



Normandie Université

Pôle Régional de Modélisation Numérique

Références des Publications
des laboratoires utilisateurs pour l'année 2019

Référence du document : RA-PUBLIS-2019 - Révision 01 - Date de création : 20/07/2020

Validation : MSC

Documents référencés : N/A

Résumé : Liste des Publications des laboratoires utilisateurs du PRMN (service de calcul intensif) pour l'année 2019.

Révisions :

- 01 : première version publiée

Accessibilité

ComUE Normandie Université : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

A.	INTRODUCTION	7
B.	PROJETS SCIENTIFIQUES EXPERTISÉS	8
1.	Projet : 1998007 Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	8
2.	Projet : 1998022 Intitulé : Écoulements turbulents compressibles	8
3.	Projet : 1998053 Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	9
4.	Projet : 2002003 Intitulé : Simulation numérique de l'interaction entre la lumière et un objet de forme complexe	10
5.	Projet : 2003008 Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	11
6.	Projet : 2003013 Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières	11
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.	13
8.	Projet : 2005004 Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	13
9.	Projet : 2005010 Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.	16
10.	Projet : 2005013 Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	16
11.	Projet : 2006003 Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.	17
12.	Projet : 2006011 Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	19
13.	Projet : 2007001 Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	20
14.	Projet : 2007013 Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	20
15.	Projet : 2008018 Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie	20
16.	Projet : 2010006	21

	Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
17.	Projet : 2012006	21
	Intitulé : Simulation haute-fidélité de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
18.	Projet : 2012008	23
	Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
19.	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.	
20.	Projet : 2014007	25
	Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V	
21.	Projet : 2015001	26
	Intitulé : Simulation numérique avancée de condensats de Bose-Einstein. Simulation de la turbulence quantique.	
22.	Projet : 2015004	27
	Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.	
23.	Projet : 2015005	27
	Intitulé : Cylindre partiellement immergé soumis a la houle et au courant	
24.	Projet : 2015007	28
	Intitulé : Structure de dynamique dans les solutions aqueuses	
25.	Projet : 2016003	29
	Intitulé : Geometrical and Statistical Properties of Turbulent Flows with Varying Viscosity	
26.	Projet : 2016005	29
	Intitulé : COACH-IPP	
27.	Projet : 2016008	29
	Intitulé : Étude des oscillations hydroclimatiques en Europe	
28.	Projet : 2016009	30
	Intitulé : Modélisation structurales et électronique de l'interface InAlN/GaN pour l'application aux transistors de haute mobilité électronique	
29.	Projet : 2016014	30
	Intitulé : Caractérisation hydrodynamique (écoulement et turbulence) des sites hydroliens et étude des effets de sillage des turbines par simulations numériques	
30.	Projet : 2016016	32
	Intitulé : Adsorption de polluant en milieu aqueux : approche numérique et expérimentale	
31.	Projet : 2016017	33
	Intitulé : Simulation atomistique de quelques minéraux d'intérêt pour la géologie et la bio-minéralisation	
32.	Projet : 2016018	33
	Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des dislocations dans les matériaux III-N	
33.	Projet : 2016019	33

	Intitulé : WavyFilm	
34.	Projet : 2016020	33
	Intitulé : Calculs de réseaux pour la biologie et l'écologie marine (RESEAU BIO)	
35.	Projet : 2016022	34
	Intitulé : Apprentissage statistique pour la compréhension de scènes audio LEAUDS : Learning to understand audio scenes	
36.	Projet : 2017002	34
	Intitulé : Numerical Simulations of flow over Savonius-style wind turbines blades	
37.	Projet : 2017004	35
	Intitulé : Simulation directe des écoulements diphasiques	
38.	Projet : 2017006	36
	Intitulé : Modélisation de la convection naturelle dans un anneau cylindre en rotation	
39.	Projet : 2017008	37
	Intitulé : Développement d'un canal à houle numérique	
40.	Projet : 2017010	37
	Intitulé : Modélisation mathématique et simulation numérique haute performance d'écoulements fluides complexes	
41.	Projet : 2017011	38
	Intitulé : Multi Atlas Segmentation for Medical Images (MASMI)	
42.	Projet : 2017016	39
	Intitulé : Exploration de simulation multi-agents pour le laboratoire de géographie UMR IDEES	
43.	Projet : 2017017	40
	Intitulé : HYD2M (Hydrodynamique du Raz Blanchard : Mesures et Modélisations)	
44.	Projet : 2017018	40
	Intitulé : Deep in Normandy	
45.	Projet : 2017020	40
	Intitulé : Correction de données de séquençage haut débit issues de nouvelles technologies de 3ème génération	
46.	Projet : 2017021	41
	Intitulé : Simulations climatiques passées et futures sur les domaines Europe et Méditerranée dans le cadre du programme international CORDEX	
47.	Projet : 2017022	41
	Intitulé : Étude sur la sélectivité et l'absorption des mélanges (H ₂ O et Phénol) dans les matériaux carbonés nano-structurés	
48.	Projet : 2017025	42
	Intitulé : GREYC - Équipe Image	
49.	Projet : 2018001	42
	Intitulé : Etude de mécanismes d'activation électrophone du CO ₂ et autres petites molécules	
50.	Projet : 2018002	42
	Intitulé : Calcul multi-tâches pour l'analyse statistique de la morphologie des écoulements liquide/gaz	

51.	Projet : 2018003	43
	Intitulé : Caractérisation structurale et spectroscopique de molécules dans l'environnement et dans l'espace	
52.	Projet : 2018004	44
	Intitulé : Simulation numérique du collage de bulles de gaz	
53.	Projet : 2018005	45
	Intitulé : Analyse d'images biomédicales préclinique et clinique. Mise en place des outils pour le calcul parallèle sur la grappe de calcul du CRIANN	
54.	Projet : 2018006	45
	Intitulé : RIN Asterics / ANR Smiles - Apprentissage Statistique à l'Echelle pour la Représentation et la Classification non-supervisées	
55.	Projet : 2018008	46
	Intitulé : Dynamique Moléculaire Appliquée à la Biologie	
56.	Projet : 2018009	46
	Intitulé : Mise au point de nouveaux descripteurs de réactivité chimique	
57.	Projet : 2018011	46
	Intitulé : Modélisation de la diffusion de carbone dans les aciers martensitiques	
58.	Projet : 2018012	47
	Intitulé : Design in silicon d'analogues fluorescents du cholestérol	
59.	Projet : 2018015	47
	Intitulé : Modélisation Mathématique : Applications et Simulations Numériques pour les énergies renouvelables, l'éco-mobilité, l'imagerie et la physique (M2NUM)	
60.	Projet : 2018019	47
	Intitulé : Prédiction des spectres de dichroïsme circulaire des motifs coudes dans les peptides	
61.	Projet : 2018020	47
	Intitulé : Simulation thermique d'un four de boulangerie antique	
62.	Projet : 2018021	47
	Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes	
63.	Projet : 2019003	48
	Intitulé : Étude ab-initio du mécanisme de détection de molécules gazeuses en surface des nanotubes de carbone : application capteur de gaz	
64.	Projet : 2019004	48
	Intitulé : Composés organolithiens : développement d'un protocole théorique pour la prédiction du couplage scalaire homonucléaire lithium	
65.	Projet : 2019007	48
	Intitulé : Détermination de la structure de fibrille d'amyloïde par mesure résistive dans des nanopores coniques fonctionnalisés	
66.	Projet : 2019008	49
	Intitulé : Modélisation numérique tridimensionnelle de la rétro diffusion d'un système radar HF pour la caractérisation de la surface océanique en domaine côtier : application au radar HF du Raz Blanchard	
67.	Projet : 2019009	49

	Intitulé : LOCADYN (Localisation et sécurisation dynamique des flux de personnes, d'objets et d'informations sur les sites industriels)	
68.	Projet : 2019010	50
	Intitulé : Caractérisation et modélisation des émissions rayonnées des systèmes de charge sans contact pour l'étude des couplages avec l'environnement du véhicule électrique	
69.	Projet : 2019011	50
	Intitulé : Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques	
70.	Projet : 2019012	50
	Intitulé : Modélisation du trafic routier et son environnement par un graphe spatio-temporel, extraction de patterns temporels	
71.	Projet : 2019013	50
	Intitulé : Analyses génomiques et métagénomiques microbiennes	
72.	Projet : 2019016	50
	Intitulé : Approche théorique de la dégradation thermo-oxydante des réseaux polymères époxy	
73.	Projet : 2019017	51
	Intitulé : Study of the reaction mechanism of the Cu-mediated trifluoromethylation reaction of acrylamide by C-H bond activation	
74.	Projet : 2019018	51
	Intitulé : Highly-efficient red-emitting phosphors based on non-rare earth multicomponent oxides	
75.	Projet : 2019019	51
	Intitulé : Décomposition par attributs des inégalités de revenu : le genre et la race impactent les inégalités aux Etats-Unis	
76.	Projet : 2019902	51
	Intitulé : ExModelo	
C.	RÉSEAU NORMAND POUR LA MODÉLISATION MOLÉCULAIRE	52
1.	RNMM : SMS EA 3233	52
	Intitulé : Sciences et méthodes séparatives	
2.	RNMM : Plateforme PISSARO	52
	Intitulé : Analyse protéomique	
3.	RNMM : CERMN	53
	Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
4.	RNMM : UMR 6014 COBRA	54
	Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du rapport d'activités du CRIANN pour l'année 2019. 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 - FR 3335 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2019 : 509 024

2. Projet : 1998022

Intitulé : Écoulements turbulents compressibles

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

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

Heures.CPU 2019 : 2 612 185

Publications de rang A

1. Soni, V., Chaudhuri, A., Brahmi, N., Hadjadj, A. Turbulent structures of shock-wave diffraction over 90degree sign convex corner. *Physics of Fluids*, 31, 086103 (2019).
2. Sharma, S., Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Kloker, M. Control of oblique-type breakdown in a supersonic boundary layer employing streaks. *Journal of Fluid Mechanics*, 873, 1072-1089 (2019).
3. Sharma, S., Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Turbulent Flow Topology in Supersonic Boundary Layer with Wall Heat Transfer. *International Journal of Heat & Fluid Flow*, 76, 187-196 (2019).
4. Atyabi, S.A., Afshari, E., Wongwises, S., Yan, W.-M., Hadjadj, A., Shadloo, M.S. Effects of assembly pressure on PEM fuel cell performance by taking into accounts electrical and thermal contact resistances. *Energy*, 179(15), 490-501 (2019).
5. Gai, G., Kudriakov, S., Rogg, B., Hadjadj, A., Studer, E., Thomine, O. Numerical study on laminar flame velocity of hydrogen-air combustion under water spray effects. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(31), 17015-17029 (2019).
6. Piquet, A., Zebiri, B., Hadjadj, A., Shadloo, M.S. A parallel high-order compressible flows solver with domain decomposition method in generalized curvilinear coordinates system. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* (2019).
7. Shenoy, D., Shadloo, M.S., Peixinho, J., Hadjadj, A. Direct numerical simulations of laminar and transitional flows in diverging pipes. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* (2019).
8. Nguyen, M., Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Lebon, B., Peixinho, J. Perturbation threshold and hysteresis associated with the transition to turbulence in sudden expansion pipe flow. *International Journal of Heat & Fluid Flow*, 76, 187-196 (2019).
9. Gai, G., Kudriakov, S., Hadjadj, A., Studer, E., Thomine, O. Modeling pressure loads during a premixed hydrogen combustion in the presence of water spray. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(10), 4592-4607 (2019).
10. Sow, A., Chinnayya, A., Hadjadj, A. On the viscous boundary layer of weakly unstable detonations in narrow channels. *Computers & Fluids*, 179, 449-458 (2019).

11. Mouronval, A-S., Tie, B., Hadjadj, A., Moebs, G. Investigation of shock/elastic obstacles interactions by means of a coupling technique. *Journal of Fluids & Structures*, 84, 345-367 (2019).
12. Soni, V., Hadjadj, A., Roussel, O., Moebs, G. Parallel multi-core and multi-processor methods on point-value multiresolution algorithms for hyperbolic conservation laws. *Journal of Parallel & Distributed Computing*, 123, 192-203, (2019).
13. Soni, V., Hadjadj, A., Roussel, O. On the use of adaptive multiresolution method with time-varying tolerance for compressible fluid flows. *Shock Waves*, 29(1), 37-50 (2019).
14. 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*, 55(7), 1849–1861 (2019).

Communications dans des congrès internationaux

1. Zebiri, B., Piquet, A., Hadjadj, A. Numerical study of side loads in over-expanded conical nozzle. 8th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS), Madrid, Spain, 1-4 July 2019.
2. Brahmi, N., Hadjadj, A. High-resolution numerical simulations of shock-diffraction induced vorticity generation in cylindrical cavities. 32nd International Symposium on Shock Waves (ISSW32), Singapore, 14-19 July 2019.
3. Zebiri, B., Piquet, A., Hadjadj, A. Shock-induced flow separation in an over-expanded supersonic planar nozzle. 32nd International Symposium on Shock Waves (ISSW32), Singapore, 14-19 July 2019.
4. Hadjadj, A. Progress in Computational Energy and thermal Sciences. 5th International Conference on Energy, Materials and Applied Energetics (ICEMAEP'2019), Constantine, Algeria, 22-24 October 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Sushank SHARMA. Laminar-to-turbulent transition in supersonic boundary layer: Different scenarios and possible control. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenue le 17 octobre 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Margio MENDEZ. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue avril 2020.
- Nassim BRAHMI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue en sept. 2020.
- Boubakr ZEBIRI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue en sept. 2020.
- Gaigong GAI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue en octobre 2020.
- Fatemeh ALMASI. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2021.
- Serge MEYNET. Thèse de Doctorat de l'INSA de Rouen, soutenance prévue fin 2022.

