectaculaires des moyens informatiques et c'est grâce au support du CRIHAN que les calculs de l'équipe du CORIA sont effectués.

## Thèse

1. Ménard T., 2007 Développement d'une méthode Level Set pour le suivi d'interface: application à l'atomisation de jet liquide, 30 mars 2007, Université de Rouen.

## Journaux

1. Tanguy S., Ménard T., Berlemont A. A Level Set Method for vaporizing two-phase flows Journal of Computational Physics, 221, 2, 837-853, 2007.
2. Ménard T., Tanguy S., Berlemont A. Coupling Level Set / VOF / Ghost fluid methods: Validation and application to 3D simulation of jet primary break-up Int. J. Multi-phase Flows, 33, 5, 510-524, 2007.

## Conférences

1. Ménard T., Demoulin F-X and Berlemont A. 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet by coupling Level Set / VOF / Ghost fluid methods ICMF2007, Leipzig, Germany, 2007.
2. Tanguy S., Berlemont A. Numerical Simulation of non spherical droplet vaporization with a Level Set / Ghost Fluid Method: influence of Stefan flow. ICMF2007, Leipzig, Germany, 2007.
3. Ménard T., Berlemont A. Interface tracking with a coupled Level Set / VOF / Ghost fluid method: application to jet atomization Keynote lecture FEDSM2007 5th Joint ASME /JSME Fluids Engineering Conference July 30-August 2, San Diego, CA, 2007.

## Conférences Invités

1. Berlemont A.: Coupling Level Set / VOF / Ghost Fluid methods: description and application on jet atomization Von Karman Institute, CFD OF MULTIFLUID FLOWS, May 21 - 24, Rhode-Saint-Genèse, Belgique, 2007.
2. Berlemont A. Level Set / Ghost Fluid Method with heat and mass transfers: technique and application on droplet vaporization Von Karman Institute, CFD OF MULTIFLUID FLOWS, May 21 - 24, Rhode-Saint-Genèse, Belgique, 2007.

### 2.10.2. LIMHP Paris

#### Projet 2007.002

**Responsable : Xavier Bonnin CR CNRS**

Le Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux et des Hautes Pressions est une unité propre du CNRS (UPR 1311) rattachée au département des Sciences pour l'Ingénieur (section 10 du comité national).

La demande de ressource a été faite au sein de l'équipe « Energie et environnement » pour l'opération 'Modélisation du réacteur CASIMIR'. L'objectif des travaux de recherche est la modélisation et l'estimation de la formation de poussières carbonées dans les plasmas obtenus à l'intérieur du réacteur de recherche CASIMIR situé au LIMHP, dédié à l'étude des interactions plasma-paroi. Dans le cadre du projet actuel, cela signifie une modélisation Particle-In-Cell des deux plasmas créés par injection de puissance micro-onde.

Le correspondant pour ce projet est Mr. Xavier BONNIN, Chargé de Recherche du CNRS qui coordonne l'activité du laboratoire autour de la problématique des plasmas de bord pour le projet ITER. Le projet est, à ce jour, mené par Mr. BONNIN et Melle Armelle MICHAU (du service de calcul scientifique du laboratoire), en collaboration avec Mr. Khaled HASSOUNI (chef de l'opération de recherche concernée) et Mr. Guillaume LOMBARDI (en charge du réacteur CASIMIR lui-même). D'autres collaborations extérieures pour ce projet sont aussi détaillées plus bas.

### Etat d'avancement des travaux

La convention pour le projet 2007002 a été ouverte le 1er janvier 2007. Le projet implique un code PIC (Particle-In-Cell) pour déduire les conditions plasmas présentes à l'intérieur du réacteur CASIMIR du LIMHP pour y étudier ensuite les processus physico-chimiques y ayant cours, en particulier la croissance de poussières. Cet outil de modélisation plasma a vocation à traiter à la fois les deux décharges de la chambre d'érosion et du tube de transfert dans CASIMIR et aussi être adapté à l'étude de décharges RF capacitives en plasma Ar/O<sub>2</sub> pour des procédés de dépôt de SnCl<sub>4</sub>. Le modèle permet actuellement de calculer la distribution en espace et en énergie des ions positifs d'hydrogène (H<sup>+</sup>, H<sub>2</sub><sup>+</sup> et H<sub>3</sub><sup>+</sup>) dans la chambre d'érosion de CASIMIR, et ainsi de pouvoir en déduire le taux d'érosion du carbone du substrat qui y est exposé. Le code est en cours d'extension actuellement pour mieux traiter les ions négatifs H<sup>-</sup> dans la décharge et y incorporer les hydrocarbures légers C<sub>x</sub>H<sub>y</sub> (où  $x \leq 3$ ) vus par spectrométrie de masse dans le réacteur et les atomes, molécules et radicaux neutres. On pourra ainsi en déduire les taux de formation (en surface et en volume) des différentes espèces et juger de leur chimie durant leur transport vers la décharge secondaire puis la chambre de re-dépôt. Un travail équivalent sera aussi entrepris pour simuler le plasma de la décharge secondaire et y étudier la chimie qui s'y produit.

### Communication

1. F. Duré, A. Michau, K. Hassouni, X. Bonnin, G. Lombardi, F. Bénédict et C. Arnas, Modelling of carbon dust formation by cluster growth in plasma, présenté au 1er Workshop de l'EPS sur la Poussière dans les Plasmas de Fusion (DFP/EPS), 8 au 10 juillet 2007, Varsovie, Pologne.

### Collaborations

Le projet CASIMIR au LIMHP et la modélisation associée de la chimie des poussières de carbone dans les plasmas se font dans le cadre d'un projet collaboratif incluant :

1. C. Arnas, C. Dominique, P. Roubin et C. Martin (PIIM, UMR 6633, Université Aix-Marseille I, Marseille, France).
2. R. Hugon (LPMIA, UMR 7040, Université Henri Poincaré, Nancy, France).
3. C. Brosset, B. Pégourié (DRFC, CEA, Cadarache, France).

Le développement du code PIC est un effort collaboratif avec :

1. W. Morscheidt (LPPGTS, ENSCP, Université Paris V, Paris, France).
2. D. Tskhakaya (Département de Physique Théorique, Université d'Innsbruck, Autriche et Académie des Sciences, Tbilissi, Géorgie).

Plus généralement, cet effort se situe à l'intérieur du Programme de Travail Européen sur les poussières dans ITER, lequel est dirigé par C. Grisolia (DRFC, CEA, Cadarache, France), pour le compte de l'European Fusion Development Agreement.

### 2.10.3. UGSF-UMR CNRS 8576 Laboratoire de Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle LILLE

#### Projet 2005.011

**Responsable : Philippe LAGANT CR1  
CNRS Université des Sciences et Technologies de LILLE**

Etude par dynamique moléculaire des interactions entre ligands de type phéromone et leurs protéines transporteuses.

Ce projet n'a pas encore abouti à la rédaction d'un article scientifique.

En effet, nous avons utilisé le programme CHARMM parallélisé dans sa version originale. Après un long temps de calcul (>10 nanosecondes) pour un système comprenant 2500 atomes, aucune extraction de la phéromone n'a pu être mise en évidence. Nous avons alors modifié ce logiciel pour inclure de nouveaux paramètres et nous avons passé un certain temps à paralléliser cette partie. La dynamique moléculaire effectuée sur plus de trois nanosecondes a montré l'expulsion de la phéromone par sa protéine transporteuse, expulsion cependant non totale, des résidus aminoacides aromatiques en gênant la sortie complète. Les calculs de dynamique moléculaire ont été repris de deux façons :

- Modification des torsions des aminoacides qui empêchent la sortie totale de la phéromone et avons montré son évacuation.
- Reprise des calculs en mutant les aminoacides impliqués dans l'expulsion du ligand et nos prédictions montrent qu'il n'y a plus de sortie de la phéromone. Ceci montre le rôle important joué par ce résidu dans l'expulsion.

L'équipe de Biologistes-Biochimistes avec qui nous travaillons au sein de notre UMR-CNRS est actuellement en cours de mutation de ces amino-acides pour confirmer (ou infirmer) nos prédictions. Nous aurons prochainement les résultats de ces mutations et publierons les résultats avec cette équipe en associant le CRIHAN.

#### Projet n° 2007010

**Responsable : Philippe LAGANT CR1  
CNRS Université des Sciences et Technologies de LILLE**

Etudes structurales de Polysaccharides anioniques formant des hydrogels: Chondroïtine 4-Sulfate

Ce projet vient juste de terminer et nous sommes en train de dépouiller le travail afin de publier nos résultats. Nous avons effectué une dynamique moléculaire d'un trisaccharide dans une boîte d'eau avec des contre-ions sodium. 860 heures de calculs ont été nécessaires pour ce travail. Les résultats semblent très encourageants et montrent l'utilité de ce type d'études.

#### 2.10.4. LMPG EA 2255

**Laboratoire de Mécanique,  
Physique et Géosciences  
Université du Havre**

##### **Projet 2003.013** **MCF Grégory Pinon, PU Elie Rivoalen**

##### **Conférences**

Deux conférences nationales aux CFM2007 (Congrès Français de Mécanique, Grenoble 27-31 août 2007) :

1. Modélisation numérique des écoulements externes d'inverseur de poussée. Une aide pour la conception des nacelles,  
Grégory Pinon, Jean-Marc Cherfils, Xavier Bouteiller, Laurent Blin et Elie Rivoalen, Aircelle Le Havre : Groupe SAFRAN.
2. Instabilité secondaire sur un anneau de vortacité,  
Grégory Pinon<sup>1</sup>, Ivan Delbende<sup>2</sup>, Elie Rivoalen<sup>1</sup> & Maurice Rossi<sup>3</sup>.

##### **Article**

1. Pour la revue Aerospace Science and Technology (AST). Thrust reverser's jet trajectories prediction for a civil aircraft in landing phase Pinon<sup>1</sup>, a, J-M. Cherfils<sup>2</sup>, a, X. Bouteiller<sup>3</sup>, b, M. Bendaoud<sup>3</sup>, c, L. Blin<sup>2</sup> b and E. Rivoalen.  
a Université du Havre, Laboratoire de Mécanique, Physique et Géosciences, 76600 Le Havre,  
b Aircelle, Groupe SAFRAN, route Pont VIII, 76700 Gonfreville l'Orcher, c AXS Analyse de structures, 164 Boulevard de Gravelle, 76600 Le Havre.

##### **Projet 2006015** **Huaqing Wang, Professeur des Universités, Antony Beaudoin**

Modélisation physique et numérique du colmatage dans les sols.

Acceptation d'un projet national en Janvier 2007 :

Projet National Erosion Interne des Ouvrages Hydrauliques (ERINOH) – Thème C : Modélisation multi échelle de la migration de grains.

##### **Publications**

1. Samira Oukfif and Anthony Beaudoin, Modeling reactive transport in heterogeneous saturated porous media : effects of non linear sorption. Revue Européenne de Génie Civil, 11 (4), April 2007.
2. Samira Oukfif, Anthony Beaudoin, Ahmed Benamar and Huaqing Wang, Numerical modeling of mass transport in saturated porous media using particles method, Geosciences & Computing (paper submitted).

##### **Thèse**

1. Doctorante : Samira Oukfif  
Titre de la thèse : Modélisation numérique et physique du colmatage dans les sols  
Date de début de thèse : Septembre 2005  
Financement : bourse régionale de Haute Normandie.

##### **Communications**

1. Anthony Beaudoin, Samira Oukfif, Huaqing Wang et Ahmed Benamar, Modélisation de la migration de particules fines par Méthode particulaire, Séminaire PN ERINOH à l'IREX, le 10 juillet 2007.
2. Pierre Yves Hicher, Présentation du projet national ERINOH – thème C : Migration des particules, à la FNTP de Paris, 30 Janvier 2007.

3. Samira Oukfif, Huaqing Wang, Ahmed Benamar et Anthony Beaudoin, Transport réactif de solutés en milieux poreux hétérogènes : étude de l'effet de l'adsorption non linéaire, Séminaire Réseau SCALE, 2007.

##### **Posters**

1. Samira Oukfif, Anthony Beaudoin, Huaqing Wang et Ahmed Benamar, Transport réactif dans des milieux poreux saturés : étude de l'effet de l'adsorption non linéaire, 24<sup>èmes</sup> Rencontres Universitaires de Génie Civil, 2006.
2. Samira Oukfif, Anthony Beaudoin, Huaqing Wang et Ahmed Benamar, Modélisation physique et numérique du colmatage dans des sols, Entretiens du RGCU, 2005.
3. Samira Oukfif, Huaqing Wang, Ahmed Benamar et Anthony Beaudoin, Modélisation du transport et de la cinétique de dépôt de particules en suspension dans des milieux granulaires, Confrontation entre les résultats numériques et expérimentaux, JEMP 2007.

#### 2.10.5. GPM UMR CNRS 6634

##### **Projet 2004.002** **Responsable Pierre-Emmanuel Berche, Groupe de Physique des matériaux, Uni- versité de Rouen**

Etude par simulation numérique du comportement magnétique de multicouches Fe/Dy

##### **Publication**

1. Monte Carlo investigation of the magnetic anisotropy in Fe/Dy multilayers, E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue  
Soumis à Journal of Physics C: Condensed Matter.

##### **Thèse**

1. Soutenance de thèse d'Etienne Talbot prévue le 4 décembre 2007 : Etude par simulation numérique des propriétés magnétiques de multicouches Fe/Dy.

##### **Mémoires**

1. Mémoire de M2 Recherche Matériaux de Fabrice Noël soutenu en juin 2007 : Réalisation de cycles d'hystérésis de multicouches magnétostrictives Tb-(Fe-Co)/Fe par simulation numérique Monte Carlo.
2. Mémoire de stage de M1 EPO de Thomas Philippe soutenu en mai 2007 : Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe<sub>2</sub>/YFe<sub>2</sub> en simulation numérique.
3. Mémoire de stage de M1 EPO de Marilyne Certain soutenu en mai 2007 : Etude des propriétés magnétiques de multicouches (Fe/Au).

##### **Communications**

En congrès sous forme de poster :

1. Etude de l'anisotropie magnétique perpendiculaire dans les multicouches Fe/Dy : simulation numérique de cycles d'hystérésis. E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue 11<sup>ème</sup> Colloque Louis Néel - Couches minces et nanostructures magnétiques Lyon, (14/16-03-2007).
2. Etude de l'anisotropie magnétique perpendiculaire dans les multicouches Fe/Dy : simulation numérique de cycles d'hystérésis. E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue Congrès général de la Société Française de Physique Grenoble, (09/13-07-2007).
3. Field dependence of the magnetization depth profile in DyFe<sub>2</sub>/YFe<sub>2</sub> superlattices from Monte Carlo simulations. P.E. Berche, E. Talbot, T. Philippe and C. Dufour

Conference on Computational Physics Bruxelles, (05/08-09-2007).

4. Monte Carlo investigation of magnetic anisotropy in amorphous Fe/Dy multilayers. E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue, Conference on Computational Physics Bruxelles, (05/08-09-2007).

### Séminaires

1. Simulations numériques Monte Carlo et modélisation des systèmes magnétiques. P.E. Berche et E. Talbot Université Claude Bernard, Lyon 1 (09-02-2007).
2. Simulations numériques de cycles d'hystérésis. E. Talbot Université de Rouen (05-07-2007).

## 2.10.6. ECOFH IRCOF

### Equipe de Chimie Organique Fine et Hétérocyclique de l'IRCOF (ECOFH)

Direction Pr. François Marsais,

Utilisateur des Ressources : Pr G. DUPAS

### Appréciation du service

Le CRIHAN nous permet d'utiliser des logiciels très précieux dans le domaine de la modélisation moléculaire : MS-Modeling, Gaussian 03, Cerius2. Les relations avec le CRIHAN sont excellentes car compétence et convivialité sont au rendez-vous pour résoudre les problèmes informatiques et techniques qui ne manquent pas de se présenter. Nous sommes donc extrêmement satisfaits des ressources fournies par le CRIHAN.

### Projet 2005.006

#### Collaboration

Avec le LASOC du Pr Paul-Louis Desbène à Evreux. Complexes entre deux acides aminés et le cuivre (II) en présence d'eau. Les calculs relatifs à ce projet sont en cours d'achèvement et les résultats corrélés avec l'expérience seront publiés fin 2007.

### Projet 2006014

#### Collaboration avec le LCMT :

Le LCMT est dirigé par le Dr Patrick Metzner à Caen dans le cadre de la thèse de G. Grach. Rationalisation de l'énantiosélectivité observée dans la synthèse asymétrique de nouveaux aminosulfoxydes ferrocéniques. Ce projet n'a pour l'instant pas pu aboutir. L'état de transition recherché pose des problèmes très complexes. Des calculs préliminaires avaient été effectués et avaient conduit à une publication : Diastereoselective Addition of Enantiopure Lithium tert-Butylsulfonylferrocene to Imines. Grach, G.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Lohier, J.-F.; Mojovic, L.; Ple, N.; Turck, A.; Reboul, V.; Metzner, P. La thèse de G. Grach sera soutenue le 25/10/07 à Caen. Quelques heures de calcul de ce projet ont été utilisées pour vérifier la faisabilité d'un autre projet qui sera déposé en novembre 2007 : Etude de la structure de magnésiates de lithium. Les premiers résultats ont été présentés le lundi 22 octobre 2007, à Reims, lors d'un séminaire organisé par le CRIHAN et le centre de calcul RO-MEO.

### Thèse

1. Sylvain Achelle, 24 octobre 2007. UMR CNRS 6014. Synthèse de nouveaux oligomères possédant un ou plusieurs motifs diaziniques : applications en tant que cristaux liquides et matériaux fluorescents. De nombreux calculs ont été utilisés dans ce travail de thèse afin d'essayer de trouver des corrélations avec les propriétés physiques des molécules synthétisées et modélisées.

Calculs d'intermédiaires de réaction avec MS-Modeling géré par le CRIHAN :

### Publications

1. Diastereoselective Conjugate Addition of Organocuprates to 3,4-Dimethyl-5,6-dihydro-2(1H)-pyridinones. A Concise Synthesis of trans-3,4-Dimethyl-4-phenylpiperidines Farhana Oueslati, Cécile Perrio, Georges Dupas, and Louisa Barré, Groupe de Développements Méthodologiques en Tomographie par Emission de Positons, UMR CEA 2E, Université de Caen-Basse Normandie, Centre Cyceron, Caen, and Equipe de Chimie Fine et Hétérocyclique de l'IRCOF, UMR CNRS 6014, INSA de Rouen.
2. Synthesis of New 3-(2,2,2-Trifluoroethyl)-5-hydroxy-5-(phenylsulfanyl- or sulfonyl-methyl)-1,5-dihydropyrrol-2-ones Starting from  $\alpha$ -Unsaturated  $\beta$ -Lactones and Amines Jean-Philippe Bouillon,<sup>a</sup> Yuriy Shermolovich,<sup>ab</sup> Sergiy Mykhaylychenko,<sup>ab</sup> Dominique Harakat,<sup>c</sup> Bernard Tinant,<sup>d</sup>  
a Laboratoire Sciences et Méthodes Séparatives (SMS), EA 3233, Université de Rouen, IRCOF,  
b Institute of Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 5, Murmanska, Kiev, Ukraine,  
c Laboratoire Réactions Sélectives et Applications, UMR CNRS 6519, Université de Reims, Faculté des Sciences, Reims,  
d Unité de Chimie Structurale et des Mécanismes Moléculaires, Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgique.

### Collaboration

1. Une collaboration est en cours de démarrage avec le laboratoire L2M, composante de l'UMR 6522. Ce projet concernera l'étude d'un mécanisme de polymérisation.

## 2.10.7. LMR EA 3828, Laboratoire de Mécanique de Rouen, INSA de Rouen

### Projet 2003006

Responsable : Fabrice Barbe

### Appréciation du service

Très positive ; qualité appréciée.

### Articles de revue

1. Hoang, H., Barbe, F., Quey, R., Taleb, L. (2007) FE determination of the plasticity induced during diffusive transformation in the case of nucleation at random locations and instants". *Comput Mat Sc*, A paraitre, doi:10.1016/j.commatsci.2007.07.032.
2. F. Barbe, R. Quey and L. Taleb (2007) Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. Case of a cubic array of nuclei *Eur J Mech/A Solids* 26, pp. 611-625.

### Communication

1. H. Hoang, F. Barbe, R. Quey and L. Taleb (2007) FE analysis of the effect of the kinetics of nucleation on the plasticity induced during diffusive transformation 17th Int Workshop Computational Mechanics of Materials, Paris (France), August 22-24 2007.
2. H. Hoang, F. Barbe, R. Quey and L. Taleb (2007) Analyses numériques des conséquences mécaniques de transformation de phase diffusionnelle dans l'acier : plasticité de transformation et effet de pré-écrouissage 18è Congrès Français de Mécanique. Grenoble, 27-31 août 2007, France.

**2.10.8. INSERM U 413**  
**Laboratoire de**  
**Neuroendocrinologie Cellulaire et**  
**Moléculaire,**  
**Mont Saint Aignan**

Directeur : Professeur Hubert VAUDRY

**Publications 2006**

1. Aubert, N., Falluel-Morel, A., Vaudry, D., Xifro, X., Rodriguez-Alvarez, J., Fisch, C., de Jouffrey, S., Le Bigot, J.F., Fournier, A., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: PACAP and C2-ceramide generate different AP-1 complexes through a MAP-kinase-dependent pathway: Involvement of c-Fos in PACAP-induced Bcl-2 expression. *J. Neurochem.* 99:1237-1250 (2006). (IF = 4,8).
2. Aubry, C., Oulyadi, H., Dutheil, G., Leprince, J., Vaudry, H., Pannecoucke, X. and Quirion, J.C.: New synthesis of cis 5-tert-butyl-L-proline via cuprate. Evaluation as a cis proline mimetic in a biological active octapeptide. *J. Pept. Sci.* 12:154-160 (2006). (IF = 2,4).
3. Basille, M., Cartier, D., Vaudry, D., Lihmann, I., Fournier, A., Freger, P., Gallo-Payet, N., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: Localization and characterization of pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide receptors in the human cerebellum during development. *J. Comp. Neurol.*, 496:468-478 (2006). (IF = 3,7).
4. Basille, M., Falluel-Morel, A., Vaudry, D., Aubert, N., Fournier, A., Freger, P., Gallo-Payet, N., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: Ontogeny of PACAP receptors in the human cerebellum: perspectives of therapeutic applications. *Regul. Pept.* 137:27-33 (2006). (IF = 2,5).
5. Chatenet, D., Leprince, J., Dubessy, C., Boullaran, C., Scalbert, E., Pfeiffer, B., Renard, P., Lihmann, I., Paccard, P., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Structure-activity relationships of a novel series of urotensin II analogues: identification of a urotensin II antagonist. *J. Med. Chem.* 49:7234-7238 (2006). (IF = 4,8).
6. Chen, Y., Samal, B., Hamelink, C.R., Xiang, C.C., Chen, Y., Chen, M., Vaudry, D., Brownstein, M.J., Hallenbeck, J.M. and Eiden, L.E.: Neuroprotection by endogenous and exogenous PACAP following stroke. *Regul. Pept.* 137:4-19 (2006). (IF = 2,5).
7. Conlon, J.M., Al-Ghaferi, N., Abraham, B., Sonnevend, A., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and Iwamuro, S.: Antimicrobial peptides from the skin of the Tsushima brown frog *Rana tsushimensis*. *Comp. Biochem. Physiol.* 143:42-49 (2006). (IF = 1,5).
8. Conlon, J.M., Al-Ghafari, N., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and Davidson, C.: Evidence from peptidomic analysis of skin secretions that the red-legged frogs, *Rana aurora draytonii* and *Rana aurora aurora*, are distinct species. *Peptides* 27:1305-1312 (2006). (IF = 2,4).
9. Conlon, J.M., Al-Ghafari, N., Abraham, B., Jiansheng, H., Cosette, P., Leprince, J., Jouenne, T. and Vaudry, H.: Antimicrobial peptides from diverse families isolated from the skin of the Asian frog, *Rana grahami*. *Peptides* 27:2111-2117 (2006). (IF = 2,4).
10. Conlon, J.M., Leprince, J., Vaudry, H., Jiansheng, H. and Nielsen, P.F.: A family of antimicrobial peptides related to japonicin-2 isolated from the skin of the chaochia brown frog *Rana chaochiaensis*. *Comp. Biochem. Physiol.* 144:101-105 (2006). (IF = 1,5).
11. Jauneau, A.C., Ischenko, A., Chatagner, A., Benard, M., Chan, P., Schouff, M.T., Patte, C., Vaudry, H. and Fontaine, M.: Interleukin 1 $\beta$  and anaphylatoxins exert a synergistic effect on NGF expression by astrocytes. *J. Neuroinflammation* 3:1-10 (2006). (IF = 4,4).
12. Jégou, S., Cartier, D., Dubessy, C., Gonzalez, B., Chatenet, D., Tostivint, H., Scalbert, E., Leprince, J., Vaudry, H. and Lihmann, I.: Localization of the urotensin-II receptor in the rat central nervous system. *J. Comp. Neurol.* 495:21-36 (2006). (IF = 3,7).
13. Lapeyre, M., Leprince, J., Massonneau, M., Oulyadi, H., Renard, P.Y., Romieu, A., Turcatti, G. and Vaudry, H.: Aryldithioethylloxycarbonyl (Ardec): a new family of amine protecting groups removable under mild reducing conditions and their applications to peptide synthesis. *Chem. Eur. J.* 12:3655-3671 (2006). (IF = 4,9).
14. Lebon, A., Seyer, D., Cosette, P., Coquet, L., Jouenne, T., Chan, P., Leprince, J., Fournier, A., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Vaudry, D.: Identification of proteins regulated by PACAP in PC12 cells by 2D gel electrophoresis coupled to mass spectrometry. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1070:380-387 (2006). (IF = 1,9).
15. Leprince, J., Cosquer, D., Bellemère, G., Chatenet, D., Tollemer, H., Jégou, S., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Catabolism of the octadecaneuropeptide ODN by prolyl endopeptidase: Identification of an unusual cleavage site. *Peptides* 27:1561-1569 (2006). (IF = 2,4).
16. Molendi-Coste, O., Grumolato, L., Laborie, C., Lepage, J., Maubert, E., Ghzili, H., Vaudry, H., Anouar, Y., Breton, C. and Vieau, D.: Maternal perinatal undernutrition alters neuronal and neuroendocrine differentiation in the rat adrenal medulla at weaning. *Endocrinology* 147:3050-3059 (2006). (IF = 5,1).
17. Mounien, L., Bizet, P., Boutelet, I., Gourcerol, G., Basille, M., Gonzalez, B.J., Vaudry, H. and Jégou, S.: Expression of PACAP receptor mRNAs by neuropeptide Y neurons in the rat arcuate nucleus. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1070:457-461 (2006). (IF = 1,9).
18. Mounien, L., Bizet, P., Boutelet, I., Gourcerol, G., Fournier, A., Vaudry, H. and Jégou, S.: Pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide directly modulates the activity of proopiomelanocortin neurons in the rat arcuate nucleus. *Neuroscience* 143:155-163 (2006). (IF = 3,2).
19. Mouquet, H., Drouot, L., Charlionnet, R., Arnoult, C., Bonnet-Bayeux, F., Thomas, M., Leprince, J., Joly, P., Tron, F. and Gilbert, D.: Proteomic analysis of the antibody response following immunization with a single autoantigen. *Proteomics* 6:4829-4837 (2006). (IF = 5,8).
20. Mouquet, H., Farci, S., Joly, P., Maillère, B., Leblond, J., Drouot, L., Leprince, J., Tonon, M.C., Loiseau, P., Charron, D., Tron, F. and Gilbert, D.: A truncated alternative spliced isoform of human desmoglein 1 contains a specific T cell epitope binding to the pemphigus foliaceus-associated HLA class II DR $\beta$ 1\*0102 molecule. *J. Immunol.* 177:6517-6526 (2006), (IF = 6,7).
21. with the aim of targeting peptides into the brain. *Org. Biomol. Chem.* 4:817-825 (2006). (IF = 2,2).
22. Ravni, A., Bourgault, S., Lebon, A., Chan, P., Galas, L., Fournier, A., Vaudry, H., Gonzalez, B.J., Eiden, L.E. and Vaudry, D.: The neurotrophic effects of PACAP in PC12 cells: control by multiple transduction pathways. *J. Neurochem.* 98:321-329 (2006). (IF = 4,8).

