



Normandie Université

## Pôle Régional de Modélisation Numérique

### Références des Publications des laboratoires utilisateurs pour l'année 2017

Référence du document : RA-PUBLIS-2017 - Révision 01 - Date de création : 27/02/2018

Validation : 13 juin 2019 (MSC)

Documents référencés : N/A

**Résumé** : Liste des Publications des laboratoires utilisateurs du PRMN (service de calcul intensif) pour l'année 2017.

**Révisions** :

- 01 : première version publiée

**Accessibilité**

ComUE Normandie Université : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

**Table des matières**

|  |    |
|--|----|
| Introduction   | 7  |
| Projets scientifiques expertisés   | 8  |
| Projet : 1998007   | 8  |
| Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique   |    |
| Projet : 1998022   | 8  |
| Intitulé : Écoulements turbulents compressibles  |    |
| Projet : 1998053   | 9  |
| Intitulé : Étude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable  |    |
| Projet : 2002003   | 10 |
| Intitulé : Simulation numérique de l'interaction entre la lumière et un objet de forme complexe  |    |
| Projet : 2003008   | 11 |
| Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray  |    |
| Projet : 2003013   | 11 |
| Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières   |    |
| Projet : 2004004   | 12 |
| 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   | 12 |
| Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands  |    |
| Projet : 2005010   | 14 |
| Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.                                       |    |
| Projet : 2005013   | 15 |
| Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.   |    |
| Projet : 2005014   | 15 |
| Intitulé : Étude des cinétiques des transformations de phases dans les alliages modèles des aciers   |    |
| Projet : 2006003   | 16 |
| Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.  |    |
| Projet : 2006011   | 17 |
| Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES   |    |
| Projet : 2007001   | 18 |
| Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement |    |
| Projet : 2007013   | 19 |
| Intitulé : Étude ab-initio de systèmes fortement corrélés  |    |
| Projet : 2008013   | 20 |

|   |    |
|---|----|
| Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée   |    |
| Projet : 2010006  | 20 |
| Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique  |    |
| Projet : 201010 et 2014008  | 21 |
| Intitulé : Topologie quantique  |    |
| Intitulé : Développement de nouveaux descripteurs atomiques et moléculaires pour la caractérisation des liaisons "faibles"  |    |
| Projet : 2011001  | 21 |
| Intitulé : Étude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire   |    |
| Projet : 2011007  | 22 |
| Intitulé : Modélisation multi-échelle de nano-systèmes  |    |
| Projet : 2012006  | 22 |
| Intitulé : Simulation haute-fidélité de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe   |    |
| Projet : 2012008  | 23 |
| Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation   |    |
| Projet : 2013005  | 25 |
| Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique  |    |
| Projet : 2013006  | 26 |
| Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique   |    |
| Projet : 2013010  | 26 |
| Intitulé : Modélisation numérique de l'impact hydro-sédimentaire de l'implantation de systèmes récupérateurs d'énergie  |    |
| Projet : 2013019  | 26 |
| Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.  |    |
| Projet : 2014002  | 27 |
| 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  | 27 |
| Intitulé : Étude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.   |    |
| Projet : 2014007  | 27 |
| Intitulé : Conduction électrique le long des dislocations dans les nano-fils de matériaux nitrures-III.   |    |
| Projet : 2014010  | 28 |
| Intitulé : Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.  |    |
| Projet : 2015001  | 28 |
| Intitulé : Simulation numérique avancée de condensats de Bose-Einstein  |    |
| Projet : 2015004  | 29 |
| Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.  |    |

|   |    |
|---|----|
| Projet : 2015005  | 30 |
| Intitulé : Taylor-Couette turbulent avec transfert de chaleur   |    |
| Projet : 2015007  | 30 |
| Intitulé : Structure et Dynamique dans les mélanges liquides ioniques/solvants moléculaires   |    |
| Projet : 2015008  | 31 |
| Intitulé : Étude théorique d'une surface de silice modifiée et rationalisation des interactions phase stationnaire/composé aromatique cible.  |    |
| Projet : 2015009  | 31 |
| Intitulé : Rationalisation du moment dipolaire de deux molécules pharmaceutiques durant la rotation de groupements flexibles.   |    |
| Projet : 2015011  | 32 |
| Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes.  |    |
| Projet : 2015012  | 32 |
| 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  | 33 |
| Intitulé : FireDiag   |    |
| Projet : 2016003  | 33 |
| Intitulé : Geometrical and Statistical Properties of Turbulent Flows with Varying Viscosity   |    |
| Projet : 2016005  | 34 |
| Intitulé : COACH-IPP  |    |
| Projet : 2016009  | 34 |
| Intitulé : Modélisation structurales et électronique de l'interface InAlN/GaN pour l'application aux transistors de haute mobilité électronique   |    |
| Projet : 2016010  | 35 |
| Intitulé : Cinétique des inhibiteurs de protéines kinases et Affinité par Docking   |    |
| Projet : 2016011  | 35 |
| 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  | 36 |
| Intitulé : Caractérisation hydrodynamique (écoulement et turbulence) des sites hydroliens et étude des effets de sillage des turbines par simulations numériques  |    |
| Projet : 2016016  | 37 |
| Intitulé : Adsorption de polluant en milieu aqueux : approche numérique et expérimentale  |    |
| Projet : 2016017  | 38 |
| Intitulé : Simulation atomistique de quelques minéraux d'intérêt pour la géologie et la bio-minéralisation  |    |
| Projet : 2016018  | 38 |
| Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des dislocations dans les matériaux III-N   |    |
| Projet : 2016019  | 39 |

|  |    |
|--|----|
| Intitulé : WavyFilm  |    |
| Projet : 2016022   | 39 |
| Intitulé : Apprentissage statistique pour la compréhension de scènes audio   |    |
| Projet : 2017001   | 40 |
| Intitulé : Propriétés Optiques non-linéaires de Cristaux Moléculaires  |    |
| Projet : 2017002   | 40 |
| Intitulé : Numerical Simulations of flow over Savonius-style wind turbines blades  |    |
| Projet : 2017003   | 40 |
| Intitulé : Modélisation de la relaxation structurale dans un biopolymère et dans son monomère                            |    |
| Projet : 2017004   | 41 |
| Intitulé : Simulation directe des écoulements diphasiques  |    |
| Projet : 2017005   | 41 |
| Intitulé : Simulation numérique de matériaux à changement de phase   |    |
| Projet : 2017006   | 41 |
| Intitulé : Modélisation de la convection naturelle dans un anneau cylindre en rotation                                   |    |
| Projet : 2017008   | 43 |
| Intitulé : Développement d'un canal à houle numérique  |    |
| Projet : 2017011   | 43 |
| Intitulé : Multi Atlas Segmentation for Medical Images (MASMI)   |    |
| Projet : 2017016   | 44 |
| Intitulé : IDEES UMR 6266 CNRS   |    |
| Projet : 2017017   | 44 |
| Intitulé : HYD2M (Hydrodynamique du Raz Blanchard : Mesures et Modélisations)  |    |
| Projet : 2017018   | 45 |
| Intitulé : Deep in Normandy  |    |
| Projet : 2017019   | 46 |
| Intitulé : Modélisation de la fatigue des pales d'éoliennes en environnement naturel à l'aide d'un code fluide structure |    |
| Projet : 2017020   | 46 |
| Intitulé : Correction de données de séquençage haut débit issues de nouvelles technologies de 3ème génération            |    |
| Projet : 2017024   | 46 |
| Intitulé : Modélisation des écoulements polyphasiques  |    |
| Projet : 2017025   | 47 |
| Intitulé : GREYC - Équipe Image  |    |
| <a href="#">Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire</a>  | 48 |
| RNMM : SMS EA 3233   | 48 |
| Intitulé : Sciences et méthodes séparatives  |    |
| RNMM : Plateforme PISSARO  | 50 |
| Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines   |    |
| RNMM : CERMN   | 51 |

Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie  
RNMM : UMR 6014 COBRA  
Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique

52

## A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIANN pour l'année 2017. 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

### 1. Projet : 1998007

**Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique**

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Jean-Guy CAPUTO

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

Heures.CPU 2017 : 1 788 632

**Publications de rang A**

1. R. Melin, J-G. Caputo, K. Yang, B. Doucot, A simple Floquet-Wannier-Stark-Andreev viewpoint and emergence of low- energy scales in a voltage-biased three-terminal Josephson junction, *Phys. Rev. B*, 95, 085415 , (2017). arXiv:1611.01932

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Imene Khames
- Thèse de Alexandre Vieira

### 2. Projet : 1998022

**Intitulé : Écoulements turbulents compressibles**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

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

Heures.CPU 2017 : 2 231 246

**Publications de rang A**

1. Verma, S.B., Hadjadj, A., Haidn, O. Origin of side-loads in a subscale truncated ideal contour nozzle. [Aerospace Science & Technology, 71, 725–732 \(2017\).](#)
2. Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Laminar-turbulent transition in supersonic boundary layers with surface heat transfer. [Numerical Heat Transfer, 72\(1\), 40-53 \(2017\).](#)
3. Soni, V., Hadjadj, A., Chaudhuri, A., Ben-Dor, G. Shock wave reflections over double-concave cylindrical reflectors. [Journal of Fluid Mechanics, 813, 70-84, \(2017\).](#)
4. Ben-Nasr, O., Hadjadj, A., Chaudhuri, A., Shadloo, M.S. Assessment of subgrid-scale modeling for large-eddy simulation of a spatially-evolving compressible turbulent boundary layer. *Computers & Fluids*, 151, 144–158 (2017).
5. Soni, V., Roussel, O., Hadjadj, A. On the accuracy and efficiency of point-value multiresolution algorithms for solving scalar wave and Euler equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 323, 159-175 (2017).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Effects of wall heat transfer on the high speed flow boundary layer transition. 16th European Turbulence Conference, 21-24 August 2017, Stockholm, Sweden.
2. Nguyen, M-Q., Lebon, B., Shadloo, M.S., Peixinho, J., Hadjadj, A. Transition to turbulence in a d-sudden expansion pipe flow. Euromech Symposium on 3-D instability mechanisms in transitional and turbulent flows, 18–20 Sep. 2017, Bari, Italy.



3. Lebon, B., Nguyen, M-Q., Ishizaka, S., Tasaka, Y., Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Peixinho, J. Experiments with disturbances on the flow through a sudden expansion in a circular pipe. Euromech Symposium on 3-D instability mechanisms in transitional and turbulent flows, 18–20 Sep. 2017, Bari, Italy.

#### Thèses soutenues en 2017 sur le projet

- Arthur PIQUET. Physical analysis and numerical simulation of the separation phenomenon in over-expanded nozzle flows, 13/11/2017.

#### Thèses en cours sur le projet

- 2016-2019 : Boubakr ZEBIRI
- 2016-2019 : Margio MENDEZ
- 2016-2019 : Sushank SHARMA
- 2016-2019 : Nassim BRAHMI

### 3. **Projet : 1998053**

#### Intitulé : Étude 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 - Paris 5 - FRE 2463 (PARIS)

Heures.CPU 2017 : 197 792

#### Publications de rang A

1. Calibration of 1,2,4-triazole-3-thione, an original Zn-binding group of metallo-lactamase inhibitors. Validation of a polarizable MM/MD potential by ab initio quantum chemistry (QC). K. Kwapien, M. Damergi, S. Nader, L. El Khoury Z. Hobaika, R. G. Maroun, J.-P. Piquemal, L. Gavara, D. Berthomieu, J.-F. Hernandez, N. Gresh, 2017, J. Phys. Chem. B, 121, 6295-6312.
2. A simple isomerisation of the purine scaffold of a kinase inhibitor, roscovitine, affords a ten- fold enhancement of its affinity for CDK5 and CDK7. Could this be traced back to conjugation-induced stiffenings/loosenings of rotational barriers? K. El Hage, J.-P. Piquemal, N. Oumata, L. Meijer, H. Galons, N. Gresh, 2017, ACS Omega, 2, 3467-3474.
3. The inhibition process of HIV-1 integrase by diketoacids molecules: understanding the factors governing the better efficiency of dolutegravir. Léa El Khoury, Jean-Philip Piquemal, Serge Femandjian, Richard G. Maroun, Nohad Gresh, Zeina Hobaika, BBRC, 2017, 488, 433-438.
4. Importance of explicit smeared lone-pairs in anisotropic polarizable molecular mechanics. Torture track angular tests for exchange-repulsion and charge transfer contributions. Léa El Khoury, Sehr Naseem-Khan, Karolina Kwapien, David Perahia, Zeina Hobaika, Richard Maroun, Jean-Philip Piquemal, Nohad Gresh, J. Comput. Chem., 2017, 38, 1897-1920.
5. Channeling Through Two Stacked Guanine Quartets of One and Two Alkali Cations in the Li+, Na+, K+ and Rb+ Series. Assessment of the Accuracy of the SIBFA Anisotropic Polarizable Molecular Mechanics Potential. Nohad Gresh, Sehr Naseem-Khan, Louis Lagardère, Jean-Philip Piquemal, Judit E. Sponer, Jiri Sponer, J. Phys. Chem. B, 2017, 121, 3997-4014.

#### Communications dans des congrès internationaux

1. Treizième Congrès des Chimistes Théoriciens d'expression Latine, Paris, 3-7 juillet 2017. Séparabilité, non-additivité et anisotropie des potentiels de mécanique/dynamique moléculaire polarisables.
2. CECAM Congress, Sheffield, Royaume-Uni, 21-28 juillet 2017. Polarizable molecular mechanics/dynamics potentials. Validations by QC computations.

3. Modeling Interactions in Biomolecules, MIB 2017, Pilsen, 3-8 septembre 2017. Polarizable molecular mechanics/dynamics potentials. Validations by QC computations on two sensitive issues: stacked guanine quartets and dizinc metalloenzyme binding sites.
4. Lorentz Center meeting, Leyden, Pays-Bas, 30 octobre-3 novembre 2017. Construction and Refinements of a Polarizable Molecular Mechanics/Dynamics Potentials for Large-Scale Simulations of DNA and RNA.