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 : Laboratoire de Chimie Théorique UMR 7616 CNRS (PARIS)

Heures.CPU 2019 : 1 354 712

Publications de rang A

1. Spectrometric and computational studies of the binding of HIV-1 integrase inhibitors to viral DNA extremities. L. El Khoury, K. El Hage, J.-P. Piquemal, S. Fermandjian, R. G. Maroun, N. Gresh, Z. Hobaika, PeerJ PhysChem., 2019, DOI 10.7717/peerj-pchem.6
2. Calibration of the dianionic phosphate group. Validation on the recognition site of the homodimeric enzyme phosphoglucose isomerase. M. Devillers, J.-P. Piquemal, L. Salmon, N. Gresh. J. Comput. Chem. 2019 (soumis).
3. Quantum-Chemistry based design of halobenzene derivatives with augmented affinities for the HIV-1 viral G4/C16 base-pair. P. El Darazi, L. El Khoury, K. El Hage, R. G. Maroun, Z. Hobaika, J.-P. Piquemal, N. Gresh. Frontiers in Chemistry 2019 (soumis). <https://arxiv.org/abs/1911.11100>.
4. Molecular Dynamics using the SIBFA polarizable force field: first application to condensed phase simulations. Article en préparation.

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 2019 : 128 420

Publications de rang A

1. Yon, J., 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, 37 (1), 1151-1159, (2019).
2. Liu, F., J. Yon, A. Fuentes, P. Lobo, G. J. Smallwood and J. C. Corbin. "Review of recent literature on the light absorption properties of black carbon: Refractive index, mass absorption cross section, and absorption function." Aerosol Science and Technology, (just-accepted), 1-27, (2019).
3. Q. Duan, X. Han, S. Idlahcen, K. F Ren, "Three-dimensional light scattering by a real liquid jet: VCRM simulation and experimental validation", JQRST 239 (2019) 106677

Communications dans des congrès internationaux

1. Yon, J. (2019). Impact of Internal Multiple Scattering on the RDG prediction of the light scattering by Fractal Aggregates. Light- scattering by soot particles. Toulouse, France.
2. Liu, F., J. Yon, A. Fuentes, J. Corbin, C, P. Lobo and G. Smallwood, J (2019). A CRITERION FOR EVALUATION OF THE VALIDITY OF BLACK CARBON REFRACTIVE INDEX FROM MEASUREMENTS OF LIGHT ABSORPTION IN THE VISIBLE AND NEAR-INFRARED. Proceedings of the 9th International Symposium on Radiative Transfer, RAD - 19. Athens, Greece.
3. Morán, J., J. Yon, A. Poux, F. Liu and A. Fuentes (2019). Improving Monte Carlo simulations for an accurate modeling of nanoparticles coagulation. EAC 2019. Gothenburg, Sweden.
4. Q. Duan, K. F. Ren, X. Han, "Scattering of a laser beam by a real liquid jet", 11th ISMTMF, ZHengjiang, China, 3-7 Nov. 2019
5. Q. Duana, X. Han, K. F. Ren, "Extension of vectorial complex ray model to 3D light scattering by large non-spherical particles", ELS XVIII, Zhejiang University, Hangzhou, China, 10-14 June 2019

Communications dans des congrès nationaux

1. Lefevre, G., M. Bouvier and J. Yon (2019). IMPACT OF THE ADDITION OF AN ORGANIC LAYER ON THE RADIATIVE PROPERTIES OF SOOT. CFA Congrès Français sur les aérosols. Paris, France.
2. Morán, J., J. Yon, A. Poux, F. Liu and A. Fuentes (2019). Improving Monte Carlo simulations for an accurate modeling of soot aggregation. GDR Suie. Marseille, France.
3. Yon, J., J. Morán, F.-X. Ouf and J. Mitchell, Brian Alexander (2019). Un modèle d'autocorrélation de paire pour une meilleure description morphologique des agrégats fractals individuels. GDR Suie. Marseille, France.

Thèses en cours sur le projet

- José Moran Cofre (début décembre 2018)
- Clément Argentin (début octobre 2019)
- Ruiping YANG (fin décembre 2019)
- Ce ZHANG (début Septembre 2019)

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. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Alain BERLEMONT

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

Heures.CPU 2019 : 2 840 571

6. **Projet : 2003013**

Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

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

Heures.CPU 2019 : 556 117

Publications de rang A

1. B. Gaurier, C. Carlier, G. Germain, G. Pinon, and E. Rivoalen. Three tidal turbines in interaction : an experimental study of turbulence intensity effects on wakes and turbine performances. Accepted for publication in *Renewable Energy*, –(–) :—, 2020.
2. M. Togneri, G. Pinon, C. Carlier, C. Choma Bex, and I. Masters. Comparison of synthetic turbulence approaches for blade element momentum theory prediction of tidal turbine performance and loads. *Renewable Energy*, 145 :408 – 418, 2020.
3. F. Dabonneville, N. Hecht, J. Reveillon, G. Pinon, and F-X. Demoulin. A zonal grid method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, 180 :22 – 40, 2019.
4. B. Gaurier, G. Germain, and G. Pinon. How to correctly measure turbulent upstream flow for marine current turbine performances evaluation ? In *Advances in Renewable Energies Offshore : Proceedings of the 3rd International Conference on Renewable Energies Offshore (RENEW 2018)*, October 8-10, 2018, Lisbon, Portugal. 1st Edition. Carlos Guedes Soares (Ed.). ISBN 978-1-138-58535-5. Modelling tidal currents. pp.23-30 (Taylor & Francis Group), 2019.

Communications dans des congrès internationaux

1. Grégory Pinon, Charifa El Hadi, Myriam Slama, Jose Nuno, Pablo Mansilla, Erwann Nicolas, Julie Marcille, Jean-Valery Facq, Ines Belarbi, Benoît Gaurier, Grégory Germain, André Pacheco, and Michael Togneri. Influence of turbulence and wave flow conditions on different scaled tidal turbines. In D. Vicinanza, editor, *Proceedings of the Thirteenth European Wave and Tidal Energy Conference*, pages 1 – 8, Università degli Studi della Campania “Luigi Vanvitelli”, Italy, Sep 1–Sep 6 2019. EWTEC. ISSN : 2309-1983.
2. Martin Trasch, Anais Chambon, Astrid Deporte, Jean-Baptiste Drevet, Grégory Germain, Didier Lemosse, and Grégory Pinon. Numerical modelling of an undulating membrane tidal energy converter. In D. Vicinanza, editor, *Proceedings of the Thirteenth European Wave and Tidal Energy Conference*, pages 1 – 8, Università degli Studi della Campania “Luigi Vanvitelli”, Italy, Sep 1–Sep 6 2019. EWTEC. ISSN : 2309-1983.
3. Michael Togneri, Elaine Buck, Alasdair MacLeod, Erwann Nicolas, André Pacheco Grégory Pinon José Nuño, Michael O’Connor, and Ian Masters. Multi-model analysis of tidal turbine reliability. In D. Vicinanza, editor, *Proceedings of the Thirteenth European Wave and Tidal Energy Conference*, pages 1 – 8, Università degli Studi della Campania “Luigi Vanvitelli”, Italy, Sep 1–Sep 6 2019. EWTEC. ISSN : 2309-1983.
4. Camille Choma Bex, Clément Carlier, Benoist Gaston, Grégory Pinon, Grégory Germain, and Elie Rivoalen. A stochastic method to account for the ambient turbulence in lagrangian vortex computations. In D. Vicinanza, editor, *Proceedings of the Thirteenth European Wave and Tidal Energy Conference*, pages 1 – 8, Università degli Studi della Campania “Luigi Vanvitelli”, Italy, Sep 1–Sep 6 2019. EWTEC. ISSN : 2309-1983.
5. Maria Ikhennicheu, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Philippe Druault, Grégory Pinon, and Jean-Valery Facq. Experimental study of the wall-mounted cylinder wake effects on a tidal turbine behaviour compared to free stream turbulence. In D. Vicinanza, editor, *Proceedings of the Thirteenth European Wave and Tidal Energy Conference*, pages 1 – 8, Università degli Studi della Campania “Luigi Vanvitelli”, Italy, Sep 1–Sep 6 2019. EWTEC. ISSN : 2309-1983.
6. M. Batlle Martin, N. Hecht, G. Pinon, J. Reveillon, O. Kimmoun, Numerical simulation of a solitary breaking wave using OpenFOAM VIII International Conference on Computational Methods in Marine Engineering, 13 – 15 May 2019, Gothenburg, Sweden.

Communications dans des congrès nationaux

1. M. Batlle Martin, N. Hecht, G. Pinon, J. Reveillon, O. Kimmoun, Numerical simulation of breaking wave impact on a vertical wall In IV French/Belgian conference of OpenFOAM users, 13 – 14 June 2019, Marseille, France

2. M. Batlle Martin, J.J. Souaga, N. Hecht, G. Pinon, J. Reveillon, O. Kimmoun, F.X. Demoulin, Simulation numérique d'un soliton defleurant avec OpenFoam 16^{èmes} Journées de l'Hydrodynamique – 27 – 29 November 2018 – Marseille, France

Thèses en cours sur le projet

- Interreg 5AA (Atlantic Area) MONITOR
- Interreg 5FCE (France Manche Angleterre) TIGER
- CPER FEDER - NEPTUNE
- RIN SEMARIN
- RIN DIADEMAR

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaborations IFREMER
- Collaboration IFPEN

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 : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2019 : 46 974

Publications de rang A

1. D. Reyes Loya; A. Jean; M. Cormier; C. Fressigné; S. Nejrrotti; J. Blanchet; J. Maddaluno, M. de Paolis Chem.Eur.J.2018,24,2080 –2084 (DOI:10.1002/chem.201705645).
2. A. Arfaoui; F. Saâdi; A. Bourafai Aziez; H. Chebbi; C. Fressigné; J. Legros; H. Oulyadi, J. Maddaluno; H. Amri Synthetic Communications Volume 48, 2018, Issue 6 (doi.org/10.1080/00397911.2017.1420801).

8. **Projet : 2005004**

Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Jana SOPKOVA de Oliveira Santos

Laboratoire : CERMN - UNICAEN (CAEN)

Heures.CPU 2019 : 305 711

Publications de rang A

1. Gozzi G. J., Gonzalez D., Boudesco C., M. M. Dias A. M. M., Gotthard G., Uyanik B., Dondaine L., Marcion G., Hermetet F., Denis C., Hardy L., Suzanne P., Douhard R., Jeco G., Dubrez L., Demidov O. N., Neiers F., Briand L., Sopková-de Oliveira Santos J., Voisin-Chiret A.-S. and Garrido C. Selecting the first chemical

molecule inhibitor of HSP110 for colorectal cancer therapy. *Cell Death Differ.* 2019, May 8, doi:10.1038/s41418-019-0343-4.

2. Riva C., Suzanne P., Charpentier G., Dulin F., Halm-Lemeille M.-P. and Sopkova-de Oliveira Santos J. In silico chemical library screening and experimental validation of novel compounds with potential varroacide activities. *Pest. Biochem. Physiol.* 2019, 160, 11–19. <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2019.05.012>
3. Toublet F.-X., Lecoutey C., Lalut J., Hatat B., Davis A., Since M., Corvaisier S., Freret T., Sopkova-de Oliveira Santos J., Claeysen S., Boulouard M., Dallemagne P. and Rochais C. Inhibiting Acetylcholinesterase to Activate Pleiotropic Prodrugs with Therapeutic Interest in Alzheimer's Disease. *Molecules* 2019, 24(15), 2786; doi.org/10.3390/molecules24152786
4. Bourafai-Azies A., Sebban M., Benabderrahmane M., Marekha B., Denis C., Paysant H., Weiswald L. B., Carlier L., Bureau R., Coadou G., Ravault D., Voisin-Chiret A. S., Sopková-de Oliveira Santos J. and Oulyadi H. Binding mode of Pyridoclast to Myeloid cell leukemia-1 (Mcl-1) revealed by Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, Docking and Molecular Dynamics Approaches. *J. Mol. Dyn. Struct.*, 2019, 29:1-17. doi: 10.1080/07391102.2019.1680434..
5. Denis C., Sopková-de Oliveira Santos J., Bureau R. and Voisin-Chiret A.S. Hot-Spots of Mcl-1 Protein. *J. Med. Chem.*, 2019, accepted.

Communications dans des congrès internationaux

1. Benabderrahmane, M., Voisin-Chiret, A.S, Bureau, R., Sopkova-de Oliveira Santos. J. Mcl-1 structural dynamics: new insights from Metadynamics Simulations and Pocket Crosstalk Analysis CECAM (EPFL- USI) Lugano Summer School June 10-21 2019 Trieste, Italia.
2. Yahia-Ouahmed M., Giret M., Antraygues K., Jouanne M., Kieffer C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Inhibiting XIAP, design of new non-peptidic foldamers of SMAC. 27th Annual GP2A Medicinal Chemistry Conference, 21st-23rd August 2019, Nottingham, United Kingdom.

