



Normandie Université

Pôle Régional de Modélisation Numérique

Références des Publications des laboratoires utilisateurs pour l'année 2016

Référence du document : RA-PUBLIS-2016 - Révision 01 - Date de création : 03/02/2016

Validation : 16 mai 2019

Documents référencés : N/A

Résumé : Liste des Publications des laboratoires utilisateurs du PRMN (service de calcul intensif) pour l'année 2016.

Révisions :

- 01 : première version publiée

Accessibilité

ComUE Normandie Université : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

Introduction	6
Projets scientifiques expertisés	7
Projet : 1998007	7
Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	
Projet : 1998022	7
Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles	
Projet : 1998053	8
Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	
Projet : 2002003	8
Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	
Projet : 2003008	9
Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	
Projet : 2003013	9
Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières	
Projet : 2004004	10
Intitulé : Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	
Projet : 2005004	11
Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	
Projet : 2005010	12
Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.	
Projet : 2005013	12
Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	
Projet : 2005014	13
Intitulé : Étude des cinétiques des transformations de phases dans les alliages modèles des aciers	
Projet : 2006003	13
Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.	
Projet : 2006007	15
Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	
Projet : 2006011	15
Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	
Projet : 2007001	16
Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	
Projet : 2007013	17
Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	

Projet : 2008005	18
Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique	
Projet : 2008013	18
Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée	
Projet : 2008018	18
Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie	
Projet : 2010006	19
Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2011001	19
Intitulé : Étude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2011007	20
Intitulé : Modélisation multi-échelle de nano-systèmes	
Projet : 2012006	20
Intitulé : Simulation haute-fidélité de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
Projet : 2012008	22
Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
Projet : 2012013	23
Intitulé : Simulation STEM - HAADF	
Projet : 2012016	23
Intitulé : Classification de molécules	
Projet : 2013005	23
Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique	
Projet : 2013006	24
Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique	
Projet : 2013010	24
Intitulé : Modélisation numérique de l'impact hydro-sédimentaire de l'implantation de systèmes récupérateurs d'énergie	
Projet : 2013019	24
Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.	
Projet : 2014002	25
Intitulé : Amélioration des propriétés mécaniques, thermiques et électriques des matériaux composites renforcés par des inclusions rigides métallisés et thermiquement conducteurs par le biais de la simulation numérique et technique homogénéisation multi-échelles.	
Projet : 2014003	25
Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.	
Projet : 2014005	25
Intitulé : Validation et évaluation d'un nouveau solveur explicite cartésien pseudo-compressible à raffinement adaptatif (AMR) massivement parallèle. Application à la simulation d'une hydrolienne.	
Projet : 2014007	26

Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.	
Projet : 2014010	26
Intitulé : Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.	
Projet : 2015001	27
Intitulé : Simulation numérique avancée de condensats de Bose-Einstein	
Projet : 2015004	28
Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.	
Projet : 2015005	28
Intitulé : Taylor-Couette turbulent avec transfert de chaleur	
Projet : 2015007	29
Intitulé : Structure et Dynamique dans les mélanges liquides ioniques/solvants moléculaires	
Projet : 2015008	29
Intitulé : Etude théorique d'une surface de silice modifiée et rationalisation des interactions phase stationnaire/composé aromatique cible.	
Projet : 2015009	30
Intitulé : Rationalisation du moment dipolaire de deux molécules pharmaceutiques durant la rotation de groupements flexibles.	
Projet : 2015011	31
Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes.	
Projet : 2015012	31
Intitulé : Exposition aux dioxines et risque de cancer du sein (Projet GEO3N). Modélisation de la dispersion des dioxines dans différents milieux pour le développement et la validation d'un score d'exposition applicable dans des études épidémiologiques.	
Projet : 2016002	32
Intitulé : FireDiag	
Projet : 2016006	32
Intitulé : Etude de cycles catalytiques impliquant le nickel	
Projet : 2016007	33
Intitulé : Modélisation lagrangienne de l'accélération dans un écoulement cisailé homogène à grand nombre de Reynolds	
Projet : 2016008	33
Intitulé : Étude des oscillations hydroclimatiques en Europe	
Projet : 2016009	33
Intitulé : Modélisation structurales et électronique de l'interface InAlN/GaN pour l'application aux transistors de haute mobilité électronique	
Projet : 2016010	34
Intitulé : Cinétique des inhibiteurs de protéines kinases et Affinité par Docking	
Projet : 2016011	34
Intitulé : Prédiction des constances cinétiques de liaison des inhibiteurs de protéine kinase par des simulations de dynamique moléculaire (KinetiX4PKI)	
Projet : 2016013	35
Intitulé : Diffusion atomique sous champ électrique extrême	

Projet : 2016014	35
Intitulé : Caractérisation hydrodynamique (écoulement et turbulence) des sites hydroliens et étude des effets de sillage des turbines par simulations numériques	
Projet : 2016016	36
Intitulé : Adsorption de polluant en milieu aqueux : approche numérique et expérimentale	
Projet : 2016019	36
Intitulé : WavyFilm	
Projet : 2016021	36
Intitulé : Ingénierie des interactions protéine-ligand	
Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire	38
RNMM : SMS EA 3233	38
Intitulé : Sciences et méthodes séparatives	
RNMM : Plateforme PISSARO	40
Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines	
RNMM : CERMN	41
Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : UMR 6014 COBRA	43
Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIANN pour l'année 2016. Il regroupe les travaux effectués par les laboratoires utilisateurs des ressources mises à disposition par le CRIANN dans le cadre du Pôle Régional de Modélisation Numérique.

Les activités sont présentées par "projet scientifique", au sens de leur identification dans la base de données du PRMN. Un "projet scientifique" est un programme annuel de réservation de ressources pour un thème de recherche donné : le projet est identifié par un numéro et est associé à un ou plusieurs comptes utilisateurs en charge de ce projet. Chaque projet enregistré au CRIANN/PRMN a préalablement fait l'objet d'une validation scientifique par des experts reconnus dans le domaine concerné : ceux-ci évaluent la pertinence du rapport entre le volume de ressources demandées (en nombre d'heures de calcul essentiellement) et le thème scientifique étudié.

Un deuxième volet d'activités concerne l'utilisation des ressources logicielles et matérielles acquises dans le cadre du Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire par les membres du projet.

Les informations présentes dans ce document ont toutes été transmises par les laboratoires eux-mêmes : seule la présentation a fait l'objet de retouches par le CRIANN à des fins d'harmonisation.

B. Projets scientifiques expertisés

3. Projet : 1998007

Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jean-Guy CAPUTO

Laboratoire : LMI - EA 3226 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 77 930

Publications de rang A

1. R. Melin, M. Sotto, D. Feinberg, J-G. Caputo, B. Doucot, Gate-tunable zero-frequency current cross-correlations of the quartet mode in a voltage-biased three-terminal Josephson junction, *Phys. Rev. B* 93, 115436 (2016) <http://arxiv.org/abs/1511.08436>

4. Projet : 1998022

Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 1 508 909

Publications de rang A

1. A. Chaudhuri, A. Hadjadj. Numerical Investigations of Transient Nozzle Flow Separation. *Aerospace Science & Technology*, 53, 10-21 (2016).
2. N. Taguelmimt, L. Danaila, A. Hadjadj. Effect of viscosity gradients on mean velocity profile in temporal mixing layer. *Journal of Turbulence*, 17(5), 491-517 (2016).
3. N. Taguelmimt, L. Danaila, A. Hadjadj. Effects of viscosity variations in temporal mixing layer. *Flow, Turbulence & Combustion*, 96(1), 163-181 (2016).
4. A. Piquet, O. Roussel, A. Hadjadj. Comparative study of Brinkman penalization and direct-forcing immersed boundary methods for compressible viscous flows. *Computers & Fluids*, 136, 272-284 (2016).
5. D. Kotov, H.C. Yee, A. Wray, A. Hadjadj, B. Sjogreen. High Order Numerical Methods for the Dynamic SGS Model of Turbulent Flows with Shocks. *Communications in Computational Physics*, 19(2), 273-300 (2016).

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Vineet SONI. Parallel Adaptive Multiscale Numerical Methods for Complex Compressible Flows. Thèse de Doctorat de l'Université de Rouen Normandie, 09/12/2016.

Thèses en cours sur le projet

- Arthur PIQUET. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue en mars 2017.
- Boubakr ZEBIRI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2019.
- Margio MENDEZ. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2019.
- Sushank SHARMA. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2019.
- Nassim BRAHMI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2019.

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire : LPMS / FRE 2463 CNRS (PARIS)

Heures.CPU 2016 : 63 481

Publications de rang A

6. N. Gresh, D. Perahia, B. de Courcy, J. Foret, C. Roux, L. El-Khoury, J.-P. Piquemal, L. Salmon, Complexes of a Zn-Metalloenzyme Binding Site with Hydroxamate-Containing Ligands. A Case for Detailed Benchmarkings of Polarizable Molecular Mechanics/ Dynamics Potentials When the Experimental Binding Structure is Unknown, *J. Comput. Chem.* 2016, 37, 2770–2782. DOI: 10.1002/jcc.24503
7. C. Narth, L. Lagardere, E. Polack, N. Gresh, Q. Wang, D. R. Bell, J. A. Rackers, J. W. Ponder, P. Y. Ren, J.-P. Piquemal, Scalable Improvement of SPME Multipolar Electrostatics in Anisotropic Polarizable Molecular Mechanics Using a General Short-Range Penetration Correction up to Quadrupoles, *J. Comput. Chem.* 2016, 37, 494–505. DOI: 10.1002/jcc.24257

6. Projet : 2002003**Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jérôme YON

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 5 569

Publications de rang A

1. Yuan Y, Ren KF, Rozé C., Fraunhofer diffraction of irregular apertures by Heisenberg uncertainty Monte Carlo model, *Particuology* 24:151-158, 2016.
2. Sun B, Kattawar G. W., Yang P., Ren KF., "Rigorous 3-D vectorial complex ray model applied to light scattering by an arbitrary spheroid", *JQRST* 179:1-10, 2016.
3. Duan Q, Zhong R, Han X, Ren KF, Influence of spatial curvature of a liquid jet on the rainbow positions: ray tracing and experimental study, accepted by *JQRST*, 2016.
4. Liu, F., Yon, J., Bescond, A. (2016). On the radiative properties of soot aggregates – Part 2: Effects of coating. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 172, 134-145.

Communications dans des congrès internationaux

1. Ren KF, Rozé C, Idlahcen S, Ma Z, Characterization of size and form of a suspended droplet by using Vectorial Complex Ray Model, ILASS, Sept. 4-7, 2016, Brighton, England.
2. Ren KF, Vectorial Complex Ray Model for interaction of light with arbitrarily shaped smooth surface, **plenary lecture**, icPOE2016-Intern. Conf. Photonics & Opt. Eng., Oct. 14-17 2016, Xi'an China.

Communications dans des congrès nationaux

1. Ren KF, Rozé C, Prédiction de diffusion spatiale 3D de la lumière par une particule de forme irrégulière avec Tracé de rayons vectoriels complexes, CFTL, 13-19 Sept. 2016, Toulouse, France.

2. Ren KF, Ray theory of waves and its application to the characterization of large non-spherical particles, keynote in Measurement Techniques for Multiphase Flows, Sept. 22-24 2016, Beijing, China.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Fengshan Liu, Black Carbon Metrology, Measurement Science and Standards, National Research Council, Ottawa, Ontario, Canada K1A 0R6.
- Xinqing Sheng, Center for Electromagnetic Simulation, School of Information and Electronics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China.
- Xiang'e Han, School of Physics and Optoelectronic Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China.
- Ping Yang, Department of Physics & Astronomy, Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA.