23. Ravni, A., Eiden, L.E., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Vaudry, D.: Cycloheximide treatment to identify components of the transitional transcriptome in PACAP-induced PC12 cell differentiation. *J. Neurochem.* 98:1229-1241 (2006). (IF = 4,8).
24. Thébault, S., Deniel, N., Marion, R., Charlionet, R., Tron, F., Cosquer, D., Leprince, J., Vaudry, H., Ducrotte, P. and Déchelotte, P.: Proteomic analysis of glutamine-treated human intestinal epithelial HCT-8 cells under basal and inflammatory conditions. *Proteomics* 6:3926-3937 (2006). (IF = 5,8).
25. Tostivint, H., Joly, L., Lihmann, I., Parmentier, C., Lebon, A., Morisson, M., Calas, A., Ekker, M. and Vaudry, H.: Comparative genomics provides evidence for close evolutionary relationships between the urotensin II and somatostatin gene families. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 103:2237-2242 (2006). (IF = 10,3).
26. Xifro, X., Falluel-Morel, A., Minano, A., Aubert, N., Vaudry, D., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Rodriguez, J.: NMDA blocks activation of JNK and mitochondrial apoptotic pathway induced by potassium deprivation in cerebellar granule cells. *J. Biol. Chem.* 281:6801-6812 (2006). (IF = 6,5). (NC = 3).

### Publications 2007

1. Allais, A., Burel, D., Isaac, E.R., Gray, S.L., Basille, M., Ravni, A., Sherwood, N.M., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: Altered cerebellar development in mice lacking pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide. *Eur. J. Neurosci.* 25:2604-2618 (2007). (IF = 3,9).
2. Botia, B., Basille, M., Allais, A., Raoult, E., Falluel-Morel, A., Galas, L., Jolivel, V., Wurtz, O., Komuro, H., Fournier, A., Vaudry, H., Burel, D., Gonzalez, B.J. and Vaudry, D.: Neurotrophic effects of PACAP in the cerebellar cortex. *Peptides* 28:1746-1752 (2007). (IF = 2,5).
3. Cameron, D.B., Galas, L., Jiang, Y., Raoult, E., Vaudry, D. and Komuro, H.: Cerebellar cortical-layer-specific control of neuronal migration by pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide. *Neuroscience* 146:697-712 (2007). (IF = 3,4).
4. Conlon, J.M., Cosette, P., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H., Kolodziejek, J., Nowotny, N., Bevier, C.R. and Moler, P.E.: Peptidomic analysis of skin secretions from *Rana heckscheri* and *Rana okaloosae* provides insight into phylogenetic relationships among frogs of the *Aquarana* species group. *Regul. Pept.* 138:87-93 (2007). (IF = 2,5).
5. Conlon, J.M., Bevier, C.R., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and Hossack, B.R.: Peptidomic analysis of skin secretions supports separate species status for the tailed frogs, *Ascaphus truei* and *Ascaphus montanus*. *Comp. Biochem. Physiol. Part D2*:121-125 (2007). (IF = 1,5).
6. Conlon, J.M., Al-Ghaferi, N., Abraham, B. and Leprince, J.: Strategies for transformation of naturally-occurring amphibian antimicrobial peptides into therapeutically valuable anti-infective agents. *Methods* 42:349-357 (2007) (IF = 3,6).
7. Conlon, J.M., Woodhams, D.C., Raza, H., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and Rollins-Smith, L.A.: Peptides with differential cytosolic activity from skin secretions of the lemur leaf frog *Hylomantis lemur* (Hylidae: Phyllomedusinae). *Toxicon* 50:498-506 (2007). (IF = 1,9).
8. Do-Rego, J.L., Leprince, J., Luu-The, V., Pelletier, G., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Structure-activity relationships of a series of analogs of the endozepine octadecaneuropeptide (ODN11-18) on neurosteroid biosynthesis by hypothalamic explants. *J. Med. Chem.* 50:3070-3076 (2007). (IF = 4,8).
9. Doumèche, B., Galas, L., Vaudry, H. and Di Martino, P.: Membrane foulants characterization in a drinking water production unit. *Trans. IChemE, Part C, Food Bioprod. Process.* 85:42-48 (2007). (IF = 0,4).
10. Jégou, J.F., Chan, P., Schouff, M.T., Griffiths, M.R., Neal, J.W., Gasque, P., Vaudry, H. and Fontaine, M.: C3d binding to the myelin oligodendrocyte glycoprotein results in an exacerbated experimental autoimmune encephalomyelitis. *J. Immunol.* 178:3323-3331 (2007). (IF = 6,7).
11. Jégou, J.F., Chan, P., Schouff, M.T., Gasque, P., Vaudry, H. and Fontaine, M.: Protective DNA vaccination against myeline oligodendrocyte glycoprotein is overcome by C3d in experimental autoimmune encephalomyelitis. *Mol. Immunol.* 44:3691-3701 (2007). (IF = 3,2).
12. Wong, A.O.L., Lin, M.C.N., Vaudry, H. and Chow, B.K.C.: Discovery of growth hormone-releasing hormones and receptors in nonmammalian vertebrates. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 104:2133-2138 (2007) (IF = 10,3).
13. Lescot, E., Sopkova-de Oliveira Santos, J., Dubessy, C., Oulyadi, H., Lesnard, A., Vaudry, H., Bureau, R. and Rault, S.: Definition of new pharmacophores for non-peptide antagonists of human urotensin-II. Comparison with the 3D-structure of human urotensin II and URP. *J. Chem. Inform. Model.* 47:602-612 (2007). (IF = 4,8).
14. Ohnuma, A., Conlon, J.M., Yamaguchi, K., Kawasaki, H., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and Iwamuro, S.: Antimicrobial peptides from the skin of the Japanese mountain brown frog *Rana ornativentris*: evidence for polymorphism among preprotemporin mRNAs. *Peptides* 28:524-532 (2007). (IF = 2,4).
15. Suzuki, H., Iwamuro, S., Ohnuma, A., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H., Taylor, C.K., Abel, P.W. and Conlon, J.M.: Expression of genes encoding antimicrobial and bradykinin-related peptides in skin of the stream brown frog, *Rana sakuraii*. *Peptides* 28:505-514 (2007). (IF = 2,4).

### Publications IN PRESS

1. Cho, H.J., Acharjee, S., Moon, M.J., Oh, D.Y., Vaudry, H., Kwon, H.B. and Seong, J.Y.: Molecular evolution of neuropeptide receptors with regard to maintaining high affinity to their authentic ligands. *Gen. Comp. Endocrinol.* (in press). (IF = 2,3).
2. Conlon, J.M., Kolodziejek, J., Nowotny, N., Leprince, J., Vaudry, H., Coquet, L., Jouenne, T. and Iwamuro, S.: Cytolytic peptides belonging to the brevinin-1 and brevinin-2 families isolated from the skin of the Japanese brown frog, *Rana dybowskii*. *Toxicon* (in press). (IF = 1,9).
3. Deniel, N., Marion-Letellier, R., Charlionet, R., Tron, F., Leprince, J., Vaudry, H., Ducrotte, P., Dechelotte, P. and Thébault, S.: Glutamine regulates the human epithelial intestinal HCT-8 cell proteome under apoptotic conditions. *Mol. Cell. Proteom.* (in press). (IF = 8,3).
4. Le Mevel, J.C., Lancien, F., Mimassi, N., Leprince, J., Conlon, J.M. and Vaudry, H.: Central and peripheral cardiovascular, ventilatory and motor effects of trout urotensin II in the trout. *Peptides* (in press). (IF = 2,5).
5. Leprince, J., Chatenet, D., Dubessy, C., Fournier, A., Pfeiffer, B., Scalbert, E., Renard, P., Pacaud, P.,

Oulyadi, H., Ségalas-Milazzo, I., Guilhaudis, L., Davoust, D., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Structure-activity relationships of urotensin II and URP. Peptides (in press). (IF = 2,4).

6. Matsuda, K., Wada, K., Miura, T., Maruyama, K., Shimakura, S.I., Uchiyama, M., Leprince, J., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Effect of the diazepam-binding inhibitor-derived peptide, octadecaneuropeptide (ODN), on food intake in goldfish. Neuroscience (in press). (IF = 3,2).

#### Thèses

1. AUBERT Nicolas : Contribution à l'étude des effets neuroprotecteurs du peptide PACAP dans le cervelet du rat. Transposition à un modèle pathologique chez le primate. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 15 décembre 2006.  
Jury : S. de Jouffrey, B. Gonzalez, M. Laburthe, V. Prévot, H. Vaudry et D. Vivien.
2. COMPERE Vincent : Rôle des endozépinines dans le contrôle de l'homéostasie énergétique dans un contexte infectieux. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 12 janvier 2007.  
Jury : B. Dureuil, M.M. Malagon, J. Mantz, M.C. Tonon et H. Vaudry.
3. BENARD Magalie: Rôles des anaphylatoxines C3a et C5a dans le remodelage tissulaire et le développement. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 11 mai 2007.  
Jury : A. Buisson, M. Fontaine, G. Pelletier, J. Ripoché, W. Rostène et H. Vaudry.
4. JEGOU Jean-François : Etude du rôle du fragment C3d du complément dans la physiopathologie de l'encéphalomyélite auto-immune expérimentale. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option : Neurosciences, 5 juillet 2007.  
Jury : G. Arland, M. Fontaine, V. Frémeaux-Bacchi, D. Gilbert, L. Prin et H. Vaudry.
5. RAVNI Aurélie : Etude fonctionnelle des gènes régulés au cours de la différenciation des cellules PC12 induite par le NGF et le PACAP. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option : Neurosciences, 5 octobre 2007  
Jury : S. Gasman, V. Prévot, D. Vaudry, H. Vaudry et D. Vivien.

#### Masters

1. DESFEUX Arnaud : Transposition in vivo des mécanismes anti-apoptotiques du neuropeptide PACAP caractérisés in vitro. Juillet 2006 (TB).
2. ELIAS Salah : Contribution de la chromogranine A dans la voie de sécrétion régulée dans les cellules neuroendocrines. Juillet 2006 (B).
3. GALLAS Syrine : Approche moléculaire de la stimulation électrique gastrique au niveau du système nerveux central et de l'estomac. Juillet 2006 (B).
4. HAMEURY Emilie : Clonage de l'ADNc et distribution des ARNm codant l'urotensin II-related peptide chez le poisson-zèbre (*Danio rerio*). Juillet 2006 (B).
5. LANFRAY Damien : Implication des facteurs périphériques anorexigènes dans le contrôle de la production des endozépinines. Juillet 2006 (B).
6. PAITRY Pierrick : Etude des mécanismes d'expression des gènes UTS2 et URP. Juillet 2006 (B).
7. RAOULT Emilie : Implication du tissu-plasminogen activator dans l'effet du pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide sur la migration des cellules en grain du cervelet. Juillet 2006 (B).

#### Liste des conférences :

1. H. VAUDRY : 23rd Conference of European Comparative Endocrinologists, Manchester, UK, August 29-September 2, 2006.
2. D. VAUDRY : 16th International Symposium on Regulatory Peptides, Hakone, Japan, August 30-September 2, 2006.
3. M.C. TONON : 10ème Journée Scientifique du réseau LARC-Neurosciences, Lille, 10 novembre 2006.
4. H. VAUDRY : 4th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berkeley, CA, USA, March 26-28, 2007.
5. D. VAUDRY : 8th International Symposium on VIP, PACAP and Related Peptides, Manchester, VT, USA, September 3-8, 2007.
6. H. VAUDRY : 8th International Symposium on VIP, PACAP and Related Peptides, Manchester, VT, USA, September 3-8, 2007.
7. P. CHAN : Séminaire de fractionnement des protéines, ENS de LYON, 6 juin 2007.

#### 2.10.9. UMR CNRS 6185

Université de Caen, Centre Cyceron

#### Projet 2007.011

Responsable : Nathalie COLLOC'H

Neurodégénérescence : modèles et stratégies thérapeutiques

#### Utilisation du service

"Etude par dynamique moléculaire de l'influence du xénon sur le mécanisme de l'urate oxydase" débuté le 21/03/2007. Nous sommes actuellement deux sur le projet : Fabienne DULIN et moi-même. La consommation fin août 2007 était d'environ 6500 heures.

Les travaux du laboratoire ont montré que des gaz anesthésiques comme le xénon ou le protoxyde d'azote pouvaient se lier à l'urate oxydase dans une cavité de taille importante localisée à côté du site actif de la protéine. L'urate oxydase est une protéine type pour étudier les effets des gaz sur les cibles intracellulaires. Nous avons émis l'hypothèse que cette cavité aurait un rôle dans la flexibilité de l'enzyme et que la présence d'un gaz dans cette cavité ralentirait la cinétique d'activation. Nous nous proposons donc de vérifier cette hypothèse par une approche théorique de dynamique moléculaire. Les simulations de dynamique moléculaire permettent d'accéder aux mouvements internes de la protéine. Le travail de préparation de la protéine pour la dynamique a été réalisé sur les machines du laboratoire. Des simulations sur des temps longs, de l'ordre de quelques nanosecondes, n'étant pas réalisable sur les stations du laboratoire, nous avons donc sollicité les services du CRIHAN. Nous utilisons actuellement le logiciel AMBER en version parallélisée.

Nous travaillons sur deux systèmes : l'urate oxydase en présence ou en absence du xénon. A ce jour, nous avons réalisé une dynamique d'environ 10 nanosecondes pour le système en présence du xénon et 6.5 nanosecondes sur le système urate sans le xénon dans la poche.

Nous sommes actuellement dans la phase d'analyse des résultats qui est réalisée en majorité sur les stations du laboratoire. Nous comparons les mouvements des résidus du site actif de l'enzyme quand la cavité hydrophobe est dans son état normal (sans atomes visibles dedans)

ou quand un gaz anesthésique comme le xénon se lie dans cette cavité et avec ou sans la présence de l'inhibiteur 8-azaxanthine dans le site actif. Ces travaux nous permettront alors de voir, si la présence du gaz perturbe les mouvements de la protéine, ce qui ralentirait son action enzymatique comme nous l'avons suggéré.

Ce projet est actuellement géré par Fabienne DULIN qui est en post-doctorat au laboratoire et moi-même en collaboration avec Gérard Monard (UMR 7565, Université de Nancy) et Jana Sopkova (CERMN, Université de Caen). Les résultats sur cette étude ne donnent pour le moment lieu à aucune publication puisqu'ils sont en cours d'analyse, mais seront disponibles d'ici la fin de l'année. Au cours de ce projet, nous avons apprécié les différents échanges avec le service du CRIHAN et notamment à travers les ticketnet.

### **Insight II (Accelrys)**

Nous utilisons également les ressources du CRIHAN à travers l'utilisation d'un des logiciels de visualisation 3D des protéines disponibles par l'intermédiaire du CRIHAN : Insight II (Accelrys). L'utilisation de Insight a notamment contribué aux travaux de Fabienne DULIN, thèse soutenue le 19 décembre 2006, Guillaume MARASSIO, thèse débutée le 1er septembre 2007 et Mikael Naveau, stage de licence, juillet 2006.

### **Publications**

1. F. Dulin, I. Callebaut, N. Colloc'h, J.P. Mornon 'Sequence-based modeling of A $\beta$ 42 soluble oligomers' *Biopolymers* (2007), 85, 422-437.
2. N. Colloc'h, J. Sopkova de Oliveira-Santos, P. Retailleau, D. Vivares, F. Bonneté, B. Langlois d'Estaintot, B. Gallois, A. Brisson, J.J. Risso, M. Lemaire, T. Prangé, J.H. Abraini 'Protein crystallography under xenon and nitrous oxide pressure: Comparison with in vivo pharmacology studies and implications for the mechanism of inhaled anesthetic action.' *Biophys. J.* (2007), 92, 217-224.

### **Thèse**

1. F. Dulin 'Exploration des caractéristiques tridimensionnelles des amas protéiques hydrophobes issus du formalisme « Hydrophobic Cluster Analysis ». Modélisation de formes oligomériques solubles du peptide A $\beta$  impliqué dans la maladie d'Alzheimer, et identification d'un point chaud commun à différentes protéines amyloïdes.  
Thèse de l'Université Paris VI, Spécialité Analyse des Génomes et Modélisation moléculaire », soutenue le 19 décembre 2006.

## **2.10.10.CNRS UMR 6614 CORIA Université de Rouen**

### **Projet 2006.010**

#### **Responsable : François-Xavier Demoulin**

Un étudiant en projet d'étude: Christophe Cuvier Ecole Centrale Lille. "Comparaison des résultats de calcul LES obtenu avec le code AVBP en comparaison avec une expérience au CORIA (Thèse de Jean-François Krawczynski, soutenance prévue en octobre 2007), résultats non encore publiés.

### **Collaboration**

1. Laboratoire UPR 9028 LCD Poitiers, responsable local A. Mura, début d'un post-doc sur ce sujet en Juillet 2007.

## **2.10.11.LMFN UMR6614 CORIA INSA de Rouen**

### **Projet : 2006003**

#### **Responsable : Pascale Domingo, Chargée de recherche CNRS**

Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente

### **Appréciation du service**

Le CRIHAN fournit un support d'excellente qualité à la fois pour l'aide à l'optimisation des codes et des méthodes à l'architecture du supercalculateur IBM et pour le stockage et l'archivage des résultats des simulations.

### **Publications dans des journaux :**

1. L. Vervisch, P. Domingo (2006) « Two recent developments in numerical simulation of premixed and partially premixed turbulent flame », *C.R. Mécanique*, 334 (8/9), pp. 523-530.
2. P. Domingo, L. Vervisch, (2006) « DNS of partially premixed flame propagating in a turbulent rotating flow », *Proc. Combust. Inst.* Vol. 31.
3. P. Domingo, L. Vervisch, D. Veynante (2007) « Large Eddy Simulation of a lifted methane-air jet in a vitiated coflow » Accepté pour publication dans *Combustion and Flame*.

### **Communications**

Colloques internationaux avec comité de lecture :

1. P. Domingo, L. Vervisch, D. Veynante (2007) « Large Eddy Simulation of diluted combustion » 21st ICDERS, Poitiers, July 23-27.
2. Guido Lodato, Pascale Domingo and Luc Vervisch (2007) « Fully compressible Large-Eddy Simulation of wall-jet turbulent mixing: improved boundary conditions for edge, corner and transverse fluxes. » TSFP-5 conference, TU Munich, 27-29 august.
3. Guido Lodato, Pascale Domingo and Luc Vervisch (2007) « Quality assessment of inlet boundary conditions and domain size for fully compressible LES of wall-jet turbulent mixing » 11th EUROMECH, European Turbulence conference, 25-28 June 2007, Porto, Portugal.
4. Naudin, L. Vervisch and P. Domingo (2007) « A Turbulent-Energy Based Mesh Refinement Procedure for Large Eddy Simulation », 11th EUROMECH, European Turbulence conference, 25-28 June 2007, Porto, Portugal.
5. S. Payet, A. Naudin, P. Domingo, B. Labegorre, L. Vervisch (2006) « Studying flame dilution by burnt gases using numerical combustion », ECCOMAS CFD 2006, Delft, Pays-Bas.

### **Thèses**

1. Sandra Payet « Analyse de l'oxycombustion en régime diluée par simulation des grandes échelles de la turbulence » soutenue en mai 2007.
2. Alexandre Naudin « Simulations de brûleur à swirl, approche PCM/FPI » soutenance prévue janvier 2008.
3. Guido Lodato « Simulation aux grandes échelles de jets en impaction » soutenance prévue en novembre 2008.
4. Grégory Bonomeau « Modélisation de sous-maille de la combustion turbulente. Application aux moteurs à combustion interne » soutenance prévue en novembre 2009.

- Guillaume Godel « Développement de nouvelles méthodes de tabulation de chimie détaillée pour la prise en compte conjointe des régimes diffusif et partiellement prémélangé. » soutenance prévue en novembre 2009.
- Subramanian Vallinayagam Pillai « Modélisation aux grandes échelles de l'allumage dans un brûleur à swirl. » soutenance prévue en novembre 2009.

#### Collaborations

- Laboratoire EM2C de l'école centrale Paris.
- Université de Cambridge (Prof. Mastorakos et Pr. Bray).
- Institut for Energy and Powerplant Technology, Darmstadt University.
- Equipe de CFD du Cerfacs de Toulouse.

#### 2.10.12.UMR 7611

##### Laboratoire de Chimie Organique, Université Pierre et Marie-Curie- Paris 6 Jussieu

Directeur Max Malacria

**N° projet : 2006.013**

**Responsable : Vincent Gandon**

#### Appréciation du service

Nous sommes tous entièrement satisfaits du service. Nous avons trouvé avec ce serveur de calculs un environnement parfaitement adapté à notre activité de recherche. En particulier, l'offre de logiciels nous convient tout à fait.

#### Publications

- The Effect of a Water Molecule on the Mechanism of Formation of Compound 0 in Horseradish Peroxidase. Derat, E.; Shaik, S.; Rovira, C.; Vidossich, P.; Alfonso-Prieto, M. J. Am. Chem. Soc. 2007, 129, 6346–6347.
- Tandem Gold(I)-Catalyzed Cyclization / Electrophilic Cyclopropanation of Vinyl Allenes. Lemière, G.; Gandon, V.; Cariou, K.; Fukuyama, T.; Dhimane, A.-L.; Fensterbank, L.; Malacria, M. Org.Lett. 2007, 9, 2207–2209.
- Synthesis of 4:5-Benzo-1-cobalta-2-silacyclopentenes and their Reactions with Alkynes and Alkenes: an Expedient Route to Silicon-Containing Polycyclic Frameworks. Agenet, N.; Mirebeau, J.-H.; Petit, M.; Thouvenot, R.; Gandon, V.; Malacria, M.; Aubert, C. Organometallics 2007, 26, 819–830.
- Cobalt(I)-Mediated Preparations of Polyborylated Cyclohexadienes: Scope, Limitations, and Mechanistic Insight. Geny, A.; Lebœuf, D.; Rouquié, G.; Vollhardt, K. P. C.; Malacria, M.; Gandon, V.; Aubert, C. Chem. Eur. J. 2007, 13, 5408–5425.
- Cobalt-Mediated [2+2+2] Cycloaddition versus C–H and N–H Activation of 2-Pyridones and Pyrazinones with Alkynes: A Theoretical Study. Aubert, C.; Gandon, V.; Geny, A.; Heckrodt, T. J.; Malacria, M.; Paredes, E.; Vollhardt, K. P. C. Chem. Eur. J. 2007, 13, 7443–7465.
- Cobalt-Catalyzed Cyclotrimerization of Alkynes: The Answer to the Puzzle of Parallel Reaction Pathways. Agenet, N.; Gandon, V.; Malacria, M.; Aubert, C. J. Am. Chem. Soc. 2007, 13, 7466–7478.
- Unprecedented Aromatic Homolytic Substitutions and Cyclization of Amide-Iminyl Radicals: Experimental and Theoretical Study Beaume, A., née Servais; Courillon,

C.; Derat, E.; Malacria, M. Chem. Eur. J. 2007, 13, accepté.