Communications dans des congrès nationaux

1. Giovannini J., Sopkova-de Oliveira Santos J., Catto M. and Voisin-Chiret A. S. Design, synthesis and characterization of protein-protein interactions disruptors related to early amyloidogenic phenomena in Alzheimer's disease. 26ème Journées des Jeunes Chercheurs, 20-22 février, Paris, France.
2. Fogha J., Hedir S., De Giorgi M., Gautier F., Juin P., Poulain L., Voisin-Chiret A. S., Sopková-de Oliveira Santos J. Structure-guided design of Mcl-1 inhibitors, application to the ovarian cancers treatment. 21e congrès du GGMM, 3 - 5 avril 2019, Nice, France.
3. Giovannini J., Sopkova-de Oliveira Santos J., Catto M. and Voisin-Chiret A. S. 3D models of Tau aggregates related to Alzheimer's disease, 21e congrès du GGMM, 3 - 5 avril 2019, Nice, France.
4. Antraygues, K, Giret, M., Kieffer, C., Weiswald, L.-B., Sopkova-de Oliveira Santos, J., Poulain L., Voisin-Chiret, A.S. Conception, synthèse et évaluation d'inhibiteurs de XIAP pour rétablir l'apoptose. 12èmes journées scientifiques du Cancéropôle Nord Ouest, 15- 17 mai 2019, Deauville.
5. Benabderrahmane, M., Voisin-Chiret, A.S, Bureau, R., Sopkova-de Oliveira Santos. J. Navigating the conformational landscape of Mcl-1. Journée de l'Ecole Doctorale Normande de Chimie, 5 juillet 2019, Caen, France.
6. Giret, M., Antraygues, K., Yahia-Ouahmed, M., Jouanne, M. Kieffer, C., Sopkova-de Oliveira Santos, J., Inhibiting XIAP, design of new non-peptidic foldamers of SMAC. Journée Normande de Recherche Biomédicale, 19 Novembre 2019, Caen, France.
7. Benabderrahmane, M., Voisin-Chiret, A.S, Bureau, R., Sopkova-de Oliveira Santos.J. Mcl-1 structural dynamics from protein ensembles, enhanced sampling and pocket crosstalk analysis. Journée Normande de Recherche Biomédicale, 19 Novembre 2019, Caen, France.
8. Giovannini J., Jouanne M., Locurcio M., Sopkova-de Oliveira Santos J., Catto M. and Voisin-Chiret A. S. Design, synthesis and characterization of potential Tau aggregation disruptors, Journée Normande de Recherche Biomédicale, 19 Novembre 2019, Caen, France.

9. Benabderrahmane, M., Voisin-Chiret, A.S, Bureau, R., Sopkova-de Oliveira Santos, J. Mcl-1 structural dynamics from protein ensembles, enhanced sampling and pocket crosstalk analysis. 9e journées de la SFCi, 21-22 nov. 2019 Paris, France.
10. Giret, M., Antraygues, K., Yahia-Ouahmed, M., Jouanne, M. Kieffer, C., Sopkova-de Oliveira Santos, J. Design of new non-peptide foldamers of SMAC. 9e journées de la SFCi, 21-22 nov. 2019 Paris, France.
11. Giovannini J., Sopkova-de Oliveira Santos J., Catto M. and Voisin-Chiret A. S. In silico Tau aggregates as tool for design and synthesis of aggregation disruptors related to Alzheimer's disease, 9e journées de la SFCi, 21-22 nov. 2019 Paris, France.
12. Benabderrahmane M. Etude de relation structure-activité des ligands de Mcl-1 : application au traitement des cancers de l'ovaire. Socadoc -CERMN meeting, 21 septembre 2019, Caen, France.
13. Denis C., De Pascale M., Marekha B., Jouanne M., Kieffer C., Brotin E., Weiswald L.-B., Poulain L., Denoyelle C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Voisin-Chiret A.S., Bureau R. Structure-Based Drug Design of Dual Mcl-1/Bcl-xL Inhibitors, 21e congrès du GGMM, 3 - 5 avril 2019, Nice, France.

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 (Directrice J. Sopkova).

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Martin GIRET : Criblage de molécules potentiellement inhibitrices de XIAP pour la découverte de nouveaux agents antiprolifératifs. M2 Drug Design, Université de Caen Normandie, 2019. (Encadrant : J. Sopkova, C. Kieffer).
- Kévin ANTRAYGUES : Synthèse et évaluation d'antagonistes de XIAP vers de nouveaux traitements du cancer de l'ovaire chimiorésistant. M2 Drug Design, Université de Caen Normandie, 2019. (Encadrant : C. Kieffer).

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)
 - INSERM UMR866 'Lipids, Nutrition, Cancer - LNC', Université de Bourgogne (Dr. C. Garrido)
- Projet GPCR, Polypharmacologie
- Projet LECMA
 - CERMN (Prof P. Dallemagne, Prof C. Rochais)
 - IGF, CNRS Université Montpellier, (Dr S. Claeyssen)
 - Unité INSERM U413, Rouen (Dr D. Vaudry, Dr J. Leprince)

9. Projet : 2005010**Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : ICMR - Reims - UMR 7312 (REIMS)

Heures.CPU 2019 : 418 528

Publications de rang A

1. Johanna Klein, Hassan Khartabil, Jean-Charles Boisson, Julia Contreras-Garcia, Jean-Philip Piquemal, and Eric Hénon, A New Way for Probing Bond Strength, *J. Phys. Chem. A*, submitted.
2. Miguel Ponce-Vargas, Corentin Lefebvre, a Jean-Charles Boisson, Eric Hénon*, An Atomic Decomposition Scheme of Noncovalent Interactions Applied to Host-Guest Assemblies, *J. Chem. Inf. Model*, submitted.

Communications dans des congrès nationaux

1. M. Ponce-Vargas, The Independent Gradient Model: A Novel Approach for Probing Strong and Weak interactions, *Rencontres des Chimistes Théoriciens du Grand Est*, 21/11/2019, Strasbourg, France.
2. E. Hénon, Présentation Générale des thématiques de Chimie Théorique sur le site de Reims. *Rencontres des Chimistes Théoriciens du Grand Est*, 21/11/2019, Strasbourg, France.

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Johanna Klein, M2, Université de Reims Champagne-Ardenne, 2019 : Développement et étude théorique d'un descripteur de liaison chimique par le nouveau modèle IGM (Independent Gradient Model).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

10. Projet : 2005013**Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Isabelle CHATAIGNER

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2019 : 62 420

Publications de rang A

1. Birbaum, L.; Gillard, L.; Gérard, H.; Oulyadi, H.; Vincent, G.; Moreau, X.; De Paolis, M.; Chataigner, Dearomatization of 3-Nitroindoles with Highly g-Functionalized Allenates in Formal (3+2) Cycloadditions ; *J. Chem. Eur. J.* 2019, 25, 13688–13693. DOI:10.1002/chem.201903455
2. Pasturaud, K.; Rkein, B.; Sanselme, M.; Sebban, M.; Lakhdar, S.; Durandetti, M.; Legros, J.; Chataigner, I. ; Facile dearomatization of nitroaromatic compounds using lithium enolates of unsaturated ketones in conjugate additions and (4+2) formal cycloadditions ; *Chem. Commun.* 2019, 55, 7494 -7497. DOI: 10.1039/C9CC02924A
3. Marques, A.-S. ; Duhail, T. ; Marrot, J. ; Chataigner, I. ; Coeffard, V. ; Vincent, G. ; Moreau, X. *Angew ; Fused Hexacyclic Ring System Through Interrupted iso-Nazarov Initiated Diastereoselective Domino Polycyclization of 2,4-Dienals ; Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 9969–9973. DOI : 10.1002/anie.201903860

Communications dans des congrès internationaux

1. I. Chataigner ; «Dearomatization of Electron-poor Aromatics Under High Pressure»; 30/09/19: LabFact event, Southampton (UK).

Communications dans des congrès nationaux

1. I. Chataigner ; "Dearomatizations of Electron-poor Aromatics" 29/08/19: GECO 60, Obernai (France).

Thèses en cours sur le projet

- Léo Birbaum (2019-2021) "Désaromatization de dérivés nitroaromatiques par annélations (3+2)"

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- LIT UMR CNRS 7200, Strasbourg - Mihaela Gulea
- URCOM, EA 3221, Le Havre - Ata Martin Lawson
- ILV, UMR CNRS 8180, Université de Versailles-St-Quentin-en- Yvelines - Xavier Moreau
- LCT, UMR CNRS 7616, UPMC - Hélène Gérard

11. **Projet : 2006003**

Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.

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

Porteur : Pascale DOMINGO

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

Heures.CPU 2019 : 3 178 044

Publications de rang A

1. N. Tonicello, G. Lodato, L. Vervisch (2020) Entropy preserving low dissipative shock capturing with wave-characteristic based sensor for high-order methods, *Comput. Fluids.* 197:104357
2. A. Seltz, P. Domingo, L. Vervisch, Z. M. Nikolaou (2019) Direct mapping from LES resolved scales to filtered-flame generated manifolds using convolutional neural networks, *Combust. Flame.* 210: 71-82.
3. K. Bioche, A. Pieyre, G. Ribert, F. Richecoeur, L. Vervisch (2019) The role of gravity in the asymmetry of flames in narrow combustion chambers, *Combust. Flame.* 203: 238-246.
4. G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch (2019) Analysis of sub-grid scale modeling of the ideal-gas equation of state in hydrogen-oxygen premixed flames, *Proc. Combust. Inst.* 37(3): 3255-3262.

5. U. Guven, G. Ribert (2019) Impact of non-ideal transport modeling on supercritical flow simulation, Proc. Combust. Inst. (37,3): 3255 - 3262.
6. B. Duboc, G. Ribert, P. Domingo (2019) Evaluation of chemistry models on methane/air edge flame simulation, Proc. Combust. Inst. (37,2): 1691 - 1698.
7. B. Duboc, G. Ribert, P. Domingo (2019) Hybrid transported-tabulated chemistry for partially premixed combustion, Computers Fluids (179): 206 - 227.
8. G. Lodato. (2019) Characteristic modal shock detection for discontinuous finite element methods, Computers & Fluids, 179, 309–333.
9. 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, 200: 219-231.

Communications dans des congrès internationaux

1. P. Domingo, G. Ribert, J. Ruan (2019) High fidelity simulations of supersonic combustion. 16th ICFD, (Sendai, Miyagi, Japan).
2. Seltz, P. Domingo, L. Vervisch (2019) Large Eddy Simulation of premixed turbulent combustion using a neural network, International Conference on Numerical Combustion (NC19), Aix-La-Chapelle, Allemagne.
3. K. Bioche, G. Ribert, L. Vervisch, The role of gravity in the asymmetry of flames in narrow combustion chambers. International Conference on Numerical Combustion (NC19), Aix-La-Chapelle, Allemagne.
4. J. Ruan, P. Domingo, G. Ribert (2019) Large-eddy simulation of a scramjet combustor. 11th MCS, (Tenerif, Spain).
5. A. Seltz, P. Domingo, L. Vervisch, (2019) Machine Learning for Sub-Grid Scale Turbulent Combustion Modeling. 9th ECM (Lisboa, Portugal), 2019.
6. J. Ruan, P. Domingo, G. Ribert, (2019) Flame stabilization in a cavity-base scramjet. 9th ECM (Lisboa, Portugal), 2019.
7. U. Guven, G. Ribert, Modelling and simulation of high-pressure flows. 9th ECM (Lisboa, Portugal), 2019.
8. K. Bioche, G. Ribert, L. Vervisch, Numerical simulation of flames in narrow combustion chambers. 9th ECM (Lisboa, Portugal), 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Loïc Ruan, juillet 2019, Simulation aux grandes échelles de la combustion supersonique dans les superstatoréacteurs à cavité.
- Alexandre Bouaniche, décembre 2019, A hybrid stochastic-sectional method for the simulation of soot particle size distributions.

Thèses en cours sur le projet

- Andréa Seltz ; encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Camille Barnaud ; encadrants P. Domingo/ L. Vervisch
- Niccolo Tonicello ; encadrants L. Vervisch / G. Lodato
- Hassan Tofaili ; encadrants L. Vervisch / G. Lodato
- Florian Monnier ; encadrant G. Ribert

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Irphe, Marseille - Université de Purdue, USA
- State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China
- CMAP, Ecole Polytechnique, Paris

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

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

Porteur : Benjamin DURET

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

Heures.CPU 2019 : 3 078 738

Publications de rang A

1. J. Anez, A. Ahmed, N. Hecht, B. Duret, J. Reveillon, F.X. Demoulin, Eulerian-Lagrangian Spray Atomization model coupled with Interface Capturing Method for Diesel injectors, 2019. International Journal of Multiphase Flow, Volume 113, p. 325-342.
2. F. Dabonneville, N. Hecht, J.Reveillon, G. Pinon, F.X. Demoulin. A zonal grid method for incompressible two-phase flows, 2019. Computers & Fluids, Volume 180, p. 22-40.