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

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Alain BERLEMONT

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 831 480

Publications de rang A

1. W. Aniszewski [Improvements, testing and development of the ADM- \$\tau\$ sub-grid surface tension model for two-phase LES](#), J. Comp. Physics, Volume 327, Pages 389-415, 2016.

8. Projet : 2003013**Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

Laboratoire : LOMC (LE HAVRE)

Heures.CPU 2016 : 1 840 143

Publications de rang A

1. Paul Mycek, Grégory Pinon, Corentin Lothodé, Alexandre Dezotti, and Clément Carlier. Iterative solver approach for turbine interactions : application to wind or marine current turbine farms. Applied Mathematical Modelling, 41 :331 – 349, 2017.
2. Grégory Pinon, Gaële Perret, Lei Cao, Adrien Poupardin, Jérôme Brossard, and Elie Rivoalen. Vortex kinematics around a submerged plate under water waves. part II : Numerical computations. European Journal of Mechanics - B/Fluids, pages 1–37, 2016.
3. Aurélie Rivier, Anne-Claire Bennis, Grégory Pinon, Vanesa Magar, and Markus Gross. Parameterization of wind turbine impacts on hydrodynamics and sediment transport. Ocean Dynamics, 66(10) :1285–1299, 2016.
4. Paul Mycek, Grégory Pinon, Grégory Germain, and Elie Rivoalen. Formulation and analysis of a diffusion-velocity particle model for transport-dispersion equations. Computational and Applied Mathematics, 35(2) :447–473, 2016.

Communications dans des congrès internationaux

1. Grégory Pinon, Xuezhou Z. Lu, Jean-Marc Cherfils, Élie Rivoalen, and Jérôme Brossard. Survivability of a owc under extreme wave condition using SPH. In 2016 ASCE, EMI Conference (Engineering Mechanics Institute), 25-27 Oct. 2016 2016. Metz, France.
2. Michael Togneri, Ian Masters, Grégory Pinon, and Clément Carlier. A comparison of synthetic turbulence generation methods. In 2016 ASCE, EMI Conference (Engineering Mechanics Institute), 25-27 Oct. 2016 2016. Metz, France.
3. M. O. Nieto-Oropeza, V. Magar, M. S. Gross, S. G. Marinone, G. Pinon, and J. D. de Basabe Delgado. Analisis tecnico-economico para la implementacion de parques de extraccion de energia hidrocinetica : un caso de estudio en el golfo de california. In The Mexican Geophysical Union Annual Meeting 2016 (RAUGM16), Oct. 30th - Nov. 4th 2016. Puerto Vallarta, Jalisco, Mexico.

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Xuezhou Lu - Soutenue le 21 juin 2016 - Simulations numériques de l'action de la houle sur des ouvrages marins de récupération d'énergie dans des conditions hydrodynamiques sévères. Thèse financée par une bourse régionale Région Haute Normandie.

Thèses en cours sur le projet

- Clément Carlier - débutée en janvier 2014 - Simulation du comportement d'hydroliennes dans des conditions de fonctionnement réaliste - Thèse co-financée Région Haute Normandie / IFREMER.
- Arnaud Fur - débutée en novembre 2015 - Étude numérique du comportement de membranes ondulantes.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- IFREMER, ANR THYMOTE, LABEX EMC3, NEPTUNE.

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Jacques MADDALUNO

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2016 : 34 634

Communications dans des congrès nationaux

- Séminaire à l'Université d'Oslo (Pr Mohamed Amedjkouh), Chiral lithium amides: new expeditions in polar organometallic chemistry, Oslo (Norvège), 14 janvier 2016.

10. Projet : 2005004**Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Jana SOPKOVA

Laboratoire : CERMN - UNICAEN EA 4258 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 214 431

Publications de rang A

1. Jourdan J.-P., Since M., El Kihel L., Lecoutey C., Corvaisier S., Legay R., Sopkova-de Oliveira Santos J., Cresteil T., Malzert-Fréon A., Rochais C., Dallemagne P. Novel benzylidenepherylpyrrolizones with pleiotropic activities potentially useful in Alzheimer's disease treatment. *Eur. J. Med. Chem.* 114 (2016) 365-379.
2. Saleh N., Saladino G., Gervasio F. L., Haensele E., Banting L., Whitley D. C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Bureau R., Clark T. A Three-Site Mechanism for Agonist/Antagonist Selective Binding to Vasopressin Receptors. *Angew. Chem. Int. Ed.* 55(28) (2016) 8008-8012.
3. Yahiaoui S., Hamidouche K., Ballandonne C., Davis A., Sopkova de Oliveira Santos J., Freret T., Boulouard M., Rochais C., Dallemagne P. Design, synthesis, and pharmacological evaluation of multitargetdirected ligands with both serotonergic subtype 4 receptor (5-HT4R) partial agonist and 5-HT6R antagonist activities, as potential treatment of Alzheimer's disease. *Eur. J. Med. Chem.* 121 (2016) 283-293.
4. Jouanne M., Voisin-Chiret A. S., Legay R., Coufourier S., Rault S. and Sopkova-de Oliveira Santos J. Beta strand mimicry: Exploring oligothiénylpyridines foldamers, *Eur. J. Org. Chem.* (2016) in press.

Communications dans des congrès internationaux

1. J. Sopkova - de Oliveira Santos, B. Marekha, A. Bourafai, M. Sebban, H. Oulyadi. Revealing the mode of interaction between Mcl-1 and its oligopyridine-based foldameric inhibitors: a coupled molecular modeling-NMR perspective. 52nd International conference on medicinal chemistry: RICT 2016. July 6-8, 2016, Caen, France.
2. J. Sopkova-de Oliveira Santos, L. Belkacem Bouricha, K. Bordji, P. Dallemagne, M. Bernaudin, N. Colloc'h. Virtual screening search for HIF-2 α selective inhibitor. 52nd International conference on medicinal chemistry: RICT 2016. July 6-8, 2016, Caen, France.
3. Clémence Riva, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Marie-Pierre Halm-Lemeille, Drug design approach to protect honeybee : acetylcholinesterase as a novel target against the parasite *Varroa destructor*. 23rd Young Research Fellows Meeting, février 2016 (Lille, France).

Communications dans des congrès nationaux

1. De Pascale, M. ; Sopkova-de Oliveira Santos, J. ; Voisin-Chiret A.S. Design and synthesis of Mcl-1/ Bcl-xL dual inhibitors for treatment of chemoresistant ovarian cancer. 23èmes Journées Jeunes Chercheurs de la Société de Chimie Thérapeutique (SCT), 15-17 février 2016, Lille.
2. Jouanne, M.; Legay, R.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rault, S.; Voisin-Chiret, A.S. Exploring Oligothiénylpyridines as nonpeptidic Beta-strand Mimetics. 23èmes Journées Jeunes Chercheurs de la Société de Chimie Thérapeutique (SCT), 15-17 février 2016, Lille.
3. Hedir, S.; Gloaguen, C.; Voisin-Chiret, A.S.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Fogha, J.; Gautier, F.; De Giorgi, M.; Burzicki, G.; Perato, S.; Pétigny-Lechartier, C.; Simonin-Le Jeune, K.; Brotin, E.; Goux, D.; N'Diaye, M.; Lambert, B.; Louis, M.H.; Ligat, L.; Lopez, F.; Juin, P.; Bureau, R.; Rault, S.; Poulain, L. Pyridoclast et ses dérivés, des foldamères abiotiques mimes d'hélice alpha de la famille des oligopyridines, inhibent directement Mcl-1 et sensibilisent les cellules cancéreuses ovariennes aux stratégies dirigées contre Bcl- xL. 9èmes journées scientifiques du Cancéropôle Nord-Ouest, 18-20 mai 2016, Deauville.

4. C. Riva, L. Chambry, M. Sokolowski, J. Sopkova de Olivera Santos, M.- P. Halm-Lemeille Effets sublétaux chez *Apis mellifera* d'une consommation de pirimicarbe, molécule candidate contre *Varroa destructor*, 46e édition du congrès du Groupe Français des Pesticides, mai 2016 (Bordeaux, France).
5. C. Riva. Acetylcholinesterase as a novel target against the parasite *Varroa destructor*. Journées de l'Ecole Doctorale EdN BISE, mars 2016 (14000 Caen, France).

Thèses en cours sur le projet

- Karima Alim : Etudes moléculaires du système 26RFa-GPR103 par une approche pharmacochimique. (co-encadrement, financement de la Région Haute-Normandie au titre des grands réseaux de Recherches CBS).
- Clémence Riva : Mise en évidence de nouveaux composés anti-varroas (50% région Basse-Normandie, 50% VetoPharma) (co-direction).

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Hadjer CHEGHIB (stage M1 – Master de Recherche « Drug Design ») Recherche d'inhibiteurs sélectifs de HIF-2alpha par la technique du criblage par pharmacophore en vue de traitement des glioblastomes.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet Interactions protéine-protéine : La ligue contre le cancer, CRUNCH
 - UMR 6014 CNRS, Rouen (Prof H. Oulyadi, Dr M. Seban)
 - CERMN (Prof S. Rault, Dr AS Voisin-Chiret)
 - BioTICLA Unit, Centre François Baclesse, EA4656, Caen (Dr L. Poulain)
 - UMR 892 Inserm - 6299 CNRS Nantes (Dr P. Juin, Dr F. Gautier)
 - UPMC-CNRS-ENS, Université Paris 6 (Dr. L. Carlier).
- Polypharmacologie - LECMA
 - CERMN (Prof P. Dallemagne, Dr C. Rochais)
 - GMPc, Université de Caen Basse-Normandie (Prof M. Boulouard)
 - IGF, CNRS Université Montpellier, (Dr S. Claysen).
- Projet GPCR
 - Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Vaudry, Dr J. Leprince)
 - Université de Portsmouth (Prof T. Clark)
 - Université de Southampton (Prof J. W. Essex).

11. **Projet : 2005010**

Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : UMR 6519 (REIMS)

Heures.CPU 2016 : 125

- Publications reportées à l'année 2017.

12. **Projet : 2005013**

Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire
Porteur : Isabelle CHATAIGNER
Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT-SAINT-AIGNAN)
Heures.CPU 2016 : 21 894

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Thèse de Karine Pasturaud : « Désaromatisation d'arènes électro-appauvris par additions nucléophiles d'énolates », soutenue le 20 décembre 2016. Financement : LabEx SynOrg.

Thèses en cours sur le projet

- 2016-2019 : Batoul Rkein, Fontionnalisations d'arènes électroappauvris par activation C-H organocatalytique. Financement : région – réseau CRUNCh – support LabEx Synorg.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Programme de collaboration avec Hélène Gérard (LCT, UMR CNRS 7616, UPMC). Étude théorique DFT.
- Programme de collaboration avec Mihaela Gulea (COBRA, UMR CNRS 6014, Université de Rouen). Étude théorique DFT de cycloadditions [4+2].
- Programme de collaboration avec Guillaume Vincent (ICMMO, UMR 8182, Université de Paris-Sud, Orsay) et Xavier Moreau (ILV, UMR CNRS 8180, Université de Versailles- Saint Quentin). Étude de réactions cycloadditions et hétérocycloadditions.

13. Projet : 2005014**Intitulé : Étude des cinétiques des transformations de phases dans les alliages modèles des aciers**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux
Porteur : Cristelle PAREIGE
Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)
Heures.CPU 2016 : 1 321

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Romain Badyka - septembre 2014 - septembre 2017.
- Rapport d'activité CRIANN.