#### Thèse

- Nicolas Agenet (soutenance prévue le 12 octobre), Ophélie Kwasnieski (vient juste de commencer).

#### DEA

- Gaëtan Burnens.

#### 2.10.13.UMR 6614 CNRS CORIA

##### Projet 2002.003

**Responsable : Claude ROZE**

#### Publications

C. Calba, C. Rozé, T. Girasole and L. Méès. Monte Carlo simulation of the interaction between an ultra short pulse and a dense scattering medium : case of large size particles. Opt. Comm., 265, 373-382, 2006.

L.H. Chen, C. Rozé, A. Garo, T. Girasole, K.F. Cen and G. Gréhan. Semi-analytical Monte Carlo simulation of laser-induced fluorescence propagation in an optically participating spray. J. of Zhejiang Univ. SCIENCE A, 45(7), 1170-1178, 2007.

#### Formation

- C. Calba. Interaction entre une impulsion laser ultra brève et un nuage dense de particules : simulations numériques et expériences Thèse de l'Université de Rouen 2004-2007, soutenance prévue en décembre 2007.
- B. Jawad. Diagnostic femtoseconde en milieu dense. Stage de Master2 DIODE, septembre 2007.

#### Communications

- L. Méès, C. Calba, A. Bonnamy, C. Rozé and T. Girasole. Femtosecond time scale diagnostics in dense scattering media .Proceedings of the 8th international congress on Optical Particle Characterization, Graz, Austria, July 9-13, 2007.
- J. Yon, C. Rozé, T. Girasole, A. Coppalle and L. Méès. Extension of RDG-FA for scattering prediction of aggregates of soot taking into account large monomers interactions. Proceedings of the 8th international congress on Optical Particle Characterization, Graz, Austria, July 9-13, 2007.

## 2.10.14.UMR CNRS 6011 Université du Maine, Le Mans

### Projet 2002.005 Responsable : Pascal Gosselin

#### Appreciation du service

[.....] L'examen de la littérature montre que dans le cas de molécules très « simples » comme l'acétone, la meilleure estimation du  $\#(C=O)$  est obtenue au niveau de calcul MP2. Nous commençons actuellement ces calculs MP2 (la détermination laborieuse des ressources nécessaires à ce calcul (mémoire, espace disque) à provoqué un net dépassement de notre quota en 2006 ; ces problèmes sont maintenant résolus, grâce à l'aide du personnel technique du CRIHAN.

#### Publication

1. Anodic behaviour of methyldene-cyclopentadiaryl derivatives: cyclic voltammetry and theoretical study : Cé-cile Hubert, Khoa Tran, Fanny Hauquier, Charles Cougnon, Jean-François Pilard, Pascal Gosselin, Joëlle Rault-Berthelot and Eugène Raoult. *New Journal of Chemistry*, 2007, DOI: 10.1039/b704340f. (<http://www.rsc.org/publishing/journals/NJ/article.asp?doi=B704340F>).

#### Collaborations

1. Université du Maine : Prof. Laurent Fontaine, Prof. Jean-François Pilard, Dr Gilles Dujardin (DR CNRS), Dr Charles Cougnon (CR CNRS), Dr Sagrario Pascual (MCF).
2. Université de Nantes : Prof. Jacques Lebreton.
3. Université de Rennes : Dr Joëlle Rault-Berthelot (DR CNRS).
4. Université Montpellier II : Dr Monique Calmès.

## 2.10.15.U648 INSERM, IFR Biomédicale, Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire, Paris

### Projet 1998.053 Responsable : Nohad Gresh

#### Appréciation du service

Nous apprécions beaucoup les prestations du CRIHAN, et la compétence du support technique. Notre activité au CRIHAN est centrée sur :

- a) le développement de potentiels de mécanique moléculaire 'polarisables', formulés et calibrés sur la base de la chimie quantique;
- b) les applications de ce logiciel à l'étude de complexes ligand-macromolécule.

#### Thèse

1. Direction de la thèse de Monsieur Benoit de Courcy.

#### Publications

1. Towards a force field based on density fitting. J.-P. Piquemal, G. Andres Cisneros, P. Reinhardt, N. Gresh, and T. A. Darden, *J. Chem. Phys.*, 124, 104101 (2006).
2. An efficient and enantioselective synthesis of suitably protected  $\beta$ -[1-(4-Malonyl)naphtyl]-L-alanine and  $\beta$ -[1-(4-malonylmethyl)naphtyl]-L-alanine: novel fluorescent and non-hydrolysable phosphotyrosine mimetics.

- H. Chen, J.-P. Luzy, N. Gresh, and C. Garbay, *Eur. J. Org. Chem.* 2329-2335 (2006).
3. Development, validation, and applications of anisotropic polarizable molecular mechanics to study ligand and drug-receptor interactions. N. Gresh, *Curr. Pharm. Des.*, 12, 2121-2158 (2006).
  4. Binding of 5-Phospho-D-Arabinonohydroxamate and 5-Phospho-D-Arabinonate Inhibitors to Zinc Phosphomannoisomerase from *Candida albicans* studied by polarizable molecular mechanics and quantum mechanics. C. Roux, N. Gresh, L. E. Perera, J.-P. Piquemal, and L. Salmon, *J. Comput. Chem.* 28, 938-957 (2007).
  5. Novel 1,4-benzodiazepine derivatives with antiproliferative properties on tumor cell lines. Dourlat, W.-Q. Liu, N. Gresh, and C. Garbay, *Bioorg. Med. Chem. Letters* 17, 2527- 2530 (2007).
  6. Role of water molecules for binding inhibitors in the SH2 of Grb2: a molecular dynamics study. V. Leroux, N. Gresh, W.-Q. Liu, C. Garbay, and B. Margret, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* 806, 51-66 (2007).
  7. Toward a separate reproduction of the contributions to the Hartree-Fock and DFT intermolecular interaction energies by polarizable molecular mechanics with the SIBFA potential. J.-P. Piquemal, H. Chevreau, and N. Gresh, *J. Chem. Theory and Comput.*, 3, 824-837 (2007).
  8. Key role of the polarization anisotropy of water in modeling classical polarizable force fields. J.-P. Piquemal, R. Chelli, P. Procacci, and N. Gresh, *J. Phys. Chem. A*, 111, 8170-8176 (2007).
  9. The specificity of acyl transfer from 2-mercaptobenzamide thioesters to the HIV-1 nucleocapsid protein. L. M. Miller Jenkins, T. Hara, S. R. Durrell, R. Hayashi, J. K. Inman, J.-P. Piquemal, N. Gresh, and E. Appella, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 11067-11078 (2007).
  10. Anisotropic, polarizable molecular mechanics studies of inter-, intramolecular interactions, and ligand-macromolecule complexes. A bottom-up strategy. Gresh, G. Andres Cisneros, T. A. Darden, and J.-P. Piquemal, *J. Chem. Theory and Comput.* 3, 000-000 (2007).

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

### Projet 1998.022

Responsable : Abdellah HADJADJ, Pr INSA  
de Rouen

#### Appréciation du service

Au-delà de la simple fourniture des heures de calcul, la participation du CRIHAN à la gestion, et à l'optimisation des outils de calculs développés dans le cadre de cette étude (parallélisation, gestion des entrées/sorties et des files d'attente, occupation mémoire, etc.) a été très appréciée.

#### Communications

Congrès internationaux avec comité de lecture et actes :

1. Hadjadj, A., Dubos, S., Ribert, G. (2007), Large-eddy simulation of a shock/boundary-layer interaction at  $M=2.25$ . The 5th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Munchen, 27-29 August, Germany.
2. Hadjadj, A., Perrot, Y. (2007), Numerical simulation of transient supersonic nozzle flows. The 26th International Symposium on Shock Waves, DLR-Gottingen, 15-20 July, Germany.
3. Hadjadj, A., Dubos, S., Ribert, G. (2007), Large-eddy simulation of a supersonic boundary layer at  $M=2.25$ . IUTAM Symposium, Unsteady Separated Flows and their Control, Corfu, 18-22 June, Greece.
4. Perrot, Y., Hadjadj, A. (2006), Computational study of nozzle flow separation with film injection. AIAA paper 2006-3029. The 3rd Flow Control Conference, San Francisco, California, 5-8 June, US.
5. Hadjadj, A., Perrot, Y. (2006) Computational Study of Nozzle Flow Separation with Film Injection. Invited Seminar at the 2nd FSCD/ATAC Workshop on nozzle flow separation, ESA/ESTEC, 15-16 November, The Netherlands.
6. Hadjadj, A., Perrot, Y. (2006) Numerical simulation of boundary layer separation a truncated ideal contoured nozzle at low pressure ratios, 17th International Symposium on Shock Interaction, Roma, Italy, 4-8 Sept.

Rapports de contrat :

1. Hadjadj, A., Ribert, G. (2007), Modélisation des écoulements instationnaires dans les systèmes d'échappement. Application à la dépollution automobile. Contrat FAURECIA/As-CORIA.
2. Ribert, G., Hadjadj, A. (2007), Canaux de refroidissement des moteurs-fusées : pré-étude en vue de la simulation numérique. Rapport de synthèse - contrat R647 SNECMA/INSA-CORIA.
3. Hadjadj, A. (2006), Modélisation des écoulements dans les tuyères propulsives. Rapport de synthèse - contrat CNES/As-CORIA, N° 4700017455 / DLA094 du 09-05-2006.

#### Thèse

1. Perrot, Yohann (19/12/2006). Etude, mise au point et validation de modèles de turbulence pour des écoulements compressibles. Thèse de doctorat, INSA de Rouen.

#### Stage Master

1. Ngomo, Davy (19/09/2007). Modélisation des écoulements réactifs dans les micro-systèmes énergétiques. Rapport stage Master 2 - EFE, CORIA - Université et INSA de Rouen.

#### Stages Ingénieur INSA

1. Jaunin, Gaylord (19/01/2007). Simulation numérique des phénomènes transitoires dans une tuyère supersonique. Rapport projet de recherche (6mois), Département Mécanique, INSA de Rouen.
2. Content, Cédric (30/09/2007). Simulation numérique des tuyères supersoniques. Rapport stage technicien (3mois), Département Energétique et Propulsion, INSA de Rouen.
3. Benjamaa, Hussein (31/01/2006). Simulation numérique de l'interaction d'onde de choc/couche limite turbulente. Rapport projet de recherche (6mois), Département Mécanique, INSA de Rouen.
4. Rodriguez, Alfonso (30/05/2006). Simulation numérique d'un jet co-axial compressible. Rapport projet de recherche (6mois), Département Mécanique, INSA de Rouen.

## 2.10.17.UMR CNRS 6014 – IRCOF LFAOC Laboratoire des Fonctions Azotées et Oxygénées Complexes

### Projet : 2005.013

Responsable : Isabelle Chataigner

Etude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.

#### Publication

1. I. Chataigner, C. Panel, H. Gérard, S. R. Piettre Chem. Commun. 2007, 3288-3290.  
"Sulfonyl vs carbonyl group: which is the more electron-withdrawing?"

#### Thèse

1. Nathalie Chopin, soutenance prévue en 2008.

#### Collaboration

1. Dr Hélène Gérard, Laboratoire de Chimie Théorique, Université Paris VI.

## 2.10.18.CNRS UMR 8107

Laboratoire de Mécanique de Lille,  
Université Lille1

### Projet 2006.006

Responsable : Jean-Philippe Laval, Chargé  
de Recherche CNRS

Etude de la turbulence de paroi sous gradient de pression adverse.

### Appréciation du service

Le service fonctionne correctement. Il semble que la machine est maintenant très utilisée. Il est donc difficile de faire du développement avec des jobs courts.

### Publications

1. M. Marquillie, J.-P. Laval, and R. Dolganov, Direct Numerical Simulation of separated channel flows with a smooth profile, {soumis à J. Turbulence}, 2007.
2. M. Marquillie, J.-P. Laval and R. Dolganov, DNS of channel flows with pressure gradient, Advances in Turbulence XI, 11th Euromech European Turbulence Conference, June 25-28, 2007, Porto, Portugal, pp 91-93.
3. R. Dolganov, B. Dubrulle and J.-P. Laval, A LES-Langevin model of turbulence, Advances in Turbulence XI, 11th Euromech European Turbulence Conference, June 25-28, 2007, Porto, Portugal, p 738.

### Thèse

1. Rostislav Dolganov (4ème année)

## 2.10.19.UMR CNRS 6014,

Université de Rouen, Laboratoire  
des Fonctions Azotées &  
Oxygénées Complexes de l'IRCOF

### Projet 2004.004

Responsable : Jacques Maddaluno

Directeur de l'UMR CNRS 6014: Prof. Jean-Charles Quirion

### Publications

1. Titre : "3-aminopyrrolidine lithium amides as chiral ligands for allyllithium derivatives: synthesis, NMR analysis and computational study of their mixed aggregates."  
Auteurs : A. Harrison-Marchand, J.-Y. Valnot, A. Corruble, N. Duguet, H. Oulyadi, S. Desjardins, C. Fressigné, J. Maddaluno  
Statut : Pure & Applied Chemistry 2006, 78, 321-331.
2. Titre : "First principles molecular dynamics evaluation of thermal effects on the NMR 1JLi-C spin-spin coupling."  
Auteurs : A. de la Lande, C. Fressigné, H. Gérard, J. Maddaluno, O. Parisel  
Statut : Chem. Eur. J. 2007, 13, 3459-3469 .
3. 3- Titre : "Origin of the detrimental effect of lithium halides on an enantioselective nucleophilic alkylation of aldehydes."  
Auteurs : F. Paté, N. Duguet, H. Oulyadi, A. Harrison-Marchand, C. Fressigné, J.-Y. Valnot, M. C. Lasne, J. Maddaluno  
Statut : J. Org. Chem. 2007, 72, 6982-6991.

### Communications

1. Asymmetric synthesis with mixed aggregates of chiral organolithium derivatives.  
Conférence au 11th meeting of the French-American Chemical Society (FACS XI)  
Paris, 4-7 juin 2006.
2. Agrégats mixtes d'amidures de lithium chiraux: de la structure à la réactivité  
Conférence à l'Université de Cergy-Pontoise  
Neuville-sur-Oise, 6 février 2007.
3. Agrégats mixtes d'amidures de lithium chiraux: de la structure à la réactivité  
Conférence à l'Université Louis Pasteur  
Strasbourg, 23 février 2007.
4. Structure and reactivity of mixed aggregates of chiral lithium amides  
Conférence à la Scuola di Dottorato in Scienza ed Alta Tecnologia de l'Université de Turin  
Turin, 17 avril 2007.

### Thèses

1. M Franck Paté (soutenue le 27 Juin 2006)  
Titre : Structure d'agrégats mixtes impliquant des amidures chiraux. Etude par R.M.N. multinoyaux 6Li/13C/1H/15N et calculs DFT.
2. Mlle Anne Lautrette (en cours depuis 2000).  
Titre : Complexes mixtes entre amidures chiraux et organolithiens sp<sup>2</sup> (aryllithium et vinylithium). Caractérisation par RMN et modélisation moléculaire. Soutenance prévue : premier trimestre 2007.
3. Baptiste Lecachey (en cours depuis 2006).  
Titre : Structure d'agrégats mixtes utiles en synthèse asymétrique. Etude par R.M.N. multinoyaux 6Li/13C/1H/15N et calculs DFT.

### Projet 2005.002

Responsable : Catherine Fressigné

### Appréciation du service :

Remarquable ! Sans ce centre de calcul, la puissance de ses machines, la souplesse de votre gestion (attribution des heures en particulier), notre productivité en chimie quantique s'effondrerait. Grâce à la collaboration du CRIHAN, nous sommes en mesure de rivaliser avec les meilleurs mondiaux dans le domaine de la modélisation moléculaire de haut niveau.

### Publication

1. Titre : "Intramolecular carbolithiation of alkyne: unprecedented anti selectivity"  
Auteurs : C. Fressigné, A.-L. Girard, M. Durandetti, J. Maddaluno.  
Statut : Angew. Chem. Int. Ed., accepté pour publication.

### Communications

1. Hétérocyclisation par carbométallation : d'un métal l'autre  
Conférence aux 4èmes Journées Franco-Tunisienne de Chimie Organique (JCO 2006)  
Hammamet (Tunisie), 4-7 septembre 2006.
2. Nouvelle réaction d'hétérocyclisation par carbométallation intramolécule  
Conférence à l'Institut de Chimie Organique et Analytique de l'Université d'Orléans (ICOA)  
Orléans, 26 octobre 2006.
3. Carbométallation of alkynes: new access to binuclear heterocycles  
Conférence au centre de recherches d'Otsuka Phar-

maceutical Ltd

Tokushima (Japon), 11 mai 2007.

4. Carbometallation of alkynes: new access to binuclear heterocycles  
Conférence à Kanazawa University (Pr Chisato Mukai)  
Kanazawa (Japon), 18 mai 2007.
5. Carbometallation of alkynes: new access to binuclear heterocycles  
Conférence au symposium regional "Cyclisations" de la Japan Chemical Society  
Okayama (Japon), 19 mai 2007.
6. Carbometallation of alkynes: new access to binuclear heterocycles  
Conférence à la Osaka Prefecture University  
Osaka (Japon), 25 mai 2007.

### Thèse

1. Mlle Anne-Lise Girard (soutenue le 6 juillet 2007).  
Titre : Hétérocyclisation par carbométallation intramoléculaire d'alcynes. Applications à la construction de polyhétérocycles aromatiques.

### 2.10.20.LASOC

Université de Rouen, Evreux

Dr Nadine Mofaddel

En 2007, des publications sont en cours de rédaction ou de soumission.

Pas de thèse traitant de ce sujet, la modélisation n'étant pas le sujet principal de recherche du laboratoire, mais un outil permettant de rationaliser certains phénomènes expérimentaux.

Je réalise régulièrement des calculs avec MS Modeling ou Sybyl. Ils seront utilisés pour une (ou 2) thèses en 2008 et 2 publications.

### 2.10.21.Centre de Recherche sur la Matière

Divisée,  
CNRS-Université d'Orléans

Projet 2003.002

Responsable : Joël Puibasset

### Publications

1. Grand Canonical Monte Carlo simulation study of water adsorption in silicalite at 300K, Pellenq R. J.-M., Roussel T. and Puibasset, J. Phys. Chem. C (submitted).
2. Molecular Simulations of Water in Hydrophobic Microporous Solids, Pellenq R. J.-M. and Puibasset J., Special Issue FOA 2007.
3. Thermodynamic pressure of simple fluids confined in cylindrical nanopores by isothermal-isobaric Monte Carlo: Influence of fluid/substrate interactions, Puibasset, J. J. Chem. Phys. 2007, 127, 074702.
1. Surface excess free energy of simple fluids confined in cylindrical pores by isothermal-isobaric Monte Carlo: Influence of pore size, Puibasset, J. J. Chem. Phys. 2007, 126, 184701.

### Communications

1. Molecular Simulations of Water in Hydrophobic Microporous Solids, Pellenq R. J.-M. and Puibasset, J., Fundamentals of Adsorption 2007, (International Conference).

2. New direct simulation methods for thermodynamic pressure and coexistence diagram calculations in heterogeneous tubular pores, J. Puibasset, International Conference on Thermodynamics, Rueil-Malmaison, France, 26-28 septembre 2007.

3. Eau confinée dans des silices mésoporeuses et microporeuses: comparaison entre le Vycor et la silicalite, J. Puibasset and R. J.-M. Pellenq, 23<sup>ème</sup> Réunion du Groupe Français des Zéolithes, La Grande-Motte, 29 mai-1 juin 2007.

### 2.10.22.UPRES EA3915

Département de modélisation  
moléculaire du CERMN,  
Université de Caen

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

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

### Thématiques principales

- Conception et études structures activités de ligands sérotoninergiques.
- Conception de nouveaux antagonistes de l'urotensine (récepteur GPR14).
- Utilisation du cluster Dalton dans le cadre de ce projet (projet n°2005004).
- Mise en place et exploitation des chimiothèques (screening virtuel sur la base des pharmacophores, docking).
- Analyses des données issues de diffraction RX.
- Estimation des propriétés écotoxicologiques et toxicologiques des produits chimiques.

### Publications

1. J. Sopkova de Oliveira Santos, J.-C. Lancelot and S. Rault.  
2-(Methoxycarbonyl)-4-methylthiophen-3-aminium chloride monohydrate: the first crystal structure of a 3-aminothiophene-2- carboxylic acid ester. Acta Cryst., 2006, 62, 182-184.
2. Ch. Rochais, J. Sopkova de Oliveira Santos, P. Dallemagne and S. Rault. "Synthesis of novel pyrrolopyrrolizones as prospective anticancer agents" Heterocycles., 2006, (68) 10, 2063-2067.
3. Guillaume Grach, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Jean-François Lohier, Ljubica Mojovic, Nelly Plé, Alain Turck, Vincent Reboul, and Patrick Metzner. Diastereoselective Addition of Enantiopure Lithium tert-Butylsulfanylferrocene to Imines. JOC, 2006, 71(26); 9572-9579.
4. Elodie Lescot, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Christophe Dubessy, Hassan Oulyadi, Aurélien Lesnard, Hubert Vaudry, Ronan Bureau and Sylvain Rault. Definition of new pharmacophores for non-peptide antagonists of human Urotensin-II. Comparison with the 3D-structure of human Urotensin-II and URP. J. Chem. Inf. Model., 2007, 47, 602-612. En relation avec le projet 2005004.
5. Lescot, E.; Bureau, R.; Rault, S. Non-peptide Urotensin-II receptor agonists and antagonists: review and structure-activity relationships. Peptides review, 2007, acceptée. En relation avec le projet 2005004.
6. Lescot, E.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Colloc'h, N.; Rodrigo, J.; Milazzo-Segalas, I.; Bureau, R.; Rault,

S. Three-dimensional Model of human Urotensine-II Receptor: Docking of human Urotensin-II and non-peptide antagonists in the binding site and comparison with an antagonist pharmacophore model. *Proteins*, 2007, soumise. En relation avec le projet 2005004.

7. Sopkova-de Oliveira Santos J., Verhaeghe P., Lohier J.-F., Rathelot P., Vanelle P. and Rault S. Quinoline derivatives, potential antiparasitic and antiviral agents. *Acta Cryst.*, 2007, C63, o643-o645.

## Communications

Par affiches :

1. "Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine sur la base de pharmacophores 3D." Lescot, E. ; Bureau, R. ; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rodrigo, J.; Lesnard, A. ; Oulyadi, H. ; Dubessy, C. ; Vaudry, H. and Rault, S. 13ème journées Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, 30 Janvier 2006 Paris, France. En relation avec le projet 2005004.

2. "Découverte d'un nouveau chef de file des ligands 5-HT5A. Premiers éléments d'un pharmacophore." Rodrigo, J.; Lancelot, J.C.; Lesnard, A.; Bureau, R.; Dodd, R.H.; Rault, S. 13ème journées Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, 30 Janvier 2006 Paris, France.

3. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine sur la base d'un pharmacophore 3D. 14ème journées Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique. E. Lescot, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, J. Rodrigo, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, S. Rault., 30 Janvier 2006 Paris, France. En relation avec le projet 2005004.

4. Identification of novel ligands for human Urotensin-II receptor through 3D pharmacophores virtual screening of in-house CERMN chemolibrary. E. Lescot, A. Lesnard, J. Sopkova-de Oliveira Santos, R. Bureau, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, S. Rault. XVth European Conference of GP2A, September 7th – 8th 2006, University of Bath, England. En relation avec le projet 2005004.

5. Analyse de la chimiothèque du CERMN sur la base d'un pharmacophore 3D : Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine II. E. Lescot, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, A. Lesnard, J. Rodrigo, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, S. Rault. 3ème Journée Scientifique de la Chimiothèque Nationale, 28 juin 2006 Caen, France.

6. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine par un criblage virtuel de la chimiothèque sur la base d'un pharmacophore 3D. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 42èmes rencontres internationales de chimie thérapeutique, 5, 6 et 7 juillet 2006 Marseille, France. En relation avec le projet 2005004.

7. Antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine-II humaine : Approche 3D-SAR et étude des interactions avec le récepteur GPR14. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, J. Rodrigo, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 10ème Journée Scientifique de Réseau Larc-Neurosciences, 10 Novembre 2006, Lille, France. En relation avec le projet 2005004.

8. Antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine-II humaine en série thénoimidazolone : Etude 3D-SAR, Synthèse et Analyse des interactions au sein du récepteur UT-II humain. V. Lefebvre, E. Lescot, F. Fabis, J. Sopkova-de Oliveira Santos, J. Rodrigo, A. Lesnard, C.

Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 14ème journées Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, 31 Janvier 2007 Paris, France. En relation avec le projet 2005004.

9. Classification et études de relation structure activité de ligands 5-HT4. Thibault Varin, Ronan Bureau, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. Journée Nationale des Jeunes Chercheurs. Paris, Janvier 2007.

10. Antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine-II humaine : Approche 3D-SAR et étude des interactions avec le récepteur GPR14. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, J. Rodrigo, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 10ème journée de l'école doctorale Normande de Chimie-Biologie, 16 Mars 2007 Caen, France. En relation avec le projet 2005004.

11. Etude comparative de méthodes de classification hiérarchiques sur la base d'empreintes moléculaires. Application à des données d'activité biologiques 5-HT4. Thibault Varin, Ronan Bureau, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. Journée de l'Ecole Doctorale. Caen, Mars 2007.

12. Clustering studies on 5-HT4 ligands. Thibault Varin, Ronan Bureau, Nicolas Saettel, Jonathan Villain, Aurélien Lesnard, François Dauphin, Sylvain Rault. ChemAxon 2007 User Group Meeting. Budapest (Hongrie), Juin 2007.

13. Comparative analysis of clustering methods for 5-HT4 data. Thibault Varin, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Ronan Bureau, Sylvain Rault. Rencontre Internationale de Chimie Thérapeutiques, Lille, Juillet 2007.

14. Clustering methods and 3D-Pharmacophore for 5-HT4 data. Thibault Varin, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Ronan Bureau, Sylvain Rault. GP2A, Bordeaux, Septembre 2007.

Conférences invités / communications orales.

1. Pharmacophores et ligands 5-HT. Bureau, R. Journées "De l'expérimentation à la simulation", 6-7 Mars 2006, CINES, Montpellier (conférencier invité).

2. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine II humaine par un criblage virtuel sur la base d'un pharmacophore 3D. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 9ème journée de l'école doctorale Normande de Chimie-Biologie, 17 Mars 2006 Rouen, France. En relation avec le projet 2005004.

3. Nouveaux inhibiteurs ALK4/ALK5. Implications sur la voie de signalisation de la myostatine et la croissance musculaire. Bureau, R. Colloque consacré aux Dystrophies Musculaires des Ceintures, 13 Mai 2006, Evry, France.

4. Conception de nouveaux ligands 5-HT sur la base de pharmacophores. Bureau, R. 20ème Journées Franco-belges de Pharmacochimie, Juin 2006, Lille, France (conférencier invité).

5. Analyse in silico et validation expérimentale. Bureau, R., Ecole thématique « Criblage à Haut Débit (Ecole thématique), 20 septembre 2006, Bischoffsheim, France (conférencier invité).

6. Présence d'une molécule d'oxygène dans le site actif de l'urate oxydase et implication pour son mécanisme catalytique. Colloc'h N., Abraini J.H., Sopkova-de Oliveira Santos J., El Hajji M., Castro B. and T. Prangé. Colloque de l'Association Française de Cristallographie, Toulouse, 10-13 juillet 2006.

7. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine : Approche 3D-SAR et études des interactions avec les récepteur. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, J. Rodrigo, R. Bureau, S. Rault. XVèmes Journées du Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire, 2-4 Mai 2007 Autrans, France. En relation avec le projet 2005004.

8. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine par criblage virtuel d'une chimiothèque. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, J. Rodrigo, A. Lesnard, H. Oulyadi, I. Milazzo, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. IVème Journée Scientifique de la Chimiothèque Nationale, 27 Juin 2007 Caen, France.

### Thèses

1. Mlle Elodie Lescot (début 2004).  
Financement du Ministère de la Recherche et de la Technologie  
Sujet : Conception d'antagonistes de l'urotensine.
2. M. Thibault Varin (début 2006).  
Financement par une bourse régionale.  
Sujet : Détermination par modélisation moléculaire de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques de type 5A (5-HT<sub>5A</sub>) et 6 (5-HT<sub>6</sub>). Exploitation des chimiothèques locales et nationales.

### Collaborations

Universitaires :

1. Projet 5-HT<sub>7</sub> et urotensine : Unité INSERM U 413 (Dr C. Delarue, Dr. H. Vaudry) et IRCOF, laboratoire de RMN (Pr H. Oulyadi), Université de Rouen.
2. Projet 5-HT et 5-HT<sub>7</sub> : Collaboration St Jacques de Compostelle (Dr M. Loza), CERMN (Dr J. Rodrigo).

Projet ANR :

1. Sélection du projet INNO-TOX. Projet se plaçant dans le cadre de la thématique REACh. Collaboration PCAS (M. Bouquet) / CNRS 7186 (P. Vasseur).

### Enseignements

1. Travaux dirigés de modélisation moléculaire dans le cadre du Master Professionnel "Imagerie de la santé" : 10 étudiants (4 heures).
2. Utilisation des logiciels comme base de support d'un cours de modélisation moléculaire, Master recherche M2 chimie organique : 10 étudiants.
3. Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmaceutiques : 80 étudiants (autour de 40 heures).

## 2.10.23. UPRES EA 3233, IRCOF, équipe SMS, Science et Méthodes Séparatives, Université de Rouen,

Directeur : Professeur Gérard COQUEREL

Utilisation des logiciels Cerius<sup>2</sup> et Materials Studio (Accelrys), et SYBYL (Tripos) pour :

- 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.

### Appréciation du service

A chaque sollicitation, les membres du CRIHAN ont fait le nécessaire pour résoudre nos difficultés ou assurer la maintenance de nos outils de modélisation moléculaire dans des délais très satisfaisants. L'efficacité de ce service, ainsi que la diffusion de l'information en provenance des fournisseurs de logiciels, est fortement appréciée par notre équipe de recherche.

### Publications

1. Absolute configuration and structural features of R207910, a novel anti-tuberculosis agent  
S. Petit, G. Coquerel, C. Meyer, J. Guillemont  
J. Mol. Struct., 2007, 837, 252-256.
2. Synthesis and X-ray structural studies of the dextro-rotatory enantiomer of methyl  $\alpha$ -5(4,5,6,7-tetrahydro(3,2-c)thieno pyridyl) (2-chlorophenyl)-acetate isopropylsulfate  
L. Renou, S. Coste, G. Coquerel  
J. Mol. Struct., 2007, 827, 108-113.
3. Chiral discrimination in host-guest supramolecular complexes. Understanding enantioselectivity and solid solution behaviors by using spectroscopic methods and chemical sensors  
A. Grandeury, E. Condamine, L. Hilfert, G. Gouhier, S. Petit, G. Coquerel  
J. Phys. Chem. B, 2007, 111(25), 7017-7026.
4. Chiral Discrimination at the Solid State of Methyl 2-(Diphenylmethylsulfonyl)acetate  
L. Renou, T. Morelli, S. Coste, M.N. Petit, B. Berton, J.-J. Malandain, G. Coquerel  
Crystal Growth & Design, 2007, 7 (9), 1599-1607.
5. Polar Dissolution and Regrowth of ( $\pm$ )-Modafinil Twins Grown in Gels  
M. Pauchet, G. Coquerel  
Crystal Growth & Design, 2007, 7 (9), 1612-1614.

### Thèse

1. PAUCHET Morgan (Janvier 2007), Directeur G. Coquerel, Titre : "Application of the Derived Crystal Packing model to molecular crystals grown in solution or in gels" (thèse Européenne).

### Collaboration

1. IRCOF, Université de Rouen, UMR 6014, équipe LFAOC (Pr. Géraldine Gouhier).

**2.10.24.EA2255,**  
**Laboratoire de Mécanique,**  
**Physique et Géosciences,**  
**Equipe « Instabilités, Turbulence,**  
**Plasma »**

**Projet 2006.001**

**Responsable : Ioan F. Schneider, Profes-**  
**seur**

**Appréciation du service**

J'apprécie particulièrement le bon fonctionnement, l'aide permanent pour les problèmes liés aux codes de calcul, ainsi que la disponibilité des collègues en cas de questions.

**Publications**

**A. Articles parus dans des revues à comité de lecture :**

1. M. C. Stroe, M. Fidirig, F. O. Waffeu Tamo, O. Motapon, O. Crumeyrolle, G. Varin-Bréant, A. Bultel, P. Vervisch, A. Suzor-Weiner et I. F. Schneider, "Reactive collisions between electrons and molecular hydrogen cation isotopomers: cross sections and rate coefficients for HD<sup>+</sup> and DT<sup>+</sup>", Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion, 14, 103, 2006.
2. A. Wolf, H. Buhr, M. Grieser, R. von Hahn, M. Lestinsky, E. Lindroth, D. Orlov, S. Schippers, I. F. Schneider, „Progress in stored ion beam experiments on atomic and molecular processes“, Hyperfine interactions 172, 111, 2006.
3. S. Morisset, L. Pichl, A. E. Orel et I. F. Schneider, "Wave-packet approach to Rydberg resonances in dissociative recombination", Physical Review A 76, 042702, 2007.

**B. Communications Orales à des congrès internationaux/co-auteur :**

1. S. Novotny, H. Rubinstein, H. Buhr, J. Hoffmann, M. Mendes, O. Novotny, D.A. Orlov, M. Berg, B. Jordan-Thaden, A.S. Jaroshevich, C. Krantz, M. Lestinsky, A. Petrigani, I.F. Schneider, D. Shafir, M. Lange, D. Zajfman, D. Schwalm, A. Wolf, "Anisotropic fragmentation near dissociative recombination resonances", 7th International Symposium on Dissociative Recombination, Ameland, Pays Bas, 18-23 juillet 2007.
2. F. O. Waffeu Tamo, H. Buhr, O. Motapon, X. Urbain, D. Zajfman, A. Wolf, I.F. Schneider, "Assignment of resonances in dissociative recombination of HD<sup>+</sup>", 7th International Symposium on Dissociative Recombination, Ameland, Pays Bas, 18-23 juillet 2007.
3. O. Motapon, F. O. Waffeu Tamo, X. Urbain, A. Suzor-Weiner et I.F. Schneider, "New results in the dissociative recombination and superelastic collisions between low energy electrons and H<sub>2</sub><sup>+</sup> ions: rotational effects and comparison with experiments", 7th International Symposium on Dissociative Recombination, Ameland, Pays Bas, 18-23 juillet 2007.

**C. Posters dans des congrès internationaux :**

1. F. O. Waffeu Tamo et al, "Reactive collisions of electrons with molecular cations: calculations and comparison with plasma and storage-ring experiments", 5th International Conference on Atomic and Molecular Data, Meudon, 15-19.10.2006.
2. S. Novotny, H. Rubinstein, H. Buhr, J. Hoffmann, M. Mendes, O. Novotny, D.A. Orlov, M. Berg, B. Jordan-

Thaden, A.S. Jaroshevich, C. Krantz, M. Lestinsky, A. Petrigani, I.F. Schneider, D. Shafir, M. Lange, D. Zajfman, D. Schwalm, A. Wolf, "Angular dependence in the dissociative recombination process of HD<sup>+</sup>", European Conference on Atomic and Molecular Physics, 1-5 may 2007, Palermo, Italie, livre des résumés, page 327:Tu1-54, 2007.

3. S. Morisset, F. O. Waffeu Tamo, H. Buhr, S. Novotny, N. Mbanzabingwi, D. R. Backodissa-Kiminou, M. C. Stroe, O. Motapon, L. Tchang-Brillet, M. Fidirig, L. Pichl, X. Urbain, D. Zajfman, A. Wolf, A. E. Orel et I.F. Schneider, "New results in the state-to-state description of reactive collisions between electrons and molecular cations", 7th International Symposium on Dissociative Recombination, Ameland, Pays Bas, 18-23 juillet 2007.
4. S. Mada, L. Pichl, I. F. Schneider, Y. Li, R. J. Buenker, M. Kimura, "Electron transfer in proton collisions with silane at keV energies", 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Allemagne, 25-31 juillet 2007.
5. S. Novotny, H. Rubinstein, H. Buhr, J. Hoffmann, M. Mendes, O. Novotny, D. A. Orlov, M. Berg, B. Jordan-Thaden, A. S. Jaroshevich, C. Krantz, M. Lestinsky, A. Petrigani, I. F. Schneider, D. Shafir, M. Lange, D. Zajfman, D. Schwalm, A. Wolf, "Energy dependence of the anisotropy in HD<sup>+</sup> dissociative recombination", 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Allemagne, 25-31 juillet 2007.
6. H. Buhr, F. O. Waffeu Tamo, I. F. Schneider, S. Altevogt, V. M. Andrianarajaona, L. Lammich, M. Lestinsky, M. Motsch, I. Nevo, S. Novotny, D. A. Orlov, H. B. Pedersen, F. Sprenger, D. Schwalm, A. Wolf, D. Zajfman, "Calling rotational resonances in low-energy dissociative recombination of HD<sup>+</sup> by name", 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Allemagne, 25-31 juillet 2007.
7. O. Motapon, I. F. Schneider, A. E. Orel, "Dissociative recombination of CF<sup>+</sup>", 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Allemagne, 25-31 juillet 2007.

**Thèses, Masters, stages**

O. MOTAPON, 28 juin 2007, habilitation à diriger des recherches à l'Université du Havre, « Collisions électrons-atomes et électrons-ions moléculaires : application à l'élargissement des raies, à la recombinaison dissociative et aux processus connexes »

F. O. WAFFEU-TAMO, 2004-2007, thèse, « Collisions réactives dans les plasmas d'intérêt atmosphérique et énergétique » (soutenance prévue, décembre 2007).

D. R. BACKODISSA-KIMINO, 2007-..., thèse, « Recombinaison dissociative dans les milieux de combustion » (soutenance prévue en 2010)

N. MBANZABIGWI, stage de Master 2 « Energie, Fluides, Environnements », « Etude des espèces chargées dans la combustion », soutenu le 5 septembre 2007

C. COTTE, stage de Master 1, Physique, Mécanique et Géosciences, « Recombinaison dissociative électron – cation: vitesses de réaction pour CO<sup>+</sup> », soutenu le 26 juin 2007

## Collaborations

Nationales :

1. Université de Rouen, Laboratoire CORIA, groupe « Plasmas » (Pierre VERVISCH, Arnaud BULTEL, Bruno CHERON).
2. Université Paris XI, Laboratoire de Photophysique Moléculaire.
3. Université Paris XI, Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas. Groupement de recherche «Dépollution par Catalyse et Plasma », CNRS (GdR CATA-PLASME).
4. Université Paris XI, Laboratoire de Collisions Atomiques et Moléculaires. GdR « Hydrogène à la surface »/2006-2009.
5. Université Paris XIII, Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux et des Hautes Pressions (GdR CATAPLASME, GdR « Hydrogène à la surface »/2006-2009).
6. Université de Provence, Aix-Marseille, Laboratoire de Physique des Interactions des Ions et des Molécules.

Internationales :

1. Max Planck Institut für Kernphysik, Heidelberg.
2. Weizman Institute of Sciences, Department of Particle Sciences, Rehovot.
3. University of Davis, California, Department of Applied Science.
4. University College, London, Department of Atomic Physics and Astrophysics.
5. Université Catholique de Louvain la Neuve, Département de Physique Atomique.
6. International Christian University, Natural Sciences Department.
7. Université de Bucarest, Faculté de Chimie ; convention SOCRATES (2005 – 2007).
8. Université de Douala, Centre de Physique Atomique, Moléculaire et Optique Quantique : accord bilatéral, accord tripartite avec l'A.U.F., thèse en co-tutelle Le Havre/Douala (2004 – 2007).

## 2.10.25.UMR CNRS 6089, GSMA, Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique

### Projet 2005.009 Responsable : Thibaud COURS

#### Appréciation du service

Satisfaction totale.

#### Publications

1. Sebastien Canneaux, Jean-Christophe Soetens, Eric Henon et Frederic Bohr, "Accommodation of ethanol, acetone and benzaldehyde by the liquid-vapor interface of water: A molecular dynamics study", Chem. Phys., V327 (2006) P512.
2. Thibaud Cours, Sebastien Canneaux et Frederic Bohr, "Features of the Potential Energy Surface for the Reaction of HO<sub>2</sub> Radical with Acetone", International Journal of Quantum Chemistry, V107 (2007) P1344.

#### Communication

1. Thibaud Cours, Sebastien Canneaux et Frederic Bohr, "Features of the Potential Energy Surface for the Reaction of HO<sub>2</sub> Radical with Acetone", Poster, Journées des Chimistes Théoriciens Francophones, Nancy juin 2006.

## 2.10.26.UMR CNRS 6634, Groupe de Physique des Matériaux, Université de Rouen

### Projet 2006.007 Responsable : MC Nicolas Lecoq

#### Publication

1. "Phase field simulation of coarsening of  $\gamma$  precipitates in an ordered  $\gamma'$  matrix.", J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte and H. Zapolsky, Acta Materialia 55 (2007) 6151-6158

#### Master

1. Résolution d'une équation Cahn-Hilliard par la méthode de champs de phase (Pauline Vervisch- stage Master 1 EPO Université de Rouen).

#### Thèse

1. Simulation numérique de la cinétique de précipitation dans les alliages Aluminium-Scandium-Zirconium (Thèse Julien Boisse (GPM) 2ème année).

#### Communications

1. "Simulations par champ de phases de la coalescence dans les alliages Ni-Al, Al-Sc et Al-Zr-Sc", J. Boisse, Journée Doctorants GPM, 20 juin 2007.
2. "Phase field simulations of heterogeneous precipitates in Al-Zr-Sc alloy", N. Lecoq, H. Zapolsky, J. Boisse, R. Patte, GDR Champ Phase, Paris, 4-6 juin 2007.
3. "Cinétique de coalescence dans les alliages Ni-Al et Al-Zr-Sc. Simulations par une méthode de champ de phases.", J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte and H. Zapolsky, GDR Transdiff, Marseille, 25-27 juin 2007.
4. "Coarsening Kinetic of Aluminium-Zirconium-Scandium Precipitates", J. Boisse, N. Lecoq, H. Zapolsky and R. Patte, Euromat 2007, 10-13 septembre 2007.

## 2.10.27.CNRS UMR 6634, GPM, Groupe de Physique des Matériaux, Université de Rouen

### Projet 2005.003 Responsable : Denis Ledue

Propriétés magnétiques de nanoparticules

#### Communication

1. Orale : « Anisotropie magnétique effective dans les nanoparticules de structure cubique ». Réunion GDR-DFT++ « Apport de la structure électronique au nanomagnétisme ». 17-19 octobre 2007, CEA Saclay INSTN.

#### Publication

1. « Effective magnetic anisotropy in cubic lattice nanoparticles with Néel surface anisotropy ». H. Kachkachi and D. Ledue. En préparation.

#### Collaboration

1. H. Kachkachi. Groupe d'Etude de la Matière Condensée, UMR 8365 CNRS. Université de Versailles Saint-Quentin, 45 avenue des Etats-Unis, 78035 Versailles, France.

## Projet 2006008

Cinétique de transformation de phase et propriétés magnétiques dans les alliages binaires NiFe.

### Thèse

2. Thèse de Doctorat (2006-2009), I. Vernyhora.

**2.10.28.UMR 7616 ,  
Laboratoire de Chimie Théorique,  
Université Pierre et Marie Curie,  
Paris 6**

**Projet 2003.003  
Responsable : Hélène GERARD**

### Appréciation du service

- Cluster extrêmement stable,
- Temps d'attente dans les queues faibles
- Possibilités de lancer des travaux de longues durées
- Bonne efficacité des jobs parallèles
- Nombreux outils d'aides à l'optimisation des calculs mis en place récemment (pourcentage de processeurs et de mémoires effectivement utilisés)

Bref, un environnement de calcul agréable, puissant et efficace. Satisfaction totale !

### Publications

1. Sulfonyl vs. carbonyl group: which is the more electron-withdrawing" I. Chataigner, C. Panel, H. Gérard, S. Piettre, Chem. Commun., 2007, 3288.
2. "Addition of hetero allenyl copper reagents to aldehydes: scope and behavior" E. Vrancken, N. Alouane, H. Gérard, P. Mangeney, J. Org. Chem., 2007, 72, 1770.
3. "First-principles molecular dynamics evaluation of thermal effects on the NMR  $^1\text{JLiC}$  spin-spin coupling" A. de la Lande, C. Fressigné, H. Gérard, J. Maddaluno, O. Parisel, Chem. Eur. J., 2007, 13, 3459.
4. "Theoretical modelling of tripodal  $\text{CuN}_3$  and  $\text{CuN}_4$  cuprous complexes interacting with  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}$  or  $\text{CH}_3\text{CN}$ ", A. de la Lande, H. Gérard, V. Moliner, G. Izzet, O. Renaud, O. Parisel, J. Biol. Inorg. Chem., 2006, 11, 593.
5. Experimental and theoretical study of the regiospecific coordination of Rull and OsII fragments on the lacunary polyoxometalate  $[\alpha\text{-PW}_{11}\text{O}_{39}]^{7-}$ , D. Laurencin, R. Villanneau, H. Gérard, A. Proust, J. Phys. Chem. A., 2006, 110, 6345.
6. "Revisiting the structure of  $(\text{LiCH}_3)_n$  aggregates using Car-Parrinello molecular dynamics", H. Gérard, A. de la Lande, J. Maddaluno, O. Parisel, M. E. Tuckerman, J. Phys. Chem. A., 2006, 110, 4787.

### Thèses

1. Christophe GOURLAOUEN (soutenance le 19/09/2006).
2. Aurélien de la LANDE (soutenance le 25/09/2007).

### Master

1. Simon ULMER (M2, Paris 11 & ENS Cachan, février - juin 2007).

### Communications

1. Condensation d'aldéhydes sur des allénylcuprates  
H. Gérard, Séminaire LCT (janvier 2007).
2. Physicochimie organique d'agrégats lithiés  
O. Parisel, Séminaire LCT (janvier 2007).

### Collaborations

1. Jacques Maddaluno, IRCOF (Rouen).
2. P. Mangeney, UPMC (Paris).

**2.10.29.CRISMAT, UMR 6508 CNRS-  
Laboratoire de CRIStallographie et  
science des MATériaux,  
ENSICAEN-UNICAEN**

**Projet 2007.013  
Responsable : Marie-Bernadette Lepetit**

### Appréciation du service

Bien, pas surchargé comme les centres nationaux. Il manque cependant des logiciels de calcul quantique dont nous avons besoin et que nous devons utiliser à l'IDRIS, comme Molcas et Crystal.

### Publications

Aucune (projet très récent).

### Thèses

1. Sylvain Landron.
2. Julien Soret.
3. Post-doc (Alain Gellé).

### Communications

1. Marie-Bernadette Lepetit et Sylvain Landron, "Ab-initio determination of an effective model for the superconducting cobalt oxides" Gordon conference on superconductivity, Les Diablerets, Suisse, 9-14 septembre 2007.
2. Sylvain Landron et Marie-Bernadette Lepetit, "Ab-initio determination of effective models for the  $\text{CoO}_2$  based compounds", European Conference on Solid State Chemistry, Caen, France, 11-13 septembre 2007.
3. Sophie Boudin et Marie-Bernadette Lepetit "Co spin states in  $\text{LnBaCo}_2\text{O}_{5.5}$  by initio calculations", European Conference on Solid State Chemistry, Caen, France, 11-13 septembre 2007.
4. Alain Gellé et Marie-Bernadette Lepetit "Ab initio study of transition metal oxides with numerous open shells" European Conference on Solid State Chemistry, Caen, France, 11-13 septembre 2007.
5. Marie-Bernadette Lepetit "Détermination ab initio d'intégrales d'échange magnétique dans les systèmes fortement corrélés, exemples sur les oxydes de Cobalt et vanadium", Réunion Nanomagnétisme du GDR DFT++, Saclay, France, 17-19 octobre 2007.

### Collaborations

- Expérimentateurs du CRISMAT (chimistes et physiciens),
1. A. Keren, Technion Israel Institute of Technology.
  2. Jorge Iñiguez, Institut de Ciencia de Materials de Barcelona (CSIC).
  3. Philippe Ghosez, Université de Liège.

**2.10.30.SIFCOM, UMR CNRS 6176,  
Ecole Nationale Supérieure  
d'Ingénieurs de Caen,  
Laboratoire Structure des  
Interfaces et Fonctionnalité des  
Couches Minces,  
ENSICAEN**

**Projet 2003.009**

**Responsable : Gérard NOUET**

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

**Publications**

1. Atomic core structure of 90° c-bent screw threading dislocations in wurtzite GaN  
I. BELABBAS, J. CHEN, P. RUTERANA, G. YU, G. NOUET  
Rare Metals 2006, 25, 1-4.
2. Energetics of the 30° Schockley partial dislocation in wurtzite GaN  
I. BELABBAS, G. DIMITRAKOPULOS, J. KIOSEOGLOU, A. BERE, J. CHEN, Ph. KOMNINOU, P. RUTERANA, G. NOUET  
Superlattices and Microstructures, 2006, 40, 458-463.
3. Ionization energy of GaN point defects  
A. BERE, I. BELABBAS, G. NOUET, P. RUTERANA, J. CHEN, G. SEGDA, J. KOULIDIATI  
Phys.stat.sol. (c) 2007, 4, 2593-2596.
4. Investigation of the atomic core structure of the -mixed dislocation in wurtzite GaN  
I. BELABBAS, A. BÉRÉ, J. CHEN, P. RUTERANA, G. NOUET  
Phys.stat.sol. (c) 2007, 4, 2940-2944.
5. Atomistic modelling of the (a+c) mixed dislocation core in wurtzite GaN  
I. BELABBAS, A. BÉRÉ, J. CHEN, S. PETIT, M. AKLI BELKHIR, P. RUTERANA, G. NOUET  
Phys.Rev. B, 2007, 75, 115201.
6. Atomic core configuration of the a -screw basal dislocation in wurtzite GaN  
I. BELABBAS, G. NOUET, Ph. KOMNINOU  
J.Cryst.Growth 2007, 300, 212-216.