Communications dans des congrès internationaux

1. Aqeel Ahmed. Numerical simulation of cavitation with multi-component gas. 10th International Conference on Multiphase Flow, May 2019, Rio de Janeiro, Brazil.
2. Remigi A, Di Battista R, Massot M, Demoulin FX, Duret B, Reveillon J, Ménard T, Hugo D, exploring different approaches for the simulation of multi-scale atomization process, 10th International Conference on Multiphase Flow, May 2019, Rio de Janeiro, Brazil.
3. Aqeel Ahmed. Cavitation coupled atomization. 6th Cavitation and Multiphase flows Workshop, Chania, Crete, Greece, June 24-27, 2019, Jun 2019, Chania, Crete, Greece.
4. Anez, J., Ahmed, Dabonneville F., Duret B., Reveillon, J., Demoulin, F. X. Multi-scale spray atomization model. Ilass Europe. 29th european conference on Liquid Atomization and Spray Systems. Paris, September 2019.

Communications dans des congrès nationaux

1. Anez J., Reveillon, J. blockMesh vs snappyHM vs oversetMesh pour le calcul de profils d'éolienne en RANS et URANS. Journée Grenobloise des utilisateurs OpenFOAM. Grenoble, Juin 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Aqeel Ahmed, LES of atomization and cavitation for fuel injector, septembre 2019, Université de Rouen.

Thèses en cours sur le projet

- Alberto Remigi : Développement d'une approche numérique pour l'amélioration d'un injecteur aéromécanique
- Diego Ferrando : Modélisation numérique avancée du processus d'atomisation: application à un système d'injection aéronautique

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Paul Tournant : Etude de l'impact de structures liquides sur une paroi (stage M2).
- Hakim Hamdani : Etude de l'aérodynamique autour d'une pale d'éolienne en mouvement (Stage M1).
- Johanna Rebot : Etude de l'aérodynamique autour d'obstacles complexes avec OpenFOAM (Stage M1).
- Nathan Mauger : Etude de l'interaction fluide-structure d'une coque de voilier en mer, collaboration avec le laboratoire CMAP (stage M1).

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.
- Régulière collaboration avec l'université de Florence, dont un projet Européen où nous sommes partenaires (Projet H2020 Clean Sky 2 : CHAIRLIFT).

13. 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 2019 : 116 011

14. 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 2019 : 333 466

Publications de rang A

1. Y. El Mendili, D. Chateigner, B. Orberger, S. Gascoin, J-F. Bardeau, S. Petit, C. Duee, M. Le Guen, H. Pilliere, ACS Earth and Space Chemistry, 3, 2237, 2019, Combined XRF, XRD, SEM-EDS, and Raman Analyses on Serpentinized Harzburgite (Nickel Laterite Mine, New Caledonia): Implications for Exploration and Geometallurgy.
2. Y. El Mendili, A. Vaitkus, A. Merkys, S. Grazulis, D. Chateigner, F. Mathevet, S. Gascoin, S. Petit, J-F. Bardeau, M. Zanatta, M. Secchi, G. Mariotto, A. Kumar, M. Cassetta, L. Lutterotti, E. Borovin, B. Orberger, P. Simon, B. Hehlen, M. Le Guen, J. Applied Crystallography, 52, 618, 2019, Raman Open Database: first interconnected Raman-X-ray diffraction open-access resource for material identification.
3. M. Poupon, N. Barrier, A. Pautrat, S. Petit, O. Perez and P. Bazin, J. Solid State Chem. 270, 147, (2019), "Investigation of $\text{Co}_6(\text{OH})_3(\text{TeO}_3)_4(\text{OH})_{0.9}(\text{H}_2\text{O})$: Synthesis, crystal and magnetic structures, magnetic and dielectric properties.

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

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

Porteur : Alexis COPPALLE

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

Heures.CPU 2019 : 6 889

16. 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 2019 : 416 606

Publications de rang A

1. H. Kanso, R. Patte, V. Baltz and D. Ledue ; Influence of finite size and edge effects on the exchange bias properties of ferromagnetic/antiferromagnetic nanodots : Granular Monte Carlo investigation ; Phys. Rev. B 99, 054410 (2019).
2. H. Kanso, R. Patte and D. Ledue ; Antiferromagnetic thickness and temperature dependence of the exchange bias properties of Co/IrMn nanodots and continuous films: A Monte Carlo study ; J. Magn. Mater. 491, 165543 (2019).

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Kanso, R. Patte and D. Ledue ; Exchange bias properties of FM/AFM square nanodots : a Monte Carlo investigation ; Joint MMM-Intermag Conference, 14-18/01/2019 (Washington DC).
2. H. Kanso, R. Patte, H. Zapolsky and D. Ledue ; Effect of grain boundaries and interdiffusion on the exchange bias properties of ferromagnetic/antiferromagnetic nanodots : a Monte Carlo investigation ; 12th International Symposium on Hysteresis and Micromagnetics, 19-22/05/2019 (Heraklion, Crete).

Communications dans des congrès nationaux

1. H. Kanso, R. Patte et D. Ledue ; Effets des joints de grains et de l'interdiffusion sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots ferromagnétiques/antiferromagnétiques : Etude par simulations numériques ; Colloque Louis Néel XIX, 14-17/05/2019 (Toulouse).

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Haydar Kanso : Influence des phases magnétiques désordonnées sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots ferromagnétiques/antiferromagnétiques: étude par simulations Monte Carlo et comparaison à l'expérience. Thèse soutenue le 18 octobre 2019 à l'Université de Rouen.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

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

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

Porteur : Vincent MOUREAU

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

Heures.CPU 2019 : 11 112 442

Publications de rang A

1. Akkari, N., Casenave, F. & Moureau, V. (2019) Time Stable Reduced Order Modeling By An Enhanced Reduced Order Basis Of The Turbulent And Incompressible 3d Navier–Stokes Equations. *Mathematical And Computational Applications* 24 (2), 45.
2. 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* 000, 1–11.
3. Domingo-Alvarez, P., Bénard, P., Moureau, V., Lartigue, G. & Grisch, F. (2019) Impact Of Spray Droplet Distribution On The Performances Of A Kerosene Lean/Premixed Injector. *Flow, Turbulence And Combustion*.
4. Dufresne, Y., Moureau, V., Lartigue, G. & Simonin, O. (2019) A Massively Parallel Cfd/Dem Approach For Reactive Gas-Solid Flows In Complex Geometries Using Unstructured Meshes. *Computers And Fluids* In Press.
5. Hamidouche, Z., Dufresne, Y., Pierson, J.-L., Brahem, R., Lartigue, G. & Moureau, V. (2019) Dem/Cfd Simulations Of A Pseudo-2d Fluidized Bed : Comparison With Experiments. *Fluids* 4 (1), 51.
6. Mercier, R., Mehl, C., Fiorina, B. & Moureau, V. (2019) Filtered Wrinkled Flamelets Model For Large-Eddy Simulation Of Turbulent Premixed Combustion. *Combustion And Flame* 205, 93–108.

Communications dans des congrès internationaux

1. Ageorges, V., Peixinho, J., Perret, G., Lartigue, G. & Moureau, V. (2019) Numerical And Experimental Studies Of The Flow Around A Partially Submerged Vertical Cylinder. 24ème Congrès Français De Mécanique. Brest, France.
2. Benard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Mercier, R. (2019) Detailed Kinetic Scheme Effect On Large-Eddy Simulations Of The Preccinsta Burner. 17th International Conference On Numerical Combustion. Aachen, Germany.
3. Domingo-Alvarez, P., Lartigue, G., Grisch, F., Moureau, V. & Benard, P. (2019) Development Of A Two-Level Oh-Plif Model For Les For Comparison With Raw Oh-Fluorescence Images. 17th International Conference On Numerical Combustion. Aachen, Germany.
4. Houtin-Mongrolle, F., Benard, P., Lartigue, G., Moureau, V., Bricteux, L. & Reveillon, J. (2019) Wake Interaction Of Yawed Wind Turbine By Large-Eddy Simulation. *Wind Energy Science Conference 2019*. Cork, Ireland.
5. Houtin-Mongrolle, F., Benard, P., Lartigue, G., Moureau, V., Bricteux, L. & Reveillon, J. (2019) Wake Interaction Of Yawed Wind Turbine By Large-Eddy Simulation. *Emrsim2019 : Simulation And Optimization For Renewable Marine Energies*. Roscoff, France.
6. Houtin-Mongrolle, F., Bricteux, L., Benard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Reveillon, J. (2019) Actuator Line Method Applied To Grid Turbulence Generation For Large-Eddy Simulations. *Ercoftac Work-Shop Direct And Large Eddy Simulation 12 (DLES12)*. Madrid, Spain.
7. Janodet, R., Vaudor, G., Lartigue, G., Benard, P., Moureau, V. & Mercier, R. (2019) An Unstructured Conservative Level-Set Algorithm Coupled With Dynamic Mesh Adaptation For The Computation Of Liquid-Gas Flows. 29th European Conference On Liquid Atomization And Spray Systems (ILASS Europe). Paris, France.
8. Moureau, V., Benard, P., Lartigue, G. & Mercier, R. (2019) Dynamic Adaptation Of Tetrahedral-Based Meshes For The Simulation Of Turbulent Premixed Flames. 17th International Conference On Numerical Combustion. Aachen, Germany.
9. Moureau, V., Benard, P., Lartigue, G., Mercier, R., Cailler, M., Froehly, A. & Dobrzynski, C. (2019) Dynamic Mesh Adaptation For Moving Fronts And Interfaces : Application To The Modeling Of Premixed Flames And Primary Atomization. *Tetrahedron Workshop VI*. Inria, Saclay, France.

10. Moureau, V., Benard, P., Lartigue, G., Mercier, R., Cailler, M., Froehly, A. & Dobrzynski, C. (2019) Dynamic Mesh Adaptation For Moving Fronts And Interfaces : Application To The Modeling Of Premixed Flames And Primary Atomization. APS-DFD Meeting. Seattle, WA, United States.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- 2017-2020 : Felix Barnaud, "Modeling of dynamic stall on wind turbine blades". Funded by SIE- MENS/GAMESA Renewable Energies. To be defended the 18th of december, 2019. Advisors: Prof Luminita Danaila and Dr Vincent Moureau.
- 2017-2020 : Patricia Domingo-Alvarez, "Modeling of high-pressure combustion". Chaire PERCEVAL funded by ANR/SAFRAN/ONERA/CORIA. To be defended the 12th of december, 2019. Advisors: Prof Frédéric Grisch and Dr Vincent Moureau.
- 2014-2019 : Hakim Larabi, "Auto-adaptive simulation of spray flames". Normandy region funding. Defended the 13th of november, 2019. Advisors: Prof Mourad Boukhalfa and Dr Vincent Moureau.
- 2015-2019: Yann Dufresne, "Modeling of granular flows with heat and mass transfers". MORE4LESS ANR project. Defended the 15th of october, 2019. Advisors: Prof Mourad Boukhalfa and Dr Vincent Moureau.

Thèses en cours sur le projet

- 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 Berlemont
- 2019-2022 : S. Meynet, "Large-Eddy Simulation of heat transfer in additive- manufactured heat exchangers". STREAM H2020 project. PhD director: Prof Abdellah Hadjadj.
- 2019-2022 : I. Tsetoglou, "Advanced immersed boundary methods for wind turbine wake modeling". Normandy region funding. PhD director: Prof Julien Reveillon. Co-advisor: Dr Pierre Benard.
- 2019-2022 : P. Benez, "Simulation of aspiration performance of low pressure fuel pumps". CIFRE SAFRAN HELICOPTER ENGINES. PhD director: Dr Guillaume Ribert.
- 2019-2022 : A. Grenouilloux, "High Fidelity Modeling of Aerodynamics in Thrust Inverters of Mixed-Flux Turbojets". CIFRE SAFRAN NACELLES. PhD director: Prof Armelle Cessou.

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

18. 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 2019 : 1 366 961

Publications de rang A

1. Gajdics, B., Tomán, J. J., Zapolsky, H., Erdélyi, Z., & Demange, G. (2019). A multiscale procedure based on the stochastic kinetic mean field and the phase-field models for coarsening. *Journal of Applied Physics*, 126(6), 065106.
2. Chen, K. X., Korzhavyi, P. A., Demange, G., Zapolsky, H., Patte, R., Boisse, J., & Wang, Z. D. (2019). Morphological instability of iron-rich precipitates in CuFeCo alloys. *Acta Materialia*, 163, 55-67.
3. N.Mavrikakis, C.Detlefs, P.K.Cook, M.Kutsal, A.P.C.Campos, M.Gauvin, P.R.Calvillo, W.Saikaly, R.Hubert, H.F.Poulsen, A.Vaugeois, H.Zapolsky, D.Mangelinck, M.Dumont, C.Yildirim "A multi-scale study of the interaction of Sn solutes with dislocations during static recovery in α -Fe" *Acta Materialia*, 174:92-104, 2019.
4. Y.A. Khon, H. Zapolsky, S. E. Kulkova, A.V. Bakulin, A.N. Ponomarev, N.G. Bobenko "The Quantum Effect on Mass Transfer in the Surface Layer in Stressed Solids" *Defect and Diffusion Forum*, 391:226-232, 2019.