14. Projet : 2006003**Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques
Porteur : Pascale DOMINGO
Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)
Heures.CPU 2016 : 597 652

Publications de rang A

1. G. Ribert, X. Petit, P. Domingo (2016) High-pressure methane-oxygen flames. Analysis of sub-grid scale contributions in filtered equations of state, J. Supercritical Fluids (in press).

2. N. Jaouen, L. Vervisch, P. Domingo, G. Ribert (2016) Automatic reduction and optimisation of chemistry for turbulent combustion modeling: Impact of the canonical problem, *Combust. Flame* (in press).
3. N. Jaouen, L. Vervisch, P. Domingo (2016) Auto-thermal reforming (ATR) of natural gas: An automated derivation of optimised reduced chemical schemes, *Proc. Combust. Inst.*(in press)
4. C. Locci, L. Vervisch (2016) Eulerian scalar projection in Lagrangian point source context: An approximate inverse filtering approach, *Flow Turbulence and Combust.*, 97(1):363-368.
5. L. Cifuentes, C. Dopazo, J. Martin, P. Domingo, L. Vervisch (2016) Effects of the local flow topologies upon the structure of a premixed methane-air turbulent jet flame, *Flow Turbulence and Combust.*, 96(2): 535-546.
6. B. Farcy, L. Vervisch, P. Domingo, N. Perret (2016) Reduced-order modeling for the control of selective non-catalytic reduction (SNCR), *AIChE Journal*, 62(3): 928-938.
7. B. Farcy, L. Vervisch, P. Domingo (2016) Large Eddy Simulation of selective non-catalytic reduction (SNCR): A downsizing procedure for simulating nitric-oxide reduction units, *Chem. Eng. Sci.*, 139:285-303.
8. A. Abou-Taouk, B. Farcy, P. Domingo, L. Vervisch, S. Sadasivuni, L.-E. Ericsson (2016) Optimized reduced chemistry and molecular transport for Large Eddy Simulation of partially premixed combustion in a gas turbine. *Combust. Sci. Tech.* 188(1): 21-39.

Communications dans des congrès internationaux

1. D. Midou, P. Domingo, L. Vervisch (2016) Toward Large Eddy Simulation of a Pulverized Coal Swirl Burner. 11th Int. ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Palermo, Italia, 21-23 Sept.
2. U. Guven, G. Ribert (2016) Large eddy simulation of supersonic H₂-O₂ combustion. 11th Int. ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Palermo, Italia, 21-23 Sept.
3. G. Ribert, L. Bouharaoua, P. Domingo (2016) Large eddy simulation of Cheng's supersonic burner. *SciTech*, 54th AIAA ASM Conference, San Diego, California (USA), AIAA-2016-0439.
4. G. Ribert, X. Petit, P. Domingo (2016) Simulation of high-pressure methane flames. *SciTech*, 54th AIAA ASM Conference, San Diego, California (USA), 2016, AIAA-2016-1935.

Thèses en cours sur le projet

- Eurielle Bossenec, encadrants L. Vervisch / G. Lodato (soutenance prévue mars 2017)
- Dorian Midou, encadrants L. Vervisch / P. Domingo (soutenance prévue mars 2017)
- Nicolas Jaouen, encadrants P. Domingo/L. Vervisch (soutenance prévue mars 2017)
- Bastien Duboc, encadrants P. Domingo/G. Ribert (soutenance prévue mars 2017)
- Umut Güven, encadrant G. Ribert
- Kevin Bioche, encadrants L. Vervisch / G. Ribert
- Loïc Ruan, encadrants P. Domingo / G. Ribert
- Alexandre Bouaniche, encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Jehan David, encadrants P. Domingo/L. Vervisch

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- EM2C, Centrale Supélec, Paris
- DGA
- Région Normandie
- Safran
- Ademe

15. Projet : 2006007**Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 59 742

- Voir projet n° 2012008

16. Projet : 2006011**Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Benjamin DURET

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 1 088 686

Publications de rang A

1. Bouali, Z., Duret, B., Demoulin, F.-X., Mura A., 2016. DNS analysis of small-scale turbulence-scalar interactions in evaporating two-phase flows, International Journal of Multiphase Flow 85, 326 – 335.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. J. Anez, S. Puggelli, N.Hecht, J.Reveillon, F.X. Demoulin and A. Andreini, Liquid atomization modelling in OpenFOAM, submitted for 11th OpenFOAM workshop book, Springer International Publishing AG.

Communications dans des congrès internationaux

1. J. Anez, F.X. Demoulin, N. Hecht, J. Reveillon, 2016, A general purpose LES Model for Atomization, ILASS-Europe, 27th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Brighton, UK.
2. Duret, B., Menard, T., Reveillon, J., Demoulin, F.-X., 2016. Dns analysis of weakly-compressible vaporizing turbulent two- phase flows. 9th international conference on Multiphase Flows (ICMF 2016). Florence, Italy.
3. Hetch, N., Demoulin, F.-X., Reveillon, J., 2016, Towards general purpose LES model for atomization. 9th international conference on Multiphase Flows (ICMF 2016). Florence, Italy.

Communications dans des congrès nationaux

1. Duret, B., Menard, T., Reveillon, J., Demoulin, F.-X., 2016. Etude de la turbulence au sein des écoulements liquide-gaz denses. In : GDR Turbulence. Paris, France.

Thèses en cours sur le projet

- Javier Anez Perdomo : Modeling an Oil Injector for a FCC Reactor.
- Stefano Puggelli : Development of a Quasi Multiphase Eulerian approach for scale resolved simulations for aero-engines combustors.
- Felix Dabonneville : Association of Smoothed Particle hydrodynamics and Eulerian methods for modelling atomization.
- Romain Canu : Simulation numérique directe d'écoulement diphasique avec changement de phase.
- Paul Chausserie Laprée : Simulation aux grandes échelles de sprays issus d'injecteurs haute pression.

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Romain Canu : Développement d'un formalisme DNS diphasique faiblement compressible.
- Safi Bennour : Développement d'une méthode de résolution des particules de taille finie.

17. Projet : 2007001**Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Florent LOUIS

Laboratoire : PC2A (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2016 : 11 768

Publications de rang A

1. MIRADJI F., VIROT F., SOUVI S., CANTREL L., LOUIS F., VALLET V. Thermochemistry of ruthenium oxyhydroxides species and their impact on volatile speciation in severe nuclear accident conditions, *Journal of Physical Chemistry A*, 120, 606-614, 2016.
2. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., CERNUSAK I. A DFT and Ab Initio Investigation of the Oxidation Reaction of CO by IO Radicals *Journal of Physical Chemistry A*, 120, 1737-1749, 2016.
3. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., CERNUSAK I. A Theoretical Study of the Microhydration of Iodic Acid (HOIO₂), *Computational and Theoretical Chemistry*, 1094, 98-107, 2016.
4. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., CERNUSAK I., Computational study of the I₂O₅ + H₂O = 2 HOIO₂ gas-phase reaction, *Chemical Physics Letters*, 662, 114-119, 2016.

Communications dans des congrès internationaux

1. VILLARD A., KHANNICHE S., FORTIN C., ŠKOVIERA J., CANTREL L., ČERNUSÁK I., LOUIS F., Thermochemistry of iodine nitroxides, International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC), Le Havre, 27-30 Juin 2016.
2. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., ČERNUSÁK I., Hydration and reactivity of iodic acid of atmospheric and nuclear issues, 24th International Symposium on Gas Kinetics, York (Royaume Uni), 17-21 Juillet 2016.
3. FORTIN C., LOUIS F., LEBEGUE P., FEVRE-NOLLET V., COUSIN F., CANTREL L., GREGOIRE A.C., Modelling iodine interactions with atmospheric aerosols, European Aerosol Conference, Tours, 4-9 Septembre 2016
4. MIRADJI F., LOUIS F., SOUVI S., VALLET V., CANTREL L., Modelling ruthenium chemistry in primary circuit in severe accident conditions occurring to nuclear power plant, Material Science and Engineering Conference, Darmstadt (Allemagne), 27-29 Septembre 2016.
5. LOUIS F., FORTIN C., KHANNICHE S., VILLARD A., FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P., CANTREL L., COUSIN F., CERNUSAK I., Atmospheric chemistry of iodine from molecular level to chemistry-transport modelling, XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Montevideo (Uruguay), 20-25 Novembre 2016
6. CERNUSAK I., ŠKOVIERA J., NEOGRADY P., LOUIS F., Chemistry of caesium - CASPT2 and coupled cluster studies, XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Montevideo (Uruguay), 20-25 Novembre 2016.

Communications dans des congrès nationaux

1. VILLARD A., KHANNICHE S., FORTIN C., ŠKOVIERA J., CANTREL L., ČERNUŠÁK I., LOUIS F., Thermodynamic properties of iodine nitroxides (INO_y), Groupe de Cinétique et de Photochimie en Phase Gazeuse, Reims, 31 Mai - 1 Juin 2016.
2. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., ČERNUŠÁK I., Theoretical investigation of hydration and reactivity of iodic acid, Groupe de Cinétique et de Photochimie en Phase Gazeuse, Reims, 31 Mai - 1 Juin 2016

3. FORTIN C., FEVRE-NOLLET V., LOUIS F., COUSIN F., CANTREL L., LEBEGUE P., Modélisation de la chimie de l'iode dans l'atmosphère, Groupe de Cinétique et de Photochimie en Phase Gazeuse, Reims, 31 Mai - 1 Juin 2016.
4. FORTIN C., FEVRE-NOLLET V., LOUIS F., COUSIN F., CANTREL L., LEBEGUE P., Chimie-transport de l'iode radioactif dans l'atmosphère lors d'un accident nucléaire, Congrès National de la Recherche en IUT (CNRIUT 2016), Nantes, 8-9 Juin 2016.

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Faoulat Miradji " Quantum Modelling of Ruthenium Chemistry in the field of Nuclear Power Plant Safety" le 05/12/16.

Thèses en cours sur le projet

- Jan Skoviera, Etude théorique de la formation de clusters $CsxHy$, 2012-2017 (thèse en co-tutelle, France-Slovaquie).
- Camille Fortin, Etude de l'interaction iode/atmosphère, 2015-2018, (bourse Lille1).

Stages de Master en 2016 sur le projet

- NIANG A., Etude de la microhydratation de l'acide iodeux HOIO, Mai-Juin 2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Université Comenius de Bratislava : groupe du professeur Ivan CERNUSAK.

18. Projet : 2007013**Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Sébastien PETIT

Laboratoire : CRISMAT - UMR 6508 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 531 704

Publications de rang A

1. Marie-Bernadette Lepetit, How to compute the magneto-electric tensor from ab-initio calculations?, Theor. Chem. Acc 1 135 (2016).
2. L. Palatinus, P. Brazda, P. Boullay, O. Perez, S. Petit, V. Eigner, M. Zaarour, S. Mintova, Hydrogen positions in single nanocrystals revealed by electron diffraction, acceptée dans Science.
3. V. Granata, L. Capogna, F. Forte, M.-B. Lepetit, R. Fittipaldi, A. Stunault, M. Cuoco et A. Vecchione, Spin-Orbital Nature of the High-Field Magnetic State in the $Sr_4 Ru_3 O_{10}$, Phys. Rev. B 93, 115128 (2016).
4. M. Saubanère, M. B. Lepetit, G. M. Pastor, Interaction-energy functional of the Hubbard model: Local formulation and application to low-dimensional lattices, Phys. Rev. B 94, 045102 (2016).