**Communications**

1. Interface et défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures  
G. NOUET, P. RUTERANA, J. CHEN, I. BELABBAS, A. BERE, V. POTIN, Ph. VERMAUT  
Matériaux 2006, Dijon, 13-17 Novembre 2006.
2. Atomic and Electronic Structures of Threading Dislocations in GaN  
I. BELABBAS, J. CHEN, P. RUTERANA, G. NOUET  
ICMAT, Singapore, July 1-6, 2007.

**Thèse**

1. Simulation à l'échelle atomique des coeurs de dislocations dans le nitrure de gallium  
I. BELABBAS, soutenue le 3 avril 2007, Université de Caen/Basse Normandie.

**2.10.31.UMR 6143,  
Laboratoire de Morphodynamique  
Continentale et Côtière,  
Caen**

**Projet 2007.006**

**Responsable : Jean-Claude Brun-Cottan,  
Chargé de Recherche CNRS**

Analyse des transferts à l'interface continent-océan : sédiments, circulation haline, interaction grande échelle et climat

**Appréciation du service**

Sans les services de calcul du CRIHAN, nos thèses de doctorat n'auraient tout simplement pas été menées à leur terme.

Outre les possibilités qui nous ont été offertes par le CRIHAN, nous avons particulièrement apprécié le dynamisme de la structure et le contact privilégié que nous avons pu avoir avec le personnel scientifique et technique du CRIHAN pour résoudre les multiples problèmes que nous avons rencontrés. Ces problèmes ont toujours été résolus de manière très efficace, nos outils de calcul et notre travail de recherche ont bénéficié des suggestions et remarques qui nous ont été faites par le personnel du CRIHAN. Cela est vrai en termes techniques mais aussi scientifiques.

La flexibilité que permet le CRIHAN est un atout indéniable pour les chercheurs. Nous avons particulièrement apprécié de pouvoir directement formuler nos désirs quant aux programmes installés sur les machines de calcul.

Nous trouvons que les services offerts par le CRIHAN sont un atout pour la recherche et l'innovation tant à l'échelle régionale que nationale. Nos travaux de thèse se terminant, nous espérons que nos successeurs pourront bénéficier eux aussi de cette force.

**Thème**

Le thème du travail de recherche de l'équipe de modélisation numérique du Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière (M2C UMR 6143) a pour objectif l'amélioration de la compréhension de la dynamique des zones côtières ; en particulier de la modélisation des échanges entre océans et surfaces continentales du point de vue des apports d'eau douce et de sédiments.

Un post-doctorant et un doctorant travaillent sur cette thématique à travers le développement et la paramétrisation de codes de calculs déjà existants.

- Julien Chauchat concentre son travail sur le développement et l'utilisation d'un code de modélisation du transport sédimentaire. Une approche diphasique est utilisée. Il a soutenu sa thèse le 25 juillet 2007 et est actuellement en contrat de post-doc jusqu'à la fin de l'année 2007.
- Robinson Hordoir utilise deux modèles d'océans afin d'étudier l'interaction fleuve/océan du point de vue thermo-halin et énergétique. Le modèle POM (Princeton Ocean Model) et le modèle NEMO/OPA développé à l'Institut Pierre Simon Laplace (IPSL, Paris). Soutenance de thèse prévue pour le 7 décembre 2007.

Ces travaux de recherche ont utilisé les ressources informatiques du CRIHAN via le projet n°2007006. Le détail et l'avancement de ces travaux est explicité dans le présent rapport.

## **Apports fluviaux dans les modèles d'océans côtiers et globaux : aspects quantitatifs et paramétrisation de l'interaction fleuve/océan.**

### **Collaborations**

Ce travail de recherche implique la participation de plusieurs laboratoires, dont deux font partie de la fédération de laboratoires IPSL (Institut Pierre Simon Laplace) dédiée à la recherche sur le climat et le changement climatique.

1. Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière, Caen, Correspondant : Jean-Claude Brun-Cottan, Chargé de Recherche CNRS.
2. Laboratoire de Météorologie Dynamique du CNRS, Paris, Correspondant : Jan Polcher, Directeur de Recherche CNRS.
3. Laboratoire d'Océanographie et du Climat, Expérimentation et Approches Numériques, LOCEAN, Paris, Correspondant : Gurvan Madec, Directeur de Recherche CNRS.

Ce projet est en partie financé suite à une réponse à appel d'offres auprès du GIP MERCATOR (Météo France/CNES/CNRS/Ifremer/SHOM). Il a été présenté lors de la réunion GMMC à Météo France les 17 et 18 octobre 2007.

### *Description de la problématique*

Les apports fluviaux dans les modèles d'océans sont gérés actuellement de manière très simplifiée, aussi bien à l'échelle régionale qu'à l'échelle globale. Deux problèmes majeurs se posent. (i) Ces apports proviennent souvent de bases de données peu précises tant à l'échelle spatiale que temporelle. (ii) Ces apports sont en général décrits comme s'ils provenaient de précipitations. Cette forme de rejet est exacte du point de vue de la conservation volumique et haline. Mais elle est irréaliste, sur le plan de la physique, du point de vue de l'apport énergétique que constitue une entrée d'eau douce dans l'océan.

En effet, à l'échelle globale les zones sous l'influence d'apports massifs d'eau douce ont un impact qui ne peut être négligé dans l'étude du climat. Outre le fait que ces zones constituent un important puits de carbone, elles apportent à la surface de l'océan une quantité d'eau douce qui peut avoir un effet sur la dynamique thermo-haline de l'océan global, et donc sur les échanges océan-atmosphère et la convection profonde.

À l'échelle régionale, les apports fluviaux jouent un rôle dans la dynamique thermo-haline de nombreux bassins côtiers mais sont aussi des vecteurs importants d'un point de vue biogéochimique par l'apport de nutriments ou de contaminants qu'ils sont susceptibles d'apporter.

Or l'interaction fleuve/océan est caractérisé par une suite complexe de processus responsables du mélange de l'eau douce avec l'eau salée. Si l'incertitude liée à la valeur des apports d'eau douce dans les modèles d'océans est déjà notable, la simplification extrême de la description des processus physiques (particulièrement du point de vue de l'apport de vorticité potentielle des fleuves) introduit une incohérence dynamique dans les zones côtières. On sait pourtant que les apports d'eau douce peuvent créer de véritables dynamiques côtières. Les courants côtiers Norvégiens et Ecossois en sont deux exemples.

Différents processus caractéristiques de l'interaction fleuve/océan ont été identifiés. Ces processus ont été

intégrés dans une configuration côtière haute résolution, basée sur le modèle POM (Princeton Ocean Model).

Des diagnostics ont été mis au point pour évaluer les flux de masse (eau, sel) engendrés par l'apport fluvial dans une zone côtière et paramétrés dans une optique basse fréquence et basse résolution typique des modèles d'océans à grande échelle. Ces flux ont été comparés à ceux engendrés par une configuration basse résolution basée sur la configuration grande échelle NEMO/OPA (Locéan/IPSL, Paris). Ces diagnostics ont permis d'évaluer les domaines d'efficacité et les insuffisances de la configuration NEMO basse résolution en terme de reproduction de ces mêmes flux massiques.

### *Résultats & Perspectives*

Une approche a été retenue pour paramétrer les processus méso-échelle créés par l'apport d'eau douce dans le modèle basse résolution. Cette approche est basée sur des procédures de transfert d'énergie dans les maillages considérés.

Cette méthode permet de générer un modèle en boîte (box model) lequel utilise uniquement des données accessibles à l'échelle globale, et donc accessibles aux climatologues. Une fois calibré, ce box model fait preuve d'un comportement proche des diagnostics générés sur la configuration haute résolution. Toutefois il peut être encore amélioré.

La méthode d'implémentation de ce box model dans les modèles de circulation générale océanique a été déterminée. L'intégration de cette paramétrisation dans les modèles de climat permettra de connaître l'effet des apports d'eau douce dans la circulation générale océanique, et particulièrement dans un contexte dans lequel cet apport augmente dans les régions polaires et sub-polaires. Plusieurs travaux montrent que la prise en compte des apports d'eau douce continentaux est un facteur déterminant pour le climat global, et notamment à cause de la sensibilité de la circulation méridienne de l'atlantique nord à ces apports.

### **Thèse**

1. Ce travail donnera lieu à une soutenance de thèse de doctorat le 7 décembre 2007.

### **Publications**

Année 2007 :

1. R. Hordoir, J. Polcher, J-C Brun-Cottan, and G. Madec. River inflows in ocean general circulation models : a closure through energy conservation (poster). In European Geophysical Union, Vienne (Autriche), 2007.
2. R. Hordoir, J. Polcher, J-C Brun-Cottan, and G. Madec. Spotting what lacks to resolve properly river inflows in ocean general circulation models. In European Geophysical Union, Vienne (Autriche), 2007.
3. R. Hordoir, J. Polcher, J-C Brun-Cottan, and G. Madec. Towards a parametrization of river discharges into ocean general circulation models. A closure through energy conservation. Climate Dyn., - :In review, 2007.

### ***Dynamique Sédimentaire des Zones Côtières par Approche Diphasique***

#### **Collaborations**

La recherche dans ce projet s'appuiera sur les travaux réalisés dans le cadre d'une précédente collaboration entre l'Université de Caen et le Cetmef (Centre d'Etudes Techniques Maritimes et Fluviales, Ministère de l'Équipement) dont l'objectif était le développement et l'analyse

d'une modélisation diphasique appliquée au transport sédimentaire.

1. Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière (M2C), Caen.
2. Centre d'Etudes Techniques Maritimes et Fluviales, Ministère de l'Équipement (CETMEF), Compiègne.

#### *Description de la problématique*

À l'interface continent-océan, les milieux estuariens et côtiers constituent l'aboutissement des déchets de la plupart des activités anthropiques. La présence d'une part de ce "goulot d'étranglement" des apports de contaminants vers la mer et l'existence d'autre part de caractéristiques hydro-sédimentologiques et biologiques de stockage des contaminants, rendent ce système particulièrement vulnérable. Au vu des enjeux que suscitent les zones côtières et estuariennes il est nécessaire de posséder des outils fiables d'aide à la décision. La complexité de ce milieu et des processus qui s'y produisent rendent le développement d'outils prédictifs extrêmement délicat.

L'approche classiquement utilisée pour modéliser le transport sédimentaire en milieux côtiers et estuariens consiste à traiter séparément la suspension diluée et le fond sédimentaire. Au sein de la suspension, la concentration en particules sédimentaires est faible et les interactions entre particules sont faibles. L'hypothèse du scalaire passif est faite et une équation de type advection-diffusion est résolue pour la concentration en particules sédimentaires. Les phénomènes de sédimentation et de dispersion turbulente sont alors paramétrisés par des formules empiriques. Le fond sédimentaire est le siège des phénomènes de tassement et de consolidation, les interactions entre particules sont dominantes et les théories de la mécanique des sols sont généralement employées pour modéliser le comportement du sédiment. La décomposition en sous-domaines introduit plusieurs difficultés, la première est la définition de la transition entre le fond et la suspension et la seconde correspond à la modélisation des flux de masse entre ces sous-domaines. Cette approche est largement basée sur des considérations empiriques ce qui réduit considérablement leur caractère prédictif. L'approche des écoulements diphasiques fournit un cadre théorique pour représenter l'ensemble des processus hydrosédimentaires de manière continue. Le domaine étudié est considéré dans son ensemble et les échanges entre le fond et la suspension n'ont pas à être prescrits. Cette approche doit permettre une description plus satisfaisante d'un point de vue théorique et physique des processus hydrosédimentaires et ainsi de réduire le degré d'empirisme dans les modèles numériques de transport sédimentaire que ce soit par leur application directe ou dans le développement de paramétrisation pour les modèles classiques.

#### *Résultats et travail en cours*

Les résultats obtenus mettent en évidence la cohérence de l'approche diphasique développée pour simuler les phénomènes de sédimentation et de transport en suspension dans le cas de particules non-cohésives. Ainsi, nous avons pu vérifier de manière quantitative le comportement d'une suspension dense en sédimentation et les effets de dispersion des particules par l'écoulement turbulent du fluide en écoulement dilué. Nous avons ainsi mis en évidence la capacité de cette approche à représenter les processus de sédimentation et de transport en suspension dans le cas de particules possédant une faible inertie. Ces résultats sont également en accord avec les profils analytiques proposés par Rouse (1937) et Greimann et al. (1999). Lorsque l'inertie est plus im-

portante, les profils théoriques sont mis en défaut mais les résultats obtenus avec l'approche diphasique sont en accord avec les mesures expérimentales pour le profil de concentration. Les simulations sont réalisées sans calibration préalable de paramètres empiriques ce qui constitue une avancée dans le développement d'outils prédictifs pour la modélisation du transport sédimentaire. Nous montrons ainsi le bien-fondé de l'approche diphasique pour représenter les processus physiques. Ceux-ci ne peuvent être représentés dans l'approche classique du transport sédimentaire sans introduire de paramètres empiriques. Une originalité de l'approche réside dans le cadre bidimensionnel vertical qui permet d'envisager la simulation d'écoulements non-uniformes et instationnaires.

Une première tentative de simulation hydrosédimentaire d'un estuaire réel avec un modèle diphasique bidimensionnel vertical a été présentée. Les problèmes rencontrés au cours de ce travail ne permettent pas, dans l'état actuel de nos connaissances, de réaliser des simulations avec un modèle de turbulence pour la phase solide dans ce cas. Les résultats obtenus montrent que la dynamique de l'estuaire est correctement reproduite, tant du point de vue hydrodynamique que du point de vue de la formation du bouchon vaseux. Les flux de matière entre une couche de particules fortement concentrée et la suspension sont simulés sans qu'aucune loi d'érosion ou de dépôt ne soit prescrite. Ceci constitue le point essentiel de ces simulations et illustre l'intérêt majeur de l'approche diphasique du transport sédimentaire en milieux estuariens.

L'objet des travaux en cours porte sur la sédimentation et la consolidation des sédiments et le rejet en mer des produits de dragages par clapage. Ces travaux sont réalisés dans le cadre d'un post-doctorat en collaboration avec le Cetmef (Centre d'Etudes Techniques Maritimes et Fluviales, Ministère de l'Équipement).

#### **Publications**

1. J. Chauchat. Contribution à la modélisation diphasique du transport sédimentaire en milieux côtiers et estuariens. PhD thesis, Université de Caen, 2007.
2. J. Chauchat, S. Guillou, and K.D. Nguyen. A 2d vertical two-phase flow model for sediment laden flows (poster). In European Geophysical Union, Vienne (Autriche), 2007.
3. J. Chauchat, S. Guillou, and K.D. Nguyen. Etude de la sédimentation et du transport en suspension dans un canal hippodrome avec un modèle à deux phases. Rapport Technique, Université de Caen - CETMEF, 2007.
4. J. Chauchat, S. Guillou, D. Pham Van Bang, and K.D. Nguyen. Modélisation diphasique de la dispersion turbulente dans le transport en suspension de particules sédimentaires. In XVIIIème Congrès Français de Mécanique, 6 pages, Grenoble, 2007.

## 2.10.32.UMR CNRS 6519, Laboratoire "Reactions Selectives et Applications" (RSA)

### Projet 2005.010

Responsable : du laboratoire: C. Portella,

Responsable du projet : Eric Henon

Etude Théorique de réactions en Chimie organique-Applications en Chimie des sucres.

### Appréciation du service

- Puissance machine et stockage suffisants pour publication dans les journaux scientifiques,
- Temps d'attente raisonnable avant exécution,
- Logiciels de modélisation et versions mis à disposition: TB (Gaussian 2003),
- Très bon temps de réponse du service technique suite problèmes d'exécution ou lancement.

### Publication

1. Article: "Compared Behavior of 5-Deoxy-5-iodo-D-xylo- and L-Arabinofuranosides in the Reductive Elimination Reaction: A Strong Dependence on Structural Parameters and on the Presence of Zn<sup>2+</sup>. A Combined Experimental and Theoretical Investigation", Eric Henon, Ariane Bercier, Richard Plantier-Royon, Dominique Harakat, and Charles Portella J. Org. Chem, Vol. 72, No. 7, 2007 (Acknowledgment. C.R.I.H.A.N. computing center and the computational center of the Université de Reims Champagne Ardenne (ROMEO) are acknowledged for the CPU time donated. The authors thank Prof. F. Bohr for helpful discussions. This work was supported by the Contrat de Plan Etat-Region (Program GLYCOVAL-Europol'agro). We are indebted to CNRS and Region Champagne-Ardenne for a PhD fellowship (A.B.).).

### Communication

1. Conférence : "Les séminaires Europe Agri", Reims, 28/09/2007 "Complexe Protéine/Glycolipide impliqué dans des réponses immunitaires: CD1d/KRN 7000 mariage chimie-biologie", A. Banchet, E. Henon, M. Dauchez, A. Haudrechy.

### Thèse

1. (soutenance mi-novembre). "Alcynylation d'aldéhydes chiraux dérivés de sucres", A. Banchet, soutenance le 16/11/2007, Reims, RSA.

### Animation scientifique

1. "Journée Modélisation Moléculaire ROMEO / CRIHAN" le 22 octobre 2007 à Reims.

## 2.10.33.Centre Henri Becquerel

### Projet FNCLCC

Responsable : Mme Isabelle GARDIN.

### Appréciation du service

Mise à disposition de beaucoup de ressources de calcul/stockage pour ce projet très gourmand. Un grand soutien a été apporté par le service technique pour résoudre nos problèmes d'installations/exécutions. Merci à eux ainsi qu'à l'ensemble du personnel du CRIHAN pour leur gentillesse et leur disponibilité.

### Thèse

1. Sébastien VAUCLIN. Période de la thèse : mars 2005 – mars 2008. Sujet de la thèse : Apport de l'imagerie fonctionnelle par Tomographie d'Emission de Positons (TEP) dans le ciblage par radiothérapie de conformation des tumeurs pulmonaires : influence de la synchronisation respiratoire. Financement de la thèse : bourse CIFRE SIEMENS.

### Collaboration

1. Collaboration avec SIEMENS dans le cadre de la thèse pour les post-traitements des données brutes issues des simulations réalisées sur le calculateur.

## 2.10.34.ECOBS, UMR 6014 CNRS, EQUIPE CHIMIE ORGANIQUE ET BIOLOGIQUE STRUCTURALE

Bilan des travaux faisant appel à la Modélisation Moléculaire : octobre 2006 – octobre 2007.

L'équipe RMN et Modélisation Moléculaire du Groupe d'Analyse de l'UMR CNRS 6014 comprend 4 doctorants, 1 Ingénieur CNAM, 4 Maîtres de Conférences et 1 Ingénieur de recherche qui utilisent ou ont utilisé quotidiennement la Modélisation Moléculaire dans leurs activités de recherche. Celles-ci portent principalement sur l'étude structurale de molécules organiques et bio-organiques en solution et les logiciels mis à disposition par le CRIHAN sont utilisés pour les tâches suivantes :

- le traitement et analyse de spectres RMN à l'aide du logiciel FELIX (Accelrys)
- le calcul de structures sous contraintes RMN à l'aide du logiciel CNX (Accelrys)
- l'analyse des structures obtenues à l'aide des logiciels CNX (Accelrys) et SYBYL (Tripos)
- la représentation par les logiciels CERIOUS2 (Accelrys) et SYBYL (Tripos) des interactions RMN sur les modèles obtenus dans les études structurales en chimie organique
- des calculs théoriques semi-empiriques à l'aide du logiciel Jaguar (Schrödinger) et représentation par le logiciel MOLDEN

### Publications

1. Structure-activity relationships of urotensin II and URP. J. LEPRINCE, D. CHATENET, C. DUBESSY, A. FOURNIER, B. PFEIFFER, E. SCALBERT, P. RENARD, P. PACAUD, H. OULYADI, I. SÉGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, D. DAVOUST, M. C. TONON & H. VAUDRY. Acceptée au journal Peptides.
2. Solution structure of the region 51-160 of human KIN17 reveals an atypical Winged Helix domain. L. CARLIER, J. COUPRIE, A. LE MAIRE, L. GUILHAUDIS, I. MILAZZO, M. GONDRY, D. DAVOUST, B.

GILQUIN & S. ZINN-JUSTIN  
Acceptée au journal Protein Science.

3. Definition of new pharmacophores for nonpeptide antagonists of human urotensin-II. Comparison with the 3D-structure of human urotensin-II and URP.  
E. LESCOT, J. SOPKOVA-DE OLIVEIRA SANTOS, C. DUBESSY, H. OULYADI, A. LESNARD, H. VAUDRY, R. BUREAU & S. RAULT  
Journal of Chemical Information and Modeling (2007), 28, 2075-2080.
  4. Effect of aminoisobutyric acid (Aib) substitutions on the antimicrobial and cytolytic activities of the frog skin peptide, temporin-1Dra.  
J.M. CONLON, R. AL-KHARRGE, E. AHMED, H. RAZA, S. GALADARI & E. CONDAMINE  
Peptides (New York) (2007), 28, 2075-2080.
  5. New [4.4]Cyclophane Diketals, Monoketones and Diketones: Design, Synthesis and Structural Analysis.  
N. BOGDAN, I. GROSU, E. CONDAMINE, L. TOUPET, Y. RAMONDENC, I. SILAGHI-DUMITRESCU, G. PLE & E. BOGDAN  
European Journal of Organic Chemistry (2007), 28, 4674-4687.
  6. High-Resolution Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy Studies of Polysaccharides Crosslinked by Sodium Trimetaphosphate: a Proposal for the Reaction Mechanism.  
S. LACK, V. DULONG, L. PICTON, D. LE CERF & E. CONDAMINE.
  7. Carbohydrate Research (2007), 342, 943-953.  
Chiral Discrimination in Host-Guest Supramolecular Complexes. Understanding Enantioselectivity and Solid Solution Behaviors by Using Spectroscopic Methods and Chemical Sensors  
A. GRANDEURY, E. CONDAMINE, L. HILFERT, G. GOUIER, S. PETIT & G. COQUEREL  
Journal of Physical Chemistry B (2007), 111, 7017-7026.
  8. Design, Synthesis and Structural Analysis of New Macrocycles Exhibiting Dispiro-1,3-Dioxane Units.  
C. M. FLORIAN, I. GROSU, E. CONDAMINE, L. TOUPET, Y. RAMONDENC, G. PLE, P. CARDINAEL  
Supramolecular Chemistry (2007), 19, 383-392.
- 12th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Bobigny, France, 1-6 septembre 2007.
  3. Structural studies on human NPFF, an important pain modulation neuropeptide.  
I. SEGALAS-MILAZZO, R. THUAU, N. CHARTREL, D. DAVOUST & L. GUILHAUDIS  
12th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Bobigny, France, 1-6 septembre 2007.
  4. Solution structure of two extracellular loops of urotensin-II receptor and NMR characterization of their interaction with urotensin-II.  
I. SEGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, S. BOIVIN, H. OULYADI, G. COADOU, L. CARLIER, A. FOURNIER & D. DAVOUST  
12th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Bobigny, France, 1-6 septembre 2007.
  5. Solution structure of human NPFF, an important pain modulation neuropeptide.  
L. GUILHAUDIS, R. THUAU, I. SÉGALAS-MILAZZO, N. CHARTREL & D. DAVOUST  
Euromar 2007, Tarragone, Espagne, 1-5 juillet 2007.
  6. Solution structure of extracellular loop III of urotensin-II receptor and NMR characterization of their interaction with urotensin-II.  
I. SEGALAS-MILAZZO, S. BOIVIN, L. GUILHAUDIS, H. OULYADI, A. FOURNIER & D. DAVOUST  
Euromar 2007, Tarragone, Espagne, 1-5 juillet 2007.
  7. Etude des relations structure-activité de peptides  $\mu$ -opioides endogènes (endomorphine-2 et ses dérivés)  
P. LAMEIRAS, G. COADOU, I. SÉGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, J. C. DO-REGO, J. FICHNA, J. COSTENTIN, A. JANECKA & D. DAVOUST  
13ème Journée Scientifique de l'IFRMP, Le Havre, France, 8 juin 2007.
  8. Etude structurale de la boucle extracellulaire III du récepteur UT. Caractérisation de l'interaction avec l'urotensine-II.  
S. BOIVIN, I. SÉGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, H. OULYADI, A. FOURNIER & D. DAVOUST  
13ème Journée Scientifique de l'IFRMP, Le Havre, France, 8 juin 2007.