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Zapolsky*, A. Vaugeois, R. Patte « Atomistic modeling of grain boundary segregation » EUROMAT, Stockholm, 2019. (conférence invitée).
2. H. Zapolsky* « Phase field modeling of phase transformations at meso and micro scales » Workshop "Diffusion Fundamentals 8", Erlangen, Germany, Septembre 2019. (conférence invitée).
3. H. Zapolsky* « Phase field modeling of diffusion kinetics at mesoscopic and atomistic scales » congress "Phase Field and Related Methods", Gulin, China, April 2019. (conférence invitée).
4. H. Zapolsky* "Atomistic modeling of phase transformations in solids" workshop of european programme "EXMONAN", Cherkassy, Ukraine, February 2019. (conférence invitée).
5. H. Zapolsky*, M. Lavrskyi, O. Nakonechna, R. Patte " Atomistic modeling of fcc->bcc phase transformation" ALEMI meeting, Vancouver, Canada, Juin 2019
6. O. Nakonechna*, F. Danoix, H. Zapolsky "Atomistic modeling of austenite-ferrite interface migration in pure iron" 19th ALEMI Meeting, Vancouver Canada, August 2019.
7. H. Zapolsky*, "Multiscale modeling of phase transformations" University of Science and Technology Beijing, Chine, 2019. (séminaire invité).
8. 9. H. Zapolsky*, "New atomistic approach to model phase transformation in alloys" Pacific Northwest National Laboratory, PNNL, USA, 2019. (séminaire invité).
9. 10. H. Zapolsky*, "Multiscale approach to model phase transformations in solid" Department of Materials Science Montanuniversität Leoben, Austria, 2019. (séminaire invité).

Communications dans des congrès nationaux

1. G. Demange*, H. Zapolsky, R. Patte, Méthode de champ de phase : concepts, application au branchage et ouverture à la biophysique, Séminaire biophysique, Rouen (France) : présentation orale, octobre 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Alexander Dahlstrom « Influence d'une contrainte mécanique sur le vieillissement d'alliage Fe-Cr », 20 May 2019.

Thèses en cours sur le projet

- O. Nakonechna « Étude de la ségrégation des solutés aux interfaces ferrite/austenite »
- B. Gajdics " Atomistic modeling of oxydes multi-layers" (cotutelle avec Université de Debrecen, Hongrie).

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Furkan Erdogan, stage de 3e année de licence. Croissance anisotrope de précipités de fer dans une matrice de cuivre (avril-juin 2019).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Séjour à l'Ural federal University (Urfu) en Russie en novembre 2019, pour travailler avec Pr. Dmitri Alexandrov de l'Urfu, et Dr. Andrew Kao de la Greenwich University.
- Séjour à l'université de Debrecen en Hongrie en avril 2019, pour travailler avec Pr. Zoltan Erdelyi.
- Séjour à l'Ural federal University à Ekaterinbourg en Russie en mars 2019, pour travailler avec Pr. Dmitri Alexandrov, et Dr. Andrew Kao de la Greenwich University, séminaire.
- Séjours à Institut Strength Physics Tomsk Russia, collaboration avec Pr. Y. Khon, Dr, A. Ponomarev and Dr. N. Bobenko.

19. 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 2019 : 1501

Thèses en cours sur le projet

- Tialong HE, A new approach based on finite element method for numerical computation of effective properties for composite materials : Phantom Domain Finite Element Method.

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Mohamed Alsibai, master 1 Mécanique. Étude comparative en 2D entre la méthode des éléments finis et la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger par FFT pour déterminer les tenseurs de conductivité thermique et les propriétés mécaniques des composites.

20. Projet : 2014007

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

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2019 : 516 193

21. Projet : 2015001**Intitulé : Simulation numérique avancée de condensats de Bose-Einstein. Simulation de la turbulence quantique.**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Ionut DANAILA

Laboratoire : LMRS - UMR 6085 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU 2019 : 689 331

Publications de rang A

1. S. Laurent, P. Parnaudeau, F. Chevy and I. Danaila Nonlinear dynamics of coupled super fluids, soumis (2019).

Communications dans des congrès internationaux

1. I. Danaila ; Vortices in classical fluids and superfluid Bose-Einstein condensates: a numerical investigation International Colloquium on Fluid turbulence Applications in Both Industrial and Environmental topics, July 9-11, Marseille, France.
2. I. Danaila, L. Danaila, M. Kobayashi, C. Lothode, F. Luddens, Ph. Parnaudeau, Spectral Simulations of Quantum Turbulence using the Gross-Pitaevskii Equation, European Turbulence Conference ETC-17, September 3-6, 2019, Torino, Italy.
3. I. Danaila, L. Danaila, M. Kobayashi, C. Lothode, F. Luddens, Ph. Parnaudeau, Simulations of dense vortex lattices and Quantum Turbulence using the Gross- Pitaevskii equation, Workshop on Quantum Systems in Cold-matter Physics and Chemistry, April 22-26, 2019, Fields Institute, Toronto, Canada.

Thèses en cours sur le projet

- Victor Kalt, Turbulence Quantique dans 4He et condensats de Bose-Einstein : modélisation et simulation numérique haute performance, LMRS, thèse ANR QUTE-HPC, 2019-2022.
Stages de Master en 2019 sur le projet
- G. Medghoul, Turbulence Quantique : modélisation et simulation numérique haute performance. (LMRS, stage de M2 Mathématiques et Applications Université de Rouen.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- M. Kobayashi, Kyoto University, Japon
- 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

22. 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 2019 : 12 722

Publications de rang A

1. A. Albaalbaky, Y. Kvashnin, R. Patte and D. Ledue ; "Analytical and numerical investigations of noncollinear magnetic ordering in frustrated delafossite CuCrO₂". Phys. Rev. B 99, 104415.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

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

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Gaële PERRET

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

Heures.CPU 2019 : 874092

Publications de rang A

1. V. Ageorges, J. Peixinho, and G. Perret. Flow and air-entrainment around partially submerged vertical cylinders. Phys. Rev. Fluids, 4 :064801, 2019.
2. S. Neuveglise, G. Perret, H. Smaoui, F. Marin, and P. Sergent. Impact of a quayside floating system on overtopping. J. Waterway, Port, Coastal and Ocean Engineering, DOI :10.1061/(ASCE)WW.1943-5460.0000532, 2019.
3. L. Gond, G. Perret, E. Mignot, and N. Riviere. Analytical prediction of the hydraulic jump detachment length in front of mounted obstacles in supercritical open-channel flows. Physics of Fluids, 31 :045101, 2019.

Communications dans des congrès internationaux

1. Bachar Mallat, Gaële Perret, Gilles Godard, Denis Lebrun. Experimental study of particle deposit over a rippled bed under regular water waves by digital holography. The 12th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing, 19-22 November 2019, New Taipei City, Taiwan.
2. Sixtine Neuveglise, François Marin, Hassan Smaoui, Gaële Perret et Philippe Sergent. Modelling of a quayside point absorber and its impact on overtopping. In D. Vicinanza, editor, Proceedings of the Thirteenth European Wave and Tidal Energy Conference, pages 1 – 8, Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli", Italy, Sep 1–Sep 6 2019. EWTEC. ISSN : 2309-1983.

Communications dans des congrès nationaux

1. Valentin Ageorges, Jorge Peixinho, G. Perret, G. Lartigue, V. Moureau, Numerical and experimental studies of the flow around a partially submerged vertical cylinder, 24ème Congrès Français de Mécanique, Brest, 26 au 30 Août 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Valentin Ageorges, «Écoulement et entraînement d'air autour d'un cylindre vertical partiellement immergé », thèse soutenue le 14 novembre 2019 à l'Université Le Havre Normandie.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec le CORIA, UMR 6614, en particulier, Vincent Moureau et l'équipe de YALES2 via le projet CPER -FEDER NEPTUNE (2016-2019), puis le projet LABEX EMC3 "STRUCTIMM" (2019-2020).

24. **Projet : 2015007**

Intitulé : Structure de dynamique dans les solutions aqueuses

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

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR - Lille - UMR 8516 (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2019 : 246 249

Publications de rang A

1. Volodymyr A. Koverga, Yevheniia Smortsova, François Alexandre Miannay, Oleg N. Kalugin, Toshiyuki Takamuku, Pal Jedlovszky, Bogdan Marekha, M. Natalia D. S. Cordeiro, Abdenacer Idrissi ; Distance Angle Descriptors of the Interionic and Ion-Solvent Interactions in Imidazolium-Based Ionic Liquid Mixtures with Aprotic Solvents: A Molecular Dynamics Simulation Study ; J. Phys. Chem. B 2019, 123, 28, 6065-6075
2. Volodymyr A. Koverga, Iuliia V. Voroshylova, Yevheniia Smortsova, François-Alexandre Miannay, Oleg N. Kalugin ; Local structure and hydrogen bonding in liquid γ -butyrolactone and propylene carbonate: A molecular dynamics simulation ; J. Mol. Liq., 2019, 287, 110912.
3. 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.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ari Paavo SEITSONEN, Ecole Normale Supérieure, Paris.

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

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Luminita DANAILA

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

Heures.CPU 2019 : 1 895 341

Publications de rang A

1. M. Gauding, M. Bode, D. Denker, Y. Brahami, L. Danaila, E. Varea. On the combined effect of internal and external intermittency in turbulent non-premixed jet flames. Proceedings of the Combustion Institute (in-press).
2. Gauding, M., Wang, L., Goebbert, J. H., Bode, M., Danaila, L., & Varea, E. (2019). On the self-similarity of line segments in decaying homogeneous isotropic turbulence. Computers & Fluids, 180, 206-217.

Communications dans des congrès internationaux

1. M. Gauding, M. Bode, D. Denker, Y. Brahami, L. Danaila, E. Varea. On the combined effect of internal and external intermittency in turbulent non-premixed jet flames. Combustion Symposium (2020), Australia.
2. M. Gauding, D. Denker, M. Bode, L. Danaila, E. Varea. Analysis of external intermittency in a non-premixed turbulent jet flame, Proceedings of the 11th US National Combustion Meeting, USA (2019).
3. M. Gauding, L. Danaila, E. Varea. The effect of external intermittency on the self-similarity of a turbulent jet flow. Annual Meeting of The American Physical Society – Division of Fluid Dynamics (2019), USA.

Thèses en cours sur le projet

- Yacine Brahami.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- RWTH Aachen University, Germany (M. Bode and D. Denker).
- Research Center Juelich, Institute for Advanced Computing, Germany (J.H. Goebbert).

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Ronan BUREAU

Laboratoire : CERMN - UNICAEN (CAEN)

Heures.CPU 2019 : 22 847

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

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Nicolas LECOQ

Laboratoire : M2C - Rouen - UMR 6143 (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU 2019 : 243 662

28. 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 2019 : 1 860 207

Publications de rang A

1. Ranim Mohamad, Marie Pierre Chauvat, Slawomir Kret, Piero Gamarra, Sylvain Delage, Viwanou Hounkpati, Cedric Lacam, Jun Chen and Pierre Ruterana, The critical role of N-vacancy on chemical composition fluctuations and degradation of InAlN layer, Journal of Applied Physics 125, 215707 (2019).

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.

29. 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 2019 : 868 948

Publications de rang A

1. Nguyen V.T., Santa Cruz A., Guillou S.S., Shiekh Elsouk M.N. and Thiébot J. (2019), Effects of the Current Direction on the Energy Production of a Tidal Farm: The Case of Raz Blanchard (France), Energies, 13 (13), 2478. Doi:10.3390/en12132478.
2. Grondeau M., Guillou S.S., Mercier P., Poizot E. (2019), Wake of a ducted vertical axis tidal turbine in turbulent flows, LBM actuator-line approach, Energies, 12, 4273. doi:10.3390/en12224273.
3. Bourgoïn A., Guillou S.S., Ata R., Thiébot J., Use of Large-Eddy Simulation for the bed shear stress estimation over a dune, International Journal of Sediment Research (accepted). <https://doi.org/10.1016/j.ijsrc.2019.10.002>
4. 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. (2019), Towards a turbulence characterization in tidal energy sites. First results of THYMOTE project. MATEC Web of Conferences 261(42):05002. DOI: 10.1051/mateconf/201926105002

5. Thiébot J., Guillou N., Guillou S.S., Good A., Lewis M., Wake field study of tidal turbines under realistic flow conditions, *Renewable Energy* (accepted).
6. Mercier Ph., Ikhennicheu M., Guillou S.S., Germain G., Poizot E., Grondeau M., Thiébot J., Druault Ph., The merging of Kelvin-Helmholtz vortices into large coherent flow structures in a high Reynolds number flow past a wall-mounted square cylinder, *Ocean Engineering*, (submitted).
7. Mercier Ph., Grondeau M., Guillou S.S., Poizot E., Thiébot J., Numerical study of the turbulent eddies generated by the seabed roughness. Case study at a tidal power site, *Applied Ocean Research*, (en revision).
8. Grondeau M., Poirier J.C., Guillou S.S., Philippe Ph., Poizot E., Mear Y., Implementing a realistic tidal turbine modelling with the Lattice Boltzmann Method. *Applied Mathematical Modelling* (Submitted).

Communications dans des congrès internationaux

1. Mercier P., Grondeau M., Guillou S.S., Thiébot J., Poizot E., High resolution large eddy simulation for tidal site turbulence characterisation, 13th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Naples, 1-6 sept. 2019, 7p.
2. Grondeau M., Poirier J.-C., Guillou S.S., Mear Y., Mercier P., Poizot E., Modelling the wake of a tidal turbine with upstream turbulence: LBM-LES versus, 13th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Naples, 1-6 sept. 2019, 7p.
3. Khaled F., Guillou S.S., Mear Y. and Hadri F., Numerical modelling of the impact of hydrokinetic turbine on the morphology of the near sandy bed, 13th European Wave and Tidal Energy Conference Proceeding, Naples, 1-6 sept. 2019, 8p.
4. Khaled F., Guillou S.S., Mear Y. and Hadri F., Modelling the local impact of hydrokinetic turbine on mobile sandy bed by two-phase Euler-Euler CFD approach, The 4th symposium on two-phase modeling for sediment dynamics in geophysical flows, THESIS-2019, 17-19 sept 2019, Newark, Delaware, USA.