19. Projet : 2008005**Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2016 : 9 311

- Voir projet n° 2015007

20. Projet : 2008013**Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Yves D'ANGELO

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 77 570

Publications de rang A

1. P. Bénard, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo, Large-Eddy Simulation of a hydrogen enriched methane/air meso-scale combustor, International Journal of Hydrogen Energy, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.11.206>

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Aurélie Louis-Napoléon. Déstabilisation thermique d'une couche granulaire diphasique. Stage en collaboration avec Université de Valencia, Espagne. Prix de thèse de Master 2017 de l'Association française des utilisateurs OpenFoam® (FOAM-U).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec Manuel Porcar , Université de Valencia (en Espagne).

21. Projet : 2008018**Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Alexis COPPALLE

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 1 077

22. Projet : 2010006**Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 138

Publications de rang A

1. G. Lhoutellier, D. Ledue, R. Patte and V. Baltz, Monte Carlo investigation of how interfacial magnetic couplings affect blocking temperature distributions in exchange bias bilayers, *J. Appl. Phys.*, 120, 193902 (2016).

Communications dans des congrès nationaux

1. G. Lhoutellier, D. Ledue, R. Patte and V. Baltz, Influence de l'interface sur les distributions de température de blocage de bicouches ferromagnétiques/antiferromagnétiques : Etudes par simulations Monte-Carlo, XVII Colloque Louis Néel, Saint-Dié-des-Vosges (29/03-01/04/2016).

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de H. Kanso, débutée en octobre 2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- V. Baltz, SPINTEC, Université Grenoble-Alpes/CNRS/INAC-CEA, 38000 Grenoble.

23. Projet : 2011001**Intitulé : Étude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2016 : 43 982

Communications dans des congrès nationaux

Séminaires d'Universités

- Lithium or Nickel in Carbometallation: Make your choice. Université de Kyoto (le 19 mai 2016 à Kyoto, Japon).
- Lithium or Nickel in Carbometallation: Make your choice, Université d'Okayama (le 21 mai 2016 à Okayama, Japon).
- Lithium ou Nickel en carbométallation: Au choix. Université de Nantes (le 16 juin 2016 à Nantes).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Université de Caen : laboratoire de chimie moléculaire et thio-organique (Doctorant A. Chardon).
- Université de Strathclyde (Glasgow) : Prof Eva Evia

24. Projet : 2011007**Intitulé : Modélisation multi-échelle de nano-systèmes**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Florent CALVAYRAC

Laboratoire : LPEC (LE MANS)

Heures.CPU 2016 : 37 519

Publications de rang A

1. F. Wang, Y. Yao, F. Calvayrac, and F. Zhang, "Extraction of state-resolved information from systems with a fractional number of electrons within the framework of time-dependent density functional theory," The Journal of Chemical Physics, vol. 145, no. 11, p. 114104, Sep. 2016.

Communications dans des congrès internationaux

1. Florent Calvayrac, Structure, magnetism, thermal and optical properties of some functionalized iron oxide nanoparticles and clusters of medical and industrial interest Conférence DYSON2016, Bad Ems (Allemagne) octobre 2016.

Thèses en cours sur le projet

- Tang Nguyen Van « Aimants permanents à base de Fe et Mn ».
- Charline Lema Embolo « optimisation et couplage multiéchelle de codes de mécanique quantique et mécanique moléculaire ».

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Eric Surraud, Laboratoire de Physique Théorique, UPS Toulouse.
- Souad Ammar, ITODYS, Université Paris 7.

25. Projet : 2012006**Intitulé : Simulation haute-fidélité de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Vincent MOUREAU

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 660 984

Publications de rang A

1. Bénard, P., Moureau, V., Lartigue, G. & D'angelo, Y. (2017) Large-eddy simulation of a hydrogen enriched methane/air meso-scale combustor. Int. J. of Hydrogen Energy, in press.
2. Lefebvre, A., Larabi, H., Moureau, V., Lartigue, G., Varea, E., Modica, V. & Renou, B. (2016) Formalism for spatially averaged consumption speed considering spherically expanding flame configuration. Comb. and Flame 173, 235 – 244.
3. Zmijanovic, V., Mendez, S., Moureau, V. & Nicoud, F. (2016) About the numerical robustness of biomedical benchmark cases : Interlaboratory fda's idealized medical device. International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering pp. n/a–n/a, cnm.2789.
4. Bénard, P., Balarac, G., Moureau, V., Dobrzynski, C., Lartigue, G. & D'Angelo, Y. (2016) Mesh adaptation for large-eddy simulations in complex geometries. International Journal for Numerical Methods in Fluids, pp. n/a–n/a, fld.4204.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Dufresne, Y., Moureau, V., Masi, E., Simonin, O. & Horwitz, J. (2016) Simulation of a reactive fluidized bed reactor using cfd/dem. CTR Summer Program. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.

Communications dans des congrès internationaux

1. Lartigue, G., Moureau, V. & Benard, P. (2016) Toward large-eddy simulation of complex burners with exascale super-computers : A few challenges and solutions. SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP16). Paris, France.
2. Legrand, N., Lartigue, G. & Moureau, V. (2016) A geometric multi-grid frame- work for the extraction of large-scale vortices in turbulent flows. application to the massively parallel les of a low-mach number turbine blade. ERCOFTAC ETMM11 international confe- rence. Sicily, Italy.
3. Moureau, V., Lartigue, G. & Benard, P. (2016) Hpc for large-scale unsteady simulations of turbulent reacting multi-phase flows : challenges and perspectives. Plateform for Advanced Scientific Computing (ACM PASC16) conference. Lausanne, Switzerland.
4. Moureau, V., Lartigue, G. & Benard, P. (2016) Large-eddy simulation of turbulent reacting flows using massively parallel computers : a load-balancing challenge. Séminaire à la Maison de la Simulation. Saclay, France.
5. Roger, T., Lartigue, G. & Moureau, V. (2016) An asymptotic-preserving and semi-implicit pressure-based compressible solver for flows at all mach numbers. ERCOFTAC ETMM11 international conference. Sicily, Italy.

Thèses en cours sur le projet

- 2015-2018: Y. Dufresne, "Modeling of granular flows with heat and mass transfers". MORE4LESS ANR project. PhD director : Prof Mourad Boukhalfa.
- 2015-2018: N. Legrand, "Higher-order methods for multi-level Large-Eddy Simulation". ELCI project funded by "Investissements d'Avenir". PhD director : Prof Alain Berlemont.
- 2014-2017: L. Boulet, "Conjugate heat transfer modeling of casing fire tests". TURBOMECA / DGAC funding. PhD director : Prof Mourad Boukhalfa.
- 2014-2017: H. Larabi, "Auto-adaptive simulation of spray flames". Normandy region funding. PhD director : Prof Mourad Boukhalfa.
- 2013-2017: T. Roger, "Semi-implicit time integration of the Navier-Stokes equations". SNECMA research project. PhD director : Prof Luc Vervisch.
- 2016-2019: P. Domingo, "Modeling of high pressure combustion", Chaire ANR/SAFRAN, PhD director : F. Grisch.
- 2017-2020: F. Gava, "Optimization of unstructured CFD on modern architectures", FUI ICARUS, PhD director: Prof Alain Berlemont.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Groupement d'Intérêt Scientifique SUCCESS: CORIA, LEGI, I3M, EM2C, IMFT, LMAP, CERFACS, IFP-EN
- Intel Exascale Computing Research Lab et Université de Versailles Saint-Quentin-En-Yvelines

26. Projet : 2012008**Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 616 345

Publications de rang A

1. M. Lavrskyi, H. Zapolsky, A.G. Khachaturyan « Quasiparticle Approach to Diffusional Atomic Scale Self-Assembly of Complex Structures: from Disorder to Complex Crystals and Double Helix Polymers », Nature Partner Journal Computational Materials, 18 janvier, 2016.

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Zapolsky, M. Lavrsky , A.G. Khachaturyan, « Atomistic-based Continuum Model of Spontaneous Self-assembly and Dynamics of Double Helix Polymers » , TMS 2016, Nashville.
2. H. Zapolsky, M. Lavrsky, F. Danoix, R. Patte, A.G. Khachaturyan, « Atomistic modeling and experiments of spinodal decomposition in Fe-Ni-C martensite » , TMS 2016, Nashville.
3. A. Vaugeois, H. Zapolsky, O. Kapikranian, R. Patte, « Atomic Density Function modeling of segregation at grain boundaries in α iron », 6th International Conference on Recrystallisation and Grain Growth , July 17 - 21, 2016, Pittsburgh, USA
4. A. Vaugeois, H. Zapolsky, O. Kapikranian, R. Patte, Atomistic modeling of grain boundaries phenomena in α -iron , Workshop NANODE, 28 - 29 septembre 2016, Karlsruhe, Allemagne
5. H. Zapolsky, «Atomistic et mesoscopic modeling of phase transition » International Workshop on "Experimental investigation and modelling of nanoscale solid state reactions with technological impact" at Empa, Switzerland from 31.8. to 2.9.2016 (conférence invitée)
6. H. Zapolsky, A. Vaugeois, A. Kapikranyan, R . Patte, « Atomistic modeling of point defects absorption and diffusion in alpha-iron grain boundaries » , NMJ 2016, Niagara Falls, Canada, 24-27 September 2016. (conférence invitée)
7. G. Demange, M. Lavrskyi, R. Patte, H. Zapolsky, Atomistic Modelling of Self-Assembly Kinetics of Complex Structures , Materials Science and Engineering, Darmstadt, Germany, September 27th - 29th 2016 (conférence invitée)

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Mykola Lavrskyi
- Thèse de Antoine Vaugeois

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- A.G. Khachaturyan (Rutgers University, USA)
- Z. Elderiy (Université de Debrecen, Hongrie)
- P. Maugis (Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence, Marseille)
- M. Gouné (Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux, Bordeaux)
- S. Cazottes (Matériaux Ingénierie et Sciences, Lyon)
- T. Epicier (Matériaux Ingénierie et Sciences, Lyon)
- M. Brunel (CORIA, Rouen)

27. Projet : 2012013**Intitulé : Simulation STEM - HAADF**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Williams LEFEBVRE

Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 1 182

Communications dans des congrès internationaux

1. W. Lefebvre, F. Moyon, A. Normand, N. Rolland, I. Blum, A. Etienne, C. Castro, F. Cuvilly, I. Mouton, L. Mancini, L. Rigutti, F. Vurpillot, Correlative investigations by HAADF-STEM and Atom Probe Tomography Conférence invitée au congrès EMC 2016 (European Microscopy Congress, Lyon 2016). Thèses soutenues en 2016 sur le projet
- Florian Moyon, Contribution méthodologique à l'analyse tridimensionnelle de nano-objets. Thèse présentée à l'Université de Rouen en décembre 2016. Directeur de thèse : Williams Lefebvre, Groupe de Physique des Matériaux, UMR 6634.

28. Projet : 2012016**Intitulé : Classification de molécules**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Luc BRUN

Laboratoire : GREYC - UMR 6072 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 36 185

29. Projet : 2013005**Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Hélène LAVANANT

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2016 : 78 873

Thèses en cours sur le projet

2015-2018 : Sébastien HUPIN, Caractérisation de polyoxométallates hybrides organiques-inorganiques par mobilité ionique et spectrométrie de masse. Financement : MESR

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Institut Parisien de Chimie Moléculaire, CNRS UMR 8232 Sorbonne Universités, UPMC-Paris06, 4 Place Jussieu, F-75005 Paris, Prof. A Proust, Dr. G. Izzet, Dr. L. Bouteiller, M. Piot.

30. Projet : 2013006**Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Carole Le GUYADER

Laboratoire : LMI - EA 3226 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 4 063

Thèses en cours sur le projet

- 2015-2018 : Noémie Debroux, Mathematical Modelling of Image Processing Problems : Theoretical Studies and Applications to Joint Registration, Segmentation.