#### Acte de congrès

1. Agonist and antagonist activities of peptides related to 26RFa, the last member of the RFamide peptide superfamily.  
O. LE MAREC, C. DUBESSY, J.-C. DO REGO, O. NOSJEAN, V. AUDINOT, J. A. BOUTIN, N. CHARTREL, L. GUILHAUDIS, I. SÉGALAS-MILAZZO, D. DAVOUST, M. TENA-SEMPERE, J. COSTENTIN, H. VAUDRY, M.-C. TONON & J. LEPRINCE  
(2007) In K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring Eds. Peptides 2006. Proceedings of the 29th European Peptide Symposium, Kenes International, Geneva, Switzerland, pp 378-379.

#### Communications

1. Etude structurale de polypeptides par RMN et modélisation moléculaire sous contraintes RMN.  
L. GUILHAUDIS  
Journée de modélisation moléculaire, Reims, France, 22 octobre 2007.
2. NMR structure of micelle-bound 26RFa and 43RFa, two neuropeptides with orexigenic activities.  
L. GUILHAUDIS, I. BUCHET, N. CHARTREL, J. LEPRINCE, H. VAUDRY, D. DAVOUST & I. SEGALAS-MILAZZO

#### Thèse

En cours au laboratoire :

1. Romain THUAU (soutenance prévue en janvier 2008)  
« Production et analyse structurale d'un domaine potentiel de liaison à la chitine identifié chez une chitnase de l'huître *Crassostrea gigas* & Etude structurale de trois neuropeptides humains RFamides NPFF, RFRP1 et RFRP3 par RMN et Modélisation Moléculaire. ».
2. Pedro LAMEIRAS (soutenance prévue en 2008)  
« Etude des relations structure-activité de peptides  $m$ -opioides endogènes (endomorphine-2, morphiceptine) et ses dérivés ».
3. Baptiste LECACHAY (soutenance prévue en 2009)  
« Caractérisation structurale par RMN multinoyaux  $^1H/^{6}Li/^{13}C/^{15}N$  d'agrégats lithiés impliquant des amidures chiraux ».

En co-direction :

1. Stéphane BOIVIN (soutenance prévue en janvier 2008)  
« Etudes structurales du récepteur de l'urotensine II ». Collaboration avec le Laboratoire d'Etudes Moléculai-

res et Pharmacologiques des Peptides, Institut National de la Recherche Scientifique – Institut Armand Frappier (Université du Québec, CANADA).

Autre encadrement :

1. Isabelle BUCHET (thèse CNAM soutenue le 25 juin 2007)  
« Etude structurale par Résonance Magnétique Nucléaire et Modélisation Moléculaire de deux neuropeptides stimulant l'appétit : le 26RFa et le 43RFa ».

### Enseignement

Modélisation Moléculaire dans l'enseignement à l'Université :

Les offres de formations de l'Université de Rouen sont étroitement liées aux thématiques de recherche puisque rattachées aux Ecoles Doctorales à partir des masters. Les enseignements de Modélisation Moléculaire, directement en rapport avec les activités de recherche de l'équipe, y trouvent une place importante.

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

Les filières concernées pour la période octobre 2006 - septembre 2007 ont été les suivantes :

1. Master 2 Chimie Organique – Parcours Spectrochimie (5 étudiants)  
UE (Unité d'Enseignement) Structure Dynamique de Biomolécules  
RMN et Modélisation de molécules bio-organiques (11h)
2. Master 1 de Biochimie (45 étudiants)  
UE Biophysicochimie cellulaire et moléculaire (32h)  
Structures 3D des biomolécules. Analyse et propriétés. Méthodes de Modélisation Moléculaire.
3. Master Professionnel de Bioinformatique : Etude de Génomes Outils Informatiques et Statistiques (EGOIST) (12 étudiants).  
UE Modélisation Moléculaire (35h)  
Analyse structurale des protéines par RMN et RX.  
Prédiction de structures secondaires et tertiaires de molécules biologiques.  
Outils de visualisation et simulation de structure.  
Méthodes de modélisation moléculaire.
4. Ecole doctorale Chimie-Biologie (6 étudiants)  
Analyse structurale de biomolécules : RMN et Modélisation Moléculaire (15h).

### 3. Réseau régional pour l'Enseignement et la Recherche

\_\_\_\_\_ **Rappels sur SYRHANO**

\_\_\_\_\_ **Contrats de services prolongés et appels d'offres**

\_\_\_\_\_ **Évolutions 2007 : InterCampus, Renouvellement des équipements actifs**

\_\_\_\_\_ **Évolutions envisagées pour SYRHANO**

\_\_\_\_\_ **Service de téléphonie sur IP**

\_\_\_\_\_ **Services associés rendus par le CRIHAN**

#### 3.1. Rappels sur SYRHANO

Le déploiement du réseau régional est rendu possible par les actions conjuguées de plusieurs acteurs :

- Son financement est assuré principalement par l'Etat et la Région Haute-Normandie, dans le cadre du contrat de projets et par la Communauté Economique Européenne. Les utilisateurs eux-mêmes y participent, selon une grille tarifaire validée chaque année en assemblée générale de l'association SYRHANO ;
- La maîtrise d'ouvrage est assurée par le CRIHAN, en fort partenariat avec les établissements d'enseignement supérieur. L'ensemble des utilisateurs est réuni dans l'association du même nom, SYRHANO, qui exprime régulièrement ses projets et ses besoins. L'établissement des principaux liens et la supervision du réseau font régulièrement l'objet d'appels d'offres dont les cahiers des charges techniques, reflet des demandes des utilisateurs, sont préparés par le CRIHAN.

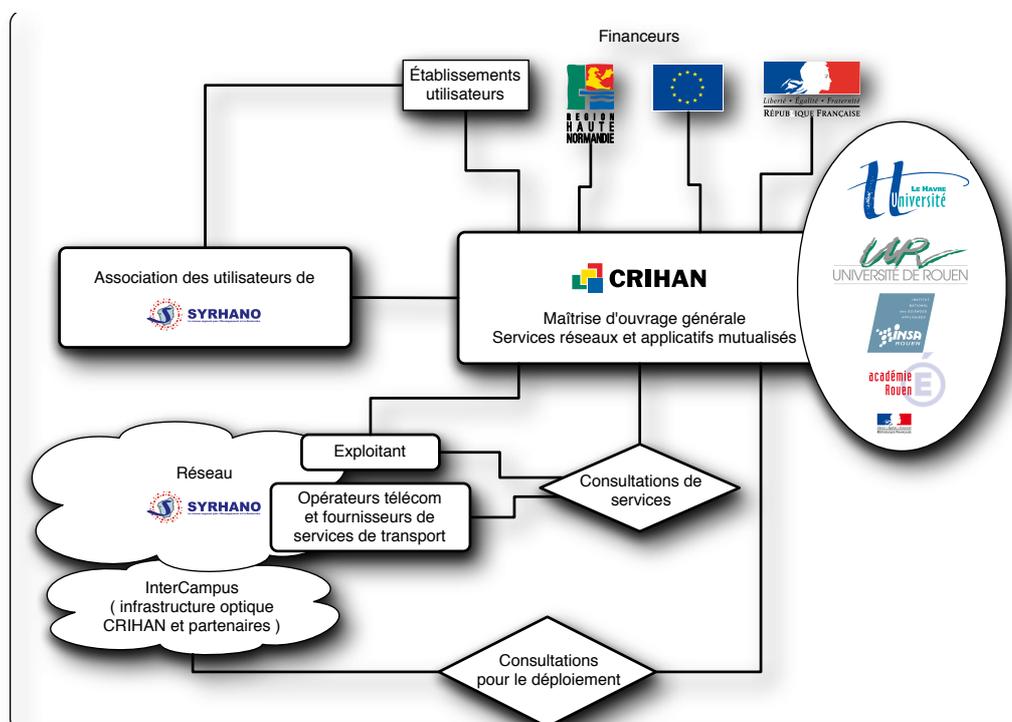
#### 3.2. Contrats de services et appels d'offres

2007 a été une année de préparation d'appels d'offres :

- Un appel d'offres pour le renouvellement des liaisons entre les principaux points de présence ;
- Un appel d'offres pour le renouvellement des services de collecte des trafics xDSL. Considérant que ceux-ci concernent en très grande majorité les établissements scolaires du second degré, cet appel d'offres a été cette année piloté par le Rectorat de Rouen, en concertation avec le CRIHAN.

Les résultats de ces appels d'offres ne seront connus qu'après la publication du présent rapport.

Construction du réseau régional SYRHANO : qui fait quoi ?

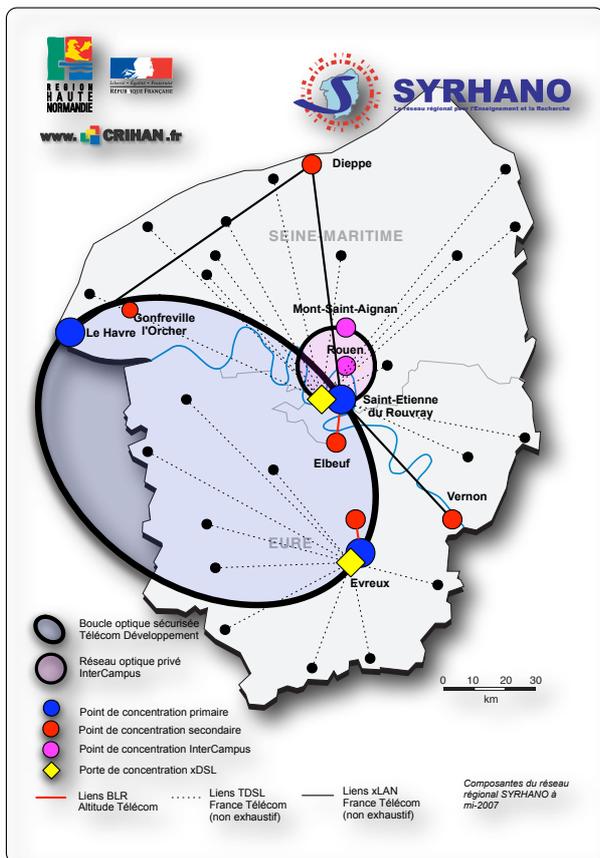


## SYRHANO en 2007

Les contrats pluriannuels initiaux, conclus avec Altitude Télécom, Communications et Systèmes, France Télécom et Neuf Cegetel avaient été prolongés jusqu'à fin 2006 puis l'ont été à nouveau jusqu'à la fin de l'année 2007 pour permettre d'attendre le résultat des nouvelles consultations évoquées ci-dessus.

Les points de présence SYRHANO en 2007 sont donc restés identiques à ceux de l'année passée.

### Principaux points de présence du réseau régional.



Les losanges jaunes ci-dessus concernent les réseaux de collecte pour les établissements scolaires du second degré. L'appel d'offres pour leur renouvellement a été mené par le Rectorat de Rouen avec l'assistance technique du CRIHAN.

Les points de présence SYRHANO, repérés par les pastilles bleues, rouges et roses dans ce schéma sont les suivants :

Ville	Lieu	Débit
Le Havre	Université (rue Lebon)	1 Gbit/s
Gonfreville l'Orcher	Médiathèque municipale	10 Mbit/s
Mont Saint Aignan	Faculté des Sciences	1 Gbit/s Fibres optiques disponibles

Ville	Lieu	Débit
Rouen	Pôle Universitaire des Sciences du Tertiaire	Fibres optiques disponibles
Saint-Etienne du Rouvray	CRIHAN	1 Gbit/s Fibres optiques disponibles
Elbeuf	IUT	10 Mbit/s
Vernon	CHI Eure-Seine	100 Mbit/s
Evreux	CHI Eure-Seine	1 Gbit/s
Dieppe	CH Dieppe. Réseau des écoles raccordé par un lien privé en cascade du CH.	100 Mbit/s

## 3.3. Évolutions de SYRHANO en 2007

### Travaux et études autour d'InterCampus

Le réseau de fibres d'optiques déployé par le CRIHAN sur l'agglomération rouennaise depuis 2000, a été marqué cette année par une substantielle augmentation de son périmètre et de ses utilisateurs avec :

- un maillage amélioré ;
- 5 nouveaux sites raccordés ;
- 6 sites à l'étude.

### Maillage

A la faveur de la récente extension Est du réseau de transport TEOR, un bouclage a pu être réalisé entre les installations déjà présentes sur le site "Rouen-Gare" et le nœud de connexions situé au niveau de la station Théâtre des Arts.

Le tracé du bouclage utilise en grande partie des cheminements rendus disponibles par la mise à disposition de fourreaux disposés tout au long des voies du TEOR par la Communauté d'Agglomération Rouennaise (CAR).

Des travaux de génie civil ont cependant été nécessaires. Ces travaux ont également donné lieu à une mutualisation avec la CAR qui déploie parallèlement un réseau de fibres optiques.

### Nouveaux sites raccordés

Sur le parcours de ce bouclage (voir le schéma ci-après), ont été raccordés :

- le CHU Charles Nicolle ;
- la Faculté de Médecine ;
- le Conseil Régional de Haute-Normandie ;
- le Centre de lutte contre le Cancer Henri Becquerel.

Les trois premiers sites bénéficient ainsi d'une double adduction.

En complément de cette liste, il faut signaler le raccordement en fibres optiques effectué sur le CRIHAN par la CCI de Rouen pour son bâtiment du Technopôle du Madrillet accueillant des structures de Recherche et Développement. Cette liaison optique est consacrée aux besoins spécifiques de ces structures quand ils concernent l'utilisation des ressources du CRIHAN en support à leurs activités de recherche.

### **Travaux préventifs au niveau de l'IUFM**

L'IUFM sera intégrée à l'Université de Rouen à compter du 1er janvier 2008. Par ailleurs, des travaux de restructuration du réseau de fibres optiques du campus universitaire de Mont Saint Aignan sont prévus à brève échéance et auront un impact important sur le point de concentration nord d'InterCampus qui devra être déplacé.

Pour ces deux raisons, et également, une fois encore, à la faveur d'une opportunité de mutualisation avec la CAR, des travaux de génie civil ont été engagés dans le secteur de l'IUFM en prévision de ces importants changements sur le tracé des fibres optiques du réseau. Cette phase a été également l'occasion de préparer une extension vers l'IFA de Mont Saint Aignan (voir ci-après).

### **Nouvelles demandes de raccordement**

- Le Rectorat de Rouen ne bénéficie pas encore d'un lien direct sur les fibres du réseau InterCampus. Un chantier est en cours de réalisation, décidé par le Rectorat à la faveur de travaux importants menés par EDF dans le centre ville de Rouen. Le CRIHAN a proposé d'établir un lien entre le Rectorat et des installations InterCampus situées à la Faculté "Pasteur" (Pôle Universitaire des Sciences du Tertiaire). Si ce projet est financé par le Rectorat, le CRIHAN joue le rôle de coordinateur des travaux vis avis des entreprises et structures impliquées (quatre entreprises pour les travaux, EDF, la Ville de Rouen et le Rectorat) ;
- L'école d'Architecture. A la faveur de l'extension vers l'Ouest du réseau TEOR, le CRIHAN a négocié avec la Communauté de l'Agglomération Rouennaise la pose d'une chambre de tirage sur son réseau de fourreaux, juste au niveau de l'École d'Architecture à Darnétal puis assisté l'École dans la préparation des travaux nécessaires pour rejoindre cette chambre. De la sorte, une interconnexion sur des fibres de la CAR est possible pour rejoindre le réseau InterCampus au niveau de la place Saint Hilaire à Rouen (sur les fibres InterCampus déployées cette année vers le CHU de Rouen) ;

- l'ESITPA. Les travaux de construction de l'ESITPA sur Mont Saint Aignan ont commencé. Le bâtiment se trouvant en face de l'IUFM (site InterCampus), le CRIHAN a également joué un rôle de coordinateur pour que soient prévus des fourreaux rejoignant l'IUFM en traversant la rue du Tronquet. Le raccordement de l'établissement à l'issue de sa construction en sera ainsi grandement facilité ;
- l'IFA. L'Institut des Formations par Alternance est situé à Mont Saint Aignan à environ 800 mètres de l'IUFM. La CAR a réalisé un bouclage "Nord" de son propre réseau de fibres optiques en passant devant ce site. Le CRIHAN a mis en évidence l'opportunité d'une mutualisation de travaux avec la CAR pour réaliser des travaux de génie civil en vue d'un raccordement de l'IFA au niveau de l'IUFM ;
- le CNED. Les mêmes travaux de bouclage Nord du réseau de fibres de la CAR offrent au CNED l'occasion de se raccorder sur ces fibres pour rejoindre le réseau InterCampus. Des négociations sont en cours ;
- l'INRP. L'Institut National de Recherche Pédagogique prévoit de s'installer en centre ville de Rouen, rue du Nord (dans les actuels locaux de l'ESITPA). Ce site est voisin du parcours des fibres InterCampus récemment déployées au niveau de la place du Boulingrin. L'institut a demandé au CRIHAN d'étudier son raccordement et de se coordonner avec la maîtrise d'ouvrage.

**Schéma du réseau InterCampus  
(septembre 2007)**

*InterCampus : types d'infrastructures utilisées par les fibres optiques*

**Tronçon 1 à 8 (2 km)**

- (sept. 2000, 36 brins)  
Campus Nord->SNCF :
- Voirie sur campus,
  - Voirie Bd de Broglie,
  - Traversée Allée du Fond du Val,
  - Fourreau Ville de Mt St Aignan sente de la Belle Epine,
  - Traversée rue d'Estouteville,
  - Passage de l'Ouest,
  - rue d'Estouteville,
  - traversée rue du Renard.

**Tronçon 1-2 / 2-20 (3,5 km)**

- (sept. 2004, 36 brins)  
Campus Nord->Pasteur :
- Voirie sur campus (avec câble 12 brins IUFM),
  - Voirie rue Lavoisier (avec câble 12 brins IUFM),
  - Multitubulaire TEOR,
  - Chambre de tirage TEOR.

**Tronçon 1-2 / 2-4bis / 4bis-5 (3 km)**

- (sept. 2004, 12 brins)  
Campus Nord->CRDP/IUFM :
- Voirie sur Campus,
  - Chambre de tirage TEOR (Panorama),
  - Multitubulaire TEOR.
- CRDP-> IUFM :
- Interne aux deux domaines.

**Tronçon 21-30 / 30-32 / 32-34 (12 km)**

- (sept. 2000, 36 brins)  
Gare rue Verte->CRIHAN :
- Cheminement en site propre Métrobus.

**Tronçon 30-20 / 20-9 (2 km)**

- (juil. 2002, 36 brins)  
Théâtre des Arts->PUST :
- Cheminement propre TEOR,
  - Fourreaux Ville de Rouen Av; OPasteur,
  - GC traversée rue Pasteur,
  - GC rue Emile Leudet.

**Tronçon 30-27 / 27-29 / 29-25 (3 km)**

- (juil. 2007, 72 brins)  
Théâtre des Arts->CHU :
- Cheminement TEOR.

**Tronçons 27-28 & 28-29 (0,5 km)**

- (juil. 2007, 12 brins)  
Adductions CRHN :
- Cheminement TEOR,
  - Fourreaux internes.

**Tronçon 26-25 (0,05 km)**

- (juil. 2007, 12 brins)  
Adductions Fac Médecine :
- Jarretierage interne.

**Tronçon 25-23 / 23-22 / 22-21 (4 km)**

- (juil. 2007, 72 brins)  
Adduction CHU nord :
- Cheminement TEOR,
  - Egouts rue Saint hilaire,
  - Egouts rue des Capucins,
  - GC bd de la Marne,
  - GC Place du Boulingrin,
  - Métrobus.

**Tronçon 32-31 (1 km)**

- (fév. 2005, 12 brins)  
Inspection Académique :
- Métrobus,
  - GC Av.de Bretagne.

**Tronçon 32-33 (2 km)**

- (mai 2006, 12 brins)  
Cité des Métiers :
- Métrobus,
  - GC Av.de l'Europe.

**Tronçon 34-35 & Av. Université (2 km)**

- (sept. 2000, 36 brins)  
Technopôle du Madrillet :
- Cheminement en fourreaux Aglo de Rouen.
- Tronçon 35-36 (1 km)**  
(12 brins)

- ESIGELEC :
- Cheminement en fourreaux Agglo de Rouen (réalisation ESIGELEC).

**Tronçon 6-5 (0,8 km)**

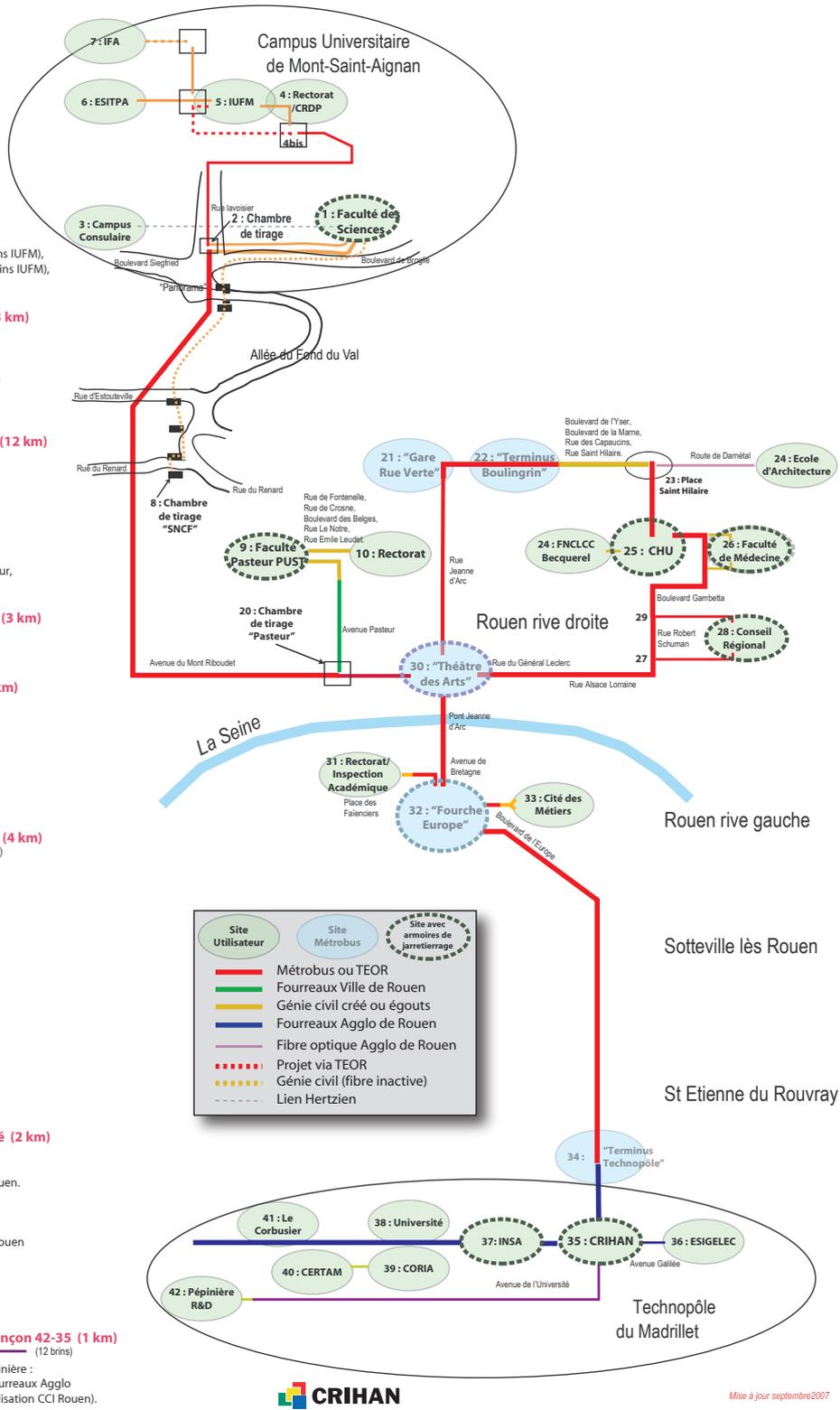
- (prévu sept 2008, 12 brins)  
ESITPA :
- GC (réalisation ESITPA).

**Tronçon 7-5 (1 km)**

- (prévision, 12 brins)  
IFA :
- GC.

**Tronçon 42-35 (1 km)**

- (12 brins)  
Pépinière :
- Fourreaux Agglo (réalisation CCI Rouen).



Mise à jour septembre 2007

## Renouvellement des équipements actifs pour SYRHANO 3

Le CRIHAN a lancé une consultation fin 2006 pour le renouvellement des équipements actifs du réseau SYRHANO. Le constructeur retenu dans le cadre de cette consultation est Cisco.