Communications dans des congrès nationaux

1. Guillou S.S., Duart R., Thiébot J., Germain G., Chaplain N., Ikhennicheu M., Bourgoïn A., Mercier P., Filipot JF, Gaurier B., Ata R., Laverne J., Benhamadouche S., Pieterse A., Maisondieu C., Poizot E., Poirier J.C., Auvray C., Droniou E., Arramounet A., Thiébault M., Pinon G. (2019), Caractérisation de la turbulence d'un site hydrolien : vers l'effet de la morphologie du fond sur la turbulence dans le Raz Blanchard, Congrès Français de Mécanique, Brest 26-30 août 2019, 10 p. (keynote lecture).
2. Delafin P.-L., Guillou S., Sommeria J., Maître T., Mesh sensitivity of vertical axis turbine wakes for farm simulations, Congrès Français de Mécanique, Brest, 26-30 août 2019, 9p.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Mr Philippe MERCIER, 2016-2019, thèse de l'Université de Caen soutenue le 21/03/2019. Modélisation de la turbulence engendrée par la morphologie du fond dans le Raz Blanchard : Approche locale (LBM-LES). Financement : projet ANR ITE THYMOTE. Directeur : Sylvain Guillou, Co-encadrants : Emmanuel Poizot, Jérôme Thiébot.
- Mr Adrien BOURGOIN, 2016-2019, thèse de l'Université de Caen soutenue le 26/03/2019, Modélisation de la turbulence engendrée par la morphologie du fond dans le Raz Blanchard : Approche régionale avec TELEMAC-LES. Financement : projet ANR ITE THYMOTE. Directeur : Sylvain Guillou, Co-encadrants : Riadh Ata, Jérôme Thiébot.

Thèses en cours sur le projet

- Fatima KHALED. Modélisation de l'interaction hydrolienne et environnement sédimentaire. Utilisation de la méthode Blade Element Method. Financement: Gouvernement du Liban. Directeur : Yann Mear, Co-encadrants : Ferhat Hadri Sylvain Guillou (début nov. 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 ballonnement des liquides dans les réservoirs de stockage. Directeurs : Sylvain Guillou (Unicaen) et Seghir Abdelghani (Univ. A. Mira, Bejaia), co-encadrée par M. Benaouicha.
- Nasteho DJAMA DIRIEH, Modélisation des effets de sillages d'hydroliennes, PhD Université de Caen, (début nov. 2018). Financement Région Normandie. Directeurs : Jérôme Thiébot, Sylvain Guillou, Co-encadrée par Nicolas Guillou.

30. **Projet : 2016016**

Intitulé : Adsorption de polluant en milieu aqueux : approche numérique et expérimentale

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

Porteur : Hamidréza RAMEZANI

Laboratoire : ICMN - Orleans - UMR 7374 (ORLÉANS)

Heures.CPU 2019 : 3 075

Publications de rang A

1. El Oufir, Z.; Ramézani, H.; Mathieu, N.; Bhatia, S. K. & Delpeux, S. ; Impact of High Adsorbent Conductivity on Adsorption of Polar Molecules: Simulation of Phenol Adsorption on Graphene sheets, *Adsorption*, 2020, 26, 537–552.

Communications dans des congrès internationaux

1. Z. El Oufir , H. Ramézani, N. Mathieu, S. Delpeux , S. K. Bhatia, "On the molecular simulation of phenol adsorption in slit-shaped carbons: role of carbon surface conductivity" from 8th International Conference on Carbon for Energy Storage and Environment Protection (CESEP'19 CONFERENCE), Octobre 2019, Spain.

Communications dans des congrès nationaux

1. Z. El Oufir , H. Ramézani, N. Mathieu, S. K. Bhatia, S. Delpeux, Adsorption du Phénol dans des carbones lamellaires : simulation Monte Carlo Grand Canonique, Colloque francophone du carbone, Samatan, Avril 2019, France, SFEC 2019, 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Zineb El OUFIR, Adsorption en milieu aqueux dans les carbones adsorbants : approche expérimentale et simulation numérique (thèse en cours 2017-2020).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Pr. Suresh Bhatia, Chemical Engineering Department, University of Queensland, Australia.
- Pr. Yoshiyuki Sugahara, Department of Applied Chemistry, School of Advanced Science and Engineering, WASEDA University, Tokyo, Japon.

31. 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 2019 : 192 790

32. 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 2019 : 455 158

33. Projet : 2016019**Intitulé : WavyFilm**

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

Porteur : Nicolas GRENIER

Laboratoire : LIMSI - Orsay - UPR 3251 (ORSAY)

Heures.CPU 2019 : 93083

34. 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 Cedex S)

Heures.CPU 2019 : 19317

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 en cours sur le projet

- Thèse Quentin Noguès, 2018-2021, Etude du cumul d'impact autour du parc éolien offshore de la baie de Seine : quelles conséquences pour le fonctionnement trophique de l'écosystème, son état de santé et les services écosystémiques ?, ECOFUNC, EdN BISE, Université de Caen Normandie, Financement : Région Normandie.

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

35. Projet : 2016022**Intitulé : Apprentissage statistique pour la compréhension de scènes audio**
LEAUDS : Learning to understand audio scenes

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques
Porteur : Alain RAKOTOMAMONJY
Laboratoire : LITIS (SAINT ETIENNE DU ROUVRAY)
Heures.CPU 2019 : 42 618

Communications dans des congrès internationaux

1. Rakotomamonjy et al. Screening Rules for Lasso with Non-Convex Sparse Regularizers, ICML 2019 , Long Beach.

Thèses en cours sur le projet

- Mohammad Abdollahi : Weakly supervised learning of audio event (début nov 2019). Financement projet ANR.

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

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs
Porteur : Mostafa SAFDARI SHADLOO
Laboratoire : CORIA - UMR 6614 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)
Heures.CPU 2019 : 1 110 277

Publications de rang A

1. F. Almasi, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, M. Ozbulut, N., Tofighi, M. Yildiz, Numerical simulations of multi-phase electro-hydrodynamics' flows using a simple incompressible smoothed particle hydrodynamics method, Computers and Mathematics with Applications, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2019.10.029>
2. S. Sharma, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, M. J. Kloker, Control of oblique-type breakdown in a supersonic boundary layer employing streaks, Journal of Fluid Mechanics, 2019 (873), 1072-1089
3. S. Sharma, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, Turbulent Flow Topology in Supersonic Boundary Layer with Wall Heat Transfer, International Journal of Heat & Fluid Flow 2019 (78) 108430
4. M. S. Shadloo, "Numerical Simulation of Compressible Flows by Lattice Boltzmann Method", Numerical Heat Transfer, Part A, 2019, 75 (3) 167-182.
5. D.V. Shenoy, M. S. Shadloo*, A. Hadjadj, J. Peixinho, Direct numerical simulations of laminar and transitional flows in diverging pipes, International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow, 2019 DOI (10.1108/HFF-02-2019-0111)

6. M. Hopp-Hirschler*, M.S. Shadloo, U. Nieken, "Viscous Fingering Phenomena in the Early Stage of Polymer Membrane Formation", *Journal of Fluid Mechanics*, 2019 (864) 97-140.
7. M. Q. Nguyen, M. S. Shadloo, A. Hadjadj, B. Lebon, J. Peixinho*, "Perturbation threshold and hysteresis associated with the transition to turbulence in sudden expansion pipe flow", *International Journal of Heat and Fluid Flow* 76 (2019) 187–196.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Sushank SHARMA, Numerical Simulation of Turbulent Compressible Flows with Heat Transfer

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

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- J. PIEXINHO, CR1 of CNRS, University of Le Havre, France
- M. J. Kloker, Professor, University of Stuttgart, Germany
- U. NIEKEN, Professor, University of Stuttgart, Germany
- M. Yildiz, Professor, Sabanci University, Turkey
- M. Ozbulut, Assistant Professor, Piri Reis University, Turkey

37. Projet : 2017004

Intitulé : Simulation directe des écoulements diphasiques

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

Porteur : Jorge César BRANDLE DE MOTTA

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

Heures.CPU 2019 : 503 052

Communications dans des congrès internationaux

1. T. Chen, V. Chéron, Z. Guo, J.C. Brändle de Motta L.-P. Wang, Simulation of immiscible two-phase flows based on a kinetic diffuse interface approach, 10th International Conference on Multiphase Flow, Rio de Janeiro, Brazil, 2019.
2. R. Canu, B. Duret, J. Reveillon, F.-X. Demoulin, A surface resolution criterion for two-phase flows DNS, 29th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Paris, 2019.
3. V. Chéron, J. C. Brändle de Motta, G. Vaudor, T. Ménard, A. Berlemont, From droplets to particles: Transformation criteria, 29th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Paris, 2019.

Communications dans des congrès nationaux

1. Victor Chéron, J Brändle de Motta, T. Ménard, A. Berlemont. Hybrid treatment of small droplets in atomized jet. Congrès Français de Mécanique, Aug 2019, Brest, France.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- R. Canu, "Développement d'une méthode compressible avec évaporation pour la simulation d'interface résolue dans le cadre de l'atomisation.", PhD Thesis, 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Victor Chéron
- Leandro Germes Martinez
- Alberto Remigi

38. **Projet : 2017006**

Intitulé : Modélisation de la convection naturelle dans un anneau cylindre en rotation

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Innocent MUTABAZI

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

Heures.CPU 2019 : 602 571

Publications de rang A

1. C. Kang, A. Meyer, H.N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Thermoelectric convection in a dielectric liquid inside a cylindrical annulus with a solid-body rotation, *Phys. Rev. Fluids* 4, 093502 (2019).
2. C. Kang & I. Mutabazi, Dielectrophoretic buoyancy and heat transfer in a dielectric liquid contained in a cylindrical annular cavity, *J. Appl. Phys.* 125, 184902 (2019) Editor's pick.
3. C. Kang, A. Meyer, H.N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Numerical study of thermal convection induced by centrifugal buoyancy in a rotating cylindrical annulus, *Phys. Rev. Fluids* 4, 043501 (2019).

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Meyer, T. Seelig, M. Meier, I. Mutabazi & C. Egbers, Thermo-electro-hydrodynamic instability of a dielectric fluid in a vertical cylindrical annulus: Earth's gravity and weightless condition, 26th ELGRA Biennial Symposium and General Assembly, September 24-27, 2019 Granada, Spain.
2. I. Mutabazi, A. Meyer, C. Kang & H. Yoshikawa, External forcing of columnar vortices in thermoelectric convection : a theoretical approach, 26th ELGRA Biennial Symposium and General Assembly, September 24-27, 2019 Granada, Spain.
3. C. Kang, A. Prigent & I. Mutabazi, Localized structures and solitary states in a vertical Taylor-Couette system with a radial temperature gradient, 17th European Turbulence Conference(ETC), Spetember 3-6, 2019, Torino-Italy.
4. 4.A. Prigent, C. Kang, C. Savaro, R. Guillerme & I. Mutabazi, Experimental and numerical study of the flow produced in a vertical Taylor-Couette system submitted to a large radial temperature gradient, Workshop ISTROF, 19-20 June 2019, Cottbus-Germany.
5. E.B. Barry, C. Kang, H.N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Linear stability analysis of thermoelectric convection in a vertical rectangular cavity with a horizontal temperature gradient, Workshop ISTROF, 19-20 June 2019, Cottbus-Germany.
6. A. Meyer, T. Seelig, P. Gerstner, C. Kang, M. Meier, M. Jongmanns, M. Baumann, I. Mutabazi, V. Heuveline & C. Egbers, Thermo-electro-hydrodynamic instability of a dielectric fluid in a vertical cylindrical annulus : Earth's gravity and weightless conditions, Workshop ISTROF, 19-20 June 2019, Cottbus-Germany.
7. C. Kang, A. Meyer, H. Yoshikawa & I. Mutabazi, Thermal convection induced by centrifugal and dielectrophoretic buoyancies in cylindrical annular cavities : a general review of recent results, Workshop ISTROF, 19-20 June 2019, Cottbus-Germany.

Communications dans des congrès nationaux

1. C. Kang & I. Mutabazi, Convection thermoélectrique dans un liquide diélectrique confiné dans une cavité annulaire, La Rochelle 29-31/10/2019.
2. E..B. Barry, H.N. Yoshikawa, C. Kang & I. Mutabazi, Modes d'instabilité de convection thermoélectrique dans une cavité rectangulaire vertical, GdR Micropesanteur Fondamentale et Appliquée, La Rochelle 29-31/10/2019.

Thèses en cours sur le projet

- E.B. Barry, Etude de la convection thermoélectrique dans des cavités rectangulaires.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

Structures :

- 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).

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

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Julien REVEILLON

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

Heures.CPU 2019 : 132 740

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet EDF-Chatou - Post doc de Javier Anez - Développement de modèles d'atomisation pour la simulation de chutes d'eau en aval de déversoir.

40. 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 2019 : 1 046 519

Publications de rang A

1. A. Rakotondrandisa, I. Danaila, L. Danaila, Numerical modelling of a melting-solidification cycle of a phase-change material with complete or partial melting, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 76, p. 57- 71, 2019.
2. A. Rakotondrandisa, G. Sadaka, I. Danaila, A finite-element toolbox for the simulation of solid-liquid phase-change systems with natural convection, soumis à *Computer Physics Communications*, 2019 (phase de révision).