31. Projet : 2013010**Intitulé : Modélisation numérique de l'impact hydro-sédimentaire de l'implantation de systèmes récupérateurs d'énergie**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Anne-Claire BENNIS

Laboratoire : M2C - Caen - UMR 6143 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 94 595

Thèses en cours sur le projet

Thèse de Hans Gunnoo : Etudes des structures spatio-temporelles dans un sillage de mât conditionnées par l'action commune des vagues et des courants. 2014-2017.

32. Projet : 2013019**Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Lionel SOULHAC

Laboratoire : LMFA - UMR 5509 (ÉCULLY)

Heures.CPU 2016 : 83 651

Communications dans des congrès internationaux

1. Nguyen, C.V., Soulhac, L., 2016, Implementation and application of source apportionment approach in the SIRANE urban air quality model, Proceeding 17th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion modelling for Regulatory Purposes
2. Nguyen, C.V., Soulhac, L., 2016, Evaluation of data assimilation methods at urban scale with the SIRANE model, Proceeding 17th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion modelling for Regulatory Purposes

Thèses en cours sur le projet

- Chi Vuong NGUYEN, Assimilation de données et couplage d'échelles pour la simulation de la dispersion atmosphérique en milieu urbain, 2013 - 2017

33. Projet : 2014002

Intitulé : Amélioration des propriétés mécaniques, thermiques et électriques des matériaux composites renforcés par des inclusions rigides métallisés et thermiquement conducteurs par le biais de la simulation numérique et technique homogénéisation multi-échelles.

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Philippe KARAMIAN

Laboratoire : LMNO - UMR 6139 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 5 009

Communications dans des congrès internationaux

1. International Conference on Computational Methods, 2016, Berkeley Californie, USA, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics Montreal, Canada, 2016

Thèses en cours sur le projet

- Sophie Lemaitre, Modélisation des matériaux composites multiphasiques à microstructures complexes. Étude des propriétés effectives par des méthodes d'homogénéisation.

34. Projet : 2014003

Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Caen - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 371 655

Voir autre projets (2014007 et 2016009)

35. Projet : 2014005

Intitulé : Validation et évaluation d'un nouveau solveur explicite cartésien pseudo-compressible à raffinement adaptatif (AMR) massivement parallèle. Application à la simulation d'une hydrolienne.

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : David LETOUZE

Laboratoire : LHEEA (NANTES)

Heures.CPU 2016 : 684 451

Publications de rang A

1. B. Elie, G. Oger, P.-E. Guillermin, B. Alessandrini, Simulation of Horizontal Axis Tidal Turbine wakes using a weakly-compressible Cartesian Finite volume solver with local mesh refinement, Renewable Energy, Volume 108, pp. 336–354, 2017.

Communications dans des congrès internationaux

1. B. Elie, G. Oger, D. Le Touzé, Importance of a high-order spatial scheme for the simulation of tidal turbine wakes. VII International Conference on Computational Methods in Marine Engineering, 2017.

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Stage de Master 2 (6 mois, avril à septembre 2016). Sujet: Étude de l'optimisation de l'architecture et du pilotage d'une ferme d'hydroliennes. Mise en place d'une boucle d'optimisation multi-critères et application à l'étude d'une ferme pilote.

36. Projet : 2014007**Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2016 : 817 550

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Équipe de Cristallographie et de simulation des Matériaux, Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Université Abderrahmane Mira de Bejaia (Algérie).
- Département de Physique, Université Aristote de Thessalonique (Grèce).
- Institut P', CNRS UPR 3346, Université de Poitiers (France).

37. Projet : 2014010**Intitulé : Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Alexandre VIVET

Laboratoire : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2016 : 7 885

Thèses en cours sur le projet

- Etonam TOSSOU – Financement MESR – début thèse octobre 2015 - Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.
- Meriem FEHRI – Financement Etat tunisien - début thèse mars 2015 – Co-tuelle ENI Sfax et Unicaen - Flambement des poutres composites renforcées par des fibres naturelles et/ou conventionnelles.

38. Projet : 2015001**Intitulé : Simulation numérique avancée de condensats de Bose-Einstein**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Ionut DANAILA

Laboratoire : LMRS UMR 6085 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 98 522

Publications de rang A

1. Guillaume Vergez, Ionut Danaila, Sylvain Auliac, Frédéric Hecht. A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation. *Computer Physics Communications*, Vol 209, pp. 144-162, 2016.
2. Ionut Danaila, Amin Khamsehchi, Vandna Gokhroo, Peter Engels, Panayotis Kevrekidis. *Physical Review A* 94 (2016), pp. 053617 (1-8).
3. Ionut Danaila, Felix Kaplanski, Sergei Sazhin. A model for confined vortex rings with elliptical core vorticity distribution. À paraître dans *Journal of Fluid Mechanics*, 2016.

Communications dans des congrès internationaux

1. I. Danaila, P. Parnaudeau, High performance computing of the 3D structure of Bose Einstein condensates, *Workshop on Computation Of Quantum Systems In Cold-matter Physics And Chemistry*, February 2016, The Fields Institute, Toronto.
2. G. Vergez, I. Danaila, S. Auliac, F. Hecht, A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation, *Workshop on Computation Of Quantum Systems In Cold-matter Physics And Chemistry*, February, 2016, The Fields Institute, Toronto.
3. Ionut Danaila, Sobolev gradient methods for solving minimisation problems in fluid or superfluid systems, *Conference on Novel Developments in Evolutionary Partial Differential Equations*, King Abdullah University of Science and Technology, Saudi Arabia, November 2016.
4. Ionut Danaila, Finite-element tools for the simulation of Bose-Einstein condensates *International Workshop on Nonlinear Partial Differential Equations and Scientific Computing*, Beijing Computational Science Research Center, July 2016.

Thèses en cours sur le projet

- Guillaume VERGEZ, co-encadement Univ Rouen (75%, I. Danaila) et UPMC (25%, F. Hecht) : Méthodes numériques pour la simulation de condensats de Bose-Einstein. Soutenance prévue en mars 2017.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- ANR BECASIM 2013-2017 (21 chercheurs permanents + 5 post-docs + 1 thésard) : 10 laboratoires de mathématiques.
Participation à ce projet pour les aspects techniques : Philippe PARNAUDEAU, Ingénieur de recherche CNRS, UMPC, Laboratoire Pprime, Poitiers (développeur principal du code GPS dans le cadre du projet BECASIM).

39. Projet : 2015004**Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 246 990

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Al Baalkaky, D. Ledue, R. Patte, Monte Carlo investigation of the coupling between ferroelectric polarization and magnetic order of the multiferroic CuCrO_2 , Magnetism and Magnetic Materials (MMM) 2016, Nouvelle Orléans (USA), 31/10-04/11/2016, (communication orale).

Communications dans des congrès nationaux

1. A. Al Baalkaky, D. Ledue, R. Patte, R. Frésard, Monte Carlo investigation of the coupling between ferroelectric polarization and magnetic order of the multiferroic $\text{CuCr}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_2$, ($0 \leq x \leq 0.3$), XVII Colloque Louis Néel, Saint-Dié-des-Vosges (29/03-01/04/2016).

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de A. Al Baalbaky, débutée en novembre 2014, Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- R. Frésard, CRISMAT, ENSICAEN, 14050 CAEN.
- Y. Kvashnin, Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, 751 20 Uppsala (Suède).

40. Projet : 2015005**Intitulé : Taylor-Couette turbulent avec transfert de chaleur**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Jorge PEIXINHO

Laboratoire : UMR 6294 (LE HAVRE)

Heures.CPU 2016 : 736 090

Publications de rang A

1. K. Selvam, J. Peixinho and A. P. Willis, Flow in a circular expansion pipe flow: effect of a vortex perturbation on localized turbulence, Fluid Dynamics Research, 48, 061418 (2016).

Communications dans des congrès internationaux

1. E. Öngüner, E.-S. Zanoun, M. Dittmar, P. Meyer, K. Selvam, J. Peixinho and C. Egbers, An overview of turbulence pipe flow activities in Cottbus large-pipe facility, EuHIT (European High-Performance Infrastructure in Turbulence) Conference, Max Planck Institute for Dynamics and Self-Organization, Göttingen, Germany (2016).

Communications dans des congrès nationaux

1. J. Peixinho, Transition to turbulence in circular expansion pipe flow, GdR (Groupe de Recherche) Turbulence, Paris, juin 2016.

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Kamal SELVAM, Transition to turbulence in circular expansion pipe flow, Thèse de doctorat de Normandie Université soutenue le 7/10/2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec Ashley P. Willis, School of Mathematics and Statistic, University of Sheffield, Grande-Bretagne sur les aspects théoriques et numériques.
- Participation au projet : "Turbulence development of the high Reynolds number flow" du programme EuHIT (European High-Performance Infrastructures in Turbulence) avec le CFTM2 (Center for Flow and Transport Modeling and Measurements) de la Brandenburgische Technische Universität de Cottbus en Allemagne.

41. Projet : 2015007**Intitulé : Structure et Dynamique dans les mélanges liquides ioniques/solvants moléculaires**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2016 : 2 131 287

Publications de rang A

1. B. Marekha, V. Koverga, E. Chesneau, O. Kalugin, T. Takamuku, P. Jedlovszky, A. Idrissi, Local structure in terms of nearest-neighbor approach in 1-Butyl-3-methylimidazolium- Based ionic liquids: MD simulations, J Phys Chem B 120 (2016) 5029 – 5041.

42. Projet : 2015008**Intitulé : Etude théorique d'une surface de silice modifiée et rationalisation des interactions phase stationnaire/composé aromatique cible.**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Pascal CARDINAEL

Laboratoire : SMS - UPRES EA 3233 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2016 : 23 287

Publications de rang A

1. Schammé, B.; Mignot, M.; Couvrat, N.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Dupray, V.; Delbreilh, L.; Dargent, É.; Coquerel, G. Molecular Relaxations in Supercooled Liquid and Glassy States of Amorphous Quinidine: Dielectric Spectroscopy and Density Functional Theory Approaches. J. Phys. Chem. B, 2016, 120, 7579–7592. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04242).

Communications dans des congrès internationaux

1. Mignot, M.; Schammé, B.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Tchaplal, A.; Mercier, O.; Cardinael, P.; Peulon-Agasse, V., Using DFT approaches to investigate the enhanced aromatic selectivity of new antracényl polar embedded stationary phases for Liquid Chromatography, ESCB1, Rouen, August 29th-September 2nd.
2. Mignot, M.; Schammé, B.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Tchaplal, A.; Mercier, O.; Cardinael, P.; Peulon-Agasse, V.; New insights for the development of polar-embedded aromatic stationary phases, Journées Nord-Ouest Européennes des Jeunes Chercheurs, Lille, 2016, June, 9-10th.

- Mignot, M.; Schammé, B.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Tchapla, A.; Mercier, O.; Cardinael, P.; Peulon-Agasse, V. ; New polar-embedded aromatic stationary phases for HPLC, IX^{èmes} journées scientifiques du Club Jeunes de l'AFSEP, Rouen, 2016, April, 18-19th.
- Communication par affiche :
New polar-embedded aromatic core-shell stationary phases for high-performance liquid chromatography Mignot, M.; Schammé, B.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Tchapla, A.; Mercier, O.; Cardinael, P.; Peulon-Agasse, V. HPLC 2016, San Francisco, 2016, June, 19-24th.

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- MIGNOT Mélanie : Elaboration de phases stationnaires pour la chromatographie liquide haute performance : Synthèse, caractérisation, et évaluation des propriétés chromatographiques des colonnes. Date de soutenance : 01 Décembre 2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Dr. Vincent Tognetti, Pr. Laurent Joubert, Dr. Valérie Peulon Agasse, Pr. Pascal Cardinael.

43. Projet : 2015009

Intitulé : Rationalisation du moment dipolaire de deux molécules pharmaceutiques durant la rotation de groupements flexibles.

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Samuel PETIT

Laboratoire : SMS - UPRES EA 3233 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2016 : 64 614

Publications de rang A

- Schammé, B.; Mignot, M.; Couvrat, N.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Dupray, V.; Delbreilh, L.; Dargent, É.; Coquerel, G. Molecular Relaxations in Supercooled Liquid and Glassy States of Amorphous Quinidine: Dielectric Spectroscopy and Density Functional Theory Approaches. J. Phys. Chem. B, 2016, 120, 7579–7592. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04242).

Communications dans des congrès internationaux

- Schammé, B.; Mignot, M.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Couvrat, N.; Dupray, V.; Delbreilh, L.; Dargent, E.; Coquerel, G., "On the Molecular Origin of a Sub-Tg Relaxation in an Amorphous Pharmaceutical: Density Functional Theory (DFT) Approach", European Symposium on Chemical Bonding, ESCB1, 29 Août au 02 Septembre, 2016, Rouen (France).

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Benjamin Schammé : Mobilité Moléculaire, Mécanismes de Cristallisation et Stabilité Physique de Composés Pharmaceutiques Amorphes : Impact des Méthodes de Préparation. Date de soutenance : 02 Décembre 2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Dr. Vincent Tognetti, Pr. Laurent Joubert, Dr. Valérie Dupray, Dr. Laurent Delbreilh.

44. Projet : 2015011**Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes.**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Anne-Claire BENNIS

Laboratoire : M2C - Caen - UMR 6143 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 41 189

Voir projet n° 2013010

45. Projet : 2015012**Intitulé : Exposition aux dioxines et risque de cancer du sein (Projet GEO3N). Modélisation de la dispersion des dioxines dans différents milieux pour le développement et la validation d'un score d'exposition applicable dans des études épidémiologiques.**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Béatrice FERVERS

Laboratoire : Centre de Lutte contre le cancer de Lyon et de Rhône-Alpes (LYON)

Heures.CPU 2016 : 21 537

Communications dans des congrès internationaux

1. T. Coudon, P. Salizzoni, C-V. Nguyen, N. Dalleau, B. Fervers ; Reconstructing past and present dioxins atmospheric pollution scenarios in the city of Lyon ; Transport & Air pollution 2016, 24-26 mai 2016 // Lyon - Ecole Normale Supérieure de Lyon (communication orale).
2. T. Coudon, E. Faure, A. Danjou, P. Salizzoni, B. Fervers ; Development of a GIS based exposure metric to assess environmental dioxin exposure and comparison with an urban Gaussian model ; 28th Annual Conference International Society for Environmental Epidemiology 2016, 03/09/2016 // Rome, Italy (communication orale).
3. T. Coudon, P. Salizzoni, C-V. Nguyen, N. Dalleau, B. Fervers ; Determination of a geographic information system based indicator to assess environmental dioxins exposure in Lyon and through comparisons with an atmospheric dispersion model results, IARC 50th Anniversary Conference 2016, 7-9 juin 2016 // Lyon - Ecole Normale Supérieure de Lyon (communication par affiche).

Communications dans des congrès nationaux

1. T. Coudon, P. Salizzoni, C-V. Nguyen, N. Dalleau, B. Fervers ; Determination of a geographic information system based indicator to assess environmental dioxins exposure in Lyon and through comparisons with an atmospheric dispersion model results ; 7ème Congrès national Santé et Environnement : Qualité de l'air et santé, 28-29 novembre 2016, Strasbourg (communication orale).
2. T. Coudon, P. Salizzoni, C-V. Nguyen, N. Dalleau, B. Fervers ; Développement d'un SIG pour l'estimation de l'exposition aux dioxines et la comparaison avec un modèle gaussien (SIRANE) ; Journée thématique Santé-Environnement, 6 juillet 2016, Grenoble – Université Grenoble-Alpes (communication orale).
3. T. Coudon, P. Salizzoni, C-V. Nguyen, N. Dalleau, B. Fervers ; Reconstructing past and present dioxins atmospheric pollution scenarios in the city of Lyon ; 7ème Congrès national Santé et Environnement : Qualité de l'air et santé, 28-29 novembre 2016, Strasbourg.
4. T. Coudon, E. Faure, A. Danjou, F. Clavel-Chapelon, P. Salizzoni, B. Fervers, Construction et validation d'un SIG pour l'estimation de l'exposition aux dioxines ; Journée médico-scientifique du Centre Léon Bérard, 23 septembre 2016, Lyon.

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Aurélie Danjou : Dioxin exposure and breast cancer risk in the E3N cohort: multi-source exposures and timing of exposure ; sous la direction de Beatrice Fervers et de Laure Dossus, soutenue publiquement le 12/12/2016.

Thèses en cours sur le projet

- Thomas Coudon : Développement et validation d'un score d'exposition aux dioxines pour une application dans des études épidémiologiques ; sous la direction de Beatrice Fervers et de Pietro Salizzoni. Date prévisionnelle de soutenance : février 2018.

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Hassan Hourani : Exposition chronique au cadmium dans l'air ambiant et risque de cancer du sein ; Avril - Septembre 2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Equipe AIR – École Centrale de Lyon : Pietro Salizzoni, Maître de conférences à l'école centrale de Lyon ; Chi-Vuong NGUYEN, doctorant à l'école centrale de Lyon.
- AASQA AURA Auvergne Rhône-Alpes : Nicolas Dalleau, ingénieur en environnement.
- Météo France : AUFFRAY Annick.
- E3N : Francesca Mancini, PhD épidémiologie.

46. Projet : 2016002**Intitulé : FireDiag**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Emilien VAREA

Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 3 484

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- ANR Firediag.

47. Projet : 2016006**Intitulé : Etude de cycles catalytiques impliquant le nickel**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Aurélien MONCOMBLE

Laboratoire : LASIR (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2016 : 193

Publications de rang A

5. F. Rebih, M. Andreini, A. Moncomble, A. Harrison-Marchand, J. Maddaluno, M. Durandetti, Direct carboxylation of aryl tosylates by CO₂ catalyzed by in situ-generated Ni⁰, Chem. Eur. J. 22 (2016) 3758 - 3763.

48. Projet : 2016007**Intitulé : Modélisation lagrangienne de l'accélération dans un écoulement cisailé homogène à grand nombre de Reynolds**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Mikhael GOROKHOVSKI

Laboratoire : LMFA - UMR 5509 (ÉCULLY)

Heures.CPU 2016 : 84 000

49. Projet : 2016008**Intitulé : Étude des oscillations hydroclimatiques en Europe**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Nicolas LECOQ

Laboratoire : M2C - Mont-Saint-Aignan - UMR 6143 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2016 : 184

50. Projet : 2016009**Intitulé : Modélisation structurales et électronique de l'interface InAlN/GaN pour l'application aux transistors de haute mobilité électronique**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2016 : 5 691

Publications de rang A

1. B. Ben Doudou, J. Chen, A. Vivet, C. Poilâne, Ab initio study of chemical bond interactions between covalently functionalized carbon nanotubes via amide, ester and anhydride linkages, Solid State Sciences, 53, p56–62 (2016).

Thèses en cours sur le projet

- 2015-2018 : Ranim MOHAMAD, Modélisation structurale et électronique de l'interface InAlN/GaN pour application au transistors de haute mobilité électronique.
- 2015-2018 : Siqian LI,, The atomic structure of inversion domains and grain boundaries in wurtzite semiconductors: an investigation by atomistic modelling and high resolution transmission electron microscopy.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Huaping LEI, Key Laboratory of Materials Physics Institute of Solid State Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, P.R. China.

51. Projet : 2016010**Intitulé : Cinétique des inhibiteurs de protéines kinases et Affinité par Docking**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Samia ACI SECHE

Laboratoire : ICOA UMR CNRS 7311 (Orléans)

Heures.CPU 2016 : 311

Voir projet n° 2016011

52. Projet : 2016011**Intitulé : Prédiction des constantes cinétiques de liaison des inhibiteurs de protéine kinase par des simulations de dynamique moléculaire (KinetiX4PKI)**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Samia ACI SECHE

Laboratoire : ICOA UMR CNRS 7311 (Orléans)

Heures.CPU 2016 : 5 189

Publications de rang A

1. Advanced molecular dynamics simulation methods for kinase drug discovery, 2016, Future Medicinal Chemistry, 545-566.

Communications dans des congrès internationaux

1. Braka, A. ; Aci-Sèche, S. ; Bourg, S. ; Garnier, N. ; Bonnet, P., Computational study of ligand-receptor binding process using enhanced molecular dynamics simulations, 21st European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship sept. 2016 - Verona (Italy).

Communications dans des congrès nationaux

1. Braka, A. ; Aci-Sèche, S. ; Bourg, S. ; Garnier, N. ; Bonnet, P., Étude par simulations de dynamique moléculaire de la cinétique du processus d'association récepteur-ligand, 29ème Colloque Biotechnocentre, oct. 2016 - Seillac.
2. Braka, A. ; Aci-Sèche, S. ; Champiré, A. ; Bourg, S. ; Vallée, B. ; Benedetti, H. ; Plé, K. ; Routier, S. ; Garnier, N. ; Bonnet, P., Structure-based design of LIM kinase inhibitors, Journée Fédération de Recherche Physique et Chimie du Vivant – FR2708, janv. 2016 - Orléans.

Thèses en cours sur le projet

- Projet ChADock: Cinétique des inhibiteurs de protéines kinases et Affinité par Docking flexible (2014-2017)
- Prédiction des constantes cinétiques des inhibiteurs de protéines kinases par des méthodes de simulation de dynamique moléculaire (2015-2018).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Institut de Recherche Servier.

53. Projet : 2016013**Intitulé : Diffusion atomique sous champ électrique extrême**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Francois VURPILLOT

Laboratoire : GPM - UMR 6634 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2016 : 8 768

54. Projet : 2016014**Intitulé : Caractérisation hydrodynamique (écoulement et turbulence) des sites hydroliens et étude des effets de sillage des turbines par simulations numériques**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Sylvain GUILLOU

Laboratoire : CERMN - UNICAEN EA 4258 (CAEN)

Heures.CPU 2016 : 12 877

Communications dans des congrès nationaux

1. Grondeau M., Mercier P., Guillou S., Méar Y., Poirier J.C. et Poizot E., Quelle turbulence ambiante pour la simulation numérique LBM-LES d'un environnement hydrolien? 15ème journées de l'hydrodynamique, Brest, 2016, 11p (CDROM).
2. Bourgoin A., Guillou S., Ata R., Thiebot J., Benhamadouche S., Développement d'une méthode LES avec TELEMAC-3D pour la simulation régionale des sites hydroliens. 15ème journées de l'hydrodynamique, Brest, 2016, 12p (CDROM).

Thèses en cours sur le projet

- Grondeau Mikael. Modélisation fine des effets de sillage et de la dynamique sédimentaire en faible profondeur, en conditions de courant et d'agitation extrêmes.: thèse CIFRE en collaboration avec DCNS-Research (Sirhena, Nantes). Jan. 2016-dec. 2018. Directeurs : S. Guillou et Y. Méar. Co-encadrant : E. Poizot.
- Bourgoin Adrien. Modélisation de la turbulence engendrée par la bathymétrie dans le Raz Blanchard : Approche régionale avec TELEMAC-LES. mars. 2016-fev. 2019. Directeurs : Sylvain Guillou et Yann Méar, Co-encadrants : R. Ata, J. Thiébot, S. Benhamadouch (démarrage le 17 mars 2016).
- Mercier Philippe. Modélisation de la turbulence engendrée par la bathymétrie dans le Raz Blanchard : Approche locale (LBM-LES). Mars 2016-fev. 2019. Financement: projet ANR EMR-ITE THYMOTE. Directeur : Sylvain Guillou , Co-encadrants : E. Poizot, J. Thiébot (démarrage le 1 mars 2016).

55. Projet : 2016016**Intitulé : Adsorption de polluant en milieu aqueux : approche numérique et expérimentale**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Hamidrèza RAMEZANI

Laboratoire : ICMN UMR 7374 CNRS (Orléans)

Heures.CPU 2016 : 93

Publications de rang A

1. Ultrafast scalable parallel algorithm for the radial distribution function histogramming using MPI maps (Available online, 9 septembre 2016), Journal of Supercomputing (10.1007/s11227-016-1854-0).

Communications dans des congrès internationaux

1. Hamidrèza Ramézani, Daniella Nguemalieu Kouetcha, Nathalie Cohaut, (2016), Scalable parallel Grand Canonical Monte Carlo simulation using MPI maps: Micro-pollutant adsorption objective, The 12th World Congress on Computational Mechanics 2016 (WCCM 2016), Seoul, South Korea, 24-31 July 2016.

Communications dans des congrès nationaux

1. D. Kouetch, H. Ramézani, N. Cohaut, (2016), Simulation par la méthode GCMC de l'adsorption de dihydrogène sur des structures lamellaires, Fédération CNRS MATériaux Val de Loire-Limousin (MATV2L) FR 3469, Journées thématiques 'Matériaux carbonés', Orléans, 14 - 16 Mars 2016.

56. Projet : 2016019**Intitulé : WavyFilm**

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Nicolas GRENIER

Laboratoire : LIMSI (ORSAY)

Heures.CPU 2016 : 183 715

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Étude du transfert de masse et de chaleur sur un film tombant cisailé avec un modèle compressible bi-fluide », E. Kuidjo, stage de Master 2 Analyse, Modélisation, Simulation, Université Paris-Saclay, sept. 2016.

57. Projet : 2016021**Intitulé : Ingénierie des interactions protéine-ligand**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Thomas SIMONSON

Laboratoire : Laboratoire de Biochimie, École Polytechnique (PALAISEAU)

Heures.CPU 2016 : 244 913

Communications dans des congrès internationaux

1. T. Simonson, Can free energy simulations help explain the peptide binding specificity of the Tiam1 PDZ domain? Charmm Developers Meeting, Boston, 2017.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Nicolas Panel, soutenance prévue en novembre 2017

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ernesto Fuetes, Dept of Biochemistry, University of Iowa, USA

Pour information : article soumis

- N. Panel, Y. Joo Sun, E. Fuentes & T. Simonson, Can free energy simulations help explain the peptide binding specificity of the Tiam1 PDZ domain? *Frontiers in Molecular Biosciences*, (2017) submitted.

C. Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

1. RNMM : SMS EA 3233

Intitulé : Sciences et méthodes séparatives

Responsable : Pr. COQUEREL Gérard

Laboratoire : Sciences et Méthodes Séparatives (SMS) UPRES EA 3233
IRCOF-Université de Rouen, 76821 Mont Saint-Aignan

Publications de rang A

1. Structural Aspects of Solid Solutions of Enantiomers (review); C. Brandel, S. Petit, Y. Cartigny, G. Coquerel *Curr. Pharm. Des.*, 2016, 22, 4929-4941.
2. Transformation of an active pharmaceutical ingredient upon high-energy milling: A process-induced disorder in Biclodyl ; B. Schammé, N. Couvrat, P. Malpeli, E. Dudognon, L. Delbreilh, V. Dupray, É. Dargent, G. Coquerel ; *Int. J. Pharm.*, 2016, 499, 67-73.
3. Molecular Relaxations in Supercooled Liquid and Glassy States of Amorphous Quinidine: Dielectric Spectroscopy and Density Functional Theory (DFT) Approaches ; B. Schammé, M. Mignot, N. Couvrat, V. Tognetti, L. Joubert, V. Dupray, L. Delbreilh, E. Dargent, G. Coquerel ; *J. Phys. Chem. B*, 2016, 120, 7579-7592.
4. Access to Several Polymorphic Forms of (\pm)-Modafinil by Using Various Solvation-Desolvation Processes J. Mahieux, M. Sanselme, G. Coquerel ; *Cryst. Growth Des.*, 2016, 16 (1), 396-405.
5. Enantiomerisation of allylic trifluoromethyl sulfoxides studied by HPLC analysis and DFT calculations L. Bailly, E. Petit, M. Maeno, N. Shibata, O. Trapp, P. Cardinael, I. Chataigner, D. Cahard ; *Chirality*, 2016, 28 (2), 136-142.
6. Trimorphism of N-methylurea: crystal structures, phase transitions and thermodynamic stabilities ; G. Baaklini, G. Gbabode, S. Clevers, P. Negrier, D. Mondieig, G. Coquerel ; *CrystEngComm*, 2016, 18, 4772-4778.
7. Pre-Nucleation Self-Assembly and Chiral Discrimination Mechanisms during Solution Crystallization of Racemic Diprophylline ; C. Brandel, Y. Cartigny, G. Coquerel, J. H.ter Horst, S. Petit ; *Chem. Eur. J.*, 2016, 22, 16103-16112.

Communications dans des congrès internationaux

1. New polar-embedded aromatic core-shell stationary phases for high-performance liquid chromatography ; M. Mignot, B. Schammé, V. Tognetti, L. Joubert, A. Tchaplal, O. Mercier, P. Cardinael, V. Peulon-Agasse ; HPLC June 2016, San Francisco (USA)
2. Chirality and supramolecular chirality, chiral discrimination in the solid-state and break of symmetry G. Coquerel ; CGOM-12/BACG Joint Conference (12 th International Workshop of the Crystal Growth of Organic Material & 47th Annual British Association of Crystal Growth Conference), Leeds, (UK), June 2016.
3. Investigations on 2-adamantanone low temperature phase transition by temperature-resolved second harmonic generation ; L.N. Yuan, S. Clevers, N. Couvrat, V. Dupray, G. Coquerel ; CGOM-12/BACG Joint Conference (12 th International Workshop of the Crystal Growth of Organic Material & 47th Annual British Association of Crystal Growth Conference), Leeds, (UK), June 2016.
4. Formation of Liquid Inclusions in N-methyl Urea Single Crystals ; E. Bobo, G. Coquerel ; 23th BIWIC meeting, MPI Magdeburg, September 2016.
5. 1,3-Dimethylurea Hydration Process Investigation by Temperature-Resolved Second Harmonic Generation ; L. Yuan, S. Clevers, N. Couvrat, Y. Cartigny, V. Dupray, G. Coquerel ; 23th BIWIC meeting, MPI Magdeburg, September 2016.

Communications dans des congrès nationaux

1. Using DFT approaches to investigate the enhanced aromatic selectivity of new antracenylyl polar embedded stationary phases for Liquid Chromatography ; M. Mignot, B. Schammé, V. Tognetti, L. Joubert, A. Tchaplà, O. Mercier, P. Cardinael, V. Peulon-Agasse ; ESCB1, Rouen, August-September 2016.
2. Compétition entre les équilibres stables et métastables d'une molécule chirale lors de la recristallisation à partir de l'état vitreux ; B. Atawa, N. Couvrat, G. Coquerel, E. Dargent, A. Saiter ; Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielles (CRISTAL-8), Rouen, Mai 2016, Abstract book, p.94.
3. Influence de la pureté sur la cristallisation depuis l'état amorphe d'une molécule chirale ; Q. Viel, C. Brandel, Y. Cartigny, G. Coquerel, E. Dargent, S. Petit ; Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielles (CRISTAL-8), Rouen, Mai 2016, Abstract book, p. 82.
4. Inversion de stabilité relative sous contraintes mécaniques : proposition d'une explication par comparaison des structures cristallographiques ; J. Linol, P. Martinetto, M. Anne, G. Coquerel ; Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielles (CRISTAL-8), Rouen, Mai 2016, Abstract book, p. 58.
5. Transformation of an active pharmaceutical ingredient upon high-energy milling: a case study with Biclotymol ; B. Schammé, N. Couvrat, P. Malpelli, E. Dudognon, L. delbreilh, V. Dupray, E. Dargent, G. Coquerel ; Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielles (CRISTAL-8), Rouen, Mai 2016, Abstract book, p. 20.
6. Phenanthrene purification: comparison between zone melting and co-crystallization ; A. Burel, S.J.T. Brugman, M. Mignot, V. Peulon-Agasse, N. Couvrat, Y. Cartigny, S. Tisse, P. Cardinael, G. Coquerel ; 42èmes JEEP (Conference on Phase Equilibria), Univ. Paris Descartes, Mars 2016, Abstract book, p. 33.

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- BOBO Emilie (2013-2016) : Contribution on the formation and the behaviors of fluid inclusions in crystals. - Directeur G. Coquerel.
- MIGNOT Mélanie (2013-2016) : Elaboration de phases stationnaires originales pour la chromatographie liquide haute performance : synthèse, caractérisation, et évaluation des propriétés chromatographiques des colonnes. Directeur V. Peulon-Agasse/P. Cardinael.
- SCHAMME Benjamin (2013-2016) : Mobilité Moléculaire, Mécanismes de Cristallisation et Stabilité Physique de Composés Pharmaceutiques Amorphes : Impact des Méthodes de Préparation. Directeur V. Dupray/L. Delbreilh.

Thèses en cours sur le projet

- Quentin VIEL (2013 - 2017) : Relaxation of chiral molecules. Directeur S. Petit/E. Dargent.
- Clément de Saint Jorre (2015 - 2018) : Mécanisme de l'Enrichissement Préférentiel. Directeur G. Coquerel/P. Cardinael.

2. RNMM : Plateforme PISSARO

Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines

Responsable : Pascal COSETTE

Adresse : UMR 6270 CNRS, PBS, Plateforme PISSARO, IRIB, 76821 Mont-Saint-Aignan

Publications de rang A

1. Aissaoui N, Abidi F, Hardouin J, Abdelkafi Z, Marrakchi N, Jouenne T and Marzouki MN. ACE inhibitory and antioxidant activities of novel peptides from *Scorpaena notata* by-product protein hydrolysate. *Int. J. Pept. Res Therap.*, 2016.
2. Aissaoui N, Abidi F, Hardouin J, Abdelkafi Z, Marrakchi N, Jouenne T, Marzouki MN. Two novel peptides with angiotensin I converting enzyme inhibitory and antioxidative activities from *Scorpaena notata* muscle protein hydrolysate. *Biotechnol Appl Biochem.* 2016 Jan 22.
3. Arfi Y., Minder L., Di Primo C., Le Roy A., Ebel C., Coquet L., Claverol S., Vashee S., Jores J., Blanchard A. and Sirand-Pugnet P. MIB-MIP: a mycoplasma system to capture and cleave immunoglobulin G. *PNAS* 2016, 113 (19): 5406-5411.
4. Aufaure R, Hardouin J, Millot N, Motte L, Lalatonne Y, Guénin E. Tetrazine Click Chemistry for the Modification of 1-Hydroxy-1,1-methylenebisphosphonic Acids: Towards Bio-orthogonal Functionalization of Gold Nanoparticles. *Chemistry.* 2016 Nov 2; 22(45):16022-16027.
5. Bailleuil G, Kravtsoff A, Joulin-Gieta A, Lecaille F, Labas V, Meudale H, Teixeira-Gomesa AP, Gilbert FB, Coquet L, Jouenne T, Brömmeg D, Schouler C, Landone C, Lalmanach G and Lalmanach AC. The unusual resistance of avian defensin AvBD7 to proteolytic enzymes preserves its antibacterial activity. *Plos One*, 2016, 11(8): e0161573.
6. Billard V., Etienne P, Maillard A., Coquet L., Jouenne T., Cruz F., Garcia-Mina J.-M., Yvin J.-C., Ourry A.. Mg deficiency affects nutrient uptakes and leaf proteome of *Brassica napus*. *Plant Physiology and Biochemistry*, 2016, 107: 337-343.
7. Boulangé-Lecomte C, Rocher B, Cailleaud K, Cosette P, Legrand E et al. Differential protein expression of the estuarine copepod *Eurytemora affinis* after diuron and alkylphenol exposures. *Chemistry Environ Toxicol Chem.* 2016 Jul; 35(7):1860-71.
8. Breton J, Tennoune N, Lucas N, Francois M, Legrand R, Jacquemot J, Goichon A, Guérin C, Peltier J, Pestel-Caron M, Chan P, Vaudry D, do Rego JC, Liénard F, Pénicaut L, Fioramonti X, Ebenezer IS, Hökfelt T, Déchelotte P, Fetissov SO. Gut Commensal *E. coli* Proteins Activate Host Satiety Pathways following Nutrient-Induced Bacterial Growth. *Cell Metab.* 2016 Feb 9; 23(2):324-34.
9. Catel-Ferrera M., Marti S., Guillon L., Jara L., Coadou G., Molle V., Bouffartigues E., Bou G., Shalk I., Jouenne T. and Dé E.. The outer membrane porin *OmpW* of *Acinetobacter baumannii* is involved in iron uptake and colistin binding. *FEBS Lett.*, 2016, 590: 524-531.
10. Coquet L., Kolodziejek J., Jouenne T., Nowotny N., King J. D., Conlon J. M.. Peptidomic analysis of the extensive array of host-defense peptides in skin secretions of the dodecaploid frog *Xenopus ruwenzoriensis* (Pipidae). *Comparative Biochemistry and Physiology Part D*, 2016, 19: 18-24.
11. Ghezzi P, Chan P. Redox Proteomics Applied to the Thiol Secretome. *Antioxid Redox Signal.* 2016 Jun 7.
12. Kentache T, Jouenne T, Dé E, Hardouin J. Proteomic characterization of N α - and N ϵ -acetylation in *Acinetobacter baumannii*. *J Proteomics.* 2016 Jul 20; 144: 148-58.
13. Khemiri A, Jouenne T and Cosette P. Proteomics dedicated to biofilmology: what have we learned from a decade of research. *Med. Microbiol. Immunol.* 2016, 205 : 1-19
14. Le Mauff F, Loutelier- Bourhis C., Bardor M., Bérard C., Doucet A., D'Aoust M.-A., Vézina L.-P., Driouich A., Couture M. M.-J. and Lerouge P. (2016) Cell wall biochemical alterations during *Agrobacterium*-mediated expression of hemagglutinin-based influenza virus-like vaccine particles in tobacco. *Plant Biotech. Journal*, Aug 2.

15. Linares D, Jean N, Van Overtvelt P, Ouidir T, Hardouin J, Blache Y, Molmeret M. The marine bacteria *Shewanella frigidimarina* NCIMB400 upregulates the type VI secretion system during early biofilm formation. *Environ Microbiol Rep*. 2016 Feb; 8(1):110-21.
16. Machado I, Coquet L, Pereira O, Jouenne T. Proteomic Changes in *Pseudomonas aeruginosa* biofilm cells after adaptive resistance development. *J Proteomics Bioinform*, 2016, 9: 58-62.
17. McLaughlin C, Lampis S, Mechkarska M, Coquet L, Jouenne T, King JD, Mangoni ML, Lukic ML, Scorciapino MA, Conlon JM. Purification, conformational analysis, and properties of a family of tigerinin peptides from skin secretions of the crowned bullfrog *Hoplobatrachus occipitalis* (Dicroglossidae). *Journal of Natural Products*, 2016 Sep 23; 79(9):2350-6.
18. Mezni A, Khazri A, Khazri O, Limam F, Cosette P, Aouani E. Neuroprotective Activity of Grape Seed and Skin Extract Against Lithium Exposure Using Proteomic Research. *Molecular neurobiology*, 1-11
19. Ouidir T, Jouenne T, Hardouin J. Post-translational modifications in *Pseudomonas aeruginosa* revolutionized by proteomic analysis. *Biochimie*. 2016 Jun; 125: 66-74.
20. Péden R, Rocher B, Chan P, Vaudry D, Poret A, Olivier S, Le Foll F, Bultelle F. Consequences of acclimation on the resistance to acute thermal stress: Proteomic focus on mussels from pristine site. *Mar Environ Res*. 2016 Oct; 121:64-73.
21. Peixoto-Machado I, Martins G., Pereira O., Jouenne T., Parpot P. and Nogueira R. Influence of the temperature in the outer membrane proteins expression and electrochemistry of *Geobacter sulfurreducens*. *Prot. Pept Lett*. Sous presse;
22. Porte B, Hardouin J, Zerdoumi Y, Derambure C, Hauchecorne M, Dupre N, Obry A, Lequerre T, Bekri S, Gonzalez B, Flaman JM, Marret S, Cosette P, Leroux P. Major remodeling of brain microvessels during neonatal period in the mouse: A proteomic and transcriptomic study. *J Cereb Blood Flow Metab*. 2016 Feb 12.
23. Snoussi S, El May A, Coquet L, Chan P, Jouenne T, Dé E, Landoulsi A. Unravelling the effects of static magnetic field stress on cytosolic proteins of *Salmonella* by a proteomic approach. *Canadian Journal of Microbiology*, 2016, 62 (4) : 338-348.
24. Thakur AK, Nigri J, Lac S, Leca J, Bressy C, Berthezene P, Bartholin L, Chan P, Calvo E, Iovanna JL, Vasseur S, Guillaumond F, Tomasini R. TAp73 loss favors Smad-independent TGF- β signaling that drives EMT in pancreatic ductal adenocarcinoma. *Cell Death Differ*. 2016 Aug; 23(8):1358-70.

3. RNMM : CERMN

Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie

Responsable : Pr. R. BUREAU - Pr. J. SOPKOVA

Laboratoire : CERMN, Université de Caen Basse-Normandie, Bd Becquerel, 14032 Caen, France
UPRES EA4259, FR-CNRS 3038. Plateforme de Chémoinformatique

Publications de rang A

1. Jonathan Villain, Marie-Pierre Halm-Lemeille, Gilles Durrieu and Ronan Bureau. Acute toxicities of pharmaceuticals toward green algae. mode of action, biopharmaceutical drug disposition classification system and quantile regression models. [Ecotoxicol Environ Saf](#). 2016, 124, 337-343 (projet RNMM).
2. Saleh, N.; Saladino, G.; Gervasio, F. L.; Haensele, E.; Banting, L.; Whitley, D. C.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Bureau, R.; Clark, T. A Three-Site Mechanism for Agonist/Antagonist Selective Binding to Vasopressin Receptors. *Angew. Chemie Int. Ed*. 2016, 55, 8008–8012 (projet RNMM).

Communications dans des congrès internationaux

1. Villain, J., Bureau, R., Durrieu, G. Robustness of machine learning algorithms : application chemoinformatic, statlearn 6th edition, Vannes (France) 7- 8 avril 2016 (projet RNMM).
2. Lepailleur, A.; Métivier, J-P.; Lemièrre, V.; Buzmakov, A.; Crémilleux, B.; Kuznetsov, S.; Napoli, A.; Cuissart, B.; Bureau, R. Detection of structural alerts for toxic side effects. A case study on mutagenicity. 5th

Strasbourg Summer School in Chemoinformatics, Strasbourg (France), 27 June-1 July 2016 (projet RNMM).

3. Métivier, J-P; Abel, A.; Lepailleur, A.; Cuissart, B.; Bureau, R. Automated generation of 2D-pharmacophores from large datasets. 5th Strasbourg Summer School in Chemoinformatics, Strasbourg (France), 27 June-1 July 2016 (projet RNMM).
4. Lepailleur, A.; Métivier, J-P; Cuissart, B.; Bureau, R. Automated detection of ligand-based 2D Pharmacophores from large datasets. 21th EuroQSAR, Verona, Italy, 4-8 September 2016 (projet RNMM).

Communications / conférences dans des congrès nationaux

1. R. Bureau, Characterization of chemical patterns associated to an optimal polypharmacological profile. Application in Alzheimer's disease. 30ème Journées Franco-Belge de Pharmacochimie, Spa (Belgique), 26-27 mai 2016, (projet RNMM).
2. Lepailleur, A.; Métivier, J.-P.; Cuissart, B.; Bureau, R. Emerging patterns mining and automated detection of contrasting chemical features. 5th Strasbourg Summer School in Chemoinformatics, Strasbourg (France), 27 June - 1 July 2016 (Conférence), (projet RNMM).
3. Bureau, R., Durieu, G. et Villain, J. (2016). Quantile de régression séquentielle : application à l'étude du mode d'action des composés chimiques, 48èmes journées de statistique de la société française de statistique, 2 juin 2016, Montpellier, résumé de 6 pages : <http://jds2016.sfds.asso.fr/prog/#VarLat> (projet RNMM).
4. R. Bureau, B. Cuissart, A. Lepailleur, JP. Métivier, Norns : Un outil logiciel pour la chemoinformatique. Journée NormanDev "Cycle de vie du logiciel", 8 décembre 2016, Caen (projet RNMM).

Thèses soutenues en 2016 sur le projet

- Jonathan Villain : Estimation de l'(éco)toxicité d'une substance chimique par des méthodes à noyaux. Ecole Doctorale SICMA (encadrement 50%), Université Européenne de Bretagne / Université de Caen. Juin 2016, Reçu avec mention très honorable. (Co-direction R. Bureau), projet RNMM.

Thèses en cours sur le projet

- Bamba Kane (1/10/2013 - ...) "Découverte et la présentation de motifs chimiques résultant d'un processus de fouille de données" (co-direction Alban Lepailleur), projet RNMM.
- Sangeetha Thirumaran (1/10/2016 - ...) "Polypharmacologie des récepteurs mélatoninergiques et sérotoninergiques à visée thérapeutique" (co-direction Alban Lepailleur), projet RNMM.

Stages de Master en 2016 sur le projet

- Hassiba Saidoun (4/01/2016 - 1/07/2016) " Search of MT5-MMP inhibitors with potential interest in the treatment of Alzheimer disease using in silico methodologies". Projet RNMM.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Pr T. Clark, Université de Portsmouth (UK) / Université d'Erlangen (D), projet RNMM.
- Pr J. Essex, Université de Southampton (UK), projet RNMM.
- Dr B. Cuissart, Pr B. Cremilleux, GREYC, Unicaen (Fr), projet RNMM.
- Dr J. Leprince, Inserm U413, Université de Rouen (UK), projet RNMM.
- Pr G. Durrieu, UBS, Vannes (Fr), projet RNMM.

4. RNMM : UMR 6014 COBRA**Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique**

Responsable : OULYADI Hassan

Laboratoire : UMR6014 CNRS, Université et INSA de Rouen - COBRA

Bâtiment IRCOF, Université de Rouen - 1, rue Thomas Becket - 76 821 MONT-SAINT-AIGNAN

Publications de Laurent Joubert et Vincent Tognetti : voir projet n° 2014008