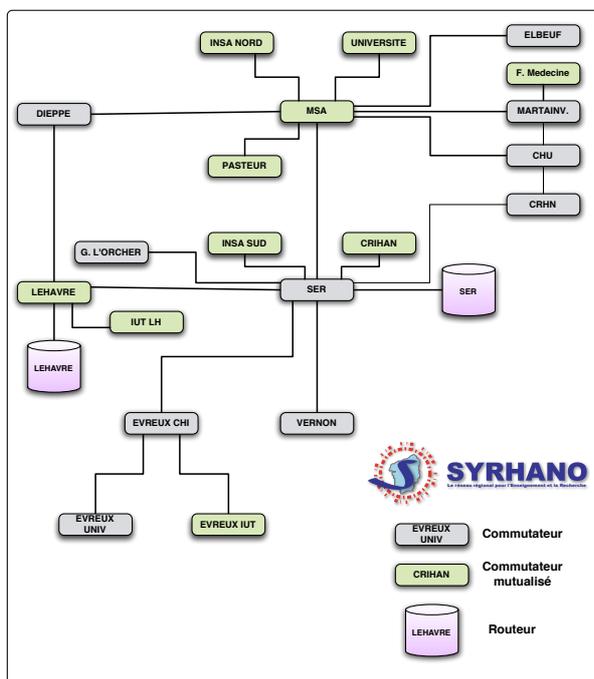
La nouvelle architecture de SYRHANO se base sur des commutateurs Ethernet déployés sur l'ensemble de points de présence et deux routeurs en cœur de réseau (Saint-Etienne du Rouvray et Le Havre). Par rapport à la version précédente de SYRHANO, la version 3 sépare plus nettement les fonctions de routage et de commutation ce qui permet :

- de simplifier l'architecture globale du réseau SYRHANO en centralisant le routage sur deux équipements de cœur ;
- de faire évoluer plus facilement les débits (jusqu'à 10Gbit/s) ;
- de réduire les coûts de déploiement de nouveaux points de présence ;
- d'offrir de nouveaux services aux sites utilisateurs, notamment des réseaux privés virtuels de type Ethernet.

Certains équipements déployés sont mutualisés avec les sites utilisateurs. Ceci permet aux établissements qui le souhaitent d'utiliser les équipements SYRHANO pour le fonctionnement de leur réseau local.

Sur le schéma ci-dessous, ces équipements sont indiqués en gris :

Architecture de SYRHANO 3



Pour valider le bon fonctionnement des équipements et des nouveaux services, une maquette a été réalisée dans les locaux du CRIHAN en début d'année avant la mise en production.

Une attention toute particulière est portée à l'installation des nouveaux équipements et aux phases de migration. Afin de minimiser les coupures pour les sites utilisateurs la migration se déroule en 2 phases :

- intégration transparente des commutateurs en coupure des équipements existants ;
- intégration des routeurs en parallèle de l'architecture en production.

Une fois l'installation terminée les deux architectures fonctionnent en parallèle et les sites sont progressivement migrés de l'une à l'autre. Le tableau ci-dessous montre le planning de migration.

Période	Action
Juin 2007	Installation des équipements de commutations en coupure entre les liaisons opérateurs et les routeurs existants
Août 2007	Intégration des routeurs de la nouvelle architecture en parallèle de l'ancienne infrastructure
Fin 2007	Migration progressive des raccordements des sites vers les équipements de la nouvelle architecture SYRHANO 3.

Deux sessions de formation sur les nouveaux équipements et services de SYRHANO 3 ont eu lieu en mai et octobre 2007. Ces formations sont à destination des personnels techniques des établissements raccordés sur SYRHANO. Une nouvelle session de formation aura lieu en décembre 2007.

### 3.4. Téléphonie sur IP sur SYRHANO

La migration des applications sur IP est une réalité. L'architecture "Web" a révolutionné les méthodes de développement et les usages, a facilité l'interopérabilité inter-applicatifs et a offert aux utilisateurs, au travers du navigateur, un guichet unique d'accès à l'information. Ce n'est pourtant qu'une première étape, certes riche mais parfois frustrante pour l'utilisateur car trop contrainte par une technologie encore jeune, en particulier pour ce qui concerne l'interface homme-machine et les interactions entre les butineurs et les systèmes d'exploitation.

La technologie IP sous-jacente est quant à elle solide avec plus de trente années d'expérience, au point de pouvoir véhiculer dans de très bonnes conditions des flux applicatifs extrêmement sensibles aux aléas.

Ainsi, la voix transite de plus en plus sur les réseaux IP. Chaque fournisseur d'accès à Internet propose par exemple à ses clients une offre de voix combinée au transport des données informatiques. Certains fournisseurs assurent même une passerelle avec le réseau téléphonique commuté et offrent la possibilité d'utiliser un logiciel de téléphonie installé sur son ordinateur personnel.

Dans le monde académique et industriel, les équipements de téléphonie (autocommutateurs et téléphones IP) sont maintenant directement raccordés sur le réseau informatique de l'établissement et parfois n'existent que sous une forme logicielle tournant sur un équipement banalisé (type PC). Le nombre de communications transitant par le réseau informatique grandit donc rapidement, au détriment de celui des communications véhiculées par les réseaux téléphoniques conventionnels (Réseau Téléphonique Comuté et Réseau Numérique à Intégration de Services).

Les principaux intérêts de la téléphonie sur IP sont :

- la mutualisation de l'infrastructure réseau existante avec les autres services informatiques ;
- la maîtrise des coûts ;
- la mise en place de nouveaux services (télétravail, etc.) et l'intégration de fonctions évoluées dans la téléphonie (visioconférence, messagerie instantanée, etc.) ;
- l'interopérabilité entre les équipements des différents constructeurs grâce à l'utilisation de protocoles standardisés et normalisés issus en particulier de l'IETF (Internet Engineering Task Force), en opposition avec les normes propriétaires utilisées généralement par les constructeurs de solutions de téléphonie ;
- un modèle économique nouveau et moins contraignant pour les utilisateurs.

### Mise en application sur SYRHANO

L'expérimentation, menée en septembre 2005 sur SYRHANO, est désormais terminée en ce qui concerne sa phase initiale. Cette phase consistait à placer un autocommutateur IP (appelé également IPBX) en coupure entre le PABX (Private Automatic Branch exchange, commutateur téléphonique privé) traditionnel et la liaison vers l'opérateur. Des nouveaux services ont été proposés aux utilisateurs tels que le télétravail, la mobilité et la réception de messages vocaux dans leurs boîtes aux lettres électroniques (fichier audio transmis, via un courrier électronique, par l'autocommutateur IP).

Les équipes techniques des sites SYRHANO ayant participé à la maquette ont été sensibilisées et ont acquis de l'expérience sur ces nouvelles technologies pour des déploiements futurs. Cette année a permis de consolider l'existant. Les autocommutateurs IP ainsi que les serveurs applicatifs associés ont été mis à niveau avec les dernières versions des logiciels disponibles.

L'INSA de Rouen comprend deux sites distincts : un sur le campus universitaire de Mont Saint Aignan, l'autre sur le technopôle du Madrillet à Saint Etienne du Rouvray. Il n'existe pas de liaison spécialisée pour raccorder les autocommutateurs des deux sites. L'IPBX est installé sur le site du Madrillet. Seuls les postes téléphoniques analogiques de ce site et les téléphones IP sont joignables via le réseau informatique. Lorsqu'un appel est émis vers le site de Mont Saint Aignan, celui-ci transite par le réseau téléphonique conventionnel. L'installation d'un autocommutateur IP, en coupure entre le PABX traditionnel et la liaison vers l'opérateur, est envisagée. Ceci permettrait à chaque site de joindre l'ensemble des téléphones de l'INSA (IP et conventionnels) via le réseau IP. Cette évolution est également motivée par le fait que de nombreux appels sont passés entre l'Université de Rouen, l'IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen) et l'INSA de Rouen. Ce nouvel équipement sera intégré au réseau informatique de l'INSA de Rouen et les tickets de taxation, émis par l'IPBX, seront gérés par l'outil Taxaphone.

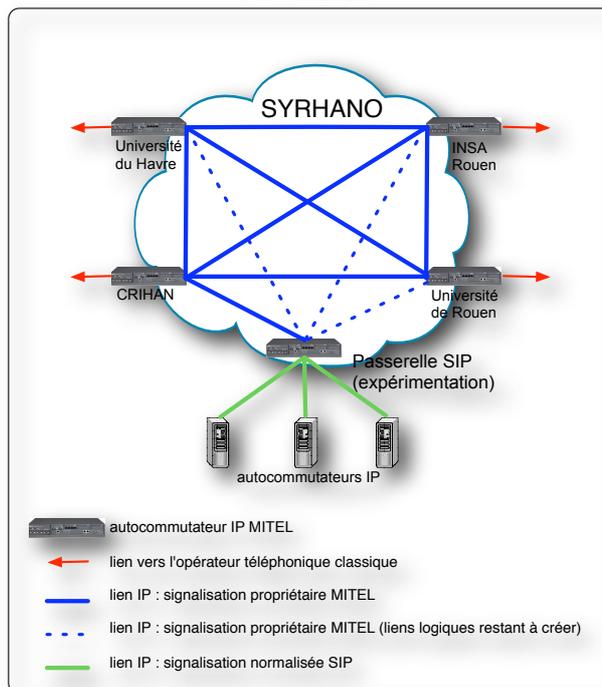
L'établissement CORIA est désormais totalement intégré au service téléphonie sur IP mis en place sur le réseau régional SYRHANO. L'ensemble des postes téléphoniques du site sont joignables via l'autocommutateur IP de l'Université de Rouen. En effet, les PABX traditionnels des deux sites sont interconnectés entre eux via un lien IP propriétaire et font partie de la même entité administrative. L'IPBX qui avait été mis à la disposition du CORIA dans le cadre de la maquette sera redéployé à l'INSA de Mont Saint Aignan.

En ce qui concerne l'Université du Havre, la situation est différente des autres sites. L'établissement a deux sorties vers son opérateur. Elles sont en "round robin" ; c'est à dire qu'il y a une répartition de charge des appels entrants. De plus, les deux liens opérateurs ne forment qu'une seule liaison logique. Par ailleurs, les deux PABX traditionnels sont reliés par le biais d'une liaison spécialisée. Dès qu'un autocommutateur IP est mis en coupure entre un des deux PABX traditionnels et le lien vers l'opérateur, les appels à destination du site ne transitent pas via le réseau IP mais via la liaison opérateur et le second PABX traditionnel. Un plan de tests doit être présenté au CRI de l'Université du Havre pour l'installation d'un deuxième autocommutateur IP en coupure entre le lien opérateur et le second PABX traditionnel.

L'utilisation de l'application Taxaphone est également envisagée pour le traitement des tickets de taxation émis par les deux autocommutateurs IP.

L'outil de gestion des tickets de taxation, dont le développement avait débuté en 2006, a encore évolué cette année : de nouvelles fonctionnalités ont été ajoutées et l'ergonomie de l'application a été améliorée. Il a été installé au CRIHAN et à l'INSA de Rouen. Cette application est également utilisée par le GIP RENATER qui dispose des mêmes autocommutateurs que ceux déployés sur SYRHANO. L'outil traite les tickets des équipements des deux sites RENATER concernés (Paris et Montpellier).

Schéma de principe du service ToIP sur SYRHANO



### Dans le cadre de RENATER

Le CRIHAN participe aux activités du groupe de travail "téléphonie sur IP" qui rassemble des techniciens des établissements de la communauté RENATER tels que l'INRIA, l'UREC, le GIP RENATER et des universités.

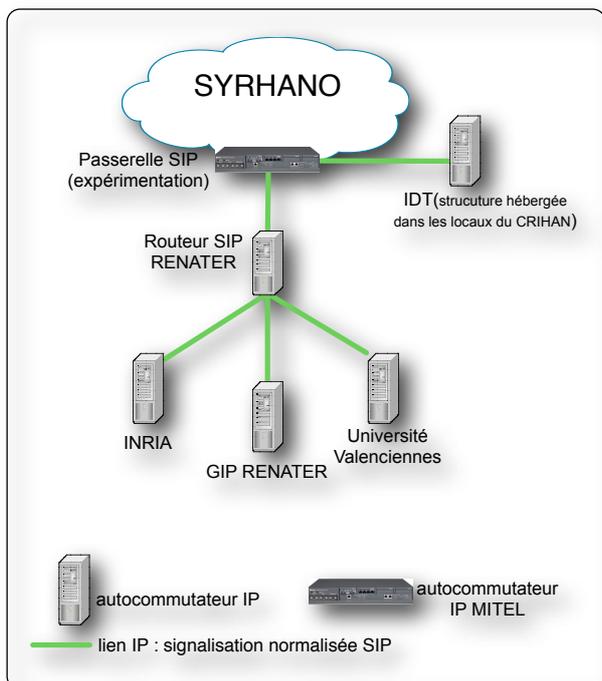
Les objectifs du groupe sont les suivants :

- réflexion sur la mise en place d'un service de téléphonie sur RENATER. Plusieurs maquettes ont été mises en place pour valider un certain nombre de points tel que le re routage d'un appel via le réseau téléphonique traditionnel lorsque le réseau IP est défaillant. Ainsi, pour le CRIHAN, les communications téléphoniques à

destination du GIP RENATER transitent par le réseau IP en priorité. Un document doit être rédigé pour formaliser le service et permettre à d'autres établissements de se joindre à la maquette existante qui gardera son caractère expérimental dans un premier temps ;

- le groupe de travail rédige actuellement un document destiné à la communauté RENATER. Son but est de présenter la maquette actuelle et de faire partager les différentes expériences du groupe en matière de téléphonie sur IP ;
- partage des connaissances : les réunions régulières du groupe de travail, auxquelles participent le CRIHAN, permettent le partage des connaissances et le savoir-faire de chacun. Le CRIHAN met à disposition son pont de visioconférence pour permettre à un plus grand nombre de participer aux réunions.

**Schéma de principe du raccordement du service ToIP sur SYRHANO vers d'autres plateformes**



## Dissémination

L'équipe du CRIHAN a été sollicitée par le Capitoul (Communauté d'Administrateurs Pour l'Informatique TOULousaine).

C'est un réseau technique qui rassemble des informaticiens de l'Enseignement et de la Recherche de Midi-Pyrénées. Son objectif principal est la mise en commun d'expériences pratiques dans des domaines techniques variés.

Une présentation de l'expérimentation réalisée sur le réseau régional SYRHANO a été faite à cette occasion.

## 3.5. Services associés au réseau

### Diffusion vidéo

Le CRIHAN met à la disposition de ses utilisateurs un serveur de diffusion en temps réel permettant la retransmission sur Internet de diverses manifestations, colloques et conférences.

Comme chaque année, plusieurs événements ont été diffusés via ce service et avec l'assistance de l'équipe

réseau, notamment pour l'installation de liaisons Internet temporaires :

- les conférences scientifiques et débats organisés par l'association Science Action ainsi que des interviews ;
- les sessions plénières du Conseil Régional de Haute-Normandie ;
- le forum des "jobs d'été" organisé par le Centre Régional Information Jeunesse de Haute-Normandie ;
- l'exposition "Aides aux initiatives jeunes" organisé par le Bureau Information Jeunesse de la ville du Havre ;
- les 24 heures motonautiques de Rouen ;
- la rencontre franco-sénégalaise autour de l'handisport organisé par les étudiants de l'Université du Havre ;
- la première soudure des boucles en fibre optique de Gonfreville l'Orcher organisé par la mairie de Gonfreville l'Orcher ;
- les web TV du Centre Régional Information Jeunesse de Haute-Normandie.

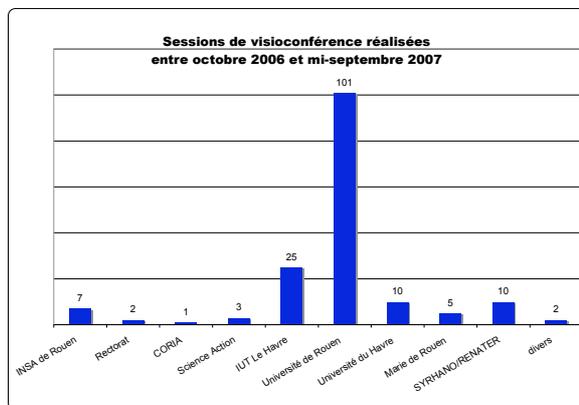
## Visioconférence

Le CRIHAN met à la disposition des utilisateurs un pont de visioconférence et d'audioconférence. Pour rappel, ce service permet à des personnes distantes de se retrouver dans une salle de réunion virtuelle. Ces personnes peuvent rejoindre la réunion à l'aide d'une station de visioconférence autonome disposant d'une caméra raccordée au réseau IP et à un téléviseur ou un rétroprojecteur. Il est possible également d'utiliser un téléphone conventionnel, un GSM ou un logiciel embarqué sur un ordinateur.

Le CRIHAN assure le support technique nécessaire au bon déroulement des différentes sessions et la formation des utilisateurs novices.

L'équipe intervient régulièrement dans la formation CIREN (CINES et RENATER) sur la visioconférence en mettant à disposition son matériel et en présentant le service de visioconférence proposé sur le réseau régional SYRHANO. Cette intervention a eu lieu en septembre 2007 et sera vraisemblablement renouvelée lors de la prochaine session.

Comme les années précédentes, le pont de visioconférence est utilisé régulièrement. Les principaux utilisateurs sont issus de la communauté "Enseignement Supérieur" comme le montre le graphique ci-dessous.



Le CRIHAN a également été contacté par la mairie de Rouen pour réaliser des démonstrations du service. La problématique est la réunion des directeurs des services généraux des agglomérations et villes de Rouen, du Havre et de Caen dans le cadre de Normandie Métropole.

Ces différentes structures n'ont pas, actuellement, d'équipements de visioconférence.

Par ailleurs, le CRIHAN mène une réflexion afin d'améliorer l'ergonomie du service ainsi que sur l'intégration d'outils de travail collaboratif tels que tableau blanc, wiki, partage de documents, etc.

Des prospections et des tests de matériels sont réalisés afin de faire évoluer le service vers la visioconférence Haute Définition qui sera utile dans le domaine de la télésanté notamment.

## Développement d'outils d'analyse pour SYRHANO

### Outils de métrologie

La supervision et la métrologie caractérisent l'exploitation d'un réseau, sur différents aspects. Elles satisfont aux besoins des usagers, en mesurant l'activité de leur site et en détectant les usages malveillants et des administrateurs réseaux en leur permettant de mesurer les performances et de détecter les pannes. Avec la complexité croissante des matériels et des services, la supervision et la métrologie sont devenues essentielles dans la gestion et l'exploitation d'un réseau, en répondant aux besoins suivants :

- mesurer les débits, en entrée et en sortie, de chaque site raccordé ;
- détecter des usages malveillants, comme les tentatives d'intrusion sur des machines ;
- surveiller l'état de fonctionnement de chaque ressource du réseau ;
- tester et valider le déploiement des services ;
- caractériser l'usage du réseau et anticiper l'évolution des besoins.

La réalisation de ces tâches nécessite des mesures, de différentes natures, effectuées en différents points du réseau. La supervision et la métrologie du réseau SYRHANO s'appuient sur trois systèmes complémentaires :

- un logiciel de supervision de l'état du réseau : InterMapper ;
- un logiciel libre de métrologie de la consommation en bande passante : Cacti ;
- un système de métrologie du trafic IP, développé par le CRIHAN.

Une veille technique menée par le CRIHAN sur les outils de métrologie, a révélé plusieurs logiciels libres (Renet-col, flowd, NetMet) susceptibles d'apporter une solution aux besoins de la métrologie IP. Les tests ont révélé, pour certains d'entre eux une instabilité, pour d'autres un manque de fonctionnalités. S'appuyant sur la publication des protocoles (NetFlow, IPFIX) dédiés à cette métrologie, le CRIHAN a pu développer les composants logiciels nécessaires qui constituent aujourd'hui le système de métrologie IP du réseau SYRHANO.

### La métrologie IP-Netflow

Cette métrologie caractérise le trafic IP, en échantillonnant des données IPv6 ou IPv4, au niveau des interfaces de communication. Ces informations offrent une description statistique détaillée des flux IP qui traversent le réseau : adresse source, adresse destination, protocole, nombre d'octets, heure, etc. Ainsi, leur analyse permet de répondre aux besoins suivants :

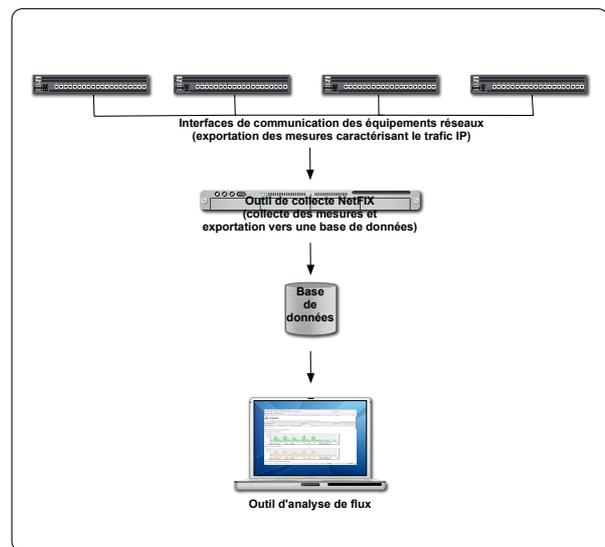
- connaître l'utilisation détaillée du réseau, par site et par application ;
- détecter les anomalies dans l'acheminement du trafic IP et fiabiliser le réseau ;
- détecter des usages malveillants.

La réalisation de cette métrologie est soumise à une forte contrainte de performance : le système doit être capable d'absorber et de traiter un échantillonnage représentatif du trafic. Le contrôle de la représentativité est assuré par comparaison avec les débits exacts du trafic IP qui sont obtenus par une autre technique de mesure.

### Que fait NetFIX ?

NetFIX est un collecteur de données sur le trafic IP. C'est l'un des composants du service de métrologie proposé aux utilisateurs du réseau régional SYRHANO.

#### Outil de collecte NetFix



Chaque routeur caractérise en temps réel les flux IP qui le traversent et exporte cette information, via le protocole NetFlow, à destination du collecteur NetFIX. Ce dernier convertit les informations de chaque flux dans un format compatible avec l'utilisation d'une base de données. Une application disjointe réalise ensuite les traitements statistiques de métrologie, en interrogeant cette base de données.

Conçu et développé par le CRIHAN, NetFIX est aujourd'hui disponible, sous la licence publique générale GNU, en téléchargement sur le site du CRIHAN.

### Les phases du développement :

- Février 2007 : Début de la collaboration avec la société CRT pour établir les spécifications de la version 2.0 ;
- Mars-Mai 2007 : Préparation de versions transitoires du collecteur et de l'analyseur ;
- Juillet 2007 : phase de tests fonctionnels de l'analyseur ;
- Août 2007 : transfert de compétences sur l'implémentation et le déploiement de la solution - archivage de la version 2.0 de l'analyseur et de la documentation qui l'accompagne ;
- Septembre 2007 : Déploiement de la solution pour SYRHANO 3.

## 4. Support à projets et actions vers les entreprises

\_\_\_\_\_ **Support aux applications de Recherche et Développement**

\_\_\_\_\_ **Structures hébergées dans les locaux du CRIHAN**

\_\_\_\_\_ **Offre de service AMON pour les PME-PMI**

\_\_\_\_\_ **Évolution du portail des musées de Haute-Normandie**

### 4.1. Support aux projets de Recherche et Développement

#### Seine-Aval

Les activités du GIP Seine-Aval s'articulent autour de deux pôles.

Un pôle opérationnel mène des actions de recherche dans le cadre du programme scientifique Seine-Aval. Ces recherches permettent d'acquérir des éléments de compréhension du système estuarien pris dans sa globalité (du barrage de Poses à l'embouchure). La production de documents de synthèse, la mise à disposition d'outils scientifiques et techniques ou encore la coordination de groupes de travail, permettent une meilleure prise en compte des grands enjeux de gestion du territoire que sont :

- le risque écologique ;
- l'évolution de la morphologie de l'estuaire et de ses habitats ;
- l'observation du milieu estuarien ;
- l'accès à l'information ;
- la gestion globale.

Un pôle scientifique est en charge d'un programme de recherche mis en place en 1995 dont l'objectif est de comprendre l'origine des principales problématiques estuariennes : l'évolution géomorphologique du système, la contamination des eaux (chimique, biologique, microbiologique etc.) et les dysfonctionnements aquatiques (conditions physico-chimiques etc.) ainsi que leurs évolutions et leurs impacts écologiques et socio-économiques.

Le CRIHAN est intervenu à titre de conseil et comme acteur pour la mise en place de solutions informatiques.

La rédaction d'un cahier des charges fonctionnel par un stagiaire encadré conjointement par le GIP Seine-Aval et par le CRIHAN a permis de mieux identifier et formaliser les besoins du pôle opérationnel. Le logiciel Silverpeas a été acquis dans ce cadre. Il s'agit d'une plateforme collaborative de gestion de contenu et de connaissances ainsi que de publication web : il est actuellement en production sur un serveur administré et hébergé par le CRIHAN. Parallèlement à cela, les équipes techniques du CRIHAN ont participé à la mise en production d'un SIG (Système d'Information Géographique) dédié à l'estuaire de la Seine.

#### Pôle Image

L'association Pôle Image de Haute-Normandie est en passe de devenir le seul pôle régional d'éducation à l'image en France à assurer la coordination de l'ensemble des dispositifs nationaux d'éducation au cinéma en temps scolaire. Autre particularité régionale, l'accent est mis sur la télévision et le multimédia dans les interventions et une ouverture sur l'Europe depuis la rentrée 2004. Cette structuration unique permet une approche

globale de la conception des outils pédagogiques et des programmes de formation en direction des enseignants. Parallèlement, s'est amorcée une nécessaire réflexion sur l'évolution des approches pédagogiques hors temps scolaire et sur la formation des éducateurs.

L'un des enjeux majeurs de ces actions se trouvera dans la possibilité d'accès aux ressources documentaires du pôle par un large public. C'est notamment l'une des perspectives attendue du futur plan de numérisation des fonds cinématographiques et audiovisuels du Pôle Image. Couplé aux 2500 ouvrages et magazines spécialisés du fonds documentaire, l'aboutissement de ce chantier permettra des consultations et travaux plus libres.