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Février 2017. Thèse soutenue par Léa El Khoury en cotutelle avec l'Université Saint-Joseph, Beyrouth, Liban.

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Perla El Darazi, en cotutelle avec l'Université Saint-Joseph, Beyrouth, Liban.

**Stages de Master en 2017 sur le projet**

- Stage de Master 2 de Perla El Darazi.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Jiri Sponer, Académie des Sciences de la République Tchèque, Brno. Construction et validation du potentiel polarisable SIBFA pour les ADN et les ARN.
- Jean-François Hernandez, Institut Max Mousseron, Université de Montpellier. Modélisation de complexes de métallob- $\beta$ -lactamases avec des inhibiteurs en série triazole-thione.
- Laurent Salmon, Université Paris-Saclay. Modélisation de complexes des enzymes phosphomannose isomérase et phosphoglyco-isomérase avec des inhibiteurs à visée thérapeutique.

**4. Projet : 2002003****Intitulé : Simulation numérique de l'interaction entre la lumière et un objet de forme complexe**

Famille thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jérôme YON

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

Heures.CPU 2017 : 16 264

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Guillaume Lefevre sur les propriétés radiatives des particules de suie recouvertes de composés organiques.

**Stages de Master en 2017 sur le projet**

- Alexandre Siméon (Master 2 EFE).

**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.
- Christopher Sorensen Cortelyou-Rust University Distinguished Professor & University Distinguished Teaching Scholar 325A Cardwell Hall.
- Andres Fuentes, Departamento de industrias, universidad tecnica federico santa maria, Av. España 1680, Valparaiso, Chile.
- 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.

## 5. **Projet : 2003008**

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

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Alain BERLEMONT

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

Heures.CPU 2017 : 502 024

#### **Publications de rang A**

1. G. Vaudor , T. Ménard , W. Aniszewski , M. Doring, A. Berlemont; A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process Computers and Fluids 152, 204–216, 2017.

#### **Communications dans des congrès internationaux**

1. Comparison between numerical and experimental water-in-oil dispersion in a microchannel, Philippe Desjonquères, Thibaut Ménard, Dominique Tarlet, Jérôme Bellettre ,ILASS Europe 2017.

#### **Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Trung Thanh Vu, Atomization process of turbulent liquid sheets : experimental analysis and numerical developments, 12 Juillet 2017 Rouen.

## 6. **Projet : 2003013**

### **Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

Laboratoire : LOMC - UMR 6294 - Le Havre (LE HAVRE)

Heures.CPU 2017 : 515 230

#### **Publications de rang A**

1. G. Pinon, G. Perret, L. Cao , A. Poupardin, J. Brossard, and E. Rivoalen. Vortex kinematics around a submerged plate under water waves. part II : Numerical computations. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 65 :368 – 383, 2017
2. G. Pinon, M. Fernández Hurst , and E. Lukeba . Semi- analytical estimate of energy production from a tidal turbine farm with the account of ambient turbulence. International Journal of Marine Energy, 2017
3. P. Mycek , G. Pinon, C. Lothodé , A. Dezotti , and C. Carlier . Iterative solver approach for turbine interactions : application to wind or marine current turbine farms. Applied Mathematical Modelling, 41 : 331 –349, 2017
4. G. Pinon, C. Carlier , A. Fur o , B. Gaurier, G.y Germain, and E. Rivoalen. Account of ambient turbulence for turbine wakes using a synthetic-eddy-method. Journal of Physics : Conference Series, 854(1) :012016, 2017

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Grégory PINON, Habilitation à Diriger des Recherches, Soutenue le 1er décembre 2017, De la modélisation Lagrangienne particulière pour des applications orientées vers les énergies marines.
- Clément CARLIER, Thèse de Doctorat, Soutenue le 12 décembre 2017, Simulation du comportement d'hydroliennes : modélisation de l'influence de la turbulence ambiante et des effets d'interactions.

**7. 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 2017 : 37 153

**Publications de rang A**

1. G. Barozzino-Consiglio, G. Hamdoun, C. Fressigné, A. Harrison-Marchand, J. Maddaluno, H.Oulyadi Chem. Eur. J. 2017,23,12475-12479.
2. Y. Gimbert, D. Lesage, C. Fressigné, J.Maddaluno J. Org. Chem. 2017, 82, 8141-8147

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Y. Gimbert: Directeur de recherches CNRS, Département de Chimie Moléculaire, Université J. Fourier, Grenoble
- D. Lesage: Ingénieur de Recherche, Université Pierre et Marie Curie Paris 6, équipe CSOB
- A. Harrison-Marchand: Maître de Conférences, Université de Rouen, COBRA
- J. Maddaluno: Directeur de recherches, CNRS, Université de Rouen, COBRA
- H. Oulyadi: professeur des universités, Université de Rouen, COBRA

**8. 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 de Oliveira Santos

Laboratoire : CERMN - UNICAEN EA 4258 (CAEN)

Heures.CPU 2017 : 277 436

**Publications de rang A**

1. Haensele, E.; Mele, N.; Miljak, M.; Read, C.; Whitley, D.; Banting, L.; Delepee, C.; Sopková-de Oliveira Santos, J.; Lepailleur, A.; Bureau, R.; Essex, J.; Clark, T. Conformation and Dynamics of Human Urotensin II and Urotensin Related Peptide in Aqueous Solution. J. Chem. Inf. Mod., 2017, 57 (2), pp 298–310.
2. 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. Benzylphenylpyrrolizinones with anti-amyloid and scavenging effects, potentially useful in Alzheimer's disease treatment. ChemMedChem, 2017, 12(12): 913-916. doi: 10.1002/cmdc.201700102.

3. Leprince, J.; Bagnol, D.; Bureau, R.; Fukusumi, S.; Granata, R.; Hinuma, S.; Larhammar, D.; Primeaux, S.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Tsutsui, K.; Ukena, K. & Vaudry, H. The Arg-Phe-amide peptide 26RFa/QRFP and its Receptor. IUPHAR Review" British Journal of Pharmacology, 2017. DOI: 10.1111/bph.13907
4. Peauger, L.; Azzouz, R.; Gembus, V.; Tintas, M.-L.; Sopková-de Oliveira Santos, J.; Bohn, P.; Papamicaël, C. & Levacher, V. Donepezil-based Central Acetylcholinesterase Inhibitors by means of a "Bio-oxidizable" Prodrug Strategy: Design, Synthesis and in vitro Biological Evaluation. Journal of Medicinal Chemistry, 2017, 2017, 60(13):5909-5926. doi: 10.1021/acs.jmedchem.7b00702
5. Kieffer, C.; Babin, V.; Jouanne, M.; Slimani, I.; Berhault, Y.; Legay, R.; Sopková-de Oliveira Santos, J.; Rault, S.; Voisin-Chiret, A. S. Sequential One Pot Double C H Heteroarylation of Thiophene Using Bromopyridines to Synthesize Unsymmetrical 2,5-Bipyridylthiophenes. Tetrahedron 2017, 73, 5509–5516.
6. Fogha J., Marekha B., De Giorgi M., Voisin-Chiret A. S., Rault S., Bureau R. and Sopkova-de Oliveira Santos J. Toward Understanding Mcl-1 Promiscuous and Specific Binding Mode. J. Chem. Inf. Model., 2017, 57 (11), pp 2885–2895.

### Communications dans des congrès internationaux

1. Sopkova-de Oliveira Santos J.. Beta strand mimicry: Exploring oligothiopyridines foldamers 6th World Congress on Medicinal Chemistry and Drug Design, 7-8 juin 2017, Milano, Italie. (Oral Communication)
2. Elke Haensele, Christopher M. Read, David C. Whitley, Lee Banting, Nawel Mele, Marija Miljak, Jonathan Essex, Carla Delépée, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Alban Lepailleur, Ronan Bureau, Timothy Clark, Urotensin- II and Urotensin-Related-Peptide: How to Decipher NMR-Data for Conformational Equilibria with Molecular Dynamics Simulation and Modeling, 13th German Peptide Symposium, 20 - 23 March 2017 Friedrich-Alexander- Universität of Erlangen-Nürnberg

### Communications dans des congrès nationaux

1. Lefranc B., Alim K., Dubessy C., Bureau R., Sopkova - de Oliveira Santos J., Chartrel N., Vaudry D., Chuquet J., Leprince J. Synthèse sur phase solide d'analogues du 26RFa(20-26) contenant une fonction guanidine mono-, di- ou trisubstituée en position 25. 20eme congrès du Groupe Français des Peptides et des Protéines – Arcachon, France, 26 au 30 mars 2017.
2. Alim K., Lefranc B., Dubessy C., Bureau R., Sopkova - de Oliveira Santos J., Chartrel N., Vaudry D., Chuquet J., Leprince J. Evaluation fonctionnelle d'analogues peptidiques du 26RFa modifiés au niveau de l'arginine 25. 20eme congrès du Groupe Français des Peptides et des Protéines – Arcachon, France, 26 au 30 mars 2017 (Oral Communication).
3. Jouanne M., Voisin-Chiret A.S., Legay R., Rault S. and Sopkova-de Oliveira Santos J.  $\beta$ -Strand Mimicry: 20e congrès du GGMM, 9-11 mai 2017 Reims, France.
4. Sopkova-de Oliveira Santos J., Belkacem Bouricha L., Bordji K., Dallemagne P., Bernaudin M., Colloc'h N. Virtual screening search for HIF-2 $\alpha$  selective inhibitor. 20e congrès du GGMM, 9-11 mai 2017 Reims, France.
5. Benabderrahmane M., Marekha B., Denis C., Voisin-Chiret A.S., Bureau R., Sopkova – de Oliveira Santos J. Etude de relation structure-activité des ligands de Mcl-1 : application au traitement des cancers de l'ovaire. Journée Normande de Recherche Biomédicale, 14 novembre 2017, Caen, France.
6. Kieffer C. Siebert F., Denis C., De Pascale M., Hedir S., Jouanne M., Sopkova-de Oliveira Santos J., Poulain L. et Voisin-Chiret, A.S. Searching for new antiproliferative agents : From the ratioanl drug design to the synthesis of SMAC-mimetics. Journée Normande de Recherche Biomédicale, 14 novembre 2017, Caen, France.

### Thèses en cours sur le projet

- Karima Alim : Études 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. Co-direction, financement 50% région Basse-Normandie, 50% VetoPharma.
- Mohammed Benabderrahmane : Étude de relation structure- activité des ligands de Mcl-1 : application au traitement des cancers de l'ovaire. MERT de l'École Doctorale Normande de Chimie.

**Stages de Master en 2017 sur le projet**

- Hadjer CHEGHIB : Nouvelles cibles thérapeutiques pour la sclérose en plaques : les analogues des récepteurs du VIP et du PACAP. Stage M2 – Master de Recherche « Drug Design ».

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- PROJET INTERACTIONS PROTEINE-PROTEINE : LA LIGUE CONTRE LE CANCER, CRUNCH
  - UMR 6014 CNRS, Rouen (Prof H. Oulyadi, Dr M. Seban)
  - CERMN (Prof S. Rault, Dr AS Voisin-Chiret, Dr. Charline Kieffer)
  - 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)
- PROJET GPCR, POLYPHARMACOLOGIE - LECMA
  - CERMN (Prof P. Dallemagne, Dr C. Rochais)
  - IGF, CNRS Université Montpellier, (Dr S. Claeyssen)
  - Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Vaudry, Dr J. Leprince)
  - Université de Portsmouth (Prof T. Clark)
  - Université de Southampton (Prof J. W. Essex)
- PROJET VARROA
  - Véro Pharma (Dr. I. Villard)

**9. 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 : ICMR - UMR 7312 (REIMS)

Heures.CPU 2017 : 860 456

**Publications de rang A**

1. V. Previtali, Cristina Trujillo, J-C. Boisson, H. Khartabil, E. Hénon and I. Rozas ; Development of the First Model of a Phosphorylated, ATP/Mg<sup>2+</sup>-Containing B-Raf Monomer by Molecular Dynamics Simulations: a Tool for Structure-Based Design ; Phys. Chem. Chem. Phys. 19 (2017), 31177.
2. C. Lefebvre, G. Rubez, H. Khartabil, J-C. Boisson, J. Contreras-García and E. Hénon ; Accurately extracting the signature of intermolecular interactions present in the NCI plot of the reduced density gradient versus electron density ; Phys. Chem. Chem. Phys. 19 (2017), 17928.

**10. 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 2017 : 40 840

**Publications de rang A**

1. Gérard, H.; Chataigner I., "Enamines vs Vinyl Ethers and Thioethers: a DFT Insight into their Divergent Reactivities toward Nitroalkenes", Chem. Eur. J. 2017, 23, 13711-13717.

**Thèses en cours sur le projet**

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

**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.

**11. 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 2017 : 145

**Thèses en cours sur le projet**

- R.Badyka : Influence des éléments d'alliage sur la cinétique de vieillissement de la ferrite d'aciers inoxydables austéno-ferritiques moulés.

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

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Pascale DOMINGO

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

Heures.CPU 2017 : 11 083 229

**Publications de rang A**

1. C. Locci, L. Vervisch, B. Farcy, P. Domingo, N. Perret (in press) Selective Non-Catalytic Reduction (SNCR) of nitrogen oxide emissions: A perspective from numerical modeling, *Flow Turbulence and Combust.*
2. U. Guven, G. Ribert (in press) Large-eddy simulation of supersonic H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> combustion: application to a rocket-like igniter, *J. Propul. Power.*
3. L. Bouheraoua, P. Domingo, G. Ribert (2017) Large Eddy Simulation of a supersonic lifted jet flame: Analysis of the turbulent flame base, *Combust. Flame* (179): 199 - 218.
4. G. Ribert, X. Petit, P. Domingo (2017) High-pressure methane-oxygen flames. Analysis of sub-grid scale contributions in filtered equations of state, *J. Supercritical Fluids* (121): 78 - 88.
5. P. Gupta, G. Lodato, and C. Scalo. Spectral energy cascade in thermoacoustic shock waves, *Journal of Fluid Mechanics*, 831, 358–393, (2017).
6. J.-B. Chapelier, G. Lodato. Study of the Spectral Difference numerical dissipation for turbulent flows using unstructured grids, *Flow Turbulence and Combustion*, in press, (2017).
7. G. Lodato, L. Vervisch, and P. Clavin. Numerical study of smoothly perturbed shocks in the Newtonian limit, *Flow Turbulence and Combustion*, 99(3), 887–908, (2017).
8. N. Jaouen, L. Vervisch, P. Domingo, G. Ribert (2017) Automatic reduction and optimisation of chemistry for turbulent combustion modeling: Impact of the canonical problem, *Combust. Flame* (175): 60 - 79.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. U. Guven, G. Ribert, Large eddy simulation of supersonic H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> combustion. 26th ICDCS, Boston (USA), 2017.
2. J.L. Ruan, P. Domingo, G. Ribert, LES of supersonic combustion in cavity-based scramjet. SIAM Int. Conf. on Numerical Combustion, Orlando, Florida (USA), 2017.
3. D. Midou, P. Domingo, G. Ribert, Large-Eddy Simulation of Pulverised-Coal Combustion. SIAM Int. Conf. on Numerical Combustion, Orlando, Florida (USA), 2017.
4. G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch, Sub-grid scale modeling of the equation of state for fully compressible combustion LES. SIAM Int. Conf. on Numerical Combustion, Orlando, Florida (USA), 2017.
5. U. Guven, G. Ribert, Numerical simulation of transcritical H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> flame. SIAM Int. Conf. on Numerical Combustion, Orlando, Florida (USA), 2017.
6. U. Guven, G. Ribert, Simulation of supersonic H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> combustion. 8th ECM (Dubrovnik, Croatia), 2017.
7. K. Bioche, G. Ribert, L. Vervisch, Premixed flame propagation in a boundary layer. SIAM Int. Conf. on Numerical Combustion, Orlando, Florida (USA), 2017.
8. J.-B. Chapelier and G. Lodato. Evaluation of a dynamic LES model for the computation of free shear flows using a high-order numerical method. 10th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-10), Jul. 6–9, 2017, Chicago, IL (USA).
9. G. Lodato and J.-B. Chapelier. Evaluation of the Spectral Element Dynamic Model for LES on unstructured, deformed meshes. ERCOFTAC Workshop: Direct and Large-Eddy Simulations 11 (DLES-11), May 29–31, 2017, Pisa (Italy).
10. E. Bossennec, G. Lodato and L. Vervisch. Turbulent Flame Sub-Grid Scale Modeling with High-Order Spectral Difference. 16th International Conference on Numerical Combustion (ICNC 2017), Apr. 3–5, 2017, Orlando, FL (USA).



11. J.-B. Chapelier and G. Lodato. Optimal high-order Spectral Difference schemes for the computation of aeroacoustics and turbulence. 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Science and Technology Forum and Exposition 2017, Jan. 9–13, 2017, Grapevine, TX (USA).
12. P. Gupta, C. Scalo and G. Lodato. Numerical Investigation and Modeling of Thermoacoustic Shock Waves. 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Science and Technology Forum and Exposition 2017, Jan. 9–13, 2017, Grapevine, TX (USA).

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Dorian Midou, thèse soutenue en avril 2017, encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Nicolas Jaouen, thèse soutenue en mars 2017, encadrants P. Domingo/L. Vervisch
- Bastien Duboc, thèse soutenue en novembre 2017, encadrants P. Domingo/G. Ribert

**Thèses en cours sur le projet**

- 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
- Andréa Seltz, encadrants L. Vervisch / P. Domingo

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- EM2C, Centrale Supélec, Paris
- IRPHE, Marseille
- Université de Purdue (USA)
- Université de Stanford (USA)

---

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

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Benjamin DURET

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

Heures.CPU 2017 : 1 8837 10

**Communications dans des congrès internationaux**

1. J. ANEZ, A. AHMED, S. PUGGELLI, J. RÉVEILLON, J.C. BRÄNDLE DE MOTTA, F.X. DEMOULIN, Subgrid Liquid Flux and interface modelling for LES of Atomization, 28th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Valencia, Spain, 2017.
2. R. CANU, C. DUMOUCHEL, B. DURET, J. REVEILLON, F.X. DEMOULIN, T. MÉNARD, M. ESSADKI, M. MASSOT, S. PUGGELLI, Where does the drop size distribution come from? 28th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Valencia, Spain, 2017.
3. F.X. DEMOULIN, Toward a fully simulated injection: from the in injector flow to the final spray, 28th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Valencia, Spain, invited speaker, 2017.

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Paul Chausserie-Lapree, Simulation aux grands échelles de sprays issus d'injecteurs haute-pression.

**Thèses en cours sur le projet**

- Javier Anez Perdomo : Modeling an Oil Injector for Reactor.
- Stefano Puggelli : Development of a Quasi Multiphase Eulerian approach for scale resolved simulations for aero-engine combustors.
- Felix Dabonneville : Association of Smoothed Particle Hydrodynamics and Eulerian methods for atomization modelling.
- Romain Canu : Simulation numérique directe d'écoulement diphasique avec changement de phase.
- Alberto Remigi : Développement d'une approche numérique pour l'amélioration d'un injecteur aéronautique.

**14. 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 - Lille - UMR 8522 (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2017 : 104 823

**Publications de rang A**

1. SKOVIERA J., NEOGRADY P., LOUIS F., PITONAK M., CERNUSAK I., Caesium hydride: MS-CASPT2 potential energy curves and  $A1\Sigma^+ \rightarrow X1\Sigma^+$  absorption/emission spectroscopy, *Journal of Chemical Physics*, 146, 104304 (10 pages), 2017.
2. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., CERNUSAK I., Thermochemistry of HIO<sub>2</sub> species and Reactivity of Iodous Acid (HOIO) with OH radical: A Computational Study, *ACS Earth and Space Chemistry*, 1, 39-49, 2017.
3. KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., CERNUSAK I., Investigation of the Reaction Mechanism and Kinetics of Iodic Acid with OH radical using Quantum Chemistry, *ACS Earth and Space Chemistry*, 1, 227-235, 2017.
4. SKOVIERA J., CERNUSAK I., LOUIS F., NEOGRADY P., MS-CASPT2 study of the ground and low lying states of CsH<sup>+</sup>, *Journal of Molecular Modeling*, 23, 1-7, 2017.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. VILLARD A., KHANNICHE S., KHIRI D., FORTIN C., FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P., CANTREL L., COUSIN F., CERNUSAK I., LOUIS F., Modelling of iodine atmospheric Chemistry, *Computational chemistry for pollutant mitigation*, Rueil-Malmaison, 13-14 Mars 2017.
2. LOUIS F., FORTIN C., KHANNICHE S., VILLARD A., KHIRI D., FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P., RIBAUCCOUR M., COUSIN F., CANTREL L., CERNUSAK I., Atmospheric chemistry of iodine from molecular level to chemistry-transport modelling, *International Conference on Aerosol Cycle (ICAC)*, Villeneuve d'Ascq, 21-23 Mars 2017.
3. LOUIS F., FORTIN C., KHANNICHE S., VILLARD A., KHIRI D., FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P., RIBAUCCOUR M., COUSIN F., CANTREL L., CERNUSAK I., Iodine atmospheric chemistry of iodine from molecular level to chemistry-transport modelling, *Atmospheric Chemical and Biological Processes: Interactions and Impacts (ATMOCHEMIO)*, Clermont-Ferrand, 19-21 Juin 2017.
4. KHIRI D., RIBAUCCOUR M., EL BAKALI A., LOUIS F., CERNUSAK I., Thermochemical properties of halogenated peroxy and alkoxy radicals of atmospheric interest, *Central European Symposium on Theoretical Chemistry*, Wisla (Pologne), 3-7 Septembre 2017.
5. ALLOUTI F., SOUVI S., MARKOVITS A., LOUIS F., Interaction of ozone and water on potassium iodide aerosol, *Computational chemistry for pollutant mitigation*, Rueil-Malmaison, 13-14 Mars 2017.

6. ALLOUTI F., SOUVI S., MARKOVITS A., LOUIS F., Interaction of ozone and water with KI aerosols, International Conference on Aerosol Cycle (ICAC), Villeneuve d'Ascq, 21-23 Mars 2017.
7. VILLARD A., CANTREL L., CERNUSAK I., LOUIS F., Thermochemical properties for iodine nitrogen oxides in gaseous and aqueous phases, International Conference on Aerosol Cycle (ICAC), Villeneuve d'Ascq, 21-23 Mars 2017.
8. FORTIN C., LOUIS F., FEVRE-NOLLET V., COUSIN F., LEBEGUE P, Modelling iodine interactions with atmospheric aerosols, International Conference on Aerosol Cycle (ICAC), Villeneuve d'Ascq, 21-23 Mars 2017.
9. KHIRI D., LOUIS F., CERNUSAK I., Reactivity of CH<sub>3</sub>I and CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub> with H atoms, International Conference on Aerosol Cycle (ICAC), Villeneuve d'Ascq, 21-23 Mars 2017.
10. KHANNICHE S., HE X., RISSANEN M., LOUIS F., SIPILÄ M., CERNUSAK I., CANTREL L., Atmospheric chemistry of iodic acid HIO<sub>2</sub>; field measurements, thermochemistry, and gas-phase reactivity, International Conference on Aerosol Cycle (ICAC), Villeneuve d'Ascq, 21-23 Mars 2017.
11. KHIRI D., LOUIS F., CERNUSAK I., Reactivity of CH<sub>3</sub>I and CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub> with H: (H, I)-abstraction and I-substitution reaction pathways, XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (CHITEL), Paris, 3-7 Juillet 2017.
12. SULEIMAN S., NOVOTNY M., LOUIS F., CERNUSAK I., On the applicability of MP2.5 method in atmospheric chemistry, XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (CHITEL), Paris, 3-7 Juillet 2017.
13. SULEIMAN S., CERNUSAK I., NOVOTNY M., LOUIS F., MP2.5 method in atmospheric reactivity? Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Wisla (Pologne), 3-7 Septembre 2017.

#### Communications dans des congrès nationaux

1. KHIRI D., KHANNICHE S., FORTIN C., FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P, COUSIN F., ČERNUŠÁK I., LOUIS F., Thermochemical properties on reactivity of iodine-containing species, Groupe de Cinétique et de Photochimie en Phase Gazeuse, Douai, 20-21 - 1 Juin 2017.

#### Thèses soutenues en 2017 sur le projet

- ŠKOVIERA J. : Structure, interactions, and reactivity of molecules not easily amenable to experiment. Thèse co-tutelle France/Slovaquie, Bourse du Gouvernement Français (2012-2017), soutenue le 25 Septembre 2017.

#### Thèses en cours sur le projet

- 2015-2018 : FORTIN C. : Modélisation de l'interaction iode/atmosphère. Thèse avec bourse Lille1.

#### Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

---

#### 15. **Projet : 2007013**

---

##### Intitulé : Étude 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 2017 : 76 462

##### **Publications de rang A**

1. Marie Bernadette Lepetit et Alain Gellé, Effective Valence-Bond theory for strongly correlated systems Computational and Theoretical Chemistry vol 1116, 59 (2017), [DOI : 10.1016/j.comptc.2017.01.006](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2017.01.006).

- Elena Cannuccia, Vinh TaPhuoc, Benjamin Brière, Laurent Cario, Etienne Janod, Benoît Corraze et Marie Bernadette Lepetit, Combined first principle calculations and experimental study of the phonon modes in the multiferroic compound GeV4S8 compound, *J. Phys. Chem C*, 121, 3522 (2017).
- G. Yahia, F. Damay, S. Chattopadhyay, V. Balédent, W. Peng, E. Elkaim, M. Whitaker, M. Greenblatt, M.-B. Lepetit et P. Foury-Leylekian, Recognition of exchange-striction as origin of magnetoelectric coupling in multiferroics, *Phys. Rev. B* 95, 184112 (2017).
- M.-B. Lepetit, A. Zrineh et O.-K. Kabbaj, Theoretical Characteristics of Metalloporphyrins (OEP) M (CH<sub>3</sub>) (M=Al, Ga, In and Tl), *Der Pharma Chemica*, 9, 80 (2017).
- Wey Peng, Victor Balédent, Sumantha Chattopadhyay, Marie-Bernadette Lepetit, Ghassen Yahia, Claire V. Colin, M. J. Gooch, C. R. Pasquier, P. Auban Senzier, M. Greenblatt, Pascale Foury-Leylekian, Toward pressure induced multiferrocity in PrMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, *Phys. Rev. B* 96, 054418 (2017).
- L. Palatinus, P. Brázda, P. Boullay, O. Perez, S. Petit, V. Eigner, M. Zaarour, S. Mintova, Hydrogen positions in single nanocrystals revealed by electron diffraction, *Science* 355, 166 (2017).

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Aysegul Begüm KOCAK, thèse en cotutelle Université de Grenoble et Université de Liège (Belgique), soutenance 6 septembre 2017.

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

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Yves D'ANGELO

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

Heures.CPU 2017 : 17 739

**17. 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 2017 : 75 834

**Communications dans des congrès internationaux**

- H. Kansa, D. Ledue, R. Patte, Exchange anisotropy in ferromagnetic/antiferromagnetic nanodots : A Monte Carlo study, HMM 2017, Barcelone (29-31/05/2017) (Communication orale).

**Communications dans des congrès nationaux**

- H. Kansa, D. Ledue, R. Patte, Anisotropie d'échange dans les nanoplots ferromagnétiques/antiferromagnétiques : Etude par simulations Monte Carlo, Colloque L. Néel, Paris (24-27/09/2017) (Communication par affiche).

**Thèses en cours sur le projet**

- 2016 : 2019 - H. Kansa : Étude par simulations numériques des propriétés d'anisotropie d'échange de nanoplots ferromagnétiques/antiferromagnétiques – Comparaison à l'expérience

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

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

**18. Projet : 201010 et 2014008****Intitulé : Topologie quantique****Intitulé : Développement de nouveaux descripteurs atomiques et moléculaires pour la caractérisation des liaisons "faibles"**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT et Vincent TOGNETTI

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2017 : Projets clos

**Publications de rang A**

1. V. Tognetti, S. Bouzbouz, L. Joubert, A theoretical study of the diastereoselective allylation of aldehydes with new chiral allylsilanes, *J. Mol. Model.* 2017, 23, 5.
2. V. Tognetti, F. Guégan, D. Luneau, H. Chermette, C. Morell, L. Joubert, Structural effects in octahedral carbonyl complexes: an atoms-in-molecules study, *Theor. Chem. Acc.* 2017, 136, 85.
3. M. Mignot, B. Schammé, V. Tognetti, L. Joubert, P. Cardinael, V. Peulon-Agasse, Anthracenyl polar embedded stationary phases with enhanced aromatic selectivity. Part II: A density functional theory study, *J. Chro. A* 2017, 1519, 91-99.
4. V. Tognetti, L. Joubert, On Atoms-in-Molecules Energies from Kohn–Sham Calculations, *ChemPhysChem* 2017, 18, 2675-2687.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. V. Tognetti; The Chemical Bonds at the 21st century, Aachen, Allemagne (02-04/09/2017), Quantum descriptors for chemical bonding and reactivity (conférence invitée).
2. V. Tognetti; 17ème International Conference on Density Functional Theory and its Applications, Tällberg, Suède (21-25/08/2017), The DFT-CDFT-QTAIM synergy to investigate chemical reactivity (conférence invitée).

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Guillaume Hoffmann (2017-2020).

**19. 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 2017 : 52 598

**20. 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 - UMR 6283 (LE MANS)

Heures.CPU 2017 : 1 470

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

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Vincent MOUREAU

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

Heures.CPU 2017 : 8 813 723

**Publications de rang A**

1. Legrand, N., Lartigue, G. & Moureau, V. (2017) A multi-grid framework for the extraction of large-scale vortices in large-eddy simulation. *J. Comp. Physics*, 349.
2. 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*, 42 (4), 2397–2410.
3. Zmijanovic, V., Mendez, S., Moureau, V. & Nicoud, F. (2017) 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.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Barnaud, F., Bénard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Deglaire, P. (2017) Flow around thick airfoils at very high reynolds number. stall and dynamic stall applications. *Direct and Large-Eddy Simulation 11*. Pisa, Italy.
2. Boulet, L., Bénard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Didorally, S. (2017) Modeling of conjugate heat transfer in a kerosene/air spray flame used for aeronautical fire resistance tests. *Direct and Large-Eddy Simulation 11*. Pisa, Italy.
3. Bénard, P., Bricteux, L., Moureau, V., Lartigue, G., Beaudet, L., Deglaire, P. & Viré, A. (2017) Highly resolved large-eddy simulation of wind turbine wakes. *Parallel CFD Conference*. Glasgow, Scotland.
4. Bénard, P., Bricteux, L., Moureau, V., Lartigue, G., Beaudet, L., Deglaire, P. & Viré, A. (2017) Highly resolved large-eddy simulation of wind turbine wakes. *Wind Energy Science Conference*. Copenhagen, Denmark.
5. Bricteux, L., Bénard, P., Zéoli, S., Lartigue, G., Moureau, V. & Viré, A. (2017) Wall modeled LES of wind turbine wakes with geometrical effects. *DFD Meeting of The American Physical Society*. Denver, USA.
6. Moureau, V., Mercier, R. & Fiorina, B. (2017) The filtered wrinkled flame (fwf) model for large-eddy simulation of turbulent premixed combustion. *International Conference on Numerical Combustion (ICNC)*. Orlando, FL, USA.
7. Boulet, L., Bénard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Didorally, S. (2017) Conjugate heat transfer modeling in a kerosene/air spray flame impacting a plate towards modeling of fire resistance on helicopter crank-cases. *International Conference on Numerical Combustion (ICNC)*. Orlando, FL, USA.
8. Akkari, N., Mercier, R., Lartigue, G. & Moureau, V. (2017) Stable pod-galerkin reduced order models for unsteady turbulent incompressible flows. *55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Science and Technology Forum and Exposition*. Grapevine, Texas, USA.

9. Maio, G., Cailler, M., Fiorina, B., Mercier, R. & Moureau, V. (2017) Les modeling of piloted jet flames with inhomogeneous inlets using tabulated chemistry methods. 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Science and Technology Forum and Exposition. Grapevine, Texas, USA.
10. Mehl, C., Fiorina, B., Mercier, R. & Moureau, V. (2017) The filtered wrinkled flame (fwf) model for large-eddy simulation of turbulent premixed combustion. 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Science and Technology Forum and Exposition. Grapevine, Texas, USA.

#### Thèses soutenues en 2017 sur le projet

- N. Legrand. Higher-order methods for multi-level Large-Eddy Simulation. 13/12/2017.

#### 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 : F. Barnaud, "Modeling of dynamic stall on wind turbine blades". PhD director : Prof Luminita Dainala.
- 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.
- 2016-2019 : P. Domingo, "Modeling of high pressure combustion", Chaire ANR/SAFRAN, PhD director : Prof. 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

---

## 22. **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 2017 : 1 185 214

#### Publications de rang A

1. Demange, G., Zapolsky, H., Patte, R., & Brunel, M. (2017). A phase eld model for snow crystal growth in three dimensions. NPJ Computational Materials, 3, 2017.
2. Brunel, M., Demange, G., Fromager, M., Talbi, M., Zapolsky, H., Patte, R., & Quevreur, B. " Instrumentation for ice crystal characterization in laboratory using interferometric out-of-focus imaging". Review of Scientific Instruments, 88(8), 083108.
3. Demange, G., Zapolsky, H., Patte, R., & Brunel, M. "Growth kinetics and morphology of snow flakes in supersaturated atmosphere using a threedimensional phase- eld model. Physical Review E, 96(2), 022803.2017.
4. S. Chentouf, S. Cazotte, F. Danoix, M. Gouné, H. Zapolsky, P. Maugis « Effect of interstitial carbon distribution and nickel substitution on the tetragonality of martensite: A first-principles study » Intermetallic, 89 pp.92-99 (2017).

5. H. Zapolsky, G. Demange, R. Kozubski « From atomistic to mesoscopic modelling of phase transitions” Division Foundations "Multiscale modelling of diffusion- controlled phenomena in condensed matter.” Edited by: Graeme E. Murch, Irina, V. Belova, Andreas Öchsner and R. Kozubski, Scientific.Net, 2017.
6. A. Dahlstrom, F. Danoix, P. Hedstrom, J. Odqvist, H. Zapolsky « An Experimental Assessment of the  $\alpha + \alpha'$  Miscibility Gap in Fe- Cr » In book: TMS 2017 146th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings, pp.711-718, 2017.

#### **Communications dans des congrès internationaux**

1. H. Zapolsky « Quasiparticle approach to study the kinetics of self-assembly in complex material », 9th World Congress on Materials science and Engineering, Rome, 2017.
2. H. Zapolsky « Quasiparticle Atomistic Approach to model a Self- Assembly Kinetics of Complex Structures and Structural Defects » Workshop II: Stochastic Sampling and Accelerated Time Dynamics on Multidimensional Surfaces, Octobre 16-20, 2017, UCLA, IPAM, Los Angeles.
3. H. Zapolsky, A. Vaugeois, R. Patte, M. Lavrskyi, A.G. Khachaturyan " Atomistic modelling of complex structure” TMS , San Diego, 2017
4. H. Zapolsky, A. Vaugeois, R. Patte, M. Lavrskyi, A.G. Khachaturyan " Atomistic modelling of carbon diffusion in Fe-C” TMS , San Diego, USA, 2017.
5. Demange, G., Zapolsky, H., Patte, R., & Brunel, M. « Phase field modeling of ice crystal growth in 3D : from dendrites to facets », San Diego, USA, 2017.

#### **Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Mykola Lavrskyi (janvier 2017)
- Antoine Vaugeois (décembre 2017)

#### **Thèses en cours sur le projet**

- Bence Gajdics
- Olha Nakonechna
- Alexander Dahlstrom

#### **Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- A.G. Khachaturyan (Rutgers University, USA)
- Z. Elderiy (Université de Debrecen, Hongrie)
- P. Maugeis (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)
- J. Odqvist (KTH, Stockholm, Suède)



**23. 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 2017 : 118 916

**Communications dans des congrès internationaux**

1. S. Hupin ; H. Lavanant ; M. Piot ; G. Izzet ; C. Afonso ; Collision Cross Sections of Polyoxometalates : linking experimental and theoretical values, 65th ASMS conference on mass spectrometry and allied topics, Indianapolis Etats-Unis, 4-8 Juin 2017.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. S. Hupin ; H. Lavanant ; M. Piot ; G. Izzet ; C. Afonso ; Collision Cross Sections of Polyoxometalates : linking experimental and theoretical values, Spectrométrie de Masse, Métabolomique et Analyse Protéomique 2017, Marne-la-vallée, 2-5 octobre 2017.

**Thèses en cours sur le projet**

2016-2018 : Sébastien HUPIN, Caractérisation de polyoxométallates hybrides organiques-inorganiques par mobilité ionique et spectrométrie de masse, Doctorat de l'université de Rouen Normandie. Financement : MESR. Co-encadrement 50 % (Directeur : Carlos AFONSO 50 %)

**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,

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

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Carole Le GUYADER

Laboratoire : LMI - EA 3226 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2017 : 281

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

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

**25. 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 2017 : 23 691

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Présentation par Hans Gunnoo d'un poster à la conférence EGU General Assembly 2017, 23-28 April 2017, Vienne, Autriche.

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Hans Gunnoo soutenue le 21 décembre 2017 à l'Université de Caen Normandie : « Etudes des structures spatio-temporelles dans un sillage de mât conditionnées par l'action commune des vagues et des courants », encadré par D. Levacher, N. Abcha et AC. Bennis

**26. 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 (ECULLY)

Heures.CPU 2017 : 1 801

**27. 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 2017 : 1 852

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Sophie Lemaitre, Modélisation des matériaux composites multiphasiques à microstructures complexes. Étude des propriétés effectives par des méthodes d'homogénéisation. Date de soutenance : 13/07/2018. Directeur de thèse : Philippe Karamian, co-directeur de thèse : Alain Campbell.

**28. Projet : 2014003**

**Intitulé : Étude 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 2017 : 335 703

**29. Projet : 2014007**

**Intitulé : Conduction électrique le long des dislocations dans les nano-fils de matériaux nitrures-III.**

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2017 : 907 363

**Communications dans des congrès internationaux**

1. L. Pizzagalli, I. Belabbas J. Kioseoglou and J. Chen, "First principles calculations of threading screw dislocation properties in III-nitride compounds", MRS Fall meeting. Boston (USA), November 26th – December 1st, (2017)

**Communications dans des congrès nationaux**

1. I. Belabbas, "Structure électronique des dislocations dans le nitrure de gallium.", 2ème Congrès de Physique et de Chimie Quantique (CPCQ 2017), Tizi-Ouzou (Algérie) 27-30 mars (2017)

**Thèses en cours sur le projet**

- 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)**

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

**30. 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 2017 : 826

**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.

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

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Ionut DANAILA

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

Heures.CPU 2017 : 144 264

**Publications de rang A**

1. I. Danaila, B. Protas, Computation of Ground States of the Gross-Pitaevskii Functional via Riemannian Optimization, SIAM J. Scientific Computing, to appear, 2017.
2. I. Danaila, F. Kaplanski and S. Sazhin, A model for confined vortex rings with elliptical core vorticity distribution, Journal of Fluid Mechanics, 811, p. 67-94, 2017.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. I. Danaila, Finite-element tools for the simulation of Bose-Einstein condensates, 27th Biennial Conference on Numerical Analysis, University of Strathclyde, Glasgow, UK, (June 2017).
2. I. Danaila, Computation of stationary states of rotating Bose-Einstein condensates via Riemannian Optimization, Conference and school Focus Activity on Mathematical and Computational methods for Quantum and Kinetic Problems, Beijing Computational Science Research Center, (June 2017).
3. I. Danaila, P. Parnaudeau, High performance computing of the 3D structure of Bose Einstein condensates, Workshop on Advances in mathematical modelling and numerical simulation of superfluids, University of Rouen Normandy, (September 2017).

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Guillaume Vergez : Modélisation et simulation numérique de condensats de Bose-Einstein. Financement : projet ANR BECASIM. Thèse soutenue le 6 juin 2017 au LMRS, Université de Rouen Normandie. Responsables I. Danaila (LMRS) et F. Hecht (UPMC).

**Stages de Master en 2017 sur le projet**

- Stage de M2, ENS Cachan et M2 AMS (Analyse, Modélisation, Simulation) de Paris-Saclay. Pierre-Emmanuel Emeriau : Méthodes numériques pour les condensats de Bose-Einstein, Responsables I. Danaila (LMRS) et F. Hecht (UPMC).

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- ANR BECASIM 2013-2017 (21 chercheurs permanents, 5 post-docs et 1 doctorant) : 10 laboratoires de mathématiques.

**32. 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 2017 : 1 182 536

**Publications de rang A**

A. Albaalbaky, Y. Kvashnin, D. Ledue, R. Patte, R. Frésard, Magneto-electric properties of multiferroic CuCrO<sub>2</sub> studied by means of ab-initio calculations and Monte Carlo simulations, Phys. Rev. B 96, 064431 (2017).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. A. Al Baalbaky, Y. O. Kvashnin, D. Ledue, R. Patte and R. Frésard, Domain rearrangement and tuning of ferroelectricity by external magnetic fields in the multiferroic CuCrO<sub>2</sub>: a Monte Carlo approach, INTERMAG 2017, Dublin (Ireland) (24-28/04/2017) (Communication orale).
2. A. Albaalbaky, D. Ledue, R. Patte, "Effect of Ga<sup>3+</sup> doping on the magnetoelectric properties in the semiconductor CuCr<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>O<sub>2</sub> (0 ≤ x ≤ 0.15): a Monte Carlo approach", MMM2017, Pittsburgh (USA) (6-10/11/2017) (Communication orale).
3. A. Al Baalbaky, Y. O. Kvashnin, D. Ledue, R. Patte and R. Frésard, "Monte Carlo investigations of the magnetoelectric properties of frustrated delafossite oxides CuCr<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>O<sub>2</sub> (0 < x < 0.2)", INTERMAG 2017, Dublin (Ireland) (24-28/04/2017) (Communication par affiche).

**Thèses en cours sur le projet**

- A. Al-Baalbaky, «Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes» Thèse débutée en novembre 2014, soutenance le 21/12/2017.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- R. Frésard, CRISMAT, ENSICAEN, Caen.
- S.Y. Kvashnin, Department of Physics and Astronomy, Uppsala University (Suède)

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

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Jorge PEIXINHO

Laboratoire : LOMC - UMR 6294 (LE HAVRE)

Heures.CPU 2017 : 202 206

**Communications dans des congrès internationaux**

1. G. Anjos, E. Gros, K. Selvam and J. Peixinho, Rising bubble in a vertical slowly diverging pipe, 9th World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Iguazu Falls, Brazil (2017)
2. M. Q. Nguyen, B. Lebon, M. S. Shadloo, J. Peixinho, A. Hadjadj, Transition to turbulence in sudden expansion pipe flow, Euromech Symposium 591: 3-D Instability mechanisms in transitional and turbulent flows, Bari, Italy (2017)
3. B. Lebon, M. Q. Nguyen, S. Ishizaka, Y. Tasaka, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, J. Peixinho, Experiments with disturbances on the flow through a sudden expansion in a circular pipe, Euromech Symposium 591: 3-D Instability mechanisms in transitional and turbulent flows, Bari, Italy (2017)

**Thèses en cours sur le projet**

- Valentin Ageorges : Efforts sur des éléments de structures houlomotrices, immergés ou partiellement immergés soumis à la houle et au courant [2016-2019].

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- 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.

**34. 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 2017 : 2 531 956

**Publications de rang A**

1. V. Koverga, O. Korsun, O. Kalugin, B. Marekha, A. Idrissi, A new potential model for acetonitrile: Insight into the local structure organization, Journal of Molecular Liquids 233 (2017) 251-261
2. A. Idrissi, B. Marekha, M. Barj, F.A. Miannay, T. Takamuku, V. Raptis, J. Samios, P. Jedlovsky, Local structure of dilute aqueous DMSO solutions, as seen from molecular dynamics simulations, Journal of Chemical Physics 146 (2017) 234507

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Thèse de doctorat de Volodymyr Koverga, soutenue le 19/12/2017.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Ari Paavo SEITSONEN, Ecole Normale Supérieure, Paris

**35. Projet : 2015008****Intitulé : Étude 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 2017 : 708

**Publications de rang A**

1. Mignot, M.; De Saint Jores, C.; Tchaplà, A.; Boyer, F.; Cardinael, P.; Agasse, V. New anthracenyl polar embedded stationary phases with enhanced aromatic selectivity, a combined experimental and theoretical study: Part 1-experimental study. *J. Chromatogr. A* 1512 (2017) 9–21. (IF most recent: 3.981).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Mignot, M.; Schammé, B.; Tognetti, V.; Joubert, L.; Tchaplà, A.; Mercier, O.; Cardinael, P.; Peulon-Agasse, V. ; Vers une meilleure compréhension des propriétés chromatographiques par la modélisation moléculaire : Etude de phases stationnaires aromatiques (mono et trifonctionnelle) à groupement polaire intercalé. ; 2ème congrès francophone de l'AFSEP sur les Sciences séparatives et les couplages, Versailles, 2017, March, 28-30th.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Mignot, M.; Tchaplà, A.; Mercier, O.; Cardinael, P.; Peulon-Agasse, V. ; Elaboration d'une gamme de phases stationnaires sur silice partiellement poreuses : quelles modifications de surface pour quelles applications ? Xèmes journées scientifiques du Club Jeunes de l'AFSEP, Montpellier, 2017, Novembre, 13-14.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Dr Vincent Tognetti et Pr Laurent Joubert, Normandy University COBRA UMR 6014 & FR 3038, Université de Rouen, INSA Rouen, CNRS Mont-Saint-Aignan Cedex France.
- Dr Valérie Peulon Agasse et Pr Pascal Cardinael, Normandie Université, Laboratoire SMS - EA3233, Université de Rouen, 76281, Mont Saint Aignan, France.

**36. 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 2017 : 42 128

**37. 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 2017 : Projet clos en 2016

**Publications de rang A**

1. A. Rivier, A.-C. Bennis, G. Jean, J.-C. Dauvin. Hydrodynamic consequences of biofouling organisms on marine energy converters. International Marine Energy Journal, Vol 2, pp101-109, 2018.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. A. Rivier, A.-C. Bennis, G. Jean, J.-C. Dauvin. Hydrodynamic consequences of biofouling organisms on marine energy converters. Proceeding of the 12th European Wave and Tidal Energy Conference, Ireland, 27th August to 2nd September 2017.

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Hans Gunnoo, Études des structures spatio-temporelles dans un sillage de mât conditionnées par l'action commune des vagues et des courants. Thèse de doctorat (octobre 2014 - décembre 2017) soutenue le 21 décembre 2017. Direction : D. Levacher, A.-C. Bennis, N. Abcha et A. Ezersky.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- ANR HYD2M

**38. 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 2017 : 8 613

**Articles dans des revues professionnelles spécialisées**

1. Coudon T, Hourani H, Fervers B, Salizzoni P. 2017. Assessment of long-term exposure to airborne dioxin and cadmium concentrations in the Lyon Metropolitan Area (France). Environment International. In press.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. T. Coudon, E.Faure, A.Danjou, F. Clavel-Chapelon, P. Salizzoni, B. Fervers; Development of a geographic information system (gis) based exposure metric to assess environmental dioxin exposure and comparison with an urban gaussian model ; CLARA - Forum de la recherche en cancérologie Auvergne-Rhône-Alpes ; 04/04/2017 – Espace tête d'or - Villeurbanne (communication par affiche).



**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.

**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

**39. Projet : 2016002****Intitulé : FireDiag**

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques  
Porteur : Emilien VAREA  
Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)  
Heures.CPU 2017 : 7 462

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- ANR Firediag

**40. Projet : 2016003****Intitulé : Geometrical and Statistical Properties of Turbulent Flows with Varying Viscosity**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs  
Porteur : Luminata DANAILA  
Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)  
Heures.CPU 2017 : 36 842

**Publications de rang A**

1. Gauding, Michael & Danaila, Luminata & Varea, Emilien. (2017). High-order structure functions for passive scalar fed by a mean gradient. International Journal of Heat and Fluid Flow. 10.1016/j.ijheatfluidflow.2017.05.009.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. M. Gauding, L. Danaila, E. Varea, The self-preservation of dissipation elements in homogeneous isotropic decaying turbulence, Proceedings of the 11th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing (2017).
2. M. Gauding, L. Danaila, E. Varea, Dissipative range statistics of turbulent flows with variable viscosity, Proceedings of the 10th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, (2017).
3. M. Gauding, L. Danaila, E. Varea, J. Boschung, J. H. Goebbert, Self-similarity of passive scalar structure functions in decaying turbulence, Proceedings of the 16th European Turbulence Conference (2017).
4. H. Sadeghi, M. Oberlack, M. Gauding, Temporally evolving turbulent jet: dns and new symmetry induced scaling, Proceedings of the 16th European Turbulence Conference (2017).

**41. Projet : 2016005****Intitulé : COACH-IPP**

Famille thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Ronan BUREAU

Laboratoire : CERMN - UNICAEN EA 4258 (CAEN)

Heures.CPU 2017 : 290

**42. 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 2017 : 4 357 102

**Publications de rang A**

1. Siqian Li, Huaping Lei, Zhuo Wang, Jun Chen, and Pierre Ruterana, Energetic and electronic properties of (0001) inversion domain boundaries in ZnO, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics, 1700429 (2017).
2. Ranim Mohamad, Antoine Bere, Jun Chen, and Pierre Ruterana, Investigation of strain effects on phase diagrams in the ternary nitride alloys (InAlN, AlGaIn, InGaIn), Phys. Status Solidi A, 1600752 (2017).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Siqian Li, Huaping Lei, Yi Wang, Md. Barkat Ullah, Jun Chen, Hadis Morkoç, Peter van Aken and Pierre Ruterana, Basal plane inversion domain boundary in ZnO/GaN heterostructures, 12th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS 2017 Strasbourg France Poster).
2. R. Mohamad, J. Chen et P. Ruterana, The miscibility of III nitride quaternary alloys, 12th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS 2017 Strasbourg France Poster).
3. R. Mohamad, J. Chen et P. Ruterana, Phase separation in the III-V semiconductors ternaries and quaternary: an ab initio and empirical potential study, Nanotechnology-2017, Dallas 2017, Invited talk.

**Thèses en cours sur le projet**

- Ranim MOHAMAD, 2015-2018, Modélisation structurale et électronique de l'interface InAlN/GaN pour application au transistors de haute mobilité électronique.
- Siqian LI, 2015-2018, 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.

**43. 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 7311 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2017 : 28 644

**44. 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 7311 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2017 : 508 222

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Ziada S. et al, Molecular dynamics simulation to predict kinetic binding constants: application to kinase protein, K4DD Congress, 16-18 octobre 2017, Berlin.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Ziada S. et al, Prediction of kinetic binding constants using biased MD simulations, 20ème congrès du GGMM, 9-11 mai 2017, Reims.

**Thèses en cours sur le projet**

- Prédiction des constantes cinétiques de liaison des inhibiteurs de protéine kinase par des simulations de dynamique moléculaire (KinetiX4PKI).

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Collaboration avec l'institut de recherche Servier, Croissy sur Seine : Docteur Eric Raimbaud, Dr Pierre Ducrot.

**45. 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 2017 : 597

**Communications dans des congrès internationaux**

- European APT workshop, Oxford
- M&M 2017 Microscopy & MicroAnalysis St. Louis, Oral presentation

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de B. Klaes

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Collaboration avec S. Katnagaullu et B. Gault (Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Allemand) : Modelisation
- Collaboration avec M. Dagan et M. Moody (Université de Oxford)

**46. 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 : LUSAC - (CHERBOURG)

Heures.CPU 2017 : 779 378

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Grondeau M., Mercier P., Guillou S.S., Poirier J., Poizot E., Méar Y., Numerical Simulation of a Tidal Turbine Model in a Turbulent Flow with the Lattice Boltzmann Method, 12th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Cork, 28-31 August 2017, #913, 8p.
2. Mercier P., Grondeau M., Guillou S.S., Thiébot J., Poizot E., Toward the Modelling of Turbulence at Tidal Stream Power Sites with the Lattice Boltzmann Method, 12th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Cork, 28-31 August 2017, #892, 8p.
3. Nguyen V.T., Guillou S.S., Santa Cruz A., Shiekh Elsouk M. N., Thiébot J., Effect of a Varying Current Direction on the Energy Production of a Pilot Tidal Farm by a Pseudo Steady Approach, 12th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Cork, 28-31 August 2017, #977, 8p.
4. Nguyen V.T., Guillou S.S., Santa Cruz A., Shiekh Elsouk M. N., Thiébot J., Effect of a Varying Current Direction on the Energy Production of a Pilot Tidal Farm by a Pseudo Steady Approach, 12th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Cork, 28-31 August 2017, #977, 8p

**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).

**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-déc. 2018. Directeurs : S. Guillou et Y. Méar. Co-encadrant : E. Poizot.
- 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).
- Fatima KHALED : Modélisation de l'interaction hydrolienne et environnement sédimentaire. Utilisation de la méthode Blade Element Method. Financement: Gouvernement du Liban. Directeur : Yann Méar, Co-encadrants : Ferhat Hadri Sylvain Guillou (démarrage le 1 novembre 2016). Laboratoire de rattachement : LUSAC/LISV.

- BROUSSEAU P. : Modélisation numérique de la Pompe hydrodynamique PoHyCA, avec prise en compte de l'interaction fluide-structure, Financement : CIFRE/SEGULA. Directeurs : Sylvain Guillou et M. Benaouicha (Début : nov. 2017).

**Stages de Master en 2017 sur le projet**

- BROUSSEAU P., soutenu le 28/08/2017, Etude numérique du comportement hydrodynamique d'un hydrofoil en mouvement de pilonnement libre et de tangage, Université de Grenoble. Encadrants : M. Benaouicha, A. Santa Cruz, S. Guillou.

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

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

Porteur : Hamidréza RAMEZANI

Laboratoire : ICMN - UMR 7374 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2017 : 299 569

**Publications de rang A**

1. D. N. Kouetcha, H. Ramézani, N. Cohaut, Ultrafast scalable parallel algorithm for the radial distribution function histogramming using MPI maps, The Journal of Supercomputing, 2017, 73, 1629-1653.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Daniella Nguemalieu Kouetcha, Hamidréza Ramézani, Nathalie Cohaut, Numerical study of CO<sub>2</sub> adsorption on the activated carbon: Role of disordered network, size effect and temperature, Computational Chemistry for pollutant mitigation, Rueil-Malmaison (near Paris), France, 13-14 March 2017.
2. Daniella Nguemalieu Kouetcha, Hamidréza Ramézani, Nathalie Cohaut, Micro-pollutants adsorption through the synthesized carbon: Molecular simulation and experiments, Graphene2017, Barcelona, Spain, 28-31 March, 2017.