Communications dans des congrès internationaux

1. G. Sadaka : Parallel 2D and 3D numerical simulations of melting with convection, 17th European Turbulence Conference, 3-6 Sept. 2019, Turin, Italie.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Aina Rakotondrandisa, soutenue le 27 septembre 2019. Directeur de thèse : I. Danaila.

Thèses en cours sur le projet

- Cécile Legrand, financement régional. Débutée le 1er octobre 2019. Directeur de thèse : I. Danaila
Co-encadrant : F. Luddens.

41. 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 2019 : 11 026

Publications de rang A

1. J Sudharshan, C. Petitjean, Fabio Spanhol, Luiz Eduardo Oliveira, Laurent Heutte, and Paul Honeine. Multiple instance learning for histopathological breast cancer image classification. *Expert systems with applications*, 117:103–111, 2019.
2. Roger Trullo, C. Petitjean, Su Ruan, and Bernard Dubray. Multi-organ segmentation using distance aware adversarial networks. *Journal of Medical Imaging*, 6(1):14001, 2019.
3. Article soumis : Z. Lambert, C. Petitjean, B. Dubray, S. Ruan, SegTHOR: Segmentation of Thoracic Organs at Risk in CT images, submitted to *Journal of Medical Imaging* (nov 2019).

Communications dans des congrès internationaux

1. Article soumis : J. Zhang, C. Petitjean, S. Ainouz, Kappa loss for skin lesion segmentation in fully convolutional network, submitted to *IEEE ISBI* (nov 2019)

Communications dans des congrès nationaux

1. Rosana El Jurdi, C. Petitjean, Paul Honeine, and Fahed Abdallah. Organ Segmentation in CT Images With Weak Annotations. In *GRETSI*, Lille, France, 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Z. Lambert (LMI, INSA Rouen)
- J. Zhang (LITIS, INSA et Univ Rouen)
- R. El Jurdi (LITIS, Univ Rouen)

42. Projet : 2017016**Intitulé : Exploration de simulation multi-agents pour le laboratoire de géographie UMR IDEES**

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

Porteur : Sébastien REY-COYREHOURCQ

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

Heures.CPU 2019 : 3 284

Communications dans des congrès internationaux

1. Eric Daudé, Kevin Chapuis, Patrick Taillandier, Pierrick Tranouez, Clément Caron, et al.. ESCAPE: Exploring by Simulation Cities Awareness on Population Evacuation. ISCRAM, May 2019, Valencia, Spain. <hal-02130387>
2. Mathieu Bourgeois, Sébastien Rey-Coyrehourcq, Marion Le Texier, Armelle Couillet, Francois Delisle. Exploring simulation models of dressed stoned exchange during the medieval age. ECTQG 2019, Sep 2019, Mondorf, Luxembourg. <halshs-02284417>
3. Sébastien Rey-Coyrehourcq, Etienne Delay, Paul Chapron. Calibration & Optimisation. École thématique. Calibration & Optimisation, Châtenay-sur-Seine, France. 2019. <cel-02284550>

Communications dans des congrès nationaux

1. Clémentine Cottineau, Julien Perret, Romain Reuillon, Sébastien Rey-Coyrehourcq, Julie Vallée. H24 : un modèle multi-agents pour étudier les effets de la ségrégation sociale et temporelle sur les disparités alimentaires en Ile-de-France. Quatorzièmes Rencontres de Théo Quant, Feb 2019, Besançon, France. <hal-02284547>
2. Sébastien Rey-Coyrehourcq, Arnaud Banos. Le calcul intensif en géographie : une tradition bien ancrée : Le cas de la simulation. Le calcul intensif et l'intelligence artificielle en sciences humaines et sociales, Genci, Apr 2019, Paris, France. <halshs-02284428>
3. Sébastien Rey-Coyrehourcq, Arnaud Banos, Juste Raimbault, Quelques usages du HPC pour la simulation de phénomènes spatialisés en géographie quantitative, JCAD 2019, Octobre 2019, Toulouse, France.

Thèses en cours sur le projet

- Prime 80 CNRS ANR Escape- Volcano porté par Eric Daudé
- ANR MO3 porté par Eric Daudé

43. 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 2019 : 231 800

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Stéphane CANU

Laboratoire : LITIS (SAINT ETIENNE DU ROUVRAY)

Heures.CPU 2019 : 232 969

45. 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 2019 : 55 216

Publications de rang A

1. Camille Marchet, Pierre Morisse, Lolita Lecompte, Arnaud Lefebvre, Thierry Lecroq, Pierre Peter-longo, Antoine Limasset. ELECTOR: Evaluator for long reads correction methods. NAR Genomics and Bioinformatics, Volume 2, Issue 1, March 2020, <https://doi.org/10.1093/nargab/lqz015>

Communications dans des congrès internationaux

1. Pierre Morisse, Camille Marchet, Antoine Limasset, Thierry Lecroq, Arnaud Lefebvre. CONSENT: Scalable self-correction of long reads with multiple sequence alignment. RECOMB-SEQ 2019, Washington, USA, mai 2019.
2. Pierre Morisse, Camille Marchet, Antoine Limasset, Thierry Lecroq, Arnaud Lefebvre. CONSENT: Scalable self-correction of long reads with multiple sequence alignment. Data Structures in Bioinformatics (DSB) 2019, Dortmund, Allemagne, février 2019.

Communications dans des congrès nationaux

1. Pierre Morisse, Camille Marchet, Antoine Limasset, Thierry Lecroq, Arnaud Lefebvre. CONSENT: Scalable self-correction of long reads with multiple sequence alignment. Actes des 20 èmes Journées Ouvertes en Biologie, Informatique et Mathématiques (JOBIM), pages 54-61, Nantes, France, juillet 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Pierre Morisse, Correction de données de séquençage de troisième génération. Université de Rouen Normandie, 26 septembre 2019.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Équipe BONSAI – Laboratoire CRISAL – Lille (Camille MARCHET, Antoine LIMASSET).
- Laboratoire Ecodiv – Université de Rouen Normandie (Matthieu CHAUVAT, Estelle FOREY, Ludovic HENNERON, Laurent MIGNOT, Sylvaine BUQUET).
- Laboratoire Glyco-MEV – Université de Rouen Normandie (Isabelle BOULOGNE, Marie-Christine KIEFER-MEYER, Sophie BERNARD, Gaelle DURAMBUR).

46. 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 2019 : 277

47. 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 2019 : 661 295

Publications de rang A

1. El Oufir, Z.; Ramézani, H.; Mathieu, N.; Bhatia, S. K. & Delpeux, S., Impact of High Adsorbent Conductivity on Adsorption of Polar Molecules: Simulation of Phenol Adsorption on Graphene sheets Adsorption, 2020, 26, 537–552.

Communications dans des congrès internationaux

1. Z. El Oufir, H. Ramézani, N. Mathieu, S. Delpeux, S. K. Bhatia, "On the molecular simulation of phenol adsorption in slit-shaped carbons: role of carbon surface conductivity" from 8th International Conference on Carbon for Energy Storage and Environment Protection (CESEP'19 CONFERENCE), Octobre 2019, Spain.

Communications dans des congrès nationaux

1. Z. El Oufir, H. Ramézani, N. Mathieu, S. Delpeux, Adsorption du Phénol dans des carbones lamellaires : simulation Monte Carlo Grand Canonique, Colloque francophone du carbone, Samatan, Avril 2019, France, SFEC 2019, 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Zineb El OUFIR, Adsorption en milieu aqueux dans les carbones adsorbants : approche expérimentale et simulation numérique (thèse en cours 2017-2020).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Alexis LECHERVY

Laboratoire : GREYC - CAEN - UMR 6072 (CAEN)

Heures.CPU 2019 : 29 129

Thèses en cours sur le projet

- Shivang Agarwal

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Prachi Garg

49. Projet : 2018001**Intitulé : Etude de mécanismes d'activation électrophone 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 2019 : 82 151

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

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

Porteur : Fabien THIESSET

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

Heures.CPU 2019 : 786 712

Communications dans des congrès internationaux

1. Fabien Thiesset, Christophe Dumouchel, Thibaut Ménard, Wojciech Aniszewski, Geoffroy Vaudor, et al.. Probing Liquid Atomization using Probability Density Functions, the Volume-Based Scale Distribution and Differential Geometry. ILASS-Europe, Sep 2019, PARIS, France. <hal-02271699>

2. Fabien Thiesset, Thibaut Ménard, Christophe Dumouchel. A New Theoretical Framework for Characterizing the Transport of Liquid in Turbulent Two-Phase Flows. ILASS-Europe, Sep 2019, Paris, France. <hal-02271685>

Thèses en cours sur le projet

- Sanadi Dilip. Atomization of liquid membranes.
- Herrera Raphael. Atomization of liquid jets in presence a transverse acoustic field.

51. **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 - UMR 7331 (REIMS CEDEX 2)

Heures.CPU 2019 : 136 499

Publications de rang A

1. Paulo HR Amaral, Monika Stanke, Ludwik Adamowicz, Leonardo G Diniz, José R Mohallem, Alexander Alijah, « Non-adiabatic effects in the H3+ spectrum », Phil. Trans. R. Soc. A 377, 20180411 (2019)
2. Alexander Alijah, Juan Carlos López Vieyra, Daniel J Nader, Alexander V Turbiner, Héctor Medel Cobaxin, « The hydrogen molecule H2 in inclined configuration in a weak magnetic field », JQSRT 233, 78 (2019)
3. Olfa Ferchichi, Najoua Derbel, Thibaud Cours, Alexander Alijah, « Dichlorine peroxide (ClOOCI) and chloryl chloride (ClClO2): very accurate ab initio structures and actinic degradation », Phys. Chem. Chem. Phys., submitted

Communications dans des congrès internationaux

• Conférences :

1. A. Alijah, « Non-adiabatic effects in the H3+ spectrum », Royal Society Discussion Meeting « Advances in Hydrogen Molecular Ions : H3+, H5+ and beyond », London, Angleterre, 01/2019, conférence invitée.

• Posters scientifiques :

2. Olfa Ferchichi, Najoua Derbel, Thibaud Cours, Alexander Alijah, « The study of structural and spectroscopic parameters of chlorine peroxide (ClOOCI) », the 26th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (HRMS), 26-30 Aout, Dijon, France 2019.
3. Olfa Ferchichi, Najoua Derbel, Thibaud Cours, Alexander Alijah, « Theoretical investigation of dichlorine peroxide », High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2019), 1-5 July, Nizhny Novgorod, Russia, 2019.
4. Najoua Derbel, Olfa Ferchichi, Alexander Alijah, « Decomposition of triazoles in the troposphere: reaction with the OH radical. », the 26th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (HRMS), 26-30 Aout, Dijon, France 2019.

Communications dans des congrès nationaux

1. Olfa Ferchichi, Najoua Derbel, Thibaud Cours, Alexander Alijah, « Caractérisation théorique du peroxyde de chlore (ClOOCI) : structure et spectre », Réseau de Chimie Théorique du Grand Est, 21-22 Novembre, Strasbourg, France 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Paulo Henrique Amaral, soutenue le 11/10/2019.

Thèses en cours sur le projet

- Olfa Ferchichi.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Mme Najoua DERBEL, Université de Tunis El Manar, Tunisie.
- M. J. R. Mohallem, Université Fédérale de Minas Gerais, Brésil.
- M. J. C. Lopez Vieyra, Université Nationale Autonome de Mexique, UNAM, Mexique.

52. Projet : 2018004**Intitulé : Simulation numérique du collage de bulles de gaz**

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

Porteur : Eric GONCALVES DA SILVA

Laboratoire : Institut Pprime - Poitiers - CNRS (Futuroscope)

Heures.CPU 2019 : 360 499

Publications de rang A

1. E. Goncalves et P. Parnaudeau, "Comparison of multiphase models for computing shock-induced bubble collapse", Int. J. of Numerical Method for Heat and Fluid Flow, accepté en octobre 2019, sous presse.

Communications dans des congrès internationaux

1. E. Goncalves et P. Parnaudeau, "SCB: An efficient and simple parallel code to simulate a 3D shock-induced bubble collapse", IUTAM Symposium on Computational Modelling of Instabilities and Turbulence in Separated Two-Phase Flows, 10-12 Juin, Dublin, 2019.
2. E. Goncalves et P. Parnaudeau, "Numerical study of a planar shock wave impacting a helium gas bubble", 14th Symp. on Num. Analysis of Fluid Flow and Heat Transfer, ICNAAM 2019, 23-26 sept. 2019, Rhodes, Grèce.
3. K. Kozhanova, E. Goncalves, Y. Hoarau et P. Parnaudeau, "Extensions of HLLC numerical scheme and its application to two-phase flows", 14th Symp. on Num. Analysis of Fluid Flow and Heat Transfer, ICNAAM 2019, 23-26 sept. 2019, Rhodes, Grèce.

Communications dans des congrès nationaux

1. E. Goncalves, Ph. Parnaudeau et Y. Hoarau, "Étude numérique de l'endommagement d'une paroi solide par le collapse d'une bulle", SHF 2019 "Machines hydrauliques et Cavitation": 6-7 novembre 2019, Sion, Suisse.

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." démarrée en décembre 2018.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Thèse financée par un projet ANR. Collaboration avec les laboratoires DynFluid (Paris) et ICUBE (Strasbourg).

53. 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 2019 : 1 583

54. Projet : 2018006

Intitulé : RIN Asterics / ANR Smiles - 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 2019 : 93 181

Publications de rang A

1. Faicel Chamroukhi and Hien D. Nguyen. Model-based clustering and classification of functional data. Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery, Dec 2018. DOI: 10.1002/widm.1298
2. Hien D. Nguyen, Faicel Chamroukhi, and Florence Forbes. Approximation results regarding the multiple-output mixture of linear experts model. Neurocomputing, doi:10.1016/j.neucom.2019.08.014, 2019
3. Faicel Chamroukhi and Bao T. Huynh. Regularized Maximum Likelihood Estimation and Feature Selection in Mixtures-of-Experts Models. Journal de la Société Française de Statistique, 160(1):57–85, March 2019.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Faicel Chamroukhi and Marius Bartcus. mixRHLP: Model-based clustering and segmentation of timeseries with changes in regime. URL https://github.com/fchamroukhi/MixFRHLP_Py. Python software

Communications dans des congrès internationaux

1. Faicel Chamroukhi, Florian Lecocq, and Hien D Nguyen. Regularized estimation and feature selection in mixtures of gaussian-gated experts models. In Research School on Statistics and Data Science, pages 42–56. Springer, July 2019.

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Bao Tuyen Huynh. Thèse de doctorat en mathématiques appliquées - statistique. Estimation and Feature Selection in High-Dimensional Mixtures-of-Experts Models. Soutenu au sein du LMNO, 2019.

Thèses en cours sur le projet

- Trung Tin Nguyen, LMNO

- Nhat Thien Pham, LMNO

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Florian Lecocq M2 SAAD : Implémentation/Transcription en R (sous forme de packages) d'algorithmes d'apprentissage non supervisés pour le clustering et la segmentation de données structurées.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- LMRS

55. 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 (STRASBOURG)

Heures.CPU 2019 : 17 489

56. 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 2019 : 234 364

57. 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 2019 : 44 307

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Zapolsky* "New atomistic approach to model phase transformation in alloys" Pacific Northwest National Laboratory, PNNL, USA, 2019 (séminaire invité).

Thèses en cours sur le projet

- Hadi Zadeh Haghighi (arrêté en Avril 2019)

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- A.G. Khachatryan (Rutgers uNiversity, USA)
- F. Danoix (GPM, Université de Rouen)

58. 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 2019 : 509 983

59. 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 - IRSEEM (SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2019 : 9 183

60. 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 - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2019 : 403 809

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

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Pascal BOUBERT

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

Heures.CPU 2019 : 158 344

62. 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 2019 : 268 792

63. Projet : 2019003**Intitulé : Étude ab-initio du mécanisme de détection de molécules gazeuses en surface des nanotubes de carbone : application capteur de gaz**

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP Caen - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2019 : 1 311

64. Projet : 2019004**Intitulé : Composés organolithiens : développement d'un protocole théorique pour la prédiction du couplage scalaire homonucléaire lithium**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2019 : 54 315

65. Projet : 2019007**Intitulé : Détermination de la structure de fibrille d'amyloïde par mesure résistive dans des nanopores coniques fonctionnalisés**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Fabien PICAUD

Laboratoire : NIT - Besançon (BESANCON)

Heures.CPU 2019 : 355 363

Publications de rang A

Un article en préparation.

Communications dans des congrès internationaux

1. Fabien Picaud (LNIT-Besançon). Study of protein confinement in order to develop functional biomimetic nanopores (French-Italian workshop : Single Nanopore for Sensing and Energy, Montpellier 2019). Oral communication
2. Nicolas Arroyo (LNIT-Besançon). Simulation of Functional Conical Nanopores in view of sensing application (French-Italian workshop : Single Nanopore for Sensing and Energy, Montpellier 2019). Oral communication
3. Nicolas Arroyo (LNIT-Besançon). Construction of Functional Conical Nanopores in view of sensing applications (Nanotech France, Paris 2019). Oral communication

Communications dans des congrès nationaux

1. Fabien Picaud (Nanomédecine, Besançon) « La simulation moléculaire : un outil prédictif pour la nanomédecine », Worskhop simulation, modélisation et calculs numériques à l'UHA (2020), Conférence invitée.

Thèses en cours sur le projet

- Nicolas Arroyo : « Capteur à base de nanopores pour la caractérisation de la taille d'agrégat d'amyloïdes »

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

Dans le cadre de ce projet, nous collaborons avec les équipes expérimentales de l'institut européen des membranes (équipe du Dr Balme) et du laboratoire de mécanismes moléculaires dans les démences neurodégénératives (Dr J. Torrent) de l'université de Montpellier.

Un contrat ANR a été obtenu en juillet 2019 sur ce sujet pour les 4 ans à venir.

Les heures de calcul octroyées nous ont permis d'optimiser les nanopores coniques fonctionnalisés dont nous aurons besoin pour détecter les différents amyloïdes le traversant.

66. Projet : 2019008

Intitulé : Modélisation numérique tridimensionnelle de la rétro diffusion d'un système radar HF pour la caractérisation de la surface océanique en domaine côtier : application au radar HF du Raz Blanchard

Famille Thématique : 4. Astronomie et géophysique

Porteur : Fayçal REJIBA

Laboratoire : M2C - Rouen - UMR 6143 (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU 2019 : 11 088

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Finco, C., 2019. Étude de l'impact simultané des propriétés électriques, diélectriques et magnétiques du sous-sol sur la mesure géophysique par méthode électromagnétique inductive dans le domaine temporel (TDEM). Thèse de doctorat, Sorbonne Université, Paris.

67. Projet : 2019009

Intitulé : LOCADYN (Localisation et sécurisation dynamique des flux de personnes, d'objets et d'informations sur les sites industriels)

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Rémi BOUTTEAU

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

Heures.CPU 2019 : 79

Stages de Master en 2019 sur le projet

- Détection et Localisation d'objets basées sur un casque de réalité augmentée, réalisé par Cyrine NABLI.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ecole Supérieure des Communications de Tunis (Sup'Com), Fethi Tlili.

68. Projet : 2019010**Intitulé : Caractérisation et modélisation des émissions rayonnées des systèmes de charge sans contact pour l'étude des couplages avec l'environnement du véhicule électrique**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Zouheir RIAH

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

Heures.CPU 2019 : 843

69. Projet : 2019011**Intitulé : Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Anthony SCEMAMA

Laboratoire : LCPQ - Toulouse - UMR 5626 (TOULOUSE)

Heures.CPU 2019 : 3 753

Communications dans des congrès nationaux

1. Anthony Scemama, Patrick Bousquet-Mélou, Marie-Sophie Cabot, Nicolas Renon ; Calculs de chimie quantique distribués entre méso-centres avec Quantum Package, JCAD 2019, Rencontres Scientifiques et Techniques du Calcul et des Données, Université de Toulouse, 9 au 11 octobre 2019.

70. Projet : 2019012**Intitulé : Modélisation du trafic routier et son environnement par un graphe spatio-temporel, extraction de patterns temporels**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Géraldine DEL MONDO

Laboratoire : LITIS (SAINT ETIENNE DU ROUVRAY)

Heures.CPU 2019 : 2570

Thèses soutenues en 2019 sur le projet

- Kamaldeep Singh Oberoi, Modélisation spatio-temporelle du trafic routier en milieu urbain, soutenue le 18-11-2019 à l'INSA de Rouen.

71. Projet : 2019013**Intitulé : Analyses génomiques et métagénomiques microbiennes**

Famille Thématique : 3. Biologie et santé

Porteur : Simon LE HELLO

Laboratoire : GRAM 2.0 (ROUEN CEDEX 5)

Heures.CPU 2019 : 4 145

72. Projet : 2019016**Intitulé : Approche théorique de la dégradation thermo-oxydante des réseaux polymères époxy**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent TOGNETTI

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2019 : 180 414

73. Projet : 2019017

Intitulé : Study of the reaction mechanism of the Cu-mediated trifluoromethylation reaction of acrylamide by C-H bond activation

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2019 : 712 672

74. Projet : 2019018

Intitulé : Highly-efficient red-emitting phosphors based on non-rare earth multicomponent oxides

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Julien CARDIN

Laboratoire : CIMAP Caen - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2019 : 22 950

Le projet a commencé très tardivement en 2019 et n'a pas encore donné lieu à des publications.

75. Projet : 2019019

Intitulé : Décomposition par attributs des inégalités de revenu : le genre et la race impactent les inégalités aux Etats-Unis

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

Porteur : Isabelle LEBON

Laboratoire : CREM UMR 6211 (CAEN)

Heures.CPU 2019 : 8 347

76. Projet : 2019902

Intitulé : ExModelo

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

Porteur : Sébastien REY-COYREHOURCQ

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

Heures.CPU 2019 : 125 377

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Support à l'École d'été Ex Modelo (exploration des modèles de simulation) organisée par l'Institut des Systèmes Complexes (ISC-PIF) - CNRS du 23 au 28 juin 2019.

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

2. RNMM : Plateforme PISSARO

Intitulé : Analyse protéomique

Responsable : Pascal COSETTE

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

Publications de rang A

1. Breton J, Legrand R, Achamrah N, Chan P, do Rego JL, do Rego JC, Coëffier M, Déchelotte P, Fetissov SO. Proteome modifications of gut microbiota in mice with activity-based anorexia and starvation: Role in ATP production. *Nutrition*. 2019 Nov - Dec;67-68:110557. doi: 10.1016/j.nut.2019.110557. Epub 2019 Aug 5. PMID:31563744
2. Borrel V, Gannesen AV, Barreau M, Gaviard C, Duclairoir-Poc C, Hardouin J, Konto-Ghiorgi Y, Lefeuvre L, Feuilloley MGJ. Adaptation of acneic and non acneic strains of *Cutibacterium acnes* to sebum-like environment. *Microbiologyopen*. 2019 8:e00841.
3. Cambronel M, Tortuel D, Biaggini K, Maillot O, Taupin L, Réhel K, Rincé I, Muller C, Hardouin J, Feuilloley M, Rodrigues S, Connil N. Epinephrine affects motility, and increases adhesion, biofilm and virulence of *Pseudomonas aeruginosa* H103. *Sci Rep*. 2019 Dec 27;9(1):20203. doi: 10.1038/s41598-019-56666-7.
4. Cardon F, Pallisse R., Bardor M., Caron A., Vanier J., Ele Ekouna J.P., Lerouge P., Boitel-Conti M. and Guillet M. (2019) 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*. (2):505-516. doi: 10.1111/pbi.12994.
5. Corbière A, Vaudry H, Chan P, Walet-Balieu ML, Lecroq T, Lefebvre A, Pineau C, Vaudry D., Strategies for the Identification of Bioactive Neuropeptides in Vertebrates., *Front Neurosci*. 2019 Sep 18;13:948. doi: 10.3389/fnins.2019.00948. eCollection 2019. Review.
6. Gannesen AV, Zdorovenko EL, Botchkova EA, Hardouin J, Massier S, Kopitsyn DS, Gorbachevskii MV, Kadykova AA, Shashkov AS, Zhurina MV, Netrusov AI, Knirel YA, Plakunov VK, Feuilloley MGJ. Composition of the Biofilm Matrix of *Cutibacterium acnes* Acneic Strain RT5. *Front Microbiol*. 2019 Jun 21;10:1284. doi: 10.3389/fmicb.2019.01284.
7. Gaviard C, Cosette P, Jouenne T, Hardouin J. LasB and CbpD Virulence Factors of *Pseudomonas aeruginosa* Carry Multiple Post-Translational Modifications on Their Lysine Residues. *J Proteome Res*. 2019 18, 923-933.
8. 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*. 2019 Jan 4;18(1):478-492. doi: 10.1021/acs.jproteome.8b00793. Epub 2018 Nov

9. Gossart A, Letourneur D, Gand A, Regnault V, Ben Mlouka MA, Cosette P, Pauthe E, Ollivier V, Santerre JP. Mitigation of monocyte driven thrombosis on cobalt chrome surfaces in contact with whole blood by thin film polar/hydrophobic/ionic polyurethane coatings. *Biomaterials*.
10. Kadri S, El Ayed M, Cosette P, Jouenne T, Elkhaoui S, Zekri S, Limam F, Aouani E, Mokni M. Neuroprotective effect of grape seed extract on brain ischemia: a proteomic approach. *Metab Brain Dis*. 2019 Jun;34(3):889-907.
11. Lamort AS, Hamon Y, Czaplowski C, Gieldon A, Seren S, Coquet L, Lecaille F, Lesner A, Lalmanach G, Gauthier F, Jenne D, Korkmaz B. Processing and maturation of cathepsin C zymogen: a biochemical and molecular modeling analysis. *International Journal of Molecular Sciences*, 2019, 20, 4747; doi:10.3390/ijms20194747.
12. Lequerré T, Rottenberg P, Derambure C, Cosette P, Vittecoq O. Predictors of treatment response in rheumatoid arthritis. *Joint Bone Spine*. 2019 Mar;86(2):151-158.
13. Macek B, Forchhammer K, Hardouin J, Weber-Ban E, Grangeasse C, Mijakovic I. Protein post-translational modifications in bacteria. *Nature Review in Microbiology* 17, 651-664.
14. Mechkarska M, J. Kolodziejek, L. Coquet, J. Leprince, T. Jouenne, N. