



Normandie Université

Pôle Régional de Modélisation Numérique

Références des Publications des laboratoires utilisateurs pour l'année 2018

Référence du document : RA-PUBLIS-2018 - Révision 01 - Date de création : 27/03/2019

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 2018.

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	9
Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles	
Projet : 1998053	10
Intitulé : Etude 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	12
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 : 2005003	12
Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins"	
Projet : 2005004	13
Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	
Projet : 2005010	15
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	16
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	18
Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	
Projet : 2007001	19
Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	
Projet : 2007013	20
Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	

Projet : 2008018	21
Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie	
Projet : 2010006	21
Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2011001	21
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2012006	22
Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
Projet : 2012008	23
Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
Projet : 2013005	24
Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique	
Projet : 2013006	25
Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique	
Projet : 2014002	25
Intitulé : Amélioration des propriétés mécaniques, thermiques et électriques des matériaux composites renforcés par des inclusions rigides métallisés et thermiquement conducteurs par le biais de la simulation numérique et technique homogénéisation multi-échelles.	
Projet : 2014007	26
Intitulé : Conduction électrique le long des dislocations dans les nano-fils de matériaux nitrures-III.	
Projet : 2015001	27
Intitulé : Simulation numérique avancée de condensats de Bose-Einstein	
Projet : 2015004	27
Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.	
Projet : 2015005	28
Intitulé : Cylindre partiellement immergé soumis à la houle et au courant	
Projet : 2015007	29
Intitulé : Structure et Dynamique dans les mélanges liquides ioniques/solvants moléculaires	
Projet : 2015011	29
Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes.	
Projet : 2015012	30
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	31
Intitulé : FireDiag	
Projet : 2016003	31
Intitulé : Geometrical and Statistical Properties of Turbulent Flows with Varying Viscosity	
Projet : 2016005	32

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	36
Intitulé : Diffusion Atomique sous Champ Électrique Extrême	
Projet : 2016014	37
Intitulé : Caractérisation hydrodynamique (écoulement et turbulence) des sites hydroliens et étude des effets de sillage des turbines par simulations numériques	
Projet : 2016017	39
Intitulé : Simulation atomistique de quelques minéraux d'intérêt pour la géologie et la bio-minéralisation	
Projet : 2016018	40
Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des dislocations dans les matériaux III-N	
Projet : 2016019	41
Intitulé : WavyFilm	
Projet : 2016020	41
Intitulé : Calculs de réseaux pour la biologie et l'écologie marine (RESEAUBIO)	
Projet : 2016022	42
Intitulé : Apprentissage statistique pour la compréhension de scènes audio	
Projet : 2017002	42
Intitulé : Numerical Simulations of flow over Savonius-style wind turbines blades	
Projet : 2017003	43
Intitulé : Modélisation de la relaxation structurale dans un biopolymère et dans son monomère	
Projet : 2017004	43
Intitulé : Simulation directe des écoulements diphasiques	
Projet : 2017005	44
Intitulé : Simulation numérique de matériaux à changement de phase	
Projet : 2017006	44
Intitulé : Modélisation de la convection naturelle dans un anneau cylindre en rotation	
Projet : 2017008	46
Intitulé : Développement d'un canal à houle numérique	
Projet : 2017010	46
Intitulé : Modélisation mathématique et simulation numérique haute performance d'écoulements fluides complexes	
Projet : 2017011	46
Intitulé : Multi Atlas Segmentation for Medical Images (MASMI)	

Projet : 2017016	47
Intitulé : IDEES UMR 6266 CNRS	
Projet : 2017017	47
Intitulé : HYD2M (Hydrodynamique du Raz Blanchard : Mesures et Modélisations)	
Projet : 2017018	48
Intitulé : Deep in Normandy	
Projet : 2017019	48
Intitulé : Modélisation de la fatigue des p,les d'éoliennes en environnement naturel à l'aide d'un code fluide structure	
Projet : 2017020	49
Intitulé : Correction de données de séquençage haut débit issues de nouvelles technologies de 3ème génération	
Projet : 2017021	49
Intitulé : Simulations climatiques passées et futures sur les domaines Europe et Méditerranée dans le cadre du programme international CORDEX	
Projet : 2017022	50
Intitulé : Étude sur la sélectivité et l'absorption des mélanges (H2O et Phénol) dans les matériaux carbonés nano-structurés	
Projet : 2017025	50
Intitulé : GREYC - Équipe Image	
Projet : 2018001	51
Intitulé : Etude de mécanismes d'activation électrophile du CO2 et autres petites molécules	
Projet : 2018002	51
Intitulé : Calcul multi-tâches pour l'analyse statistique de la morphologie des écoulements liquide/gaz	
Projet : 2018003	51
Intitulé : Caractérisation structurale et spectroscopique de molécules dans l'environnement et dans l'espace	
Projet : 2018004	52
Intitulé : Simulation numérique du collages de bulles de gaz	
Projet : 2018005	52
Intitulé : Analyse d'images biomédicales préclinique et clinique. Mise en place des outils pour le calcul parallèle sur la grappe de calcul du CRIANN	
Projet : 2018006	52
Intitulé : AtERiCS Apprentissage Statistique à l'Echelle pour la Représentation et la Classification non-supervisées	
Projet : 2018007	53
Intitulé : Modélisation ab-initio de l'adsorption et de la réactivité des hydrocarbures dans les zéolithes	
Projet : 2018008	53
Intitulé : Dynamique Moléculaire Appliquée à la Biologie	
Projet : 2018009	53
Intitulé : Mise au point de nouveaux descripteurs de réactivité chimique	
Projet : 2018011	54

Intitulé : Modélisation de la diffusion de carbone dans les aciers martensitiques	
Projet : 2018012	54
Intitulé : Design in silicon d'analogues fluorescents du cholestérol	
Projet : 2018013	54
Intitulé : Analyse d'exomes dans le cadre de la recherche sur la maladie d'Alzheimer du patient jeune-extension de la cohorte	
Projet : 2018015	55
Intitulé : Modélisation Mathématique : Applications et Simulations Numériques pour les énergies renouvelables, l'éco-mobilité, l'imagerie et la physique (M2NUM)	
Projet : 2018019	55
Intitulé : Prédiction des spectres de dichroïsme circulaire des motifs coudés dans les peptides	
Projet : 2018020	55
Intitulé : Simulation thermique d'un four de boulangerie antique	
Projet : 2018021	56
Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes	
Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire	57
RNMM : SMS EA 3233	57
Intitulé : Sciences et méthodes séparatives	
RNMM : Plateforme PISSARO	58
Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines	
RNMM : CERMN	60
Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : UMR 6014 COBRA	60
Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIANN pour l'année 2018. 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 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2018 : 3 920 411

Publications de rang A

1. J. G. Caputo, " Φ^4 model in higher dimensions", contribution au livre "A Dynamical Perspective on the Φ^4 Model: Past, Present and Future", P. Kevrekides and J. Cuevas Eds Springer Verlag.
2. M. Lucci, V. Merlo, I. Ottaviani, M. Cirillo, D. Badoni, V. Campanari, G. Salina, J. G. Caputo, and L. Loukitch, "Engineering quantum interference", Appl. Phys. Letters 2018, in press
3. Yonatan Cohen, Yuval Ronen, Jung-Hyun Kang, Moty Heiblum, Denis Feinberg, Régis Mélin, and Hadas Shtrikman ; Nonlocal supercurrent of quartets in a three-terminal Josephson junction ; Proceedings National Academy of Sciences July 3, 2018 115 (27) 6991-6994; first published June 18, 2018 <https://doi.org/10.1073/pnas.1800044115>
4. P. G. Kevrekidis, I. Danaïla, J.-G. Caputo and R. Carretero-Gonzalez, "Planar and Radial Kinks in Nonlinear Klein-Gordon Models : Existence, Stability and Dynamics", Phys. Rev. E 98 052217 (2018), <https://arxiv.org/abs/1808.02928>
5. J. G. Caputo, I. Khames, A. Knippel and A. Aceves, "Localized solutions of nonlinear wave equations on networks", J. Phys A 52, 3, (2018). <https://arxiv.org/abs/1804.07628>

Communications dans des congrès internationaux

1. Conférence invitée, workshop "Modelacion Matematica de Problemas Inversos y Aplicaciones" Université de Guadalajara, 22-23 Mars 2018.
2. Conférence invitée , workshop "Nonlinear PDEs on Metric Graphs and Branched Networks", Université de Leyden, Pays-Bas, 27 -30 Aout 2018.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Thèse d'Imene KHAMES, Septembre 2018.

2. Projet : 1998022**Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

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

Heures.CPU 2018 : 2 089 847

Publications de rang A

3. Sharma, S., Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Effect of thermo-mechanical non-equilibrium on the onset of transition in supersonic boundary layers. *Heat and Mass Transfer*, (2018).
4. Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Hussain F. Temperature-invariant scaling for compressible turbulent boundary layers with wall heat transfer. *Heat Transfer Engineering*, 39 (11), 1-10 (2018).
5. Sharma, S., Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Laminar-to-turbulent transition in supersonic boundary layers: Effects of initial perturbation and wall heat transfer. *Numerical Heat Transfer*, (2018).
6. Lebon, B., Nguyen, M., Peixinho, J., Shadloo, M.S., Hadjadj, A. A new mechanism for periodic bursting of the recirculation region in the flow through a sudden expansion in a circular pipe. *Physics of Fluids*, 30, 031701 (2018).
7. Mendez Gonzalez, M., Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Ducoin, A. Boundary layer transition over a concave surface caused by centrifugal instabilities. *Computers & Fluids*, 171, 135-153 (2018).
8. Verma, S.B., Chidambaranathan, M., Hadjadj, A. Analysis of shock unsteadiness in a supersonic over-expanded planar nozzle. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 68, 55-65 (2018).
9. Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Chaudhuri A, Ben-Nasr, O. Large-eddy simulation of a spatially-evolving supersonic turbulent boundary layer at $M=2$. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 67, 185-197 (2018).

Communications dans des congrès internationaux

1. Shenoy, D.V., Nguyen, M.Q., Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Peixinho, J., Matar. O.K. Subcritical transition to turbulence in diverging pipe flows. 71st Annual Meeting of the American Physical Society's Division of Fluid Dynamics, Atlanta, Georgia, November 18-20, 2018.
2. Sharma, S., Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Effect of thermo-mechanical non-equilibrium on the onset of transition in supersonic boundary layers. 12th European Fluid Mechanics Conference, Vienna, Austria, 9-13 September 2018.
3. Brahmi, N., Soni, V., Hadjadj, A. Vorticity production in shock waves diffraction over double cylindrical wedges. 4th International Conference on Energy, Materials and Applied Energetics (ICEMAEP'2018), Constantine, Algeria, 29-30 April 2018.
4. Zebiri, B., Piquet, A., Hadjadj, A. Large-eddy simulations of an over-expanded planar nozzle. 4th International Conference on Energy, Materials and Applied Energetics (ICEMAEP'2018), Constantine, Algeria, 29-30 April 2018.

Thèses en cours sur le projet

- Boubakr ZEBIRI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2020.
- Margio MENDEZ. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2020.
- Sushank SHARMA. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2019.
- Nassim BRAHMI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2019.

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire : LPMS - Paris 5 - FRE 2463 (PARIS)

Heures.CPU 2018 : 238 655

Publications de rang A

1. L. Lagardère, L.-H. Jolly, F. Lipparini, F. Aviat, B. Stamm, Z. F. Jing, M. Harger, H. Torabifard, G. A. Cisneros, M. J. Schnieders, N. Gresh, Y. Maday, P. Ren, J. W. Ponder, J.-P. Piquemal ; Tinker-HP: a Massively Parallel Molecular Dynamics Package for Multiscale Simulations of Large Complex Systems with Advanced Polarizable Force Fields, Chem. Sci., 2018, 9, 956-972.

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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 2 611

Publications de rang A

1. C. M. Sorensen, J. Yon, F. Liu, J. Maughan, et al., Light scattering and absorption by fractal aggregates including soot, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 217 (2018) 459-473.
2. J. Yon, F. Liu, J. Morán, and A. Fuentes, Impact of the primary particle polydispersity on the radiative properties of soot aggregates, Proceedings of the Combustion Institute 2018).
3. Chapter in book : K. F. Ren and C. Rozé, "Vectorial Complex Ray Model for light scattering of nonspherical particles", Chapter 7 in Advances in Optics: Reviews', Book Series, Vol. 1, IFSA Publishing, S.L, 2018

Communications dans des congrès internationaux

1. C. Sorensen, J. Yon, F. Liu, J. Maughan, et al., "Light scattering and absorption by fractal aggregates including soot," presented at the 17th ELS and 11th LIP conference, Texas A&M University, College Station, United States, 2018.
2. F. Liu, J. Yon, J. Moran Cofré, Carlos, A. Fuentes, et al., "Sensitivity of Bare Black Carbon MAC and AAE to Morphological Parameters, Primary Particle Polydispersity, and Refractive Index in the Visible and Near-Infrared," presented at the International Aerosol Conference, St Louis, United States, 2018.
3. T. Petkov, F. Ren, J. Loudet, and B. Pouligny, "Nonlinear Oscillatory States of Spheroidal Particles in a Two-Beam Trap Geometry," Optics in the Life Sciences Congress, 2-5 April 2017, San Diego, California, United States
4. K. F. Ren, Z. Ma, S. Idlahcen, and C. Rozé, "Application of Vectorial Complex Ray Model to Characterization of a Pendant Drop", PIERS, Singapore, November 19-22, 2017
5. K. F. Ren, "Reexamination of Airy theory for particle measurement by using Debye series and Vectorial Complex Ray Model", ISMTMF - 10th International Symposium on Measurement Techniques for Multiphase Flow Hong Kong, 3-7 December, 2017

Communications dans des congrès nationaux

1. G. Lefèvre and J. Yon, "Amplification de l'extinction spectrale de particules de suie recouvertes d'une gangue d'acide oléique," presented at the CFA, Paris, France, 2018.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- G. Lefevre, "Caractérisation des propriétés radiatives des nanoparticules de suie en présence de composés organiques," Docteur, Physique, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2018.

Thèses en cours sur le projet

- José Moran Cofre (début décembre 2018)
- Ruiping YANG 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.
- Pr Christopher Sorensen, Kansas State University, Department of Physics, 1228 N. 17th St., Manhattan, KS 66506-2601 USA.
- 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. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Alain BERLEMONT

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

Heures.CPU 2018 : 1 861 718

Publications de rang A

1. Romain Canu, Stefano Puggelli, Mohamed Essadki, Benjamin Duret, Thibaut Menard, Marc Massot, Julien Reveillon, F.X. Demoulin, Where does the droplet size distribution come from?, International Journal of Multiphase Flow, Volume 107, 2018, Pages 230-245.

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Asuri Mukundan, T. Ménard, A. Berlemont, J. C. Brändle de Motta, 'Numerical study of interface reconstruction method in under-resolved regions of the flow for liquid jet primary breakup'. In Proceedings of the 14th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS), July 22nd-26th, Chicago, USA, 2018.
2. A. Asuri Mukundan, T. Ménard, A. Berlemont, J. C. Brändle de Motta, 'Interface reconstruction method for multiphase flows in under-resolved regions'. In Proceedings of the 10th International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD10), July 2018, Barcelona, Spain.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Anirudh Asuri Mukundan

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

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

Heures.CPU 2018 : 496 993

Communications dans des congrès internationaux

1. Clément Carlier, Camille Choma Bex, Grégory Pinon, Grégory Germain, Elie Rivoalen, Recent developments to compute turbines interactions in an ambient turbulent flow In 6th Oxford Tidal Energy Workshop, 26-27 March 2018, Oxford, UK

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Camille Choma Bex.

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 2018 : 47 317

Publications de rang A

1. A. Arfaoui, F. Saâdi, A. Bourafai Aziez, H. Chebbi, C. Fressigné, J. Legros, H. Oulyadi, J. Maddaluno, H. Amri, Synthetic Communications, 2018, 48, 705-713. <https://doi.org/10.1080/00397911.2017.1420801>
2. D. Reyes Loya, A. Jean, M. Cormier, C. Fressigné, S. Nejrotti, J. Blanchet, J. Maddaluno, M. De Paolis Chem. Eur. J., 2018, 24, 2080-2084.

8. Projet : 2005003**Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins"**

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

Porteur : Denis LEDUE

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

Heures.CPU 2018 : 101

9. 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 2018 : 371 994

Publications de rang A

1. Azzouz R., Peauger L., Gembus V., Tintas M.-L., Sopkova de Oliveira Santos J., Papamicaël C., Levacher V. Novel donepezil-like N-benzylpyridinium salt derivatives as AChE inhibitors and their corresponding dihydropyridine "bio-oxidizable" prodrugs: Synthesis, biological evaluation and structure-activity relationship. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 145, 165-190.
2. Riva C.; Sokolowski M.; Normand J.; Sopkova de Oliveira Santos J.; Halm-Lemeille M.-P.; Real time effect of oral exposure to the acaricide pirimicarb, a new varroacide candidate, on *Apis mellifera* feeding rate. *Pest Management Science* 2018, 74(8), 1790- 1797. <https://doi.org/10.1002/ps.4876>.
3. Hedir S., DeGiorgi M., Fogha J., DePascale M., Weiswald L.-B., Brotin E., Marekha B., Denoyelle C., Denis C., Suzanne P., Gautier F., Juin P., Ligat L., Lopez F., Carlier L., Legay R., Bureau R., Rault S., Poulain L., Sopkova -de Oliveira Santos J. and Voisin-Chiret A.S. Structure-guided design of Pyridoclox derivatives based on Noxa / Mcl-1 interaction mode. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 159(5), 357-380.
4. Alim K., Lefranc B., Sopkova de Oliveira Santos J., Dubessy C., Picot M., Boutin J.A., Hubert Vaudry H., Chartrel N., Vaudry D., Chuquet J. and LePrince J. Design, Synthesis, Molecular Dynamics Simulation, and Functional Evaluation of a Novel Series of 26RFa Peptide Analogues Containing a Mono- or Polyalkyl Guanidino Arginine Derivative. *J. Med. Chem.* 2018, 61, 10185–10197.

Communications dans des congrès internationaux

1. Hedir S., Weiswald L.B., DeGiorgi M., Fogha J., De Pascale M., Brotin E., Marekha B., Suzanne P., Gautier F., Juin P., Ligat L., Lopez F., Legay R., Bureau R., Rault S., Sopkova -de Oliveira Santos J., Voisin-Chiret A.S. and Poulain L.; 109th Annual Congress of American Association of Cancer Research, Chicago, USA, 2018.
2. Bourafai Aziez A., Sebban M., Coadou G., Marekha B., Carlier L., Sopkova -de Oliveira Santos J., Voisin-Chiret A. S., Oulyadi H., EUROMAR, 2018, Nantes 1-5 July 2018, France.
3. Fogha J., Marekha B., Hedir S., DeGiorgi M., Gautier F., Juin P., Poulain L., Voisin-Chiret A. S. and Sopkova-de Oliveira Santos J.; Structure-guided design of Pyridoclox derivatives with Noxa like Mcl-1 binding profile. GP2A-JFB conference, 13-15 June 2018, Asnelles sur mer, France.
4. Benabderrahmane M., De Pascale M., Voisin-Chiret A.S., Bureau R., Sopkova-de Oliveira Santos J.; Computational 'microscopy' of pyridoclox-Mcl-1 interaction. GP2A-JFB conference, 13-15 June 2018, Asnelles sur mer, France.
5. Bourafai Aziez A., Sebban M., Coadou G., Marekha B., Carlier L., Sopkova-de Oliveira Santos J., Voisin-Chiret A. S., Oulyadi H., XXVIII ICMRBS 2018, 19-24 August 2018, Dublin, Irlande.
6. Benabderrahmane M., Voisin-Chiret A.S., Bureau R., Sopkova-de Oliveira Santos J., EuroQSAR, Navigating the conformational landscape of Mcl-1, 2018, 22nd EuroQSAR, 16-20 Septembre 2018, Thessaloniki, Grece.

Communications dans des congrès nationaux

1. Fogha J., Marekha B., Hedir S., De Giorgi M., Gautier F., Juin P., Poulain L., Voisin-Chiret A. S. and Sopkova-de Oliveira Santos J. Discovery of oligopyridyl scaffold molecules as potent Mcl-1 Inhibitors. AFC, 10-13 juillet 2018, Lyon, France.

2. Benabderrahmane M., Denis C., Voisin-Chiret A.S., Bureau R. and Sopkova- de Oliveira Santos J. Unraveling the mechanism of the interactions of Pyridoclast and Mcl-1: a computational investigation. Journée de l'Ecole Doctorale Normande de Chimie 2018, 21 juin 2018, Le Havre, France.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Karima Alim : Etudes moléculaires du système 26RFa-GPR103 par une approche pharmacochimique. (co-encadrement, financement de la Région Haute- Normandie au titre des grands réseaux de Recherches CBS)- soutenance 2018.
- Clémence Riva : Mise en évidence de nouveaux composés anti-varroas (50% région Basse-Normandie, 50% VetoPharma) (co-direction)- soutenance 2017.

Thèses en cours sur le projet

- Johanna Giovannini : Conception, synthèse et caractérisation de perturbateurs des interactions protéine-protéine liées aux phénomènes précoces amyloïdogéniques dans la maladie d'Alzheimer. Financement de thèse internationale Université de Caen Normandie (directrice A. S. Voisin-Chiret).
- Mohammed Benabderrahmane : Etude de relation structure-activité des ligands de Mcl-1 : application au traitement des cancers de l'ovaire. (MERT de l'Ecole Doctorale Normande de Chimie).

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Mehdi Benmameri. « Recherche des ligands du domaine BIR3 de XIAP par modélisation moléculaire ». - M1 Drug Design (Université de Caen Normandie)

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet Interactions protéine-protéine : La ligue contre le cancer, CRUNCH
 - UMR 6014 CNRS, Rouen (Prof H. Oulyadi, Dr M. Seban)
 - CERMN (Prof AS Voisin-Chiret, Dr. Charline Kieffer, Prof S. Rault)
 - Anticipe, 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
Projet LECMA
 - CERMN (Prof P. Dallemagne, Prof C. Rochais)
 - IGF, CNRS Université Montpellier, (Dr S. Claeyssen)
- Interreg PeReNE*
 - Unité INSERM U413, Rouen (Dr D. Vaudry, Dr J. Leprince)
 - Université de Portsmouth (Prof T. Clark)
 - Université de Southampton (Prof J. W. Essex)

10. 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 - Reims - UMR 7312 (REIMS)

Heures.CPU 2018 : 830 370

Publications de rang A

1. Chantal Barberot, Aurélie Moniot, Ingrid Allart-Simon, Laurette Malleret, Tatiana Yegorov, Marie Laronze-Cochard, Abderrazzaq Bentaher, Maurice Médebielle, Jean-Philippe Bouillon, Eric Hénon, Janos Sapi, Frédéric Velard, Stéphane Gérard * ; Synthesis and biological evaluation of pyridazinone derivatives as potential anti-inflammatory agents, Eur. J. Med. Chem. 146 (2018), 139-146
2. Corentin Lefebvre, Hassan Khartabil, Jean-Charles Boisson, Julia Contreras-García, Jean-Philip Piquemal and Eric Hénon* ; Independent Gradient Model: a new approach for probing strong and weak interactions in molecules from wave function calculations, Chem. Phys. Chem. 19 (2018), 724-735

Communications dans des congrès nationaux

1. Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, 8-12/10 2018, Toulouse, France Independent Gradient Model: a new tool derived from the NCI approach to probe strong and weak interactions from wave function calculations or from promolecular electron density.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec le laboratoire de Chimie Théorique de Jussieu, UMR CNRS 7616, Sorbonne Université.

11. 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 2018 : 52 192

Publications de rang A

1. Castanheiro, T.; Schoenfelder, A.; Donnard, M.; Chataigner, I.; Gulea, M. ; "Synthesis of sulfur-containing exo-bicyclic dienes and their Diels- Alder reactions to access thiacycle-fused polycyclic systems » ; J. Org. Chem. 2018, 83, 4505-4515.
2. Beuvin, M.; Manneveau, M.; Diab, S.; Picard, B.; Sanselme, M.; Piettre, S. P.; Legros, J.; Chataigner, I. ; "New Synthesis of Imidazole Derivatives from Cyanobenzenes"; Tetrahedron Lett. 2018, 59, 4487-4491.

Thèses en cours sur le projet

- Batoul Rkein (2016-2019). Sujet : « Fonctionnalisations d'arènes électroappauvris par activation C-H organocatalytique. Financement : région – réseau CRUNCh – support LabEx Synorg
- Léo Birbaum (2018-2021). Sujet : « Désaromatisation de noyaux indoliques - Synthèse d'indolines hautement fonctionnalisées". Financement : ANR

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Léo Birbaum (janv –juin 2018). Sujet : « Désaromatation de noyaux indoliques - Synthèse d'indolines hautement fonctionnalisées». Financement : ANR.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Programme de collaboration avec Hélène Gérard (LCT, UMR CNRS 7616, UPMC). Etude théorique DFT.

12. 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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 93

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

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

Porteur : Pascale DOMINGO

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

Heures.CPU 2018 : 11 736 301

Publications de rang A

1. G. Lodato. (2019) Characteristic modal shock detection for discontinuous finite element methods, *Computers & Fluids*, 179, 309–333.
2. K. Bioche, G. Ribert, L. Vervisch (2019) Simulating upstream flame propagation in a narrow channel after wall preheating: Flame analysis and chemistry reduction strategy *Combust. Flame* (accepted).
3. K. Bioche, L. Vervisch, G. Ribert (2018) Premixed flame-wall interaction in a narrow channel: Impact of wall thermal conductivity and heat losses, *J. Fluid Mech.*(856): 5 - 35.
4. G. Lodato, J.-B. Chapelier (2018) Evaluation of the Spectral Element Dynamic Model for Large-Eddy Simulation on Unstructured, Deformed Meshes, *Flow Turbulence and Combustion*, 101(2), 271–294, (2018).
5. U. Guven, G. Ribert (2018) Impact of non-ideal transport modeling on supercritical flow simulation, *Proc. Combust. Inst.* (in press).
6. B. Duboc, G. Ribert, P. Domingo (2018) Evaluation of chemistry models on methane/air edge flame simulation, *Proc. Combust. Inst.* (in press)
7. G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch (2018) Analysis of sub-grid scale modeling of the ideal-gas equation of state in hydrogen-oxygen premixed flames, *Proc. Combust. Inst.* (in press).
8. C. Locci, L. Vervisch, B. Farcy, P. Domingo, N. Perret (2018) Selective Non-Catalytic Reduction (SNCR) of nitrogen oxide emissions: A perspective from numerical modeling, *Flow Turbulence and Combust.* 100(2): 301-340.
9. U. Guven, G. Ribert (2018) Large-eddy simulation of supersonic H₂/O₂ combustion: application to a rocket-like igniter, *J. Propul. Power*, (34,2): 291 - 307.

Communications dans des congrès internationaux

1. U. Guven, G. Ribert, Modeling and simulation of supercritical flows. ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modeling and Measurements (ETMM-12), Sep. 26–28, 2018, Montpellier (France).
2. J. Ruan, P. Domingo, G. Ribert, Large-eddy simulation of supersonic combustion in a cavity-based Scramjet. ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modeling and Measurements (ETMM-12), Sep. 26–28, 2018, Montpellier (France).
3. U. Guven, G. Ribert, Numerical simulation of supercritical H₂/O₂ flame with non-ideal transport. 14th ICLASS, Chicago (USA), 2018.
4. K. Bioche, G. Ribert, L. Vervisch, Flame-wall Interaction in narrow channels: a flame shape regime diagram. ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modeling and Measurements (ETMM-12), Sep. 26–28, 2018, Montpellier (France).
5. G. Lodato, J.-B. Chapelier, B. Pinto. A dynamic sub-grid scale modelling approach for discontinuous finite elements methods. High-Fidelity Industrial LES/DNS Symposium (HiFiLeD, supported by the EU H2020 TILDA project), Nov. 14–16, 2018, Brussels (Belgium).
6. B. Pinto and G. Lodato. Large-eddy simulation of bypass transition using high-order spectral difference schemes. 12th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modeling and Measurements (ETMM-12), Sep. 26–28, 2018, Montpellier (France).
7. M.T. Migliorino, J.-B. Chapelier, C. Scalo, G. Lodato. Assessment of spurious numerical oscillations in high-order spectral difference solvers for supercritical flows. 2018 Fluid Dynamics Conference, AIAA Aviation Forum, Jun. 25–29, 2018, Atlanta, GA (USA).

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Kevin Bioche (novembre 2018). Analyse de la propagation d'une flamme méthane/air dans un canal étroit bi-dimensionnel avec prise en compte des couplages thermiques.
- Umut Güven (décembre 2018). Simulation haute-fidélité de la combustion pour les moteurs fusées.

Thèses en cours sur le projet

- Loïc Ruan encadrants P. Domingo / G. Ribert
- Alexandre Bouaniche encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Andréa Seltz encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Camille Barnaud encadrants P. Domingo/ L. Vervisch
- Niccolo Tonicello encadrants L. Vervisch / G. Lodato

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

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

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

Porteur : Benjamin DURET

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

Heures.CPU 2018 : 2 117 597

Publications de rang A

1. F. Dabonneville, N. Hecht, J. Reveillon, G. Pinon, F.X. Demoulin, 2018. A zonal grid method for incompressible two-phase flows, 2018. Computers & Fluids, Under revision.
2. Anez J., Ahmed A., Hecht N., Duret B., Reveillon J., Demoulin F.X., 2018. Eulerian–Lagrangian spray atomization model coupled with interface capturing method for diesel injectors. International Journal of Multiphase Flow, In press - Corrected Proof.

Communications dans des congrès internationaux

1. J. Anez, R. Canu, B. Duret, J. Reveillon, F.-X. Demoulin, Turbulent statistical transition from Euler to Lagrange using droplet velocity PDF, 14th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Chicago, USA, 2018.

Communications dans des congrès nationaux

1. Dabonneville Félix (CORIA) – A multiresolution method with local mesh refinement applied to atomization, Congrès Français des utilisateurs d'OpenFOAM, 2018.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- F. Dabonneville, Développement d'une méthode numérique multi-échelle et multi-approche appliquée à l'atomisation, 2018. Thèse, Université de Rouen.
- J. Anez, Modélisation de l'injection de pétrole pour les procédés FCC (Fluid Catalytic Cracking). Thèse, Université de Rouen.

Thèses en cours sur le projet

- Aqeel Ahmed : Modélisation LES de l'atomisation d'injecteur diesel.
- Alberto Remigi : Développement d'une approche numérique pour l'amélioration d'un injecteur aéromécanique.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Un des membres de notre projet (Julien Réveillon) est Président de l'association des utilisateurs d'OpenFOAM – France.
- Régulières collaborations avec l'université de Florence.

15. 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 2018 : 366 024

Publications de rang A

1. FORTIN C., KHANNICHE S., KHIRI D., FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P., COUSIN F., ČERNUŠÁK I., LOUIS F. ; Reactivity of Hydrogen Peroxide with Br and I Atoms, *Journal of Physical Chemistry A*, 122, 1053-1063, 2018.
2. KHIRI D., ČERNUŠÁK I., LOUIS F. ; A Theoretical Study of the Reactions of H Atoms with CH3I and CH2I2, *Journal of Physical Chemistry A*, 122, 6546-6557, 2018.
3. VILLARD A., KHANNICHE S., FORTIN C., CANTREL L., ČERNUŠÁK I., LOUIS F. ; A theoretical study of the microhydration processes of iodine nitrogen oxides, *International Journal of Quantum Chemistry*, In press, 2018.
4. VANDEPUTTE R., KHIRI D., LAFONT C., CANTREL L., LOUIS F. ; Theoretical investigation of thermochemical properties of cesium borates species, Submitted to *Journal of Nuclear Materials*, July 2018.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. CANTREL L., ALBIOL T., BOSLAND L., COLOMBANI J., COUSIN F., GREGOIRE A.C., LEROY O., MORIN S., MUN C., OHNET M.N., SOUVI S., MONSANGANT-LOUVET C., LOUIS F., AZAMBRE B., VOLKRINGER C. Research Works on Iodine and Ruthenium Behavior in Severe Accident Conditions, *ASME Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science*, 4, 020902-020902-15, 2018.

Communications dans des congrès internationaux

1. KHIRI D., SULIMAN S., RIBAUOUR M., EL BAKALI A., LOUIS F., ČERNUŠÁK I. ; Study of very short-lived species and their atmospheric degradation products: structures and thermochemical properties ; 16th International Congress on Quantum Chemistry, Menton, 18-23 Juin 2018.
2. SULIMAN S., ČERNUŠÁK I., NOVOTNÝ M., LOUIS F. ; Comparison of UHF and ROHF reference for the MP2.5 method. Case study of atmospheric reactivity ; 16th International Congress on Quantum Chemistry, Menton, 18-23 Juin 2018.
3. ALLOUTI F., SOUVI S., MARKOVITS A., LOUIS F. ; Oxidation of a potassium iodide surface by gaseous ozone ; 25th International Symposium on Gas Kinetics and Related Phenomena, Lille, 22-26 Juillet 2018
4. FORTIN C., KHIRI D., LOUIS F., FEVRE-NOLLET V., COUSIN F. ; Atmospheric fate of iodomethanol, unimolecular decomposition and its reaction with OH radicals ; 25th International Symposium on Gas Kinetics and Related Phenomena, Lille, 22-26 Juillet 2018.
5. KHIRI D., SULIMAN S., EL BAKALI A., LOUIS F., ČERNUŠÁK I. ; Ab initio investigation of thermochemical properties of very short-lived brominated substances (VSLs); 25th International Symposium on Gas Kinetics and Related Phenomena, Lille, 22-26 Juillet 2018.
6. TAAMALLI S., KHIRI D., CANTREL L., LOUIS F., ČERNUŠÁK I. ; Unravelling the reaction mechanisms of iodous acid with chlorine atom ; 25th International Symposium on Gas Kinetics and Related Phenomena, Lille, 22-26 Juillet 2018.
7. SULIMAN S., FORTIN C., KHIRI D., LOUIS F., FEVRE-NOLLET V., COUSIN F., ČERNUŠÁK I. ; Reaction of CH2IOH with OH radical ; 16th Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Srni (République Tchèque), 9-12 Septembre 2018.

8. TAAMALLI S., KHIRI D., CANTREL L., LOUIS F., ČERNUŠÁK I. ; Thermochemistry of HIO₂ species and reactivity of iodous acid with chlorine atom: A computational approach ; 16th Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Srni (République Tchèque), 9-12 Septembre 2018.

Communications dans des congrès nationaux

1. FEVRE-NOLLET V., LEBEGUE P., LOUIS F., FORTIN C., COUSIN F. ; Chimie Atmosphérique de l'iode : de l'échelle moléculaire aux modèles de chimie transport ; Congrès National de la Recherche en IUT (CNRIUT 2018), Aix en Provence, 7-8 Juin 2018.

Thèses en cours sur le projet

- FORTIN C. Modélisation de l'interaction iode/atmosphère. Thèse avec bourse Université de Lille (2015-), en cours.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

16. Projet : 2007013

Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés

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

Porteur : Sébastien PETIT

Laboratoire : CRISMAT - UMR 6508 (CAEN)

Heures.CPU 2018 : 444 367

Publications de rang A

1. M. Poupon, N. Barrier, A. Pautrat, S. Petit, O. Perez and P. Bazin, "Investigation of Co₆(OH)₃(TeO₃)₄(OH)0.9(H₂O) : Synthesis, crystal and magnetic structures, magnetic and dielectric properties", J. Solid State Chem. 270, 147, (2019).
2. Ghassen Yahia, Françoise Damay, Sumantha Chattopadhyay, Victor Balédent, Wey Peng, S.W Kim, M. Greenblatt, Marie-Bernadette Lepetit, Pascale Foury-Leylekian, "Experimental evidences for the microscopic mechanism of the unusual spin-induced electric polarization in GdMn₂O₅ ", Phys. Rev. B 97, 085128 (2018).
3. Rose-Marie Galera, Christine Opagiste, Mehdi Amara, Jean-Christophe Toussaint, Marie-Bernadette Lepetit, Stephane Rols, "Analysis of the magnetic properties of Ce₃Pt₂₃Si₁₁ : orthorhombic crystal field and mean-field approximation.", J. Phys. : Cond. Matter 30, 285802 (2018).
4. Maxime Deutsch, Wei Peng, Pascale Foury-Leylekian, Victor Balédent, S. Chatto-padhyay, Maria T. Fernandez-Diaz, Thomas C. Hansen, Anne Forget, Dorothée Colson, Marie-Bernadette Lepetit, Sylvain Petit, Isabelle Mirebeau, Phys. Rev. B 98, 024408 (2018), "Pressure-Induced Commensurate order in TbMn₂O₅ and DyMn₂O₅ : Influence of rare earth anisotropy and 3d-4f exchange."

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Ghassen YAHIA, thèse en codirection avec Université Paris Sud et Université de Tunis (Tunisie), soutenance 20 novembre 2018.

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

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

Porteur : Alexis COPPALLE

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

Heures.CPU 2018 : 29

18. 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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 726 038

Publications de rang A

1. H. Kanso, R. Patte, V. Baltz and D. Ledue ; "Influence of finite size and edges effects on the exchange bias properties of ferromagnetic/antiferromagnetic nanodots : a granular Monte Carlo investigation" ; soumis à Physical Review B.

Thèses en cours sur le projet

- H. Kanso : « Etude par simulations numériques des propriétés d'anisotropie d'échange de nanoplots ferromagnétiques/antiferromagnétiques – Comparaison à l'expérience ». Thèse débutée en octobre 2016.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

19. Projet : 2011001**Intitulé : Etude 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 2018 : 1 544

20. Projet : 2012006**Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe**

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

Porteur : Vincent MOUREAU

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

Heures.CPU 2018 : 8 852 549

Publications de rang A

1. Benard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Mercier, R. (2019) Large-Eddy Simulation Of The Lean-Premixed Preccinsta Burner With Wall Heat Loss. Proceedings Of The Combustion Institute.
2. Benard, P., Viré, A., Moureau, V., Lartigue, G., Beaudet, L., Deglaire, P. & Bricteux, L. (2018) Large-Eddy Simulation Of Wind Turbines Wakes Including Geometrical Effects. Computers And Fluids 0, 1–7.
3. Boulet, L., Pierre, B., Ghislain, L., Vincent, M., Sheddia, D., Nicolas, C. & Florent, D. (2018) Modeling Of Conjugate Heat Transfer In A Kerosene / Air Spray. Flow, Turbulence And Combustion Pp. 1–24.

Communications dans des congrès internationaux

1. Akkari, N., Mercier, R. & Moureau, V. (2018) Geometrical Reduced Order Modeling (Rom) By Pro- Per Orthogonal Decomposition (Pod) For The Incompressible Navier-Stokes Equations. Aiaa Aerospace Sciences Meeting, 2018.
2. Al-Asmi, I., Vandel, A., Cabot, G., Grisch, F., Moureau, V., Savary, N., Richard, S. & Renou, B. (2018) Integration Of Helicopter Annular Combustion Chamber Rig In Propulsion Systems Course For Graduate Students. Asme Turbo Expo. Oslo, Norway.
3. Barnaud, F., Benard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Deglaire, P. (2018) Wall-Modeled Large Eddy Simulation Of Flow Around Oscillating Wind Turbines Dedicated Airfoils. Aiaa Aerospace Sciences Meeting, 2018.
4. Brunet, V., Croner, E., Minot, A., De Laborderie, J., Lippinois, E., Richard, S., Boussuge, J.-F., Dombard, J., Duchaine, F., Gicquel, L., Poinot, T., Puigt, G., Staffebach, G., Segui, L., Vermorel, O., Villedieu, N., Cagnone, J.-S., Hillewaert, K., Lartigue, G. & Moureau, V. (2018) Comparison Of Various Cfd Codes For Les Simulations Of Turbomachinery : From Inviscid Vortex Convection To Multi-Stage Compressor. Gt2018-75523. In 2018, Oslo, Norway. Asme Turbo Expo. Oslo, Norway.
5. Legrand, N., Lartigue, G. & Moureau, V. (2018) Adaptive Multi-Resolution Large-Eddy Simulation With Control Of Modeling And Numerical Errors. Aiaa Aerospace Sciences Meeting, 2018.
6. Leparoux, J., Mercier, R., Moureau, V. & Musaefendic, H. (2018) Primary Atomization Simulation Applied To A Jet In Crossflow Aeronautical Injector With Dynamic Mesh Adaptation. Proceedings Of Iclass (July), 22–26.
7. Moureau, V., Benard, P., Lartigue, G., Bricteux, L., Beaudet, L. & Vire, A. (2018) Highly Resolved Large-Eddy Simulation Of Wind Turbine Wakes. Canum.
8. Moureau, V., Benard, P., Lartigue, G., Vaudor, G., Froehly, A., Dobrzynski, C. & Mercier, R. (2018) Parallel Dynamic Mesh Adaptation Of Unstructured Grids: Application To Premixed Flame And Primary Atomization Modeling. Turbulence Interactions. La Martinique, France.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Lancelot Boulet. Simulation aux grandes échelles de la tenue au feu d'un carter moteur. 20/12/2018.

Thèses en cours sur le projet

- 2015-2019: Y. Dufresne, "Modeling of granular flows with heat and mass transfers" MORE4LESS ANR project. PhD director : Prof Mourad Boukhalfa.
- 2015-2019: F. Barnaud, "Modeling of dynamic stall on wind turbine blades". PhD director : Prof Luminita Dainala.
- 2014-2018: 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 : F. Grisch.
- 2017-2020: F. Gava, "Optimization of unstructured CFD on modern architectures", FUI ICARUS, PhD director: Prof Alain Berlemont.
- 2018-2021 : R. Janodet, "Modeling of primary atomization with dynamic mesh adaptation". CIFRE SAFRAN TECH. PhD director : Prof Alain Berlemont.
- 2018-2021 : F. Houtin-Montgrolle, "Large-Eddy Simulation of offshore wind turbine wakes". NEPTUNE project. PhD director : Prof Julien Reveillon.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Groupement d'Intérêt Scientifique SUCCESS: CORIA, LEGI, IMAG, EM2C, IMFT, LMAP, CERFACS, IFP-EN
- Prof O. Desjardins, CORNELL University, USA.
- Prof L. Bricteux, MONS University, Belgium

21. 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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 686 898

Publications de rang A

1. K. X. Chen, P. A. Korzhavyi, G. Demange, H. Zapolsky, R. Patte, J. Boisse, Z. D. Wang, Morphological instability of iron-rich precipitates in Cu-Fe-Co alloys, *Acta Mater.*, 163, (2019).
2. G. Demange, S. Dépinoy, L. Lunéville, D. Simeone, V. Pontikis, . Irradiation-based design of mechanically resistant microstructures tuned via multiscale phase-field modeling. *Sci. rep.*, 8(1), (2018).
3. G. Demange, M. Chamillard, H. Zapolsky, M. Lavrskyi, A. Vaugeois, L. Lunéville, D. Simeone, R. Patte, Generalization of the Fourier-spectral Eyre scheme for the phase-field equations : Application to self-assembly dynamics in materials. *Comput. Mater. Sci.*, 144, (2018).
4. B. Gajdics, J. J. Toman, F. Misjak, G. Radnoczi, Z. Erdelyi "Spinodal decomposition in nanoparticles - Experiments and results", *Defect and Diffusion Forum* 383:89-95 (02/2018).

Communications dans des congrès internationaux

1. G. Demange*, H. Zapolsky, R. Patte, M. Brunel, Snowflake growth in supersaturated atmosphere using a three-dimensional phase-field model, International Conference on the Physics and Chemistry of Ice (PCI), Zurich (Suisse) : présentation orale, janvier 2018.
2. K. X. Chen, P.A. Korzhavyi, G. Demange*, H. Zapolsky, R. Patte, J. Boisse, Z.D. Wang, Kinetic instability induced formation of petal-like shaped iron precipitates in Cu-Fe-Co alloys, SES Madrid (2018).

3. H. Zapolsky*, A. Vaugeois , R. Patte « Atomistic modeling of grain boundary segregation », DSL 2018, Amsterdam. (Invited lecture).
4. H. Zapolsky*, A. Dahlstrom, F. Danoix, R. Patte «Application of Atomic Density Theory to study of the microstructural evolution in Fe-based alloys under applied stress and with magnetic interaction » ADIS 2018, Munich.
5. H. Zapolsky*, A. Vaugeois, R. Patte « "Quasiparticle Approach to stude grain boundaries structure in bcc iron" TMS 2018, Phoenix.
6. O. Nakonechna *, H. Zapolsky, F. Danoix "Atomistic modeling of austenite- ferrite interface migration in pure iron", 18th ALEMI Meeting 5th-6th of July 2018 (Metz, France).
7. Stochastic kinetic mean-field model, European Conference on Surface Science, Szeged, Hungary (09/2017) Computer simulation of spinodal decomposition in Ag-Cu system, French-Hungarian Scientific Research Forum, Budapest, Hungary (09/2018).

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Nikolas Mavrikakis (collaboration IM2NP).

Thèses en cours sur le projet

- Alexandr Dahlstrom.
- Bence Gajdics (co-tutelle avec l'Université de Debrecen - Hongrie).
- Olha Nakonechna.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Janos Toman, Zoltan Elderiy (Université de Debrecen, Hongrie)
- Jonas Odqvist :KTH (Stockholm, Suède)
- A.G. Khachatryan (Rutgers University, USA)
- P. Maugis (Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence, Marseille)
- M. Gouné (Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux, Bordeaux)
- S. Cazottes (Matériaux Ingénierie et Sciences, Lyon)
- T. Epicier (Matériaux Ingénierie et Sciences, Lyon)
- M. Brunel (CORIA, Rouen)

22. **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 2018 : 75 546

Communications dans des congrès internationaux

1. Hupin S, Lavanant H, Rosu F, Tognetti V, Izzet G, Proust A., Gabelica V, Afonso C; Experimental and Theoretical Collision Cross Sections of Polyoxometalates; 66th ASMS conference on mass spectrometry and allied topics, San Diego Etats-Unis, 3-7 Juin 2018.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- HUPIN, Sébastien, Caractérisation de polyoxométallates hybrides organiques-inorganiques par mobilité ionique et spectrométrie de masse ; Doctorat de l'université de Rouen Normandie, thèse soutenue le 3 décembre 2018. 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, M. Piot.

23. 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 2018 : 894

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

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

24. 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 2018 : 6 501

Publications de rang A

1. Computation of effective electrical conductivity of composite materials: A novel approach based on analysis of graphs. Composites Structures 189, 2018, 661-666, DOI:10.1016/j2018.02.012

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Dylan Jugan : Analysis of composites within the framework of homogenization.

25. 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 2018 : 5 411 422

Publications de rang A

1. L. Pizzagalli, I. Belabbas, J. Kioseoglou and J. Chen ; First-principles study of threading screw dislocations in AlN and InN ; Physical Review Materials, 2, 064607 (2018).
2. I. Belabbas, L. Pizzagalli, J. Kioseoglou and J. Chen ; Screw dislocations in wurtzite InN: an investigation from first principles ; Physical Chemistry and Chemical Physics (soumise).

Communications dans des congrès internationaux

1. I. Belabbas, L. Pizzagalli, J. Kioseoglou and J. Chen, "Screw dislocations in Indium Nitride", International conference on Extended Defects in Semiconductors (EDS2018). Thessaloniki, Greece, 24th -29th June, 2018.

Communications dans des congrès nationaux

1. Etude par simulations atomistiques des dislocations dans les matériaux nitrures-III". I. Belabbas, Les 4èmes Journées des Doctorants (JDD18) Tizi Ouzou (Algérie) 25-26 mars 2018.

Thèses soutenues en 2018 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, Thèse soutenue le 04/12/2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Equipe 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.

26. 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 Etienne du Rouvray)

Heures.CPU 2018 : 225 865

Publications de rang A

1. P. G. Kevrekidis, I. Danaila, J.-G. Caputo, R. Carretero-González ; Planar and Radial Kinks in Nonlinear Klein-Gordon Models: Existence, Stability and Dynamics, Physical Review E, 98, p. 052217(1-13) (2018).

Communications dans des congrès nationaux

1. I. Danaila, Newton and Sobolev gradient methods for nonlinear fluid and superfluid flow problems, Conference on Mathematical Models and Computation of Nonlinear Problems, Tsinghua Sanya International Mathematics Forum, Sanya, China, January 2018.
2. I. Danaila, Finite-Element Tools for the Simulation of Bose-Einstein Condensates, The 12th American Institute of Mathematical Sciences Conference, July 5-9, 2018, Taipei, Taiwan.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ph. Parnaudeau, CNRS et Université de Poitiers
- F. Chevy, ENS Paris, Laboratoire Kastler Brossel
- P. G. Kevrekidis, University of Massachusetts Amherst, USA R.
- Carretero-Gonzalez, San Diego State University, USA

27. 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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 649 798

Publications de rang A

1. A. Albaalbaky, Y. Kvashnin, R. Patte, R. Frésard and D. Ledue ; "Effects of Ga doping on magnetic and ferroelectric properties of multiferroic delafossite CuCrO₂: Ab initio and Monte Carlo approaches"; Phys. Rev. B 98, 174403 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.98.174403

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

28. Projet : 2015005**Intitulé : Cylindre partiellement immergé soumis à la houle et au courant**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Gaele PERRET

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

Heures.CPU 2018 : 639 548

Publications de rang A

1. K. Selvam, E. Öngüner, J. Peixinho, E.-S. Zanoun and C. Egbers, Wall pressure in developing turbulent pipe flows, *Journal Fluids Engineering*, 140(8) 081203 (2018).
2. B. Lebon, M. Q. Nguyen, J. Peixinho, M. S. Shadloo and A. Hadjadj, A new mechanism for periodic bursting of the recirculation region in the flow through a sudden expansion in a circular pipe, *Physics of Fluids*, 30, 031701 (2018).
3. B. Lebon, J. Peixinho, S. Ishizaka and Y. Tasaka, Subcritical transition to turbulence in sudden circular pipe expansion, *Journal of Fluid Mechanics*, 849, 340-354 (2018).

Communications dans des congrès internationaux

1. V. Ageorges, J. Peixinho and G. Perret, Flow and air-entrainment around partially submerged vertical cylinders, *EFMC12, Vienna, Austria* (2018).
2. V. Ageorges, J. Peixinho and G. Perret, Flow and air-entrainment around partially submerged vertical cylinders, *APD DFD, Atlanta, Georgia, US* (2018).
3. D. V. Shenoy, M. Q. Nguyen, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, J. Peixinho and O. K. Matar, Subcritical transition to turbulence in diverging pipe flows, *APD DFD, Atlanta, Georgia, US* (2018).

Communications dans des congrès nationaux

1. V. Ageorges, J. Peixinho and G. Perret, Ecoulement et entraînement d'air autour d'un cylindre vertical partiellement immergé, *21ème RNL, Paris, France* (2018).

Thèses en cours sur le projet

- V. Ageorges, Efforts sur des éléments de structures houlomotrices, immergés ou partiellement immergés soumis à la houle et au courant, débutée en septembre 2016, fin prévue en septembre 2019.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- LIA CNRS ISTROF: Laboratoire International Instabilities of Stratified and Rotating Flows (LOMC and BTU-Cottbus, Allemagne).
- B. Lebon, Institut de Recherche de l'École Navale, Brest.

29. 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 - Lille - UMR 8516 (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2018 : 784 514

Publications de rang A

1. Vyalov, Y. Vaksler, V. Koverga, F.A. Miannay, A. Idrissi ; Free energy of solvation of biomass model cellobiose molecule: A molecular dynamics analysis. *J. Mol. Liq.* 245 (2017) 97-102 (this paper was not listed in the previous report).
2. Nebojša Zec, Abdenacer Idrissi, Marija Bešter-Roga, Milan Vraneš, Slobodan Gadžuric ; Insights into interactions between 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide and molecular solvents: γ -valerolactone, γ -butyrolactone and propylene carbonate. Volumetric properties and MD simulations ; *J. Mol. Liq.* 268 (2018) 481-489
3. Volodymyr Koverga, Oleg N. Kalugin, François-Alexandre Miannay, Yevheniia Smortsova, Kateryna Goloviznina, Bogdan Marekha, Pal Jedlovsky and Abdenacer Idrissi ; The local structure in the BmimPF₆/acetonitrile mixture: the charge distribution effect ; *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 21892 - 21902.
4. Ari Paavo Seitsonen, Abdenacer Idrissi, Stefano Protti, Alberto Mezzetti ; Solvent effects on the vibrational spectrum of 3-hydroxy flavones ; *J. Mol. Liq.* 268 (2019) 723-728

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Thèse de doctorat SMORTSOVA Hevheniia (le 4/12/20218).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ari Paavo SEITSONEN, Ecole Normale Supérieure, Paris.

30. 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.

31. 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 : Thomas COUDON

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

Heures.CPU 2018 : 19 841

Publications de rang A

1. Coudon T, Hourani H, Nguyen C, Faure E, Mancini Fr, Fervers B, Salizzoni P; Assessment of long-term exposure to airborne dioxin and cadmium concentrations in the Lyon Metropolitan Area (France)- Environment International - 2018 Feb ; 111:177-190.
2. Coudon T, Danjou AMN ,Faure E, Praud D, Mancini Fr, Severi G. , Salizzoni P, Fervers B Development and performance evaluation of a GIS-based metric to assess exposure to airborne pollutant emissions from industrial sources. Accepted with minor revision, Environmental Health - October 2018.
3. Danjou AMN, Coudon T, Praud D, Lévêque E, Faure E. , Salizzoni P , Le Romancer M, Severi G, Mancini F, Leffondré K, L. Dossus Fervers B - Airborne Dioxin Exposure and Breast Cancer Risk in a case-control study nested within the French E3N Prospective Cohort. Accepted with minor revision, Environment International - November 2018.
4. Coudon T, Salizzoni P, Praud D, Danjou AMN, Dossus L, Faure E, Fervers B, Historical industrial dioxin emission in France: A database for epidemiological studies. Submitted to Atmospheric Pollution Research – October 2018.

Communications dans des congrès internationaux

1. Development and performance evaluation of a GIS-Based Metric to assess exposure to airborne pollutant emissions from industrial sources. ; T. Coudon, A. Danjou , E. Faure , D. Praud , FR. Mancini , G. Severi , P. Salizzoni , B. Fervers; 9th International conference on the science of exposure assessment, Manchester, UK 24-26 September 2018.
2. Development and performance evaluation of a GIS-based metric to assess exposure to airborne pollutant emissions from industrial sources. ; T. Coudon, A. Danjou , E. Faure , D. Praud , FR. Mancini , G. Severi , P. Salizzoni , B. Fervers; European congress of epidemiology, Lyon, France 3-5 juillet 2018.

Communications dans des congrès nationaux

1. [Poster] - Development and Performance Evaluation of a GIS-Based Metric to Assess Exposure to Airborne Pollutant Emissions from Industrial Sources ; T. Coudon, A. Danjou , E. Faure , D. Praud , FR. Mancini , G. Severi , P. Salizzoni , B. Fervers; Forum de la recherche en Cancérologie , CLARA, 4 -5 avril 2018.
2. [Communication orale] - Journée de valorisation des projets de recherche APR CIDE ADEME. Présentation des conclusions du projet GEO3N. Paris, France. 15 janvier 2018.
3. [Communication «grand public»] - Juin 2018. Exposition à la pollution de l'air et risque de cancer. Conférence grand public ERI, Centre Léon Bérard, Lyon, France.
4. [Communication «grand public»] - Octobre 2018. Exposition à la pollution de l'air et risque de cancer : Etat des lieux et projets de recherche. Comité territorial Air Atmo Auvergne-Rhône-Alpes. Centre Léon Bérard, Lyon, France.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Thomas Coudon : Développement et application de méthodologies d'évaluation des expositions atmosphériques chroniques aux dioxines et au cadmium dans le cadre d'études épidémiologiques, thèse dirigée par le Pr Béatrice Fervers et Dr Pietro Salizzoni - soutenue le 1er juin 2018.

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Stage Master 2 SOAC - Université Claude Bernard Lyon 1. Sujet : Reconstitution des émissions du parc automobiles Lyonnais entre 1990 et 2000 et simulations des concentrations en 2000.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec l'équipe AIR de l'Ecole Centrale de Lyon dans le cadre du projet XENAIR. Référent : Pietro Salizzoni (MDC).

32. Projet : 2016002**Intitulé : FireDiag**

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

Porteur : Emilien VAREA

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

Heures.CPU 2018 : 3 317

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Luminata DANAILA

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

Heures.CPU 2018 : 994 517

Publications de rang A

1. M. Gauding, L. Wang, J.H. Goebbert., M. Bode, L. Danaila, & E. Varea. On the self-similarity of line segments in decaying homogeneous isotropic turbulence. *Computers & Fluids* (2018).
2. M. Gauding, L. Danaila, E. Varea, One-point and two-point statistics of homogeneous isotropic decaying turbulence with variable viscosity, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 72, 143-150 (2018).
3. H. Sadeghi, M. Oberlack, M. Gauding. On new scaling laws in a temporally evolving turbulent plane jet using Lie symmetry analysis and direct numerical simulation. *Journal of Fluid Mechanics* 854 (2018): 233-260.
4. Rakotondrandisa A., Danaila I, Danaila L., 2018, 'Numerical modelling of a melting-solidification cycle of a phase-change material with complete or partial melting', *International J. of Heat and Fluid Flow*, accepté.

Communications dans des congrès internationaux

1. M. Gauding, L. Danaila, E. Varea, The effect of external intermittency on the self-similarity of structure functions in turbulent shear flows, *Annual Meeting of The American Physical Society – Division of Fluid Dynamics* (2018).

2. M. Gauding, J. H. Goebbert, L. Danaila, E. Varea, Using Highly-Resolved Direct Numerical Simulations to Analyze the Universality of Small-Scale Turbulence, in proceedings of the John von Neumann.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Post-doctorat de Michael Gauding.

34. 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 2018 : 54 633

Publications de rang A

1. Siham Hedir, Marcella De Giorgi, Jade Fogha, Martina De Pascale, Louis-Bastien Weiswald, Emilie Brotin, Bogdan Marekha, Christophe Denoyelle, Camille Denis, Peggy Suzanne, Fabien Gautier, Philippe Juin, Laetitia Ligat, Frédéric Lopez, Ludovic Carlier, Rémi Legay, Ronan Bureau, Sylvain Rault, Laurent Poulain, Jana Sopková-de Oliveira Santos, Anne Sophie Voisin-Chiret, Structure-guided design of pyridoclast derivatives based on Noxa / Mcl-1 interaction mode, European Journal of Medicinal Chemistry, Volume 159, 2018, 357-380.

Communications dans des congrès internationaux

1. Denis, C.; Dubois, M.; Brotin, E.; Poulain, L.; Voisin-Chiret, A.S.; Bureau, R.; Bull, J.A. Synthèse et Évaluation Biologique de Nouveaux Fragments Tridimensionnels vers la Découverte d'Inhibiteurs des Protéines Anti-apoptotiques. 11èmes journées scientifiques du Cancéropôle Nord-Ouest, 23-25 mai 2018, Deauville (France).
2. Denis, C.; De Pascale, M.; Marekha, B.; Kieffer, C.; Jouanne, M.; Hedir, S.; Brotin, E.; Weiswald, L.B.; Denoyelle, C.; Poulain, L.; Bourafai Aziez, A.; Sebban, M.; Oulyadi, H.; Bureau, R.; Voisin-Chiret A.S. Design, Synthesis and Biological Results of Mcl-1/Bcl-xL Inhibitors for the Treatment of Chemoresistant Ovarian Cancers. 17èmes Rencontres de Chimie Organique Biologique (RECOB), 18-22 mars 2018, Aussois (France).
3. Denis, C.; Dubois, M.; Voisin-Chiret, A.S.; Bureau, R.; Choi, C.; Mousseau, J.J.; Bull, J.A. Exploring Chemical Space with 3,3-Diarylazetidines Towards the Discovery of Anti-apoptotic Protein Inhibitors. 25th Young Research Fellow Meeting (YRFM), 5-7 mars 2018, Orléans (France).
4. Benabderrahmane M., De Pascale M., Voisin-Chiret AS., Bureau R., Sopkova-de-Oliveira Santos J. Computational 'microscopy' of pyridoclast-Mcl-1 interaction. Joint 26th GP2A / 32nd JFB Conferences – Asnelles sur Mer (France) – 13th-15th June 2018.
5. Benabderrahmane M., De Pascale M., Voisin-Chiret AS., Bureau R., Sopkova-de-Oliveira Santos J. Unraveling the mechanism of the interactions of Pyridoclast and Mcl-1 : a computational investigation. Normandy Doctoral School of Chemistry Day, 21 juin 2018, Le Havre (France).
6. BENABDERRAHMANE Mohammed, VOISIN-CHIRET Anne-Sophie, BUREAU Ronan, SOPKOVA-de OLIVEIRA SANTOS Jana. Navigating the conformational landscape of Mcl-1, 22nd EuroQSAR (Translational and health informatics: Implications for drug discovery), Sep 2018 Thessaloniki, Greece.
7. Denis, C.; De Pascale, M.; Marekha, B.; Jouanne, M.; Kieffer, C.; Brotin, E.; Weiswald, L.B.; Denoyelle, C.; Poulain, L.; Bourafai Aziez, A.; Sebban, M.; Oulyadi, H.; Sopkova De Oliveira Santos, J.; Voisin-Chiret A.S.; Bureau, R. Structure-Based Drug Design from a Selective Inhibitor of Anti-Apoptotic Proteins. 22nd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships (EuroQSAR), 16-20 septembre 2018, Thessalonique (Grèce).

8. Denis, C.; De Pascale, M.; Marekha, B.; Jouanne, M.; Kieffer, C.; Brotin, E.; Weiswald, L.B.; Denoyelle, C.; Poulain, L.; Bourafai Aziez, A.; Sebban, M.; Oulyadi, H.; Bureau, R.; Voisin-Chiret A.S. Discovery of a Novel Series of Inhibitors of Anti-Apoptotic Proteins for Treatment of Chemoresistant Ovarian Cancers. Joint 26th Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique (GP2A) / 32nd Journées Franco-Belges de Pharmacochimie (JFB) Conferences, 13-15 juin 2018, Asnelles sur Mer (France).