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Daniella Nguemalieu Kouetcha (2014-2017)

**Thèses en cours sur le projet**

- Zineb El Oufir

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Pr. Suresh Bhatia, Chemical Engineering Department, University of Queensland, Australia.

**48. Projet : 2016017****Intitulé : Simulation atomistique de quelques minéraux d'intérêt pour la géologie et la bio-minéralisation**

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2017 : 932 177

**Communications dans des congrès nationaux**

1. G. Chahi, I. Belabbas and D. Bradai, "Etude par simulation atomistique de l'ikaite", 2ème Congrès de Physique et de Chimie Quantique (CPCQ 2017), Tizi-Ouzou (Algérie) 27-30 mars (2017)
2. R. Belkofsi, I. Belabbas, "Etude par DFT de la calcite-VI sous pression", 2ème Congrès de Physique et de Chimie Quantique (CPCQ 2017), Tizi-Ouzou (Algérie) 27-30 mars (2017)

**Thèses en cours sur le projet**

- Ghiles Chahi, "Modélisation atomistique de quelques minéraux et cristaux moléculaires", Université des sciences et technologie Houari Boumediene d'Alger (Algérie), sous la direction de Prof. I. Belabbas.
- Reguia Belkofsi, "Etude par DFT et DFPT de quelques minéraux d'intérêt pour la géologie et la bio-minéralisation", Université de Bejaia (Algérie), sous la direction de Prof. I. Belabbas.

**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).

**49. Projet : 2016018****Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des dislocations dans les matériaux III-N**

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Caen - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2017 : 249 201

**Communications dans des congrès internationaux**

- I. Belabbas, G.P. Dimitrakopoulos, J. Kioseoglou, J. Smalc-Koiziorowska and J. Chen, "Shockley partial dislocations in gallium nitride", European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT 2017), Thessaloniki (Greece) September 17th-22nd, (2017).

**Thèses en cours sur le projet**

- Stefanos Giaremias, Université Aristote de Thessalonique (Grèce). Sous la direction de Prof. J. Kioseoglou.

**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).

**50. Projet : 2016019****Intitulé : WavyFilm**

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Nicolas GRENIER

Laboratoire : LIMSI - Orsay - UPR 3251 (ORSAY)

Heures.CPU 2017 : 187 378

**Communications dans des congrès internationaux**

1. G. Lavalle, S. Mergui, G. Dietze, N. Grenier, "Wave dynamics in counter-current gas-liquid flows for distillation process applications" dans 17th International workshop on trends in numerical and physical modeling for industrial multiphase flows, Cachan, 16-18 octobre 2017.
2. G. Lavalle, Y. Li, S. Mergui, G. Dietze, N. Grenier, "Instability of thin liquid films in strongly confined channels" dans 70th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Denver, 19-21 Novembre 2017.

**51. Projet : 2016022****Intitulé : Apprentissage statistique pour la compréhension de scènes audio**

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Alain RAKOTOMAMONJY

Laboratoire : LITIS (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2017 : 15 816

**Publications de rang A**

1. Nicolas Courty, Rémi Flamary, Devis Tuia, Alain Rakotomamonjy: Optimal Transport for Domain Adaptation. IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. 39(9): 1853-1865 (2017)
2. Alain Rakotomamonjy, Sokol Koço, Liva Ralaivola: Greedy Methods, Randomization Approaches, and Multiarm Bandit Algorithms for Efficient Sparsity-Constrained Optimization. IEEE Trans. Neural Netw. Learning Syst. 28(11): 2789-2802 (2017)
3. Alain Rakotomamonjy: Supervised Representation Learning for Audio Scene Classification. IEEE/ACM Trans. Audio, Speech & Language Processing 25(6): 1253-1265 (2017)

**Thèses en cours sur le projet**

- A. Traoré : apprentissage de représentation et décomposition de tenseurs (2016-2109).

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Remi Flamary, Université de Nice
- Nicolas Courty, Université de Bretagne Sud

**52. Projet : 2017001****Intitulé : Propriétés Optiques non-linéaires de Cristaux Moléculaires**

Famille thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Valérie DUPRAY

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

Heures.CPU 2017 : 137

**53. Projet : 2017002****Intitulé : Numerical Simulations of flow over Savonius-style wind turbines blades**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Mostafa SAFDARI SHADLOO

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

Heures.CPU 2017 : 4 183 709

**Communications dans des congrès internationaux**

1. M. Mndez-Gonzlez, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, A. Ducoin, "Boundary-Layer Transition Over Concave Surfaces Caused by Centrifugal Forces", EUROMECH SYMP. 591: 3-D Instability Mechanisms in Transitional and Turbulent Flows, 18-20 Sept. 2017, Bari, Italy.
2. M. Q. Nguyen, B. Lebon, M. S. Shadloo, J. Peixinho, A. Hadjadj, "Transition to Turbulence in a Sudden Expansion Pipe Flow", EUROMECH SYMP. 591: 3-D Instability Mechanisms in Transitional and Turbulent Flows, 18-20 Sept. 2017, Bari, Italy.
3. B. Lebon, M. Q. Nguyen, S. Ishizaka, Y. Tasaka, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, J. Peixinho, "Experiments with Disturbances on the Flow Through a Sudden Expansion in a Circular Pipe", EUROMECH SYMP. 591: 3-D Instability Mechanisms in Transitional and Turbulent Flows, 18-20 Sept. 2017, Bari, Italy.

**Thèses en cours sur le projet**

- Margio MENDEZ-GONZALEZ, Numerical Simulations of flow over Savonius-style wind turbines blades: application to efficient renewable energy conversion.
- Sushank SHARMA, Numerical Simulation of Turbulent Compressible Flows with Heat Transfer.

**54. Projet : 2017003****Intitulé : Modélisation de la relaxation structurale dans un biopolymère et dans son monomère**

Famille thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent DELBREILH

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

Heures.CPU 2017 : 5 562



**55. Projet : 2017004****Intitulé : Simulation directe des écoulements diphasiques**

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Jorge César BRANDLE DE MOTTA

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

Heures.CPU 2017 : 9 758

**Communications dans des congrès internationaux**

1. R. Canu, C. Dumouchel, B. Duret, J. Réveillon, F.X. Demoulin, T. Ménard, M. Essekadi, M. Massot, S. Puggelli, Where does the drop size distribution come from ? 28th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Valencia, Spain, 2017.
2. F.X. Demoulin, Toward a fully simulated injection : from the in injector flow to the final spray, 28th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Valencia, Spain, invited speaker, 2017.

**Thèses en cours sur le projet**

- Romain Canu, Simulation numérique directe d'écoulement diphasique avec changement de phase et prise en compte de particules multi-échelles. Depuis Octobre 2016.
- Victor Chéron, Traitement hybride de gouttes dans un spray atomisé. Depuis Octobre 2017.

**Stages de Master en 2017 sur le projet**

- Victor Chéron. Comparaison des méthodes IBM et Level-Set pour la prise en compte de gouttelettes Stage M2, CORIA/Université de Rouen.

**56. Projet : 2017005****Intitulé : Simulation numérique de matériaux à changement de phase**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Ionut DANAILA

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

Heures.CPU 2017 : 152

**57. Projet : 2017006****Intitulé : Modélisation de la convection naturelle dans un anneau cylindre en rotation**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Innocent MUTABAZI

Laboratoire : LOMC - UMR 6294 - Le Havre (LE HAVRE)

Heures.CPU 2017 : 283 669

**Publications de rang A**

1. C. Kang, A. Meyer, H. N. Yoshikawa, and I. Mutabazi, Numerical simulation of circular Couette flow under a radial thermo-electric body force, Physics of Fluids 29, 114105 (2017).
2. C. Kang, A. Meyer, I. Mutabazi & H.N. Yoshikawa, Radial buoyancy effects on momentum and heat transfer in a circular Couette flow, Physical Review Fluids 2, 053901 (2017).

3. A. Meyer, M. Jongmanns, M. Meier, C. Egbers & I. Mutabazi, Thermal convection in a cylindrical annulus under a combined effect of the radial and vertical gravity, *Comptes Rendus Mécanique* 345, 11-20 (2017).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. C.Kang, A. Meyer, I. Mutabazi, M. Meier & C. Egbers, Thermal convection in dielectric liquids inside a cylindrical annulus, 70th Annual Meeting of the American Physical Society, Division of Fluid Dynamics, Denver(Co), USA 19-21/11/2017.
2. C. Kang, A. Meyer & I. Mutabazi, Thermal convection in a co-rotating cylindrical annulus, 70th Annual Meeting of the American Physical Society, Division of Fluid Dynamics, Denver(Co), USA 19-21/11/2017.
3. A. Meyer, O. Crumeyrolle, I. Mutabazi, M. Joingmanns, V. Ruoff, T. Seelig & Ch. Egbers, Flow pattern and heat transfer in a cylindrical annulus under 1g and low-g conditions: Theory and simulation, ISPS-7 & ELGRA-25 Joint conference, October 2-6, 2017, Antibes, France.
4. C. Kang, A. Meyer & I. Mutabazi, Thermal convection induced by centrifugal buoyancy in acylindrical annulus with a solid body rotation, 16th European Turbulence Conference, Stockholm, Suède 21-24/08/2017.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. A. Meyer, C. Kang, H.N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Convection thermique d'un fluide diélectrique confine dans un anneau cylindrique en rotation auquel sont appliqués un gradient radial de température et une tension électrique alternative, 23ème Congrès Français de Mécanique, Lille 28 août-1 septembre 2017.
2. A. Meyer, C. Kang, M. Jongmanns, H. Yoshikawa, M. Meier, C. Egbers & I. Mutabazi, Convection thermique dans un liquide diélectrique confine dans un anneau cylindrique avec un gradient radial de température sous tension électrique alternative, Congrès Inter-universitaire Franco-Québécois (CIFQ2017), Saint-Lô, 22-24/05/2017.
3. C. Kang, C. Savaro, R. Guillermin, V. Lepiller, A. Prigent, K-S. Yang & I. Mutabazi, Convection thermique dans un anneau cylindrique en rotation différentielle avec un gradient radial de température, Congrès Interdisciplinaire Franco-Québécois (CIFQ2017), Saint-Lô, 22-24/05/2017.
4. A. Meyer, C. Kang, H. N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Convection thermique d'un fluide diélectrique confiné dans un anneau cylindrique en rotation auquel est appliquée une force diélectrophoretique, Rencontre du Non Linéaire, Paris 29-20/03/2017

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- A. Meyer, Active control of heat transfer by an electric field, thèse soutenue le 15/12/2017.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- FR 3519 CNRS COMUE-Normandie Université IEPE (Institut Energies Propulsion Environnement)
- GdR CNRS-CNES 2720, Microgravité Fondamentale et Appliquée
- CNES, Direction de Sciences Physiques en Microgravité (C. Delaroche), pour la modélisation de la convection thermique en microgravité
- LIA CNRS 1092 ISTROF: Laboratoire International Instabilities of Stratified and Rotating Flows (LOMC, IRPHE-Marseille, LAS-Cottbus-Allemagne)
- H.N. Yoshikawa, Laboratoire J.A. Dieudonné, UMR 7351, CNRS-Université de Nice-Côte d'Azur
- C. Egbers, Département of Aerodynamics and Fluid Mechanics (LAS), Brandenburg University of Technology, Cottbus (Germany).

**58. Projet : 2017008****Intitulé : Développement d'un canal à houle numérique**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Julien REVEILLON

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

Heures.CPU 2017 : 1 220

**59. Projet : 2017011****Intitulé : Multi Atlas Segmentation for Medical Images (MASMI)**

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Caroline PETITJEAN

Laboratoire : LITIS (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2017 : 873

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Roger Trullo, C. Petitjean, Su Ruan, Dong Nie, and Dinggang Shen. Joint segmentation of multiple thoracic organs in CT images with two collaborative deep architectures. MICCAI'17 workshop Deep Learning in Medical Image Analysis, 2017.
2. Roger Trullo, C. Petitjean, Su Ruan, Dong Nie, and Dinggang Shen. Fully automated esophagus segmentation with a hierarchical deep learning approach. In IEEE International Conference on Signal and Image Processing Applications (ICSIPA), Kuching Malaysia, 2017.
3. Roger Trullo, C. Petitjean, Su Ruan, Bernard Dubray, Dong Nie, and Dinggang Shen. Segmentation of organs at risk in thoracic CT images using a sharpmask architecture and conditional random fields. In IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI), 2017.
4. Dong Nie\*, Roger Trullo\*, C. Petitjean, Su Ruan, Jun Lian, and Dinggang Shen. Medical image synthesis with context-aware generative adversarial networks. In MICCAI, Quebec, Canada, 2017. \*=égale contribution

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Roger Trullo, C. Petitjean, Su Ruan, Bernard Dubray, Dong Nie, and Dinggang Shen. Segmentation des organes à risque en imagerie scanner par architecture sharpmask et crf. In GRETSI, Juan-les-PINS, France, 2017.