La numérisation des oeuvres nécessite des espaces de stockage de grandes tailles et performants. C'est dans ce cadre que le CRIHAN a procédé à une étude technique. Basée sur des matériels existants, elle a permis de valider, avant réalisation, la possibilité de mettre à disposition un espace de stockage de plus de 7 To. Un tel volume équivaut à environ 2390 heures de film en qualité DVD.

#### LinterWeb

LinterWeb est une jeune entreprise régionale qui a embauché deux ingénieurs développement avec une aide OSEO dans le cadre "Recrutement pour l'Innovation". Son département R&D travaille sur un moteur de recherche lié à Wikipedia.

La fondation Wikimedia se heurte à la problématique de sélection de ses articles les plus fiables dans les nombreux contenus de l'encyclopédie collaborative libre (environ 550 000 articles en français sont actuellement disponibles). Il s'agit d'un recueil de textes en français qui seront triés sur le volet pour leur qualité et leur stabilité. La fondation devrait faciliter l'identification sur son site de ces articles qu'elle juge pertinents, tout en maintenant la possibilité de visualiser les fiches en cours de conception ou de modification.

Une version CD-ROM est en préparation par Wikimedia France : ce support est destiné aux écoles et aux pays francophones où l'accès à Internet est rare ou de mauvaise qualité. Le lecteur de ce produit est développé par LinterWeb ainsi que le logiciel libre Kiwix qui sert à la navigation et à la recherche dans l'encyclopédie sur DVD.

Pour la recherche en ligne sur Wikipedia, LinterWeb a développé Wikiwix qui s'aligne désormais comme moteur de recherche sur Wikipedia au même titre que les produits bien connus de la toile. Dans sa phase de mise au point, ce moteur bénéficie au CRIHAN de l'environnement technique à la hauteur de cette ambition.

Ce projet a également généré une collaboration avec le LITIS (Laboratoire d'Informatique, de Traitement de l'Information et des Systèmes de l'INSA de Rouen) avec un sujet de thèse.

## TRIBVN

TRIBVN est une société spécialisée dans l'acquisition, la gestion et la diffusion de l'image numérique, au travers de solutions d'imagerie pour les laboratoires hospitaliers.

Une convention entre TRIBVN et le CRIHAN a été conclue pour la mise en œuvre d'une plateforme technique pour l'hébergement et l'expérimentation d'applications du domaine de l'imagerie médicale.

Ces applications sont destinées aux pathologistes et aux biologistes afin de leur faciliter le travail en réseau sur des dossiers d'images numérique dans un contexte de travaux collaboratifs : TRIBVN met au point ces solutions en les évaluant sur l'environnement du CRIHAN.

Le caractère innovant de certains services ainsi développés permet également aux médecins des laboratoires publics hospitaliers et/ou universitaires de développer à partir de ces outils des actions de formation continue, d'enseignement et de recherche en microscopie diagnostique. Ils autorisent la mise en œuvre de projets expérimentaux destinés à des demandes spécifiques émanant de sociétés savantes, de groupements de médecins spécialisés, d'universités ou de laboratoires de recherche; par exemple l'usage du format JP2000 en réseau, la migration de l'anatomopathologie vers les standards d'échanges déjà très utilisés dans les autres disciplines médicales comme DICOM, l'étude d'éléments sémantiques dans la variabilité diagnostique etc. Ces projets sont soutenus dans le cadre du RNTS, du BIOCRITT, du TECSAN (4) ou dans celui des appels à projets des Ministères.

## 4.2. Hébergement de structures dans les locaux du CRIHAN

### IDT

Les activités de R&D de IDT, Jeune Entreprise Innovante, en matière de services réseaux (cf. rapport précédent) se poursuivent à la fois au CRIHAN et dans des locaux loués en fin d'année à la pépinière d'entreprises du technopôle du Madrillet. Deux nouveaux développeurs ont été embauchés, ce qui porte à quatre le nombre de personnes hébergées au CRIHAN : elles interagissent régulièrement avec les équipes techniques du CRIHAN.

La CCI de Rouen, qui gère la pépinière du Madrillet a, pour les besoins de R&D des structures hébergées, mis en place une liaison optique vers les installations du CRIHAN.

### Normandie AeroEspace (NAE)

Normandie AeroEspace est un réseau structuré de 15 entreprises normandes, regroupant les activités industrielles et de service, dans le domaine de l'aéronautique et du spatial. Cette filière d'excellence de la Région représente 1,5 milliard € de CA, 10 000 salariés, 5% de croissance annuelle, 1 000 emplois à pourvoir d'ici à 5 ans, une cinquantaine de PME/PMI, fournisseurs et sous-traitants, et près de 20 laboratoires de recherche impliqués dans les projets.

Afin d'accroître l'efficacité de la filière aéronautique et spatiale, NAE déploie, en partenariat avec les acteurs régionaux, des plans d'actions autour de 3 ambitions :

- Enraciner et développer les activités en région, et ainsi faire face aux enjeux de compétitivité ;
- Promouvoir la Normandie comme une région aéronautique et spatiale de premier plan ;
- Attirer et fidéliser les talents.

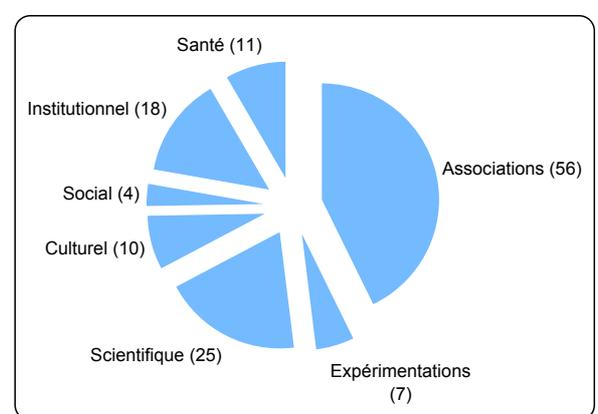
Pour atteindre ses objectifs, Normandie AeroEspace s'est fixé quatre axes de travail :

- Emploi et Formation. Préparer les emplois de demain en proposant des formations régionales adaptées et en anticipant les besoins par une démarche de Gestion Prévisionnelle des Emplois et des Compétences (GPEC) ;
- Recherche et Technologie. Piloter des projets innovants en partenariat avec des laboratoires, des écoles, des PME/PMI et en interface avec les pôles de compétitivité ;
- Achats et Sous-Traitance. Densifier le réseau des PME/PMI sous-traitantes et leur permettre d'aborder le secteur ou d'y accroître leurs parts de marché grâce à une valorisation de leur potentiel d'innovation, un accompagnement de leur management industriel, notamment dans l'atteinte du niveau de qualité attendu, un soutien dans l'élévation de leurs compétences ;
- Communication et Promotion. Accroître la reconnaissance et l'attractivité du secteur aux plans régional, national et international et orienter les actions de communication vers les acteurs économiques, les jeunes, les talents.

## 4.3. Hébergements d'applications

De nombreux serveurs d'applications sont hébergés techniquement au CRIHAN. On a déjà cité LINTERWEB et TRIBVN en raison des forts partenariats qu'ils occasionnent avec les laboratoires publics et des soutiens qui leurs sont apportés par divers programmes d'aide à l'innovation. Cependant, dans la majorité des cas, le CRIHAN héberge, soit sur des machines dédiées, soit sur des machines mutualisées, des sites web ou d'autres services en réseau pour différentes communautés scientifiques, institutionnelles, associatives ou du domaine de la santé qui représentent plus d'une centaine de structures.

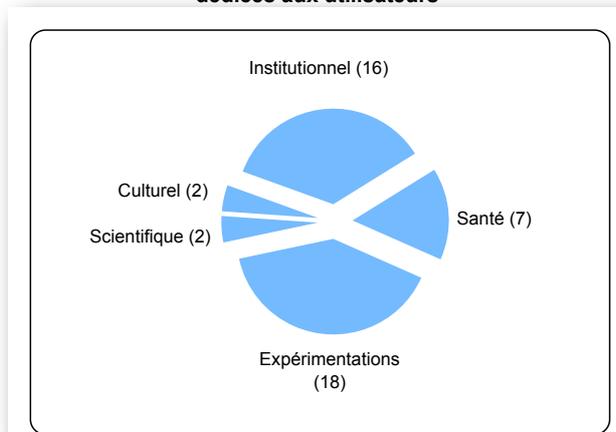
Répartition par domaine des hébergements sur les deux machines mutualisées du CRIHAN



4 BIOCRITT Ile de France, Centre Régional d'Innovation et de Transfert de Technologie Biomédicale, RNTS, Réseau National Télécom et Santé, TECSAN, Technologie innovante de la santé

Les deux machines mutualisées totalisent 131 sites pour 35 Go de données.

**Répartition par domaine des hébergements sur des machines dédiées aux utilisateurs**



En ce qui concerne les machines dédiées, le plus souvent fournies par les utilisateurs eux-mêmes, le graphique ci-dessus en montre la répartition par domaine. Les "expérimentations", majoritaires, sont le plus souvent le fait de sociétés privées désireuses de tester un projet dans les conditions de performances offertes par SYRHANO. Le domaine "institutionnel", important lui aussi, concerne essentiellement la Préfecture, le Conseil Régional, le Rectorat, mais également des organismes comme le CREFOR, le RANFOR, etc.

#### 4.4. Offre de service AMON pour les PME-PMI

Les ressources techniques du CRIHAN peuvent dans certains cas être mises à disposition de projets expérimentaux ou de R&D, voire de projets industriels en émergence et en phase de développement. Le CRIHAN peut ainsi conseiller, participer au développement ou héberger une plateforme applicative, voire une structure en cours de création.

Concernant plus spécifiquement la modélisation numérique, le CRIHAN a entamé en 2007 une démarche de sensibilisation des entreprises à l'emploi de ce type d'outil qui se révèle de plus en plus incontournable dans de nombreuses phases des processus industriels : il s'agit du projet AMON, Aide à la MODélisation Numérique, qui regroupe sur une même plateforme technique et logicielle les outils nécessaires pour ce genre de travaux.

En cours d'élaboration, cet Atelier de Modélisation Numérique préfigure une plateforme de modélisation et de simulation numérique multi physiques pour les entreprises régionales.

#### Contexte

L'objectif est de déployer et d'exploiter une plateforme de modélisation numérique pour les entreprises, intégrant des ressources matérielles, logicielles et des compétences scientifiques nécessaires à l'expertise et à l'accompagnement pour l'analyse des problèmes et leur modélisation.

#### Description

Les moyens de calcul actuels du CRIHAN sont complétés par une grappe spécifique.

Le portage des logiciels et leur optimisation sur les différentes architectures bénéficie de l'expertise du CRIHAN sur ses propres moyens informatiques. Les logiciels commerciaux les plus répandus (par exemple Fluent, Star CD, CNS, etc.) sont disponibles ainsi que leurs équivalents dans le monde du logiciel libre. S'y ajouteront les applications plus "métiers" souhaitées par les entreprises au fur et à mesure des besoins.

Sur le plan des compétences, l'environnement partenarial du CRIHAN, notamment avec les laboratoires de recherche sur le Technopôle du Madrillet, apporte l'interface nécessaire entre les entreprises et les outils de modélisation.

#### Objectifs

Permettre aux entreprises d'améliorer leurs processus de conception/production en utilisant de façon extensive les outils modernes (maquettes numériques, modélisation multi-physique, conception assistée par ordinateur, etc.). Cette évolution des méthodes devrait avoir aussi pour conséquence d'améliorer l'ensemble des modèles d'échanges de données entre entreprises donneuses d'ordres et sous-traitantes. Cette plateforme de modélisation numérique est par exemple mise à la disposition de toutes les entreprises partenaires du pôle de compétitivité Mov'eo.

#### Thématiques, partenaires scientifiques

Les thématiques qui sont au cœur des activités des utilisateurs traditionnels du CRIHAN sont essentiellement la mécanique des structures, la mécanique des fluides et la combustion. En fonction des contacts et besoins des entreprises, d'autres thématiques peuvent être abordées en faisant appel aux compétences d'autres départements ou laboratoires de l'INSA de Rouen ou des universités de la région. Les départements de Mécanique et Énergétique-Propulsion sont évidemment un premier axe majeur d'activités, mais le potentiel régional existant dans le domaine de la chimie est également une direction d'ouverture cohérente pour les aspects polluants ou matériaux par exemple.

Parallèlement, les étudiants et les enseignants impliqués y trouveront la possibilité de conceptualiser des problèmes nouveaux, tout en contribuant au développement du tissu industriel local.

#### Partenaires institutionnels

Le projet AMON bénéficie depuis fin août d'une subvention de l'Etat dans le cadre d'une Action Collective inscrite par la DRIRE de Haute-Normandie.

Outre le support de facto de la Région Haute-Normandie, le CRIHAN a souhaité également s'entourer du soutien d'organismes en lien avec les entreprises, comme le réseau des CCI régionales, HNT, OSEO, Mov'eo, en tant que partenaires-relais de cette action.

#### Communication

Des supports de communication ont été conçus et proposés aux partenaires relais qui sont sollicités pour porter l'information autour de ce projet via leurs organes de presse. Par ailleurs le CRIHAN participe aux rencontres ou colloques : en lien avec ce projet :

- rencontres Mov'éo ;
- fin juin : première édition des "Rencontres Régionales de l'Innovation" organisées par le réseau des CCI à la CCI de Rouen ;

- fin septembre : Premières Rencontres du Calcul et de la Simulation (HarVest, Paris le 26-09-2007)
- à venir en novembre : SEINO, simultanément aux Rencontres Technologiques du Technopôle du Madrillet, organisées par l'association du technopôle.

## Premiers résultats

Deux conventions ont d'ores et déjà été signées avec des entreprises :

- une entreprise spécialisée dans la réalisation d'études industrielles et des actions de Recherche et Développement dans le domaine de l'hydrodynamique et de la mécanique des fluides pour les domaines offshore, naval, du nautisme et de l'industrie ;
- une entreprise spécialisée dans la fourniture de prestations de modélisation numérique pour de grands industriels des télécom, de la défense et de l'aéronautique.

## 4.5. Portail des Musées de Haute-Normandie

### Missions du portail

Le portail des musées de Haute-Normandie répond à une double mission :

- Mettre en valeur les musées de la région par l'élaboration d'outils et d'applications web permettant d'établir une relation complémentaire, continue et plus étroite avec le public.
- Améliorer et enrichir la 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 ».

Le portail représente donc le cœur d'un service de mise en valeur des contenus issus du plan de numérisation.

### Pilotage du portail : orientations 2007

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

- Formation des utilisateurs ;
- Enrichissement du contenu ;
- Valorisation du portail et développement de la communication ;
- Développement du volet pédagogique ;
- Harmonisation des pratiques documentaires.

### Évolution du portail : Actions menées en 2007

Partant du travail réalisé les deux années précédentes (création de la base de données, récupération et intégration des données Joconde, réalisation de l'interface de gestion et de consultation des collections), la phase de finalisation a consisté à :

- L'intégration du graphisme ;
- La gestion du multi langage ;
- Prendre en compte les mises à jour de la base dans la gestion des thématiques ;
- L'enrichissement des thématiques.

Parallèlement, le nouveau module « images pour la classe » a été créé et intégré au portail. Afin de répondre aux exigences des pouvoirs publics quant à l'accessibilité des données mises en ligne, une série de démarches

pour rendre le site plus ouvert aux personnes handicapées a été entreprise.

## Orientations futures

Élargir les fonctionnalités offertes au grand public et lui faciliter l'accès aux données numérisées afin de répondre aussi bien aux attentes des acteurs du tourisme que du monde de l'éducation. En ce sens, la traduction de la base constitue une priorité.

- Assurer une meilleure visibilité du portail et du programme de numérisation auprès des institutions, des communautés culturelles et scientifiques puis des publics européens, en élaborant et en développant la création d'un réseau régional sur le patrimoine. Le rapprochement, pour une première étape, avec les données du service de l'Inventaire est ainsi envisagé.
- Garantir la pérennité des données en proposant aux membres du réseau, avec l'appui et l'infrastructure du CRIHAN, un service de sauvegarde des données numérisées.

## 5. Encadrement de stagiaires et formations dispensées

### 5.1. Stagiaires encadrés au CRIHAN

#### Université Rennes 2, Masters 2 Professionnels des Métiers de l'Information, communication, organisation

- MESQUIDA Dorothée, Etude d'un plan de communication au CRIHAN, 6 mois, (16/04/07 au 16/10/07)
- GOLDSPIEGEL Florence, Amélioration de la visibilité et suivi du plan de communication pour le portail des Musées de Haute-Normandie, 6 mois, (03/04/07 au 15/10/07).

#### Université de Rouen, UFR Sciences et Techniques

- SIMON Gaël, Génie Mathématique et Informatique, Licence 3 : Poursuite du développement du Portail des Musées de Haute-Normandie, 5 mois, (23/04/2007 au 30/09/2007)
- SALLE Thierry, Master Informatique, Spécialité Sécurité des Systèmes Informatiques (SSI) : Développement d'outils de métrologie. 6 mois, (12/03/2007 au 14/09/2007)

LAMACZ Michel, Master Informatique, Spécialité Sécurité des Systèmes Informatiques (SSI) : La sécurité sur le réseau SYRHANO, 6 mois, (12/03/2007 au 14/09/2007)

#### Contrat de professionnalisation

- Guillaume Vassault-Houlière, ISCIO, Institut Supérieur de Commerce et d'Informatique d'Orsay, formation d'administrateur réseaux, mars 2007 à février 2008.

#### Transfert de compétences

- Alexandre Boutois, stagiaire au sein de la société CRT Informatique, expertise d'un produit logiciel (déploiement, mise en production et maintenance) en métrologie sur IP, une semaine ;
- Thierry Mainfroid, employé de CRT Informatique, deux semaines.

## 5.2. Récapitulatif des formations dispensées

Date	Domaine	Titre	Stagiaires
2 au 4 octobre 2006	Outil logiciel	Installez votre serveur de liste de diffusion avec « SYMPA »	3
12 octobre 2006	Calcul	Formation pratique : outils de profilage IBM sur Power 5	4
6 au 8 novembre 2006	Outil logiciel	Installez votre serveur de liste de diffusion avec « SYMPA »	2
4 décembre 2006	Calcul	Présentation du High Performance Computing (Université du Havre)	25
26 janvier 2006	Musées	SPIP pour le portail des musées de Haute-Normandie	5
22 février 2007	Calcul	Environnement de travail sur la grappe IBM p575	6
12 au 14 mars 2007	Musées	Initiation à la prise de vue numérique (théorie + pratique)	11
15 et 16 mars 2007	Musées	Traitement des données numérisées (retouches d'images sous Gimp)	9
26 au 28 mars 2007	Musées	Initiation à la prise de vue numérique (théorie + pratique)	6
29 et 30 mars 2007	Musées	Traitement des données numérisées (retouches d'images sous Gimp)	6
9 au 11 mai 2007	Réseau	SYRHANO : formation niveau 2 : équipements de commutation	13
29 au 31 mai 2007	Réseau	SYRHANO : formation niveau 3 : équipements de routage	13
24 au 28 septembre	Musées	Initiation à la prise de vue numérique (théorie + pratique)	7
15 au 19 octobre	Réseau	SYRHANO : formation niveaux 2 & 3	14
10 au 14 décembre	Réseau	SYRHANO : formation niveaux 2 & 3	15
Avril, septembre et octobre (3 demi-journées)	Réseau	Visioconférence et videodiffusion	12
Janvier, mars et juin (5 demi-journées)	Réseau	Téléphonie sur IP	13
		Total	164

## 5.3. Descriptif des formations

### SYRHANO

Cette formation a été élaborée spécifiquement à destination des personnels techniques des établissements rattachés sur SYRHANO qui ont à se familiariser avec les nouveaux équipements actifs déployés en 2007 sur le réseau régional. Cette formation spécifique comporte une partie théorique et une partie pratique avec des travaux concrets sur les équipements de commutation et de routage. Le contenu de la formation est également orienté sur l'utilisation des services SYRHANO.

Contenu :

- Journée 1 : Niveau 2 (Ethernet et protocoles associés) ;
- Journée 2 : Niveau 2 (suite). Niveau 3 : généralités IP (y compris UDP, TCP, QoS) ;
- Journée 3 : Niveau 3 (suite), IPv6 ;
- Journée 4 : MPLS, routage dynamique (RIP, OSPF, BGP & ISIS) ;
- Journée 5 : Description des services SYRHANO et des matériels déployés.

## Installez votre serveur de listes de diffusion avec "SYMPA"

SYMPA est un gestionnaire de listes de diffusion pour établir des liens avec des groupes de contacts. Basé sur les technologies de l'Internet, il associe un archivage des messages électroniques et un espace de partage de documents accessibles par le web. Il peut être utilisé aussi bien en interne qu'en externe à l'entreprise.

L'originalité de cette formation concrète et pratique est de permettre aux participants d'apporter, s'ils le souhaitent, leur propre machine de sorte qu'à la fin de la formation, leur serveur soit totalement configuré et prêt à l'emploi.

Nombre de structures très variées ont un besoin de gestion de listes de diffusion externes ou internes comme cette année l'Université Paris V ou la direction informatique de l'armée de terre de Rennes.

### Contenu

- Principe de fonctionnement de Sympa ;
- Installation de SYMPA sur les machines ;
- Configuration de SYMPA : aspects théoriques et mise en pratique ;
- Création de listes de diffusion types ;
- Gestion des abonnés dans une base de données MySQL ou LDAP ;
- Administration de Sympa et personnalisation de l'interface ainsi que du comportement.

## Calcul

Le calcul scientifique au CRIHAN (partie théorique)

Ce module s'adresse essentiellement aux utilisateurs potentiels des ressources en calcul intensif du CRIHAN.

L'objectif est d'aider les utilisateurs des ressources en calcul intensif du CRIHAN à mieux tirer parti de l'architecture de calcul.

### Contenu :

- Architecture matérielle ;
- Outils de développement pratique (make, débogueur, compilateur) ;
- Fortran 90 ;
- Optimisation scalaire ;
- Introduction au calcul parallèle.

Le calcul scientifique au CRIHAN (partie pratique)

### Contenu :

- Présentation générale du calcul parallèle ;
- Présentation de l'échange de messages ;
- Description de la bibliothèque MPI (Message Passing Interface) avec travaux pratiques sur le cluster IBM du CRIHAN.

## Initiation à la prise de vue numérique

Cette formation est dédiée aux personnels des musées de Haute-Normandie qui, dans le cadre du programme régional de numérisation des fonds culturels a le besoin de réaliser des prises de vues de qualité dans des conditions techniques bien définies. La formation s'appuie sur

l'utilisation d'un matériel du CRIHAN qui peut ensuite être prêté aux musées.

### Contenu :

#### Les bases,

- Principes du réflex numérique (Le reflex, Acquisition du signal numérique, Les cartes mémoire) ;
- Paramètres et réglages (Paramètres d'exposition, Profondeur de champs, Distance focale, Flou de bougé, Mise au point, Éclairage, Balance des blancs, Mesure de la lumière) ;
- Prise de vue (Bracketing, Cadrage, Macrophotographie, Utilisation de l'histogramme, Résumé des paramètres) ;
- Traitement numérique (Défauts du numérique, Espaces colorimétriques, Résolution, Poids de fichiers, Formats numériques, Chaîne de traitement numérique) ;
- Présentation du matériel en prêt.
- Traitement des données numérisées avec Gimp,
- Installation de Gimp (Windows et Mac OS) ;
- Premiers pas avec Gimp (Boîte à outils, Fenêtre document, Manipulation des fenêtres) ;
- Outils essentiels (La sélection, Les calques, Les masques de calque) ;
- Retouche photographique ;
- Module UFRaw ;
- Limites de la retouche d'images.

## SPIP

SPIP est un système de publication pour l'Internet particulièrement adapté aux sites à vocation éditoriale. Il a été choisi dans le cas du portail des musées pour permettre aux personnels de ces établissements de mettre aisément à jour les informations les concernant, grâce à une interface simple d'utilisation. Le CRIHAN a organisé une formation à l'emploi de cet outil pour les personnes en charge, dans chaque musée, de la mise à jour des informations.

### Contenu :

- Modification d'un contenu existant (Modification des dates de l'article, des auteurs, des mots-clés, des images ou documents, ajout d'une traduction, mettre l'article à la poubelle, modification du contenu de l'article, modifications spécifiques) ;
- Création d'un nouveau contenu (raccourcis typographiques, ajout d'images ou de documents, de la date de début d'un événement, d'un auteur, des mots-clés, demander la publication sur le portail de l'article, créations spécifiques) ;
- Discussions (forum interne, messagerie, annonce).

Le Pôle Régional de Modélisation Numérique  
et le réseau régional SYRHANO  
sont cofinancés par  
l'État, la Région Haute-Normandie  
et la Communauté Européenne (fonds FEDER)



*Illustrations de couverture :*

- *Etude de la carène du trimaran Groupama II.*
  - *Simulation de l'écoulement autour des appendices de la carène d'un trimaran.*
  - *Le trimaran Groupama II. Ce multicoques a bénéficié des résultats obtenus sur les supercalculateurs du CRIHAN. Plusieurs simulations numériques ont permis d'optimiser ses performances.*
- (Bassin d'essai des carènes, Val de Reuil).*