MT5 (nouveau projet pour le laboratoire)

Communications écrites :

9. Johanna Giovannini, Hassiba Saidoun, Meziane Yahia-Ouahmed, Jean-Philippe Métivier, Pauline Zipfel, Julien Lalut, Peggy Suzanne, Christophe Rochais, Patrick Dallemagne, Kevin Baranger, Michel Khrestchatsky, Santiago Rivera, Ronan Bureau and Alban Lepailleur. Molecular modeling-assisted MMP-24 inhibitor conception. Joint 26th GP2A / 32nd JFB Conferences – Asnelles sur Mer (France) – 13th-15th June 2018.
10. Julien Lalut, Johanna Giovannini, Peggy Suzanne, Alban Lepailleur, Ronan Bureau, Kevin Baranger, Santiago Rivera, Patrick Dallemagne, Jean-François Briere and Christophe Rochais. Fragment-based screening approach leading to the inhibition of matrix metalloproteinase MT5-MMP. Joint 26th GP2A / 32nd JFB Conferences – Asnelles sur Mer (France) – 13th-15th June 2018.
11. Pauline Zipfel, Julien Lalut, Johanna Giovannini, Hassiba Saidoun, Peggy Suzanne, Alban Lepailleur, Ronan Bureau, Kevin Baranger, Michel Khrestchatsky, Santiago Rivera, Christophe Rochais, Patrick Dallemagne. Conception and synthesis of novel MT5-MMP inhibitors for Alzheimer's disease. Joint 26th GP2A / 32nd JFB Conferences – Asnelles sur Mer (France) – 13th-15th June 2018.
12. Pauline Zipfel, Julien Lalut, Johanna Giovannini, Hassiba Saidoun, Peggy Suzanne, Alban Lepailleur, Ronan Bureau, Kevin Baranger, Michel Khrestchatsky, Santiago Rivera, Christophe Rochais. Selective inhibition of MT5-MMP: an innovative treatment strategy for Alzheimer's disease. Rencontre Internationale de Chimie Thérapeutique, Strasbourg, Juillet 2018.

Communications dans des congrès nationaux

- Denis, C.; Dubois, M.; Voisin-Chiret, A.S.; Bureau, R.; Choi, C.; Mousseau, J.J.; Bull, J.A. Exploring Chemical Space with 3,3-Diarylazetidone Derivatives Towards the Discovery of Anti-apoptotic Protein Inhibitors. 25th Young Research Fellow Meeting, 5-7 mars 2018, Orléans (France).
- Denis, C.; De Pascale, M.; Kieffer, C.; Jouanne, M.; Hedir, S.; Brotin, E.; Weiswald, L.B.; Denoyelle, C.; Poulain, L.; Bureau, R.; Voisin-Chiret A.S. Design, Synthesis and Biological Evaluation of Inhibitors of Anti-apoptotic Proteins. Normandy Doctoral School of Chemistry Day, 21 juin 2018, Le Havre (France).

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Camille Denis : Conception, synthèse et évaluation biologique d'inhibiteurs des protéines de la famille Bcl-2 à visée anticancéreuse. Application aux cancers de l'ovaire chimiorésistants. Thèse de l'université de Caen Normandie, spécialité Pharmacie, soutenue le 21 novembre 2018.

Thèses en cours sur le projet

- Mohammed Benabderrahmane, en cours de thèse (2017 -), Ecole Doctorale Normande de Chimie, encadrement 50% (Co-direction : Pr J. Sopkova).

35. 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 2018 : 974 385

Publications de rang A

1. A Theoretical Investigation of the Miscibility and Structural Properties of $\text{In}_x\text{Al}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ Alloys, Ranim Mohamad, Antoine Béré, Viwanou Hounkpati, Piero Gamarra, Jun Chen and Pierre Ruterana, *Physica Status Solidi (b)* Volume 255, Issue 5, 1700394 (2018).
2. Polarity Control within One Monolayer at ZnO/GaN Heterointerface: (0001) Plane Inversion Domain Boundary, Siqian Li, Huaping Lei, Yi Wang, Barkat Ullah, Jun Che, Vitaliy Avrutin, Ümit Özgür, Hadis Morkoç, and Pierre Ruterana, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 10 (43), pp 37651–37660 (2018).

Thèses soutenues en 2018 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.

Thèses en cours sur le projet

- Rofka RAMDANI, 2018-2021, Modélisation de la croissance des nitrures III de structure wurtzite pour composants hyperfréquence de puissance.

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.
- Imad Belabbas, Université de Bejaia, Algérie
- Joseph Kesioglu, Université de Thessalonique, Grèce
- Laurent Pizzagalli, Institut P', CNRS, Poitiers
- Sylvain Delage, III-V Lab Palaiseau

36. 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 - Orléans - UMR 7311 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2018 : 521 301

Communications dans des congrès internationaux

1. Aci-Sèche, S. ; Braka, A. ; Garnier, N. ; Bonnet, P. "In silico prediction of binding kinetics for protein-ligand complexes", 22nd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships (EuroQSAR 2018), sept. 2018 - Thessalonique (Grèce).
2. Braka, A.; Aci-Sèche, S. ; Bourg, S.; Plé, K.; Champiré, A.; Cosson, A.; Vallée, B.; Bénédicti, H.; Routier, S.; Garnier, N. ; Bonnet, P. "Impact and Prediction of Binding Kinetics on in Vivo Drug Efficacy"; Winner of the young medicinal chemist meeting in France, 5th EFMC Young Medicinal Chemist Symposium, sept 2018 – Ljubljana (Slovenie)
3. Braka, A. ; Aci-Sèche, S. ; Garnier, N. ; Bonnet, P. "Impact and prediction of binding kinetics on in vivo drug efficacy", 25th Young Research Fellow Meeting, mars 2018 - Orléans.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Braka A. « Prédiction de la cinétique des inhibiteurs de protéines kinases et de leur affinité par docking flexible » soutenue le 28 mars 2018, sous la direction du Pr Pascal Bonnet et sous la co-direction du Dr. Norbert Garnier.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Centre de Biophysique Moléculaire, UPR 4301, CNRS d'Orléans : Dr. Norbert Garnier.

37. 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 - Orléans - UMR 7311 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2018 : 552 170

Thèses en cours sur le projet

- Ziada S : Prédiction des constantes cinétiques de complexes protéine-ligand, sous la direction du Pr. Pascal Bonnet.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Institut de Recherche Servier – Pierre Ducrot.

38. 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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 14 182

Publications de rang A

1. S. Katnagallu, M. Dagan, S. Parviainen, A. Nematollahi, B. Grabowski, P. A J Bagot, N. Rolland, J. Neugebauer, D. Raabe, F. Vurpillot, M. P Moody and B. Gault ; Impact of local electrostatic field rearrangement on field ionization ; Journal of Physics D: Applied Physics 10 (51), 2018.
2. F. Vurpillot, S. Parviainen, F. Djurabekova, D. Zanuttini, B. Gervais ; Simulation tools for atom probe tomography: A path for diagnosis and treatment of image degradation ; Materials Characterization Volume 146, Pages 336-346, 2018.

Communications dans des congrès internationaux

1. Dr Stefan Parviainen, Dr Nicolas Rolland, Mr Shyam Katnagallu, Dr Michal Dagan, Dr Baptiste Gault, Prof François Vurpillot ; Molecular Dynamics Modeling of Surface and Subsurface processes under high electric fields" ; IMC2018 / Instrumentation and Techniques (IT14 – Advances in Atom Probe Tomography) Sydney, Australia, 09/11/18 [Conférence invitée]
2. B. KLAES ; Development of wide field of view 3D field ion microscopy ; European Atom Probe Workshop, Düsseldorf, Allemagne, 07/11/18.
3. B. KLAES ; 3D imaging of irradiation defects in tungsten at the atomic scale by Field Ion Microscopy, EUROFUSION IREMEV Meeting, Madrid, Espagne, 19/11/18
4. F. Vurpillot ; Modeling Atom Probe Tomography: A Path for Diagnosis and Treatment of Reconstruction Artifacts Symptoms ; Meeting 2018 TMS Annual Meeting & Exhibition, Symposium Atom Probe Tomography for Advanced Characterization of Metals, Minerals and Materials, TMS2018, Gaithersburg, Phoenix, Arizona, mars 2018 [Conférence invitée]
5. Stefan Parviainen, François Vurpillot ; Molecular Dynamics Modeling of Surface and Subsurface Processes in Metals Under the Influence of High Electric Fields ; APT&M2018, Gaithersburg, Washington DC, juin 2018.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de B. Klaes : Développement de la tomographie par microscopie ionique pour l'étude des défauts d'irradiation [septembre 2017 – octobre 2020].

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec S. Katnagaullu et B. Gault (Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Allemand, Dusseldorf) : Modélisation des artefacts d'imagerie en sonde atomique des ségrégations de solutés sur les défauts structuraux.

39. 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 2018 : 1 116 769

Communications dans des congrès internationaux

1. [congrès avec actes] - Benaouicha M., Guillou S.S., Santa Cruz A., Trigui H., Fluid-Structure Interaction Approach for Numerical, Investigation of a Flexible Hydrofoil Deformations in Turbulent Fluid Flow, 2018 Pressure Vessels & Piping, Prague, July 15-20, 2018, Pvp2018-84636
2. [congrès avec actes] - Brousseau P., Benaouicha M., Guillou S.S., Dynamics of a Free Heaving and Prescribed Pitching Hydrofoil in a Turbulent Flow, with a Fluid Structure Interaction Approach, 2018 Pressure Vessels & Piping, Prague, July 15-20, 2018, Pvp2018-84636
3. [congrès avec actes] - Bourgoïn A., Guillou S.S., Ata R., Thiébot J., Benhamadouche S., Development of a Large-Eddy Simulation approach for tidal currents modelling, 6th International Conference on Estuaries and Coasts, ICEC-2018, 20-23 August 2018, Caen, France, 8p (CDROM) (2018)
4. [congrès avec actes] - Bourgoïn A., Guillou S.S., Ata R., Thiébot J., Benhamadouche S., Tidal currents characterization with Large Eddy Simulation, 3th Asian Waves and Tides Energy Conference, 9-12 Sept. 2018, Taipei, Taiwan.
5. [congrès avec actes] - Khaled F., Guillou S.S., Hadri F., Méar Y., Numerical modelling of the effect of the hydro- kinetic turbines on the transport of sediments - Application to The Rhone site, 5ième Congrès International Francophone de Mécanique Avancée, Beyrouth, CIFMA, 31/10 au 2/11 2018.
6. Guillou S.S., Filipot JF, Duart R., Thiébot J., Germain G., Chaplain N., Ikheunnicheu M. , Duart R., Gaurier B., Bourgoïn A., Mercier P., Ata R., Laverne J., Benhamadouche S., Pieterse A., Maisondieu C., Poizot E., Poirier J.C., Auvray C., Droniou E., Arramounet A., Pinon G. Turbulence characterization at the Raz Blanchard tidal energy site. Towards a turbulence characterization in tidal energy sites. First results of THYMOTE project. 5ième Congrès International Francophone de Mécanique Avancée, Beyrouth, CIFMA, 31/10 au 2/11 2018.
7. Guillou S.S., Filipot JF, Duart R., Thiébot J., Germain G., Chaplain N., Ikheunnicheu M. , Gaurier B., Bourgoïn A., Mercier P., Ata R., Laverne J., Benhamadouche S., Pieterse A., Maisondieu C., Poizot E., Poirier J.C., Auvray C., Méar Y., Droniou E., Arramounet A., Pinon G.. Turbulence characterization at the Raz Blanchard tidal energy site. First results of the ANR-FEM project THYMOTE, 7th International Conference on Ocean Energy 2018, Cherbourg (France), 12-14 juin 2018.
8. Brousseau P., Benaouicha M., Guillou S., Hydrofoil dynamics in a turbulent flow, with a fluid structure interaction approach, 7th International Conference on Ocean Energy 2018, Cherbourg (France), 12-14 juin 2018.
9. Mercier Ph., Grondeau M., Guillou S., Thiébot J., Poizot E., Lattice Boltzmann Method for numerical simulation of turbulent flows at tidal stream power sites. 7th International Conference on Ocean Energy 2018, Cherbourg (France), 12-14 juin 2018.
10. Grondeau M., Philippe Ph., Guillou S., Poirier J.C., Poizot E., Mear Y., Modelling the wake of a tidal turbine model with the lattice Boltzmann method, 7th International Conference on Ocean Energy 2018, Cherbourg (France), 12-14 juin 2018.
11. Khaled F., Guillou S., Hadri F., Mear Y., Impact of Tidal Stream Turbines on the near sedimentary bed by using a Two-phase modelling CFD approach, 6th International Conference on Estuaries and Coasts, ICEC-2018, 20-23 August 2018, Caen, France, (2018)

12. Boutouchent M., Grandchamp E., Guillou S.S., Goossens X., Climate change as key factor in detailed assessment of potential sites for hydrokinetic developments in Maroni river, 6th International Conference on Estuaries and Coasts, ICEC-2018, 20-23 August 2018, Caen, France, (2018)
13. Michelet N., Guillou N., Chapalain G., Thiébot J., Guillou S.S., Goward Brown A., Neill S., 3-D modelling of turbine wake interactions at a tidal stream energy site, 6th International Conference on Estuaries and Coasts, ICEC-2018, 20-23 August 2018, Caen, France, (2018).

Communications dans des congrès nationaux

1. Khaled F., Guillou S.S., Hadri F., Méar Y., Impact of Tidal Stream Turbines on the near sedimentary bed by using an Euler Two-phase modelling CFD approach, 16ième Journées de l'Hydrodynamique, Marseille 27-29 nov. 2018. 10p
2. Brousseau P., Benaouicha M., Guillou S.S., Numerical investigation of a flexible hydrofoil dynamics, with a fluid-structure interaction approach, 16ième Journées de l'Hydrodynamique, Marseille 27-29 nov. 2018. 10p
3. Khouf L., Seghir A., Benaouicha M., Guillou S.S., Modélisation numérique du ballottement des liquides dans les réservoirs, 16ième Journées de l'Hydrodynamique, Marseille 27-29 nov. 2018. 10p

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Nicolas MICHELET. Modélisation de l'impact des hydroliennes sur les conditions hydrodynamiques et sédimentaires dans le passage du Fromveur. Financement : CEREMA. Directeurs : Jérôme Thiébot et Nicolas Guillou. Co-encadrants : S. Guillou et G. Chapalain. (Début : oct. 2015). Soutenue le 18 sept. 2018
- 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.

Thèses en cours sur le projet

- Philippe MERCIER. Modélisation de la turbulence engendrée par la bathymétrie dans le Raz Blanchard : Approche locale (LBM-LES). Financement: projet ANR ITE THYMOTE. Directeurs : Sylvain Guillou, Co-encadrants : Emmanuel Poizot, Jérôme Thiébot (démarrage le 1 mars 2016).
- Adrien BOURGOIN. Modélisation de la turbulence engendrée par la bathymétrie dans le Raz Blanchard : Approche régionale avec TELEMAC-LES. Financement: projet ANR ITE THYMOTE. Directeurs : Sylvain Guillou, Co-encadrants : Riadh Ata, Jérôme Thiébot (démarrage le 17 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
- Paul BROUSSEAU, 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). Laboratoire de rattachement : LUSAC
- Lydia KHOUF, Modélisation de l'interaction fluide-structure et du ballottement des liquides dans les réservoirs de stockage. Directeurs : Sylvain Guillou (Unicaen) et Seghir Abdelghani (Univ. A. Mira, Bejaia), M. Benaouicha
- Nasteho DJAMA DIRIEH, Modélisation des effets de sillages d'hydroliennes, PhD Université de Caen, démarré le 1 novembre 2018. Financement Région Normandie. Directeurs : J. Thiébot, Sylvain Guillou, Co-encadré par Nicolas Guillou.

40. 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 2018 : 1 202 042

Publications de rang A

1. R. Belkofsi, O. Adjaoud, I. Belabbas ; Pressure induced phase transitions and elastic properties of CaCO₃ polymorphs: a density functional theory study ; Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 26, 065004 (2018).
2. G. Chahi, D. Bradai and I. Belabbas ; Structural and elastic properties of hydrated CaCO₃ polymorphs: a density functional theory study ; Journal of Materials Chemistry and Physics (Soumise).

Communications dans des congrès internationaux

1. G. Chahi, I. Belabbas and D. Bradai ; Elastic properties of ikaite and their pressure dependence: a DFT corrected Van der Waals study ; International Conference on Materials Science (ICMS2018), Setif (Algeria), 12-14 September 2018.
2. R. Belkofsi, I. Belabbas ; Etude par DFT des transitions de phases dans le CaCO₃ ; International conference on nanomaterials and renewable energies (ICNRE2018), Skikda (Algeria) 15-17 October 2018.

Communications dans des congrès nationaux

1. R. Belkofsi, I. Belabbas ; Transitions de phases dans le CaCO₃ : Etude par DFT. Les 4èmes Journées des Doctorants (JDD18) Tizi Ouzou (Algérie) 25-26 mars 2018.
2. G. Chahi, I. Belabbas, D. Bradai ; Etude des propriétés élastiques directionnelles de l'ikaite sous pression hydrostatique ; 12ème Congrès National de la Physique et ses Applications (CNPA'2018), Alger (Algérie) 13-14 Novembre 2018.

Thèses en cours sur le projet

- Mlle Belkofsi Reguia : Simulation atomistique par DFT et DFPT de quelques minéraux d'intérêt pour la géologie et la bio-minéralisation. Doctorat LMD en Physique des Matériaux / université de Bejaia (Algérie). Sous la direction de Prof. I. Belabbas.
- Mr. Chahi Ghiles : Modélisation atomistique de quelques cristaux moléculaires. Doctorat en Physique des Matériaux / Université Houari Boumediène de technologie, Alger (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).

41. 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 2018 : 389 985

Publications de rang A

1. S. Giaremis, Ph. Komninou, I. Belabbas, J.Chen and J. Kioseoglou, "Structural and electronic properties of a-edge dislocations along $\langle 1-100 \rangle$ in GaN.", Journal of applied Physics (Accepted 2018).
2. First-principles calculations of threading screw dislocations in AlN and InN, Phys. Rev. Mater, L. Pizzagalli, I. Belabbas, J. Kioseoglou and J. Chen, Phys. Rev. Materials 2, 064607 (2018)
3. I. Belabbas, G. P. Dimitrakopoulos, J. Kioseoglou, J. Smalc-Koziorowska, J. Chen, M.J. Rayson, P.R. Briddon and M. I. Heggie, "First-principles investigation of Shockley partial dislocations in wurtzite GaN" (In preparation |2018).

Communications dans des congrès internationaux

1. I. Vasileiadis, J. Smalc-kozirowska, I. Belabbas, J. Kioseoglou, J. Chen, and G. P. Dimitrakopoulos, "Structural characterization of Shockley partial dislocations in GaN by aberration-corrected HRTEM", International conference on Extended Defects in Semiconductors (EDS2018). Thessaloniki, Greece, 24th -29th June, 2018.
2. S. Giaremis, Ph. Komninou, I. Belebbas, J. Chen, and J. Kioseoglou, "Computational investigation of a – type edge dislocations along the $[10-10]$ direction in GaN", International conference on Extended Defects in Semiconductors (EDS2018). Thessaloniki, Greece, 24th -29th June, 2018.

Thèses en cours sur le projet

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

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Equipe 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).

42. Projet : 2016019**Intitulé : WavyFilm**

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

Porteur : Nicolas GRENIER

Laboratoire : LIMSIS - Orsay - UPR 3251 (ORSAY)

Heures.CPU 2018 : 487 724

Communications dans des congrès internationaux

1. G. Lavalle, Y. Li, S. Mergui, N. Grenier, G. Dietze, On the stability of inclined liquid films with confined counter-current gas, 71st Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Atlanta, United States, 2018.
2. G. Lavalle, Y. Li, S. Mergui, N. Grenier, G. Dietze, Suppression of the Kapitza instability in falling liquid films by confining the gas phase, 12th European Fluid Mechanics Conference (EFMC 2018), Vienne, Austria, 2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet ANR wavayFILM en partenariat avec le laboratoire FAST (UMR CNRS/Université Paris-Sud, impliquant Georg Dietze et Sophie Mergui) et l'industriel Air Liquide (impliquant Guillaume Mouglin).

43. Projet : 2016020**Intitulé : Calculs de réseaux pour la biologie et l'écologie marine (RESEAUBIO)**

Famille Thématique : 3. Biologie et santé

Porteur : Nathalie NIQUIL

Laboratoire : BOREA - Caen - UMR 7208 (Caen)

Heures.CPU 2018 : 2308

Publications de rang A

1. Raoux A, Lassalle G, Pezy JP, Tecchio S, Safi G, Ernande B, Mazé C, Le Loc'h F, Lequesne J, Girardin V, Dauvin JC, Niquil N (2018). Measuring sensitivity of two OSPAR indicators for a coastal food web model under offshore wind farm construction. Ecological Indicators. in press

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Thèse Quentin Noguès, Université de Caen Normandie : Noguès (2018) Analyse de sensibilité du cumul de l'effet récif et de l'effet du changement climatique, sur différents indices ENA : le cas du parc éolien offshore de Courseulles-sur-Mer. Université de Bordeaux - Collège Science et Technologie Master 2 mention Sciences de la Mer Parcours Biologie et écologie marines. (45p).

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Master de Quentin Noguès, Université de Bordeaux.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Valérie David, Université de Bordeaux, UMR EPOC
- Valérie Girardin, Université de Caen Normandie, UMR LMNO
- Jean-Claude Dauvin, Université de Caen Normandie, UMR M2C

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Alain RAKOTOMAMONJY

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

Heures.CPU 2018 : 1 604

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Mostafa SAFDARI SHADLOO

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

Heures.CPU 2018 : 6 118 899

Publications de rang A

1. M. Hopp-Hirschler, M.S. Shadloo, U. Nieken, "A Smoothed Particle Hydrodynamics Approach for Thermo-Capillary Flows", [Computers & Fluids, 2018 \(176\) 1-19.](#)
2. M. Mendez-Gonzalez, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, A. Ducoin, "Boundary Layer Transition Over a Concave Plate Caused by Centrifugal Instabilities", [Computers & Fluids, 2018 \(171\) 135-153.](#)
3. S. Sharma, M.S. Shadloo, A. Hadjadj, "Effect of thermo-mechanical non-equilibrium on the onset of transition in supersonic boundary layers", [Heat and Mass Transfer, 2018, doi.org/10.1007/s0023](#)
4. S. Sharma, M.S. Shadloo, A. Hadjadj, "Laminar to Turbulent Transition in Supersonic Boundary Layer Flows: Implications of Wall Heat Transfer, Perturbation Intensity and Thermo-Mechanical non-Equilibrium Mean Flow Profiles", [Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 2018 \(73\) 583-603.](#)
5. M. S. Shadloo, A. Hadjadj, A. Chaudhuri, O. Ben-Nasr" Large-eddy simulation of a spatially-evolving supersonic turbulent boundary layer at $M_\infty=2$ ", [European Journal of Mechanics - B/Fluids, 2018, \(67\) 185-197.](#)
6. B. Lebon, M.Q. Nguyen, J. Peixinho*, M.S. Shadloo, A. Hadjadj, "A new mechanism for the periodic bursting of the recirculation region of the flow through a sudden expansion in a circular pipe", [Physics of Fluids, 30 \(2018\) 031701.](#)
7. R. Sadeghi, M.S. Shadloo, M. Hopp-Hirschler, A. Hadjadj, U. Nieken, "Three-dimensional lattice Boltzmann simulations of high density ratio two-phase flows in porous media", [Computers & Mathematics with Applications, 2018 \(75\) 2445-2465.](#)

Communications dans des congrès internationaux

1. D. V. Shenoy , M.Q. Nguyen, M. S. Shadloo, A. Hadjadj , J. Peixinho, O. K. Matar, Subcritical transition to turbulence in diverging pipe flows, 71st Annual Meeting of the American Physical Society's Division of Fluid Dynamics, Atlanta, Georgia, November 18-20, 2018, DFD18-001832.
2. M. Hopp-Hirschler , O. K. Matar, M. S. Shadloo, Smoothed Particle Hydrodynamics Method for Multi-physics Fluid Flows, 71st Annual Meeting of the American Physical Society's Division of Fluid Dynamics, Atlanta, Georgia, November 18-20, 2018, DFD18-0018329.
3. S. Sharma, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, Effect of thermo-mechanical non-equilibrium on the onset of transition in supersonic boundary layers, 12th European Fluid Mechanics Conference, 9-13 September 2018, Vienna, Austria.

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.
- Fatemeh ALMASI: Numerical simulation of two phase electrohydrodynamics.

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Fatemeh ALMASI : Numerical simulation of two phase electrohydrodynamics.
- Dhanoush VITTAL SHENOY : Fluid flow simulations inside diverging pipe flows.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- J. PIEXINHO, CR1 of CNRS, University of Le Havre.
- O. MATAR, Professor, Imperial College London.
- U. NIEKEN, Professor, University of Stuttgart.

46. 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-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 1 067

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

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

Porteur : Jorge César BRANDLE DE MOTTA

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

Heures.CPU 2018 : 254 419

Publications de rang A

1. R. Canu, S. Puggelli, M. Essadki, B. Duret, T. Ménard, M. Massot, J. Réveillon et F.X. Demoulin. "Where Does the Droplet Size Distribution Come From ?" International Journal of Multiphase Flow, 2018.
2. B. Duret, R. Canu, J. Reveillon et F.X. Demoulin. "A pressure based method for vaporizing compressible two-phase flows with interface capturing approach." International Journal of Multiphase Flow, 2018.

Communications dans des congrès internationaux

1. B. Duret, R. Canu, J. Réveillon et F.-X. Demoulin. "A weakly compressible DNS formalism for turbulent atomization applications." Conférence présentée à la conférence ICLASS 2018 (Chicago).
2. J.-B. Charpentier, J. C. Brändle de Motta et T. Ménard. "Simulation and analysis of the imbibition of a set of parallel fibers." Présentation au EFMC12 (Vienne).
3. V. Chéron, J. C. Brändle de Motta, T. Ménard et A. Berlemont. "Hybrid treatment of atomized droplets." Présentation au EFMC12 (Vienne).

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Victor Chéron.
- Thèse de Romain Canu.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Ionut DANAILA

Laboratoire : LMRS UMR 6085 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU 2018 : 32 501

Publications de rang A

1. Aina Rakotonrandisa, Ionut Danaila and Luminita Danaila, Numerical modelling of a melting-solidification cycle of a phase-change material with complete or partial melting, soumis à International Journal of Heat and Fluid Flow (phase de revision).

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Rakotonrandisa, I. Danaila, S. Le Masson, L. Danaila : Numerical simulations of melting-solidification problems with natural convection. Application to phase-change materials. 12th European Fluid Mechanics Conference, 9 September 2018 – 13 September 2018, Vienna, Austria.

Communications dans des congrès nationaux

1. A. Rakotonrandisa, I. Danaila, L. Danaila, Etude numérique d'un cycle complet fusion-solidification pour un matériau à changement de phase, 26ème Congrès Français de Thermique, 29 mai- 3 juin 2018, Pau.
2. A. Rakotonrandisa, I. Danaila, Modélisation et simulation de matériaux à changement de phase, 44ème Congrès d'Analyse Numérique, 28 mai- 1 juin 2018, Cap d'Agde.

Thèses en cours sur le projet

- Aina RAKOTONDRANDISA (soutenance prévue en 2019).

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Innocent MUTABAZI

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

Heures.CPU 2018 : 1 727 242

Publications de rang A

1. F. Zaussinger, P. Haun, M. Neben, T. Seelig, V. Travnikov, C. Egbers, I. Mutabazi & H. Yoshikawa, Dielectrically driven convection in spherical gap geometry, Phys. Rev. Fluids 3, 093501 (2018).
2. A. Meyer, O. Crumeyrolle, I. Mutabazi, M. Meier, M. Yongmanns, M-C. Renoult, T. Seelig & C. Egbers, Flow Patterns and Heat Transfer in a Cylindrical Annulus under 1g and low-g Conditions: Theory and Simulation, Microgravity Sci. Technology 30(5), 653-662(2018), <https://doi.org/10.1007/s12217-018-9636-3>

3. C. Kang, A. Meyer, H. N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Numerical study of thermal convection induced by centrifugal buoyancy in a rotating cylindrical annulus, preprint submitted to Phys. Rev. Fluids (2018).

Communications dans des congrès internationaux

1. M. Meier, A. Meyer, V. Ostmann, C. Egbers, O. Crumeyrolle & I. Mutabazi, Thermoelectric convection in rectangular cavities, 69th International Astronautics Conference, October 1-5, 2018, Bremen, Germany
2. F. Zaussinger, P. Haun, I. Mutabazi & C. Egbers, Dielectrically-driven thermal convection, 12th. European Fluid Mechanics Conference, September 10-13, 2018, Vienna Austria.
3. C. Kang & I. Mutabazi, Numerical simulation of thermoelectric convection in a finite cylindrical annulus of a dielectric liquid, 12th European Fluid Mechanics Conference, Vienna September 10-13, 2018.
4. C. Kang, A. Prigent & I. Mutabazi, Localized structures and solitary states in a vertical Taylor- Couette system with a radial temperature gradient, 12th European Fluid Mechanics Conference, Vienna September 10-13, 2018.
5. A. Meyer, H. Yoshikawa, I. Mutabazi & C. Egbers, Effect of the dielectrophoretic force in a rigidly rotating cylindrical annulus, 20th International Couette-Taylor Workshop (ICTW20), Marseille July 11-13, 2018.
6. C. Kang & I. Mutabazi, Numerical study of thermoelectric convection in a finite cylindrical annulus, 20th International Couette-Taylor Workshop (ICTW20), Marseille July 11-13, 2018.
7. I. Mutabazi, C. Kang & A. Prigent, Numerical investigation of the flow structures in a vertical Taylor-Couette system with a large radial temperature gradient, 20th International Couette-Taylor Workshop (ICTW20), Marseille July 11-13, 2018.
8. A. Prigent, C ; Savaro & I. Mutabazi, Experimental study of the flow produced in a vertical Taylor- Couette system submitted to a large radial temperature gradient, 20th International Couette-Taylor Workshop (ICTW20), Marseille July 11-13, 2018.
9. A. Talioua, A. Prigent & I. Mutabazi, Transition to coherent structures in turbulent Couette-Taylor flow, International Conference on Rayleigh-Bénard Turbulence, Enschede, May 14-18, 2018, The Netherlands.
10. I. Mutabazi, C. Kang, Changwoo, A. Meyer, M. Jongmanns, M. Meier, C. Egbers, Thermoelectric convection in dielectric liquids in a cylindrical annulus, International Conference on Rayleigh-Bénard Turbulence, Enschede, May 14-18, 2018, The Netherlands.
11. M. Jongmanns, A. Meyer, M. Meier, C. Egbers, C. Kang & I. Mutabazi, Experiment on thermoelectric convection in dielectric liquids in a cylindrical annulus under parabolic flight conditions, International Conference on Rayleigh-Bénard Turbulence, Enschede, May 14-18, 2018, The Netherlands.
12. C. Kang & I. Mutabazi, Numerical study of thermal convection in a cylindrical annulus with solid body rotation, International Conference on Rayleigh-Bénard Turbulence, Enschede, May 14-18, 2018, The Netherlands.

Thèses en cours sur le projet

- E.B. Barry, Etude de la convection thermique dans des liquides diélectriques contenus dans des cavités rectangulaires soumises à une tension électrique alternative (octobre 2018-septembre 2021).

Stages de Master en 2018 sur le projet

- E.B. Barry, Etude de la convection thermoélectrique entre deux plaques verticales soumises à un gradient horizontal de température et une tension électrique alternative.
- M. Soughir, Etude de la convection thermoélectrique entre deux plaques horizontales soumises à un gradient vertical de température et une tension électrique alternative.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- FR 3519 CNRS COMUE-Normandie Université IEPE (Institut Energies Propulsion Environment).
- LIA CNRS 1092 ISTROF: Laboratoire International Instabilities of Stratified and Rotating Flows (LOMC, IRPHE-Marseille, LAS-Cottbus-Allemagne).
- 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.
- Chercheurs : H.N.Yoshikawa, Laboratoire J.A. Dieudonné, UMR 7351, CNRS-Université de Nice-Côte d'Azur
A. Meyer & C. Egbers, Department of Aerodynamics and Fluid Mechanics (LAS), Brandenburg University of Technology, Cottbus (Germany).

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Julien REVEILLON

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

Heures.CPU 2018 : 6 467

51. Projet : 2017010**Intitulé : Modélisation mathématique et simulation numérique haute performance d'écoulements fluides complexes**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Francky LUDDENS

Laboratoire : LMRS UMR 6085 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU 2018 : 130

Publications de rang A

1. A. Papoutsakis, S. S. Sazhin, S. Begg, I. Danaila, F. Luddens
An efficient Adaptive Mesh Refinement (AMR) algorithm for the Discontinuous Galerkin method : applications for the computation of compressible two-phase flows, *Journal of Computational Physics*, 363, p. 399-427 (2018).
2. I. Danaila, F. Luddens, F. Kaplanski, S. S. Sazhin, Formation number of confined vortex rings, *Physical Review Fluids*, 3, p. 094701(1-22) (2018).

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Caroline PETITJEAN

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

Heures.CPU 2018 : 2 064

53. 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 2018 : 1 404

Publications de rang A

1. Kevin Chapuis, Patrick Taillandier, Benoit Gaudou, Alexis Drogoul, Éric Daudé. A Multi-modal Urban Traffic Agent-Based Framework to Study Individual Response to Catastrophic Events, T. Miller et al. PRIMA 2018: Principles and Practice of Multi-Agent Systems, pp. 440-448, 2018, [□ 10.1007/978-3-030-03098-8_28](https://doi.org/10.1007/978-3-030-03098-8_28)
2. Renaud Misslin, Yvette Vaguet, Alain Vaguet, Éric Daudé. Estimating air temperature using MODIS surface temperature images for assessing Aedes aegypti thermal niche in Bangkok, Thailand Environmental Monitoring and Assessment, Springer Verlag (Germany), 2018, 190 (9), [□ 10.1007/s10661-018-6875-0](https://doi.org/10.1007/s10661-018-6875-0)

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Refactoring de la plateforme de simulation Agent « GAMA » dans sa version Headless, en vue d'un meilleur couplage avec OpenMOLE.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- IRIT (Benoit Gaudou)
- IRD (Alexis Drogoul, Jean-Daniel Zucker, Nicolas Marilleau) INRA (Patrick Taillandier)
- LITIS (Pierrick Traounez)
- ISC-PIF (Romain Reuillon, Mathieu Leclaire)

54. 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 2018 : 400 153

Communications dans des congrès internationaux

1. [Congrès avec actes] A.-C. Bennis, P. Bailly du Bois, F. Dumas, C. Lathuillère, F. Adong, J.-F. Filipot. Towards a realistic modelling of wave-current-turbulence interactions in Alderney Race. Proceeding of OTO'18/ OCEANS'18 MTS/IEEE, Kobe, Japan, 28th-31st may 2018.
2. Ocean Science 2018, 11-16 February 2018, Portland, Etats-Unis.
3. ICOE 2018, 12-14 June 2018, Cherbourg, France.
4. AGU Fall meeting 2018, 10-14 December 2018, Washington, Etats-Unis.

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Stage de Marie Martinot : Modélisation du déferlement des vagues ; M1 Mécanique (UNICAEN), mai-juin 2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Consortium de l'ANR HYD2M

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Stéphane CANU

Laboratoire : LITIS (SAINT ETIENNE DU ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 62 314

Publications de rang A

1. Laloy, E., Hérault, R., Jacques, D., Linde, N. ; Training-Image Based Geostatistical Inversion Using a Spatial Generative Adversarial Neural Network, Water Resources Research, 54(1), 381-406, 2018
2. - Inversion using a new low-dimensional representation of complex binary
3. geological media based on a deep neural network,
4. E. Laloy, R. Hérault, J. Lee, D. Jacques, and N. Linde,
5. Advances in Water Resources, 2017,
6. BELHARBI, Soufiane, HÉRAULT, Romain, CHATELAIN, Clément, et al. Deep neural networks regularization for structured output prediction. Neurocomputing, 2018, vol. 281, p. 169-177.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Didier LEMOSSE

Laboratoire : LMR - EA 3828 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 28 384

57. 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 ETIENNE DU ROUVRAY)

Heures.CPU 2018 : 12 602

Publications de rang A

1. Pierre Morisse, Thierry Lecroq, Arnaud Lefebvre; Hybrid correction of highly noisy long reads using a variable-order de Bruijn graph, *Bioinformatics*, Volume 34, Issue 24, 15 December 2018, Pages 4213–4222, <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bty521>

Communications dans des congrès internationaux

1. Pierre Morisse, Thierry Lecroq and Arnaud Lefebvre. Hybrid correction of long reads using a variable-order de Bruijn graph. *Data Structures in Bioinformatics (DSB)*, Helsinki, Finland, May 2018.

Communications dans des congrès nationaux

1. Pierre Morisse, Thierry Lecroq and Arnaud Lefebvre. LoRSCo: Long Reads Self-Correction. *SeqBio 2018*, Rouen, France, November 2018.

Thèses en cours sur le projet

- Pierre Morisse, Correction de données de séquençage haut débit issues de nouvelles technologies de 3e génération.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Laboratoire CrISTAL, Lille (Antoine LIMASSET, Camille MARCHET)
- INRIA, Rennes (Pierre PETERLONGO)

58. Projet : 2017021**Intitulé : Simulations climatiques passées et futures sur les domaines Europe et Méditerranée dans le cadre du programme international CORDEX**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Julien PERGAUD

Laboratoire : Biogéosciences CRC - UMR 6282 (DIJON)

Heures.CPU 2018 : 214 751

59. Projet : 2017022**Intitulé : Étude sur la sélectivité et l'absorption des mélanges (H₂O et Phénol) dans les matériaux carbonés nano-structurés**

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

Porteur : Hamidréza RAMEZANI

Laboratoire : ICMN - Orleans - UMR 7374 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2018 : 384

Publications de rang A

1. Kouetcha, D. N.; Ramézani, H.; Mathieu-Cohaut, N. & Bhatia, S. K. ; Carbon dioxide adsorption through carbon adsorbent structures: Effect of the porosity size, chemical potential and temperature ; Computational Materials Science, 2018, 151, 255 - 272.

Communications dans des congrès internationaux

1. Ramézani, H.; Kouetcha, D. N. & Mathieu, N. ; Simulation moléculaire d'adsorption d'un mélange binaire "Phénol-H₂O" sur les carbonés lamellaires : rôle de potentiel chimique et charge sur la surface de carbone ; Matériaux 2018, 2018.
2. Z. El Oufir , H. Ramézani, N. Mathieu, S. Delpoux, Adsorption du Phénol dans des carbonés lamellaires : simulation Monte Carlo Grand Canonique, Colloque francophone du carbone, Samatan, Avril 2019, France, SFEC 2019, 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Adsorption en milieu aqueux dans les carbonés adsorbants : approche expérimentale et simulation numérique (2017-2020).

Stages de Master en 2018 sur le projet

- Kammeugne, R. K. : Simulation moléculaire sur la capacité d'adsorption de gaz CO₂ dans C-S-H, Université d'Orléans, CNRS, ICMN, UMR 7374, Université d'Orléans, 2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

60. Projet : 2017025**Intitulé : GREYC - Équipe Image**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Frederic JURIE

Laboratoire : GREYC - CAEN - UMR 6072 (CAEN)

Heures.CPU 2018 : 65 707

Publications de rang A

1. RPNNet : an End-to-End Network for Relative Camera Pose Estimation, Sovann En, Alexis Lechervy, Frédéric Jurie, 4th International Workshop on Recovering 6D Object Pose (ECCV Workshop), Munich, Germany, September 2018. (Rang: A)

Communications dans des congrès internationaux

1. TS-Net: Combining Modality Specific and Common Features for Multimodal Patch Matching, Sovann En, Alexis Lechervy, Frédéric Jurie, IEEE International Conference on Image Processing (ICIP), Athen, Greece, October 2018. (Rang: B)

61. Projet : 2018001**Intitulé : Etude de mécanismes d'activation électrophile du CO₂ et autres petites molécules**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2018 : 33 622

62. Projet : 2018002**Intitulé : Calcul multi-tâches pour l'analyse statistique de la morphologie des écoulements liquide/gaz**

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

Porteur : Fabien THIESSET

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

Heures.CPU 2018 : 163 999

63. Projet : 2018003**Intitulé : Caractérisation structurale et spectroscopique de molécules dans l'environnement et dans l'espace**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Alexander ALIJAH

Laboratoire : GSMA (REIMS)

Heures.CPU 2018 : 96 234

Publications de rang A

1. Najoua Derbel, Olfa Ferchichi, Alexander Alijah, « Tropospheric Reactions of Triazoles with Hydroxyl Radicals: Hydroxyl Addition is Faster than Hydrogen Abstraction », ChemPhysChem 19, 1789 – 1796 (2018).

Communications dans des congrès internationaux

1. Najoua Derbel, Olfa Ferchichi, Alexander Alijah, « Reactions of Triazoles with Hydroxyl Radicals: Hydroxyl Addition », 25th international conference on high-resolution molecular spectroscopy, 3 – 7 Sept. 2018, Bilbao, Spain.
2. Najoua Derbel, Olfa Ferchichi, Alexander Alijah, « Reactions of Triazoles with Hydroxyl Radicals: Hydroxyl Addition », COST Molim WG3 meeting, 2-5 Dec. 2018, Madrid, Spain.

Thèses en cours sur le projet

- Olfa FERCHICHI, « Étude des propriétés structurales et spectroscopiques de peroxydes aux niveaux DFT et ab-initio ». Thèse en cotutelle (Reims, Tunis).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Madame Najoua DERBEL, MCF-HDR à l'Université de Tunis el Manar, Tunisie.

64. Projet : 2018004**Intitulé : Simulation numérique du collages de bulles de gaz**

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

Porteur : Eric GONCALVES DA SILVA

Laboratoire : Institut Pprime (Futuroscope)

Heures.CPU 2018 : 237 993

Communications dans des congrès internationaux

1. E. Goncalves, P. Parnaudeau. "Three-dimensional simulation of a shock-induced bubble collapse". In Eccomas ECFD-7, 11-15 juin 2018, Glasgow, Ecosse, 2018.

Thèses en cours sur le projet

- Ksenia KOZHANOVA : Développement d'une méthode fluide-structure pour l'étude du collapse de bulle près d'une paroi. Thèse démarrée en décembre 2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Thèse financée par l'ANR

65. Projet : 2018005**Intitulé : Analyse d'images biomédicales préclinique et clinique. Mise en place des outils pour le calcul parallèle sur la grappe de calcul du CRIANN**

Famille Thématique : 3. Biologie et santé

Porteur : Nicolas DELCROIX

Laboratoire : CYCERON (CAEN)

Heures.CPU 2018 : 841

66. Projet : 2018006**Intitulé : AtERiCS Apprentissage Statistique à l'Echelle pour la Représentation et la Classification non-supervisées**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Faicel CHAMROUKHI

Laboratoire : LMNO - UMR 6139 (CAEN)

Heures.CPU 2018 : 1 127

67. Projet : 2018007**Intitulé : Modélisation ab-initio de l'adsorption et de la réactivité des hydrocarbures dans les zéolithes**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Arnaud TRAVERT

Laboratoire : LCS-ISMRA (CAEN)

Heures.CPU 2018 : 259 532

68. Projet : 2018008**Intitulé : Dynamique Moléculaire Appliquée à la Biologie**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Marco CECCHINI

Laboratoire : Institut Le Bel (STRASBOURG)

Heures.CPU 2018 : 142 037

69. Projet : 2018009**Intitulé : Mise au point de nouveaux descripteurs de réactivité chimique**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2018 : 213 045

Publications de rang A

1. H. Guyon, H. Chachignon, V. Tognetti, L. Joubert, D. Cahard, Mechanistic Insights into the Decarboxylative Electrophilic Trifluoromethylthiolation of β -Ketocarboxylic Acids, Eur. J. Org. Chem. 2018, 3756-3763
2. G. Hoffmann, V. Tognetti, L. Joubert, Can molecular and atomic descriptors predict the electrophilicity of Michael acceptors ? J. Mol. Model. 2018, 24, 281.

Communications dans des congrès internationaux

1. V. Tognetti ; Energy decompositions for bonding and chemical reactivity ; 44ème International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL-2018), Santiago, Chili (08-12/10/2018).

Thèses en cours sur le projet

- Thèse d'Andrea Bonvicini (2016-2019).

70. Projet : 2018011**Intitulé : Modélisation de la diffusion de carbone dans les aciers martensitiques**

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

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

Heures.CPU 2018 : 24 450

Thèses en cours sur le projet

- Hadi Zadeh Haghighi

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- F. Danoix (GPM)
- A.G. Khachatryan (Rutgers University, USA)

71. Projet : 2018012**Intitulé : Design in silicon d'analogues fluorescents du cholestérol**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent TOGNETTI

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2018 : 306 608

Publications de rang A

1. A. Bonvicini, L. Guilhaudis, V. Tognetti, D. Desmaële, N. Sauvonnet, H. Oulyadi, L. Joubert, Revisiting absorption and electronic circular dichroism spectra of cholesterol in solution: a joint experimental and theoretical study, Phys. Chem. Chem. Phys. 2018, 20, 5274-5284.

Communications dans des congrès nationaux

1. In silico design of FLACs (FLuorescents Analogues of Cholesterol) », A. Bonvicini, V. Tognetti, L. Joubert, poster pour les Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Toulouse, 8-12/10/2018.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse d'Andrea Bonvicini (2016-2019).

72. Projet : 2018013**Intitulé : Analyse d'exomes dans le cadre de la recherche sur la maladie d'Alzheimer du patient jeune-
extension de la cohorte**

Famille Thématique : 3. Biologie et santé

Porteur : Olivier QUENEZ

Laboratoire : INSERM (ROUEN)

Heures.CPU 2018 : 166

73. Projet : 2018015**Intitulé : Modélisation Mathématique : Applications et Simulations Numériques pour les énergies renouvelables, l'éco-mobilité, l'imagerie et la physique (M2NUM)**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Redouane KHEMMAR

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

Heures.CPU 2018 : 53

74. Projet : 2018019**Intitulé : Prédiction des spectres de dichroïsme circulaire des motifs coudes dans les peptides**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Isabelle SEGALAS-MILAZZO

Laboratoire : COBRA (MONT-SAINT-AIGNAN)

Publications de rang A

1. M. Migliore, L. Guilhaudis, B. Lefranc, J. Leprince, H. Oulyadi & I. Ségalas-Milazzo. New insights in the structural characterization of turns in peptides: determination of NMR discriminatory parameters. 16th Naples Workshop on Bioactive Peptides – 7-9 juin 2018 – Naples (Italie) – communication orale

Thèses en cours sur le projet

- Thèse Mattia MIGLIORE (déc. 2016 – déc. 2019). Financement de la thèse : Région Normandie (réseau CRUNCH).
- Thèse Andrea BONVICINI (oct. 2016 – oct. 2019). Financement de la thèse : Labex SYNOrg.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Dr. Marc Baaden – Institut de Biologie Physico-Chimique (IBPC) - Paris.

75. Projet : 2018020**Intitulé : Simulation thermique d'un four de boulangerie antique**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Pascal BOUBERT

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

Heures.CPU 2018 : 29 161

Stages de Master en 2018 sur le projet

- A. Zarifah – Numerical Thermal Study of an Antique Bread Oven – Mémoire du Master Energie – Parcours Génie des systèmes industriels – Maîtrise de l'énergie – Août 2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- GrHis – Nicolas Monteix (Université de Rouen).

76. Projet : 2018021**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 2018 : 680

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Ilan-Robin : Etude de l'impact du biofouling sur la turbulence hydrolienne et la production électrique ». Encadrée par AC. Bennis et JC. Dauvin. (2018-2021)

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. Bienvenu Atawa, Nicolas Couvrat, Gérard Coquerel, Eric Dargent, Allisson Saiter ; Chirality impact on physical ageing: an original case of a small organic molecule ; *Materials Letters*, Elsevier, 2018, 228, pp. 141-144.
2. Xavier Monnier, Quentin Viel, Benjamin Schammé, Samuel Petit, Laurent Delbreilh, Valérie Dupray, Gérard Coquerel, Eric Dargent ; Vittrification of two active pharmaceutical ingredients by fast scanning calorimetry: From structural relaxation to nucleation phenomena ; *International Journal of Pharmaceutics*, Elsevier, 2018, 536 (1), pp.426 - 433.
3. H. Smets, G. Baaklini, A. Tijink, L. Sweers, H. Vossen, C. Brandel, H. Meekes, H. Cuppen, G. Coquerel ; Inhibition of the Vapor-Mediated Phase Transition of the High Temperature Form of Pyrazinamide ; *Crystal Growth and Design*, American Chemical Society, 2018, 18 (2), pp.1109 - 1116.
4. Benjamin Schammé, Nicolas Couvrat, Vincent Tognetti, Laurent Delbreilh, Valérie Dupray, Eric Dargent, Gérard Coquerel ; Investigation of Drug-Excipient Interactions in Biotinylated Amorphous Solid Dispersions ; *Molecular Pharmaceutics*, American Chemical Society, 2018, 15 (3), pp.1112-1125.
5. Bienvenu Atawa, Nicolas Couvrat, Gérard Coquerel, Eric Dargent, Allisson Saiter ; Impact of chirality on the Glass Forming Ability and the crystallization from the amorphous state of 5-ethyl-5-methylhydantoin, a chiral poor glass former ; *International Journal of Pharmaceutics*, Elsevier, 2018, 540 (1-2), pp.11 - 21.
6. Nicolas Couvrat, Julien Mahieux, Morgane Sanselme, Gérard Coquerel ; Limitations during the Resolution of (\pm)-Epinephrine by Using Tartaric Acid ; *Chemical Engineering and Technology*, Wiley-VCH Verlag, 2018, 41 (6), pp.1086 - 1092.
7. Nicolas Couvrat, Morgane Sanselme, Johann Cartigny, Frederic de Smet, Sandrine Rome, Luc Aerts, Luc Quéré, Johan Wouters, Gérard Coquerel ; A Possible Infinite Number of Components in a Single Crystalline Phase: On the Isomorphism of Brivaracetam-Guest Molecules ; *Crystal Growth and Design*, American Chemical Society, 2018, 18 (9), pp.4807 - 4810.

Communications dans des congrès internationaux

1. Aliou Mbodji, Gabin Gbabode, Valerie Dupray, Gérard Coquerel ; Propensity for amine family to form conglomerates with Chloxyphos and their resolution by preferential crystallization ; 25th BIWIC, Sep 2018, Rouen, France.
2. Lina Harfouche, Clément Brandel, Y. Cartigny, Gérard Coquerel, Samuel Petit ; Implementation of Preferential Crystallization in unfavorable cases: Detection of metastable conglomerate ; 25th BIWIC, Sep 2018, Rouen, France.
3. Lina Harfouche, Clément Brandel, Y. Cartigny, Gérard Coquerel, Samuel Petit ; Polymorphism & Enantiomeric Resolution of Stable Racemic Systems ; CORE workshop, Sep 2018, Rouen, France.
4. Gérard Coquerel, R. Oketani, François-Xavier Gendron, R. Kuroda ; Complex behaviors in a system composed of two couples of atropisomers: heterogeneous equilibria, crystallography and deracemization ; 13th International Workshop of the Crystal Growth of Organic Material, Aug 2018, Seoul, South Korea.

5. Ryusei Oketani, Clément Brandel, Pascal Cardinaël, Gérard Coquerel ; The role of racemization kinetics on deracemization rate of naphthamide compound using temperature cycling ; 13th International Workshop of the Crystal Growth of Organic Material, Aug 2018, Seoul, South Korea.
6. Gérard Coquerel, Ryusei Oketani, François-Xavier Gendron, M. Schindler, Clevers Simon et al. ; Crystallization and macroscopic symmetry breakings ; Symposium on Molecular Chirality 2018, Jun 2018, Chiba, Japan.
7. Ryusei Oketani, Gérard Coquerel, Clément Brandel, Pascal Cardinaël ; Deracemization of atropisomeric naphthamide through temperature cycles ; Symposium on Molecular Chirality 2018, Jun 2018, Chiba, Japan.
8. Lina Harfouche, Clément Brandel, Yohann Cartigny, Gérard Coquerel, Samuel Petit ; Resolving of stable racemic systems by means of preferential crystallization ; CORE summer school, Apr 2018, Manchester, United Kingdom.

Communications dans des congrès nationaux

1. François-Xavier Gendron, Ryusei Oketani, Gérard Coquerel ; Phase equilibria between atropisomers: Chirality Induced by Dissymmetric Distribution ; Journées André Collet de la Chiralité, Sep 2018, Noirmoutier, France.

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. Saiter.
- Manon Schindler (2018-2020) : Discrimination chirale par voie de cristallisation. Directeur G. Coquerel.
- Lina Harfouche (2017-2019) : Alternative methods for chiral resolution via crystallization route. Directeur S. Petit.

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. Alix F, Gembus V, Coquet L, Hubert-Roux M, Chan P, Truong L, Sebban M, Coadou G, Oulyadi H, Papamicaël C and Levacher V, "Dihydroquinoline carbamate DQS1-02 as a prodrug of a potent acetylcholinesterase inhibitor for Alzheimer's disease therapy: multi-gram scale synthesis, mechanism investigations, in vitro safety pharmacology, and preliminary in vivo toxicology profile", American Chemical Society Omega, 2018 Nov
2. Bontemps-Gallo S, Gaviard C, Richards CL, Kentache T, Raffel SJ, Lawrence KA, Schindler JC, Lovelace J, Dulebohn DP, Cluss RG, Hardouin J, Gherardini FC, "Global Profiling of Lysine Acetylation in *Borrelia burgdorferi* B31 Reveals Its Role in Central Metabolism", Front Microbiol, 2018 Août
3. Cabin-Flaman A, Delaune A, Poutrain P, Gangwe Nana YG, Jourdain B, Gibouin D, Paris JP, Trestour S, Seigneuret JM, Léopoldès de Vendômois A, Cosette P, Etienne JJ, Ripoll C, "Effect of zein additive on perfume evaporation", Int J Cosmet Sci, 2018 Dec

4. Cardon F, Pallisse R., Bardor M., Caron A., Vanier J., Ele Ekouna J.P., Lerouge P., Boitel-Conti M. and Guillet M, "Brassica rapa hairy root based expression system leads to the production of highly homogenous and reproducible profiles of recombinant human alpha-L-iduronidase", *Plant Biotechnol J*, 2018
5. Corbière A, Walet-Balieu ML, Chan P, Basille-Dugay M, Hardouin J, Vaudry D, "A Peptidomic Approach to Characterize Peptides Involved in Cerebellar Cortex Development Leads to the Identification of the Neurotrophic Effects of Nociceptin", *Mol Cell Proteomics*, 2018 Sep
6. Flécharde M, Duchesne R, Tahrioui A, Bouffartigues E, Depayras S, Hardouin J, Lagy C, Maillot O, Tortuel D, Azuama CO, Clamens T, Duclairioir-Poc C, Catel-Ferreira M, Gicquel G, Feuilloley MGJ, Lesouhaitier O, Heipieper HJ, Groleau MC, Déziel É, Cornelis P, Chevalier S, "The absence of SigX results in impaired carbon metabolism and membrane fluidity in *Pseudomonas aeruginosa*", *Sci Rep*, 2018 Nov 21
7. Gaviard C, Broutin I, Cosette P, Dé E, Jouenne T, Hardouin J, "Lysine Succinylation and Acetylation in *Pseudomonas aeruginosa*", *J Proteome Res.*, 2018 Jul 6
8. Gaviard C, Jouenne T and Hardouin J, "Proteomics of *Pseudomonas aeruginosa*: the increasing role of post-translational modification", *Exp. Rev Proteomics*, 2018
9. Gharbi D, Karkouch I, Ben Slimene I, Coquet L, Azaiez S, Tabbene O, Cosette P, Jouenne T and Limam F, "Purification and characterization of a novel high molecular weight alkaline protease produced by an endophytic *Bacillus halotolerans* strain CT2", *Int. J. Biol. Macromol.*, 2018
10. Goichon A, Bahlouli W, Ghouzali I, Chan P, Vaudry D, Déchelotte P, Ducrotté P, Coëffier M, "Colonic Proteome Signature in Immunoproteasome-Deficient Stressed Mice and Its Relevance for Irritable Bowel Syndrome", *J Proteome Res.* 2018 Nov 26
11. Haydar A, Tran S-L, Guillemet C, Darigo C, Perchat S, Lereclus D, Coquet L, Jouenne T and Ramaro N, « InhA1-mediated cleavage of the metalloprotease NprA allows *Bacillus cereus* to escape from macrophages", *Frontiers Microbiol*
12. James M, Poret M, Masclaux-Daubresse C, Marmagne A, Coquet L, Jouenne T, Chan P, Trouverie J and Etienne P, « SAG12, a major cysteine protease involved in nitrogen mobilization during senescence for seed production in *Arabidopsis thaliana*", *Plant Cell Physiol*
13. Lequerré T, Rottenberg P, Derambure C, Cosette P, Vittecoq O, "Predictors of treatment response in rheumatoid arthritis", *Joint Bone Spine*, 2018 Jul 4
14. Mechkarskaa M, Coquet L, Leprince J, Jouenne T and Conlon JM, "Peptidomic analysis of the host-defense peptides in skin secretions of the Trinidadian leaf frog *Phyllomedusa trinitatis* (Phyllomedusidae)", *Comp. Biochem. Physiol.*, 2018, part D, Genomics, Proteomics
15. Nobis S, Morin A, Achamrah N, Belmonte L, Legrand R, Chan P, do Rego JL, Vaudry D, Gourcerol G, Déchelotte P, Goichon A, Coëffier M. "Delayed gastric emptying and altered antrum protein metabolism during activity-based anorexia", *Neurogastroenterol Motil.* 2018 Jul
16. Nobis S, Achamrah N, Goichon A, L'Huillier C, Morin A, Guérin C, Chan P, do Rego JL, do Rego JC, Vaudry D, Déchelotte P, Belmonte L, Coëffier M. "Colonic Mucosal Proteome Signature Reveals Reduced Energy Metabolism and Protein Synthesis but Activated Autophagy during Anorexia-Induced Malnutrition in Mice", *Proteomics*, 2018 Aug
17. Nobis S, Goichon A, Achamrah N, Guérin C, Azhar S, Chan P, Morin A, Bôle-Feysot C, do Rego JC, Vaudry D, Déchelotte P, Belmonte L, Coëffier M, "Alterations of proteome, mitochondrial dynamic and autophagy in the hypothalamus during activity-based anorexia", *Sci Rep.* 2018 May 8
18. Péden R, Rocher B, Chan P, Vaudry D, Poret A, Olivier S, Le Foll F, Bultelle F, "Highly polluted life history and acute heat stress, a hazardous mix for blue mussels", *Mar Pollut Bull.* 2018 Oct
19. Soussi S, Essyd R, Hardouin J, Gharbi D, Elkahoui S, Tabenne O, Cosette P, Jouenne T and Limam F, « Utilization of grape seed flour for antimicrobial lipopeptide 5 production by *Bacillus amyloliquefaciens* C5 strain", *Appl. Biochem. Biotechnol.*, 2018,
20. Touchard A, Téné N, Chan P, Lefranc B, Leprince J, Treilhou M, Bonnafé E, "Deciphering the Molecular Diversity of an Ant Venom Peptidome through a Venomics", *Approach. J Proteome Res.* 2018 Oct 5
21. Young CNJ, Chira N, Róg J, Al-Khalidi R, Benard M, Galas L, Chan P, Vaudry D, Zablocki K, Górecki DC. "Sustained activation of P2X7 induces MMP-2-evoked cleavage and functional purinoceptor inhibition", *J Mol Cell Biol.* 2018 Jun 1

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

Voir projets 2005004 et 2016005

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

Responsable : OULYADI Hassan

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

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

Publications de Hélène Lavanant, Laurent Joubert et Vincent Tognetti : voir projets n° 2013005, 2018009, 2018012

Publications de rang A

1. Alix, F.; Gembus, V.; Coquet, L.; Hubert-Roux, M.; Chan, P.; Truong, L.; Sebban, M.; Coadou, G.; Oulyadi, H.; Papamicaël, C.; Levacher, V. Dihydroquinoline Carbamate DQS1-02 as a Prodrug of a Potent Acetylcholinesterase Inhibitor for Alzheimer's Disease Therapy: Multigram-Scale Synthesis, Mechanism Investigations, In Vitro Safety Pharmacology, and Preliminary in Vivo Toxicology Profile. ACS Omega 2018, 3, 18387–18397
2. Rational design of carbamate-based dual binding site and central AChE inhibitors by a "biooxidisable" prodrug approach: synthesis, in vitro evaluation and docking studies. Tintas, M-L; Gembus, V.; Alix, F.; Barré, A.; Coadou, G.; Truong, L.; Sebban, M.; Papamicaël, C.; Oulyadi, H.; Levacher, V. Eur. J. Med. Chem. 2018, 155, 171-182

Communications dans des congrès internationaux

1. M. Migliore, L. Guilhaudis, B. Lefranc, J. Leprince, H. Oulyadi & I. Ségalas-Milazzo. New insights in the structural characterization of turns in peptides: determination of NMR discriminatory parameters. 16th Naples Workshop on Bioactive Peptides – 7-9 juin 2018 – Naples (Italie) – communication orale
2. R. Najjar, L. Guilhaudis, M. Burnacci, H. Oulyadi, H. Castel, I. Milazzo. Comparative structural analyses of urotensinergic peptides by CD spectroscopy, solution NMR and Molecular Modelling. Euromar 2018 – 1-5 juillet 2018 – Nantes – communication par affiche.

Communications dans des congrès nationaux

1. Hassan OULYADI: Lithium compounds: Probing aggregation, solvation and dynamic by combining NMR and DFT calculations. 1th Main Group Metal Chemistry Symposium, Rennes, 20 avril 2018.

Thèses soutenues en 2018 sur le projet

- Riham NAJJAR : Étude structurale par RMN et modélisation moléculaire de peptides urotensinergiques, impliqués dans la régulation du système cardiovasculaire et la prolifération des cellules tumorales. Thèse [2014-2018] soutenue le 4 avril 2018. Financée par une allocation MESR puis un poste ATER 2017-2018.

- Asma BOURAFAI : Étude de l'interaction entre la protéine Mcl-1, impliquée dans l'apoptose, et de potentiels inhibiteurs : Application au traitement des cancers de l'ovaire. Thèse [2015-2018] soutenue le 7 décembre 2018. Financée par une allocation de la Région Normandie (réseau CRUNCH).

Thèses en cours sur le projet

- Mattia MIGLIORE (déc. 2016 – déc. 2019). Financée par une allocation de la Région Normandie (réseau CRUNCH).

Stages de Master en 2018 sur le projet

- M2 Thomas Guilmatre (Janv. 2018 – Juin 2018).
- M2 Matthieu Demare (Janv. 2018 – Juin 2018).