**Thèses en cours sur le projet**

- Roger Trullo – Segmentation d'organes à risques par apprentissage

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Pr Dinggang Shen, directeur du Image Analysis Core Lab, Biomedical Research Imaging Center (BRIC) de l'Université de Caroline du Nord à Chapel Hill, NC, USA.
- Pr Bernard Dubray, radiothérapeute au Centre Henri Becquerel, Rouen

**60. Projet : 2017016****Intitulé : IDEES UMR 6266 CNRS**

Famille thématique : 10. Nouvelles thématiques et applications transverses du calcul intensif

Porteur : Sébastien REY-COYREHOURCQ

Laboratoire : IDEES UMR 6266 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2017 : 3 947

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Thomas Huraux, Renaud Misslin, Alexandre Cebeillac, Éric Daudé, Alain Vaguet : Modélisation de l'impact des îlots de chaleur urbains sur les dynamiques de population d'*Aedes aegypti*, vecteur de la dengue et du virus Zika , Spatial Analysis and GEOmatics 2017.

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Renaud Misslin, Modélisation de l'environnement d'un moustique vecteur de maladies : l'exemple d'*Aedes aegypti* à Delhi (Inde) et Bangkok (Thaïlande), Université de Rouen.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Université de Rouen
- CNRS
- Institut Pasteur
- ISC-PIF Paris

**61. Projet : 2017017****Intitulé : HYD2M (Hydrodynamique du Raz Blanchard : Mesures et Modélisations)**

Famille thématique : 1. Environnement

Porteur : Anne-Claire BENNIS

Laboratoire : M2C - Caen - UMR 6143 (CAEN)

Heures.CPU 2017 : 70 576

**Communications dans des congrès internationaux**

1. A. Rivier, A.-C. Bennis, G. Jean, J.-C. Dauvin. Hydrodynamic consequences of biofouling organisms on marine energy converters. Proceeding of the 12th European Wave and Tidal Energy Conference, Ireland, 27th August to 2nd September 2017.

**Thèses soutenues en 2017 sur le projet**

- Hans Gunnoo, Études des structures spatio-temporelles dans un sillage de mât conditionnées par l'action commune des vagues et des courants. Thèse de doctorat (octobre 2014 - décembre 2017) soutenue le 21 décembre 2017. Direction : D. Levacher, A.-C. Bennis, N. Abcha et A. Ezersky.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- ANR HYD2M

**62. Projet : 2017018****Intitulé : Deep in Normandy**

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Stéphane CANU

Laboratoire : LITIS (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2017 : 2 211

**Publications de rang A**

1. Meriem El Azami, Carole Lartzien, Stéphane Canu: Converting SVDD scores into probability estimates: Application to outlier detection. *Neurocomputing* 268: 64-75 (2017)
2. Stéphane Canu, Dominique Fourdrinier: Unbiased risk estimates for matrix estimation in the elliptical case. *J. Multivariate Analysis* 158: 60-72 (2017)
3. Nicolas Courty, Rémi Flamary, Devis Tuia, Alain Rakotomamonjy: Optimal Transport for Domain Adaptation. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 39(9): 1853-1865 (2017)
4. Alain Rakotomamonjy: Supervised Representation Learning for Audio Scene Classification. *IEEE/ACM Trans. Audio, Speech & Language Processing* 25(6): 1253-1265 (2017)
5. Haibo He, Robert Haas, Jun Fu, Barbara Hammer, Daniel W. C. Ho, Fakhri Karray, Dhireesha Kudithipudi, Jose A. Lozano, Teresa Bernarda Ludermir, Jacek Mandziuk, Stefano Melacci, Antonio Paiva, Hong Qiao, Alain Rakotomamonjy, Shiliang Sun, Johan A. K. Suykens, Meng Wang: Editorial: A Successful Year and Looking Forward to 2017 and Beyond. *IEEE Trans. Neural Netw. Learning Syst.* 28(1): 2-7 (2017)
6. Alain Rakotomamonjy, Sokol Koço, Liva Ralaivola: Greedy Methods, Randomization Approaches, and Multiarm Bandit Algorithms for Efficient Sparsity-Constrained Optimization. *IEEE Trans. Neural Netw. Learning Syst.* 28(11): 2789-2802 (2017)
7. Soufiane Belharbi, Clément Chatelain, Romain Hérault, Sébastien Adam, Sébastien Thureau, Mathieu Chastan, Romain Modzelewski: Spotting L3 slice in CT scans using deep convolutional network and transfer learning. *Comp. in Bio. and Med.* 87: 95-103 (2017)
8. Selma Belgacem, Clément Chatelain, Thierry Paquet: Gesture sequence recognition with one shot learned CRF/HMM hybrid model. *Image Vision Comput.* 61: 12-21 (2017)
9. Romain Hérault, Dominic Orth, Ludovic Seifert, Jérémie Boulanger, John Aldo Lee: Comparing dynamics of fluency and inter-limb coordination in climbing activities using multi-scale Jensen-Shannon embedding and clustering. *Data Min. Knowl. Discov.* 31(6): 1758-1792 (2017)
10. Fabio Aioli, Gaëlle Bonnet-Loosli, Romain Hérault: Advances in artificial neural networks, machine learning and computational intelligence. *Neurocomputing* 268: 1-3 (2017)
11. Julien Lerouge, Zeina Abu-Aisheh, Romain Raveaux, Pierre Héroux, Sébastien Adam: New binary linear programming formulation to compute the graph edit distance. *Pattern Recognition* 72: 254-265 (2017)
12. Zeina Abu-Aisheh, Benoit Gaüzère, Sébastien Bougleux, Jean-Yves Ramel, Luc Brun, Romain Raveaux, Pierre Héroux, Sébastien Adam: Graph edit distance contest: Results and future challenges. *Pattern Recognition Letters* 100: 96-103 (2017)
13. E. Laloy, R. Hérault, J. Lee, D. Jacques, and N. Linde: Inversion using a new low-dimensional representation of complex binary geological media based on a deep neural network, *Advances in Water Resources*, Vol. 110: 387-405, (2017)

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Jorge Guevara, Roberto Hirata, Stéphane Canu: Cross product kernels for fuzzy set similarity. *FUZZ-IEEE 2017*: 1-6
2. Stéphane Canu: Machine Learning, deep learning and optimization in computer vision. *QCAV 2017*: 103380N
3. Nicolas Courty, Rémi Flamary, Amaury Habrard, Alain Rakotomamonjy: Joint distribution optimal transportation for domain adaptation. *NIPS 2017*: 3733-3742

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèses de Ruffino Cyprien, Soufiane Belharbi, Liu Yuan, et Ismaila SECK

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- LIRIS, GREYC, LIMOS, LIP6, CHU, Bequerel, UCL (Belgique)

**63. Projet : 2017019****Intitulé : Modélisation de la fatigue des pales d'éoliennes en environnement naturel à l'aide d'un code fluide structure**

Famille thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Didier LEMOSSE

Laboratoire : LMN - EA 3828 (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2017 : 11 849

**Communications dans des congrès nationaux**

1. ICOE 2018, Efficient dynamic fluid-structure computation for blade-mast interaction of a tidal turbine

**Thèses en cours sur le projet**

- Corentin Lothodé, Modélisation de la fatigue des pales d'éoliennes en environnement naturel à l'aide d'un code fluide-structure. Directeur Eduardo Souza de Cursi, encadrants Emmanuel Pagnacco et Didier Lemosse. Financement Cifre (K-Epsilon).

**64. Projet : 2017020****Intitulé : Correction de données de séquençage haut débit issues de nouvelles technologies de 3ème génération**

Famille thématique : 3. Biologie et santé

Porteur : Thierry LECROQ

Laboratoire : LITIS (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2017 : 149

**65. Projet : 2017024****Intitulé : Modélisation des écoulements polyphasiques**

Famille thématique : 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : JUN XIA

Laboratoire : MACE (LONDON)

Heures.CPU 2017 : 19 853

**Publications de rang A**

1. K. Wan J. Xia, L. Vervisch, Y. Liu, Z. Wang, K. Cen (2018) Modeling alkali metal emissions in large-eddy simulation of a preheated pulverized-coal turbulent jet flame using tabulated chemistry, Combust. Theory and Modeling, 22(2):203-236.

2. K. Wan, J. Xia, P. Domingo, Z. Wang, Y. Liu, K. Cen (submitted) Alkali metal emissions in a pulverized-coal flame: DNS analysis of reacting layers and chemistry tabulation, Proc. Combust. Inst.
3. Y. Liu, Z. Wang, J. Xia, L. Vervisch, K. Wan, Y. He, R. Whiddon, H. Bahai, K. Cen (submitted) Potassium release from a burning biomass pellet: PLIF, Multi-point LIBS, Chemical kinetics and transformation mechanisms, Proc. Combust. Inst.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. K. Wan, Z. Wang, L. Vervisch, J. Xia, Y.v Liu, Y. He, K. Cen (2017) Large-eddy simulation of alkali metal reacting dynamics in a preheated pulverized-coal jet flame using tabulated chemistry, Proc. ASME, Power and Energy Conference, Charlotte, North Carolina, USA, 26-30 June 2017.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Travaux réalisés dans le cadre d'un accueil de chercheurs de Brunel University (UK) et de Zhejiang University (P.R. China) à l'INSA de Rouen Normandie (Pr. Luc Vervisch). Projet financé par la Royal Society (UK).

---

**66. Projet : 2017025**

---

**Intitulé : GREYC - Équipe Image**

Famille thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Frédéric JURIE

Laboratoire : GREYC - CAEN - UMR 6072 (CAEN)

Heures.CPU 2017 : 28 264

Travaux démarrés fin 2017.

## 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. Quentin Viel, Laurent Delbreilh, Gérard Coquerel, Samuel Petit, Eric Dargent ; Molecular Mobility of an Amorphous Chiral Pharmaceutical Compound: Impact of Chirality and Chemical Purity ; Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2017, 121 (32), pp.7729 – 7740.
2. Gérard Coquerel, Phase Diagrams for Process Design ; Engineering Crystallography: From Molecule to Crystal to Functional Form, Springer Netherlands, pp.215 - 233, 2017, 978-94-024-1117-1.
3. Aurélien Lemerrier, Quentin Viel, Clément Brandel, Yohann Cartigny, Eric Dargent, Samuel Petit, Gérard Coquerel, Optimization of experimental conditions for the monitoring of nucleation and growth of racemic Diprophylline from the supercooled melt ; Journal of Crystal Growth, Elsevier, 2017, 472, pp.11 - 17.
4. Benjamin Schammé, Xavier Monnier, Nicolas Couvrat, Laurent Delbreilh, Valérie Dupray, Eric Dargent, Gérard Coquerel ; Insights on the Physical State Reached by an Active Pharmaceutical Ingredient upon High-Energy Milling ; Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2017, 121 (19), pp.5142 - 5150.
5. Kittisak Suwannasang, Adrian Flood, Céline Rougeot, Gérard Coquerel ; Use of Programmed Damped Temperature Cycles for the Deracemization of a Racemic Suspension of a Conglomerate Forming System ; Organic Process Research and Development, American Chemical Society, 2017, 21 (4), pp.623 - 630.
6. Antoine Burel, Marie Vaccaro, Yohann Cartigny, Séverine Tisse, Gérard Coquerel, Pascal Cardinaël ; Retention modeling and retention time prediction in gas chromatography and flow-modulation comprehensive two-dimensional gas chromatography: The contribution of pressure on solute partition ; Journal of Chromatography A, Elsevier, 2017, 1485, pp.101 - 119.
7. Quentin Viel, Clément Brandel, Yohann Cartigny, M. Ermelinda S. Eusébio, João Canotilho, Valérie Dupray, Eric Dargent, Gérard Coquerel, Samuel Petit ; Crystallization from the Amorphous State of a Pharmaceutical Compound: Impact of Chirality and Chemical Purity ; Crystal Growth and Design, American Chemical Society, 2017, 17 (1), pp.337 - 346.
8. Mélanie Mignot, Clément de Saint Jores, Alain Tchaplá, Francois Boyer, Pascal Cardinaël, Valerie Peulon-Agasse ; New anthracenyl polar embedded stationary phases with enhanced aromatic selectivity, a combined experimental and theoretical study: Part 1-experimental study ; Journal of Chromatography A, Elsevier, 2017, 1512, pp.9 - 21.
9. Mélanie Mignot, Benjamin Schammé, Vincent Tognetti, Laurent Joubert, Pascal Cardinaël, Valerie Peulon-Agasse ; Anthracenyl polar embedded stationary phases with enhanced aromatic selectivity. Part II: A density functional theory study ; Journal of Chromatography A, Elsevier, 2017, 1519, pp.91-99.
10. Abhinav Joseph, Carlos Bernardes, Anna Druzhinina, Raisa Varushchenko, Thi Yen Nguyen, Franziska Emmerling, Lina Yuan, Valérie Dupray, Gérard Coquerel, Manuel Da Piedade ; Polymorphic Phase Transition in 4'-Hydroxyacetophenone: Equilibrium Temperature, Kinetic Barrier, and the Relative Stability of  $Z' = 1$  and  $Z' = 2$  Forms ; Crystal Growth and Design, American Chemical Society, 2017, 17 (4), pp.1918 - 1932.



11. Lina Yuan, Simon Clevers, Antoine Burel, Philippe Négrier, Maria Del Barrio, Bacem Ben Hassine, Denise Mondieig, Valérie Dupray, Josep Ll Tamarit, Gérard Coquerel ; New Intermediate Polymorph of 1-Fluoro-adamantane and Its Second-Order-like Transition toward the Low Temperature Phase ; Crystal Growth and Design, American Chemical Society, 2017, 17 (6), pp.3395-3401.
12. Ibrahim Zgani, Hussein Idriss, C. Barbot, F. Djedaini-Pilard, Samuel Petit, Marie Hubert-Roux, François Estour, Géraldine Gouhier ; Positive variation of the MRI signal via intramolecular inclusion complexation of a C-2 functionalized  $\beta$ -cyclodextrin ; Organic and Biomolecular Chemistry, Royal Society of Chemistry, 2017, 15 (3), pp.564 - 569.

#### Communications dans des congrès internationaux

1. N. Couvrat, J. Mahieux, M. Sanselme, G. Coquerel ; Limitations during the resolution of ( $\pm$ )-Epinephrine by using tartaric acid" ; 24<sup>ème</sup> BIWIC, Technische Universität Dortmund, Dortmund, Aout 2017, p. 99
2. F.-X. Gendron, G. Coquerel, R. Kuroda ; Racemic isoplethal section between two atropisomeric components ; 24<sup>ème</sup> BIWIC, Technische Universität Dortmund, Dortmund, Aout 2017, Abstract book p. 1
3. I.B. Rietveld, B. Nicolai, A. Polian, M. Barrio, J.L. Tamarit ; Mapping the phase behavior of the trimorphic prodrug L-tyrosine ethyl ester through measurement data and thermodynamics ; 55th European High Pressure Research Group Meeting (EHPRG 2017), September 2017, Poznan, Poland
4. L. Harfouche, C. Brandel, Y. Cartigny, G. Coquerel and S. Petit ; Chiral Resolution of Pharmaceutical Racemic Compounds : Implementation of Preferential Crystallization in Unfavorable Cases ; Summer School on Chiral Crystallization, Resolution & Deracemization, June 2017, Nijmegen
5. L. Harfouche, C. Brandel, Y. Cartigny, G. Coquerel and S. Petit ; An experimental conglomerate discovery method ; CORE Workshop – Solid State Properties, November 2017, Cluj-Napoca (Roumanie)

#### Communications dans des congrès nationaux

1. M. Mignot, A. Tchaplal, O. Mercier, P. Cardinael, Valérie Peulon-Agasse ; Vers une meilleure compréhension des propriétés chromatographiques par la modélisation moléculaire : Etude de phases stationnaires aromatiques (mono et trifonctionnelle) à groupement polaire intercalé. Congrès biennal de l'Association Francophone des Sciences Séparatives, SEP 2017, 28-30 Mars 2017, Paris, France
2. M. Charpentier, C. Brandel, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel. Etude du diagramme de phase binaire entre la diprophylline racémique et la théophylline. 1<sup>ère</sup> journée TEEP (Thermodynamique des équilibres entre phases), Décembre 2017, Clermont-Ferrand
3. B. Atawa, N. Couvrat, G. Coquerel, A. Saiter ; État vitreux d'une molécule chirale étudiée par Fast Scanning Calorimetry: la 5-éthyl-5-méthylhydantoïne ; JCAT 48 : Journées de Calorimétrie et d'Analyse Thermique, 2017, Paris
4. F.X. Gendron, C. De Saint Jores, M. Poupard, G. Coquerel ; Deracemization of amino-acids ; 43<sup>èmes</sup> JEEP (Conference on Phase Equilibria), Univ. Politecnica Catalunya, Barcelona, Mars 2017, Abstract book, p. 82
5. M. Schindler, G. Baaklini, G. Gbabode, M. Sanselme, N. Couvrat, P. Négrier, D. Mondieig, Y. Cartigny, G. Coquerel ; Detection of a metatectic invariant in the binary system 1,3-dimethylurea/water and crystal structure determination of DMU monohydrate ; 43<sup>èmes</sup> JEEP (Conference on Phase Equilibria), Univ. Politecnica Catalunya, Barcelona, Mars 2017, Abstract book, p. 50.
6. L. Yuan, S. Clevers, A. Burel, Ph. Négrier, M. Barrio, B. Ben Hassine, D. Mondieig, V. Dupray, J. Ll. Tamarit and G. Coquerel ; Reinvestigation of 1-fluoro-adamantane phase transitions by temperature-resolved second harmonic generation ; 43<sup>èmes</sup> JEEP (Conference on Phase Equilibria), Univ. Politecnica Catalunya, Barcelona, Mars 2017, Abstract book, p. 44.

#### Thèses soutenues en 2017 sur le projet

- Quentin VIEL (2014-2017) : De l'Amorphe au Cristal : Etude d'un Composé Pharmaceutique Chiral. Directeurs S. Petit / E. Dargent.
- Lina YUAN (2014-2017) : Second harmonic generation as a complementary technique for characterization of powdered organics. Directeurs V. Dupray / G. Coquerel
- Antoine BUREL (2014-2017) : Discrimination in the solid state during crystallization: application to Phenanthrene ultrapurification. Directeur G. Coquerel.

**Thèses en cours sur le projet**

- François Xavier GENDRON (2015-2018) : Contribution to chiral discrimination in the solid state and access to pure enantiomer via Crystallization. Directeur G. Coquerel.
- Bienvenu ATAWA (2015-2018) : Molecular Mobility and Aging of Chiral Amorphous Compounds. Directeurs N. Couvrat / A. Saïter.

**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. Augusto RC, Tetreau G, Chan P, Walet-Balieu ML, Mello-Silva CC, and Santos CP, Grunau C. Double impact: natural molluscicide for schistosomiasis vector control also impedes development of *Schistosoma mansoni* cercariae into adult parasites. *PLoS Negl Trop Dis*. 2017 Jul 28
2. Cases O, Obry A, Ben-Yacoub S, Augustin S, Joseph A, Toutirais G, Simonutti M, Christ A, Cosette P, Kozyraki R, "Impaired vitreous composition and retinal pigment epithelium function in the FoxG1::LRP2 myopic mice", *Biochim Biophys Acta*. 2017 Jun
3. Clamens T, Rosay T, Crépin A, Grandjean T, Kentache T, Hardouin J, Bortolotti P, Neidig A, Mooij M, Hillion M, Vieillard J, Cosette P, Overhage J, O'Gara F, Bouffartigues E, Dufour A, Chevalier S, Guery B, Cornelis P, Feuilloy MG, Lesouhaitier O, "The aliphatic amidase AmiE is involved in regulation of *Pseudomonas aeruginosa* virulence", *Sci Rep*. 2017 Jan 24
4. Conlon JM, Guilhaudis L, Leprince J, Coquet L, Mangoni ML, Attoub S, Jouenne T and King JD, "Peptidomic analysis of skin secretions of the Mexican burrowing toad *Rhinophrynus dorsalis* (Rhinophrynidae) : insight into the origin of host-defense peptides within the Pipidea and characterization of a proline-arginine-rich peptide", *Peptides*, 2017
5. Conlon JM, Musale V, Attoub S, Mangoni ML, Leprince J, Coquet L, Jouenne T, Abdel-Wahab YHA, Flatt PR and Rinaldi A, "Cytotoxic peptides with insulin-releasing activities from skin secretion of the Italian stream frog *Rana italica* (Ranidae)", *Journal of Peptide Science*, 2017 June 14.
6. Coquet L, Obry A, Borghol N, Hardouin J, Mora L, Othmane A and Jouenne T, "Impact of chlorhexidine digluconate and temperature on curli production in *Escherichia coli*- consequence on its adhesion ability", *AIMS Microbiology*, 2017
7. Ghezzi P, Chan P, "Redox Proteomics Applied to the Thiol Secretome" *Antioxid Redox Signal*, 2017 Mar 1
8. Ghouili I, Bahdoudi S, Morin F, Amri F, Hamdi Y, Coly PM, Walet-Balieu ML, Leprince J, Zekri S, Vaudry H, Vaudry D, Castel H, Amri M, Tonon MC, Masmoudi-Kouki O, "Endogenous Expression of ODN-Related Peptides in Astrocytes Contributes to Cell Protection Against Oxidative Stress: Astrocyte-Neuron Crosstalk Relevance for Neuronal Survival", *Mol Neurobiol*. 2017 Jul 11.
9. Karkouch I, Tabbene O, Gharbi D, Ben Mlouka MA, Elkahoui S, Rihouey C, Coquet L, Cosette P, Jouenne T and Limam F, "Antioxidant, antityrosinase and antibiofilm activities of synthesized peptides derived from *Vicia faba* protein hydrolysate: A powerful agents in cosmetic application", *Industrial Crops and Products*, 2017
10. Kentache T, Ben Abdelkrim A, Jouenne T, Dé E, Hardouin J, "Global Dynamic Proteome Study of a Pellicle-forming *Acinetobacter baumannii* Strain." *Mol Cell Proteomics*. 2017 Jan
11. 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", *Mol Neurobiol*. 2017 May
12. Poret M, Chandrasekar B, van der Hoorn RAL, Coquet L, Jouenne T and Avicé JC, "Proteomic investigations of proteases involved in cotyledon senescence: a model to explore the genotypic

variability of proteolysis machinery associated with nitrogen remobilization efficiency during leaf senescence of oilseed rape"; Proteomes

13. Porte B, Chatelain C, Hardouin J, Derambure C, Zerdoumi Y, Hauchecorne M, Dupré N, Bekri S, Gonzalez B, Marret S, Cosette P, Leroux P, "Proteomic and transcriptomic study of brain microvessels in neonatal and adult mice", PLoS One. 2017 Jan 31
14. 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. 2017 Feb
15. Smine S, Obry A, Kadri S, Hardouin J, Fréret M, Amri M, Jouenne T, Limam F, Cosette P, Aouani E, "Brain proteomic modifications associated to protective effect of grape extract in a murine model of obesity", Biochim Biophys Acta. 2017 May
16. Vanier G, Lucas PL, Loutelier-Bourhis C, Vanier J, Plasson C, Walet-Balieu ML, Tchi-Song PC, Remy-Jouet I, Richard V, Bernard S, Driouch A, Afonso C, Lerouge P, Mathieu-Rivet E, Bardor M, "Heterologous expression of the N-acetylglucosaminyltransferase I dictates a reinvestigation of the N-glycosylation pathway in Chlamydomonas reinhardtii" Sci Rep. 2017 Aug 31
17. Young CNJ, Chira N, Róg J, Al-Khalidi R, Benard M, Galas L, Chan P, Vaudry D, Zablocki K et Górecki DC, "Sustained activation of P2X7 induces MMP-2-evoked cleavage and functional purinoceptor inhibition", J Mol Cell Biol, 2017 Aug 18
18. Zehlila A, Schaumann A, Ben Mlouka A, Bourguiba I, Hardouin J, Masmoudi O, Cosette P, Amri M, Jouenne T, "Glioprotective effect of Ulva rigida extract against UVB cellular damages", Algal Research 2017 Apr.

### 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 également liées à l'utilisation du calculateur

- voir projet n° 2005004 (Jana Sopkova de Oliveira Santos).
- voir projet n°2016005 (Ronan Bureau).

#### Autres publications de rang A :

- Poezevara, G.; Lozano, S.; Cuissart, B.; Bureau, R.; Bureau, P.; Croixmarie, V.; Vayer, P.; Lepailleur, A. A Computational Selection of Metabolite Biomarkers Using Emerging Pattern Mining. A Case Study in human Hepatocellular Carcinoma. J. Proteome Res. 2017, 16, 2240–2249.
- Rabatel, J.; Fannes, T.; Lepailleur, A., Le Goff, J. ; Crémilleux, B. ; Ramon, J. ; Bureau, R. ; Cuissart, B. Non a Priori Automatic Discovery of 3D Chemical Patterns: Application to Mutagenicity. Mol Inform. 2017 Jun 7.

#### Communications dans des congrès nationaux :

- Camille Denis, Bogdan Marekha, Siham Hedir, Rémi Legay, Edwige Abeillard, Emilie Brotin, Laurent Poulain, Ronan Bureau, Anne Sophie Voisin-Chiret. "Fragment-Based Library Generation for the Discovery of Dual Mcl-1/Bcl-xL Inhibitors". JJC 2017, Châtenay-Malabri, France, 8-10 février 2017.

#### Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet) :

- GREYC, équipe CoDAG, Université de Caen Normandie, Dr Bertrand Cuissart, Pr Bruno Crémilleux.

**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 également liées à l'utilisation du calculateur**

- voir projet n° 2013005 (Hélène Lavanant).

**Publications de rang A**

1. Barozzino-Consiglio, G.; Hamdoun, G.; Fressigné, C.; Harrison-Marchand, A.; Maddaluno, J.; Oulyadi, H. A Combined <sup>1</sup>H/<sup>6</sup>Li NMR DOSY Strategy Finally Uncovers the Structure of Isopropyllithium in THF Chem. Eur. J. 2017, 23, 12475-12479.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Hassan OULYADI, 39th FGMR Annual Discussion Meeting Bayreuth, Allemagne, September 25-28, 2017 Organolithium Chemistry: the end of black box.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. R. Najjar, L. Guilhaudis, N. Perzo, H. Castel & I. Ségalas-Milazzo ; Conformational studies of urotensinergic peptides using NMR and molecular modelling in DPC micelles ; 20ème congrès du GFPP – 26-30 mars 2017 – Arcachon (France) – communication orale
2. Bourafai, A.; Sebban M.; Fogliazza, M.; Coadou, G.; Voisin-Chiret, A.-S.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Carlier, L.; Oulyadi, H. ; Étude par RMN et modélisation moléculaire de l'interaction entre la protéine Mcl-1, impliquée dans l'apoptose, et de potentiels inhibiteurs (application au traitement des cancers de l'ovaire) ; GERM 2017, 14-19 Mai 2017 – Aussois (France) – communication orale
3. M. Migliore, L. Guilhaudis, B. Lefranc, J. Leprince, I. Ségalas-Milazzo ; Structural characterization of turns in bioactive peptides - Determination of NMR discriminatory parameters ; Journée de l'école doctorale normande de chimie (JEDNC2017) – 19 juin 2017 Mont Saint Aignan – communication par affiche

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse Riham NAJJAR (oct. 2014 – oct 2017). Financement de la thèse : Ministère de l'enseignement Supérieur et de la Recherche.
- Thèse Mattia MIGLIORE (déc. 2016 – déc. 2019). Financement de la thèse : Région Normandie (réseau CRUNCH).
- Thèse Asma BOURAFAI (Octobre. 2015 – Oct. 2018). Financement de la thèse : Région Normandie (réseau CRUNCH).

**Stages de Master en 2018 sur le projet**

- M1 Matthieu Demare (Mars 2017– Avril 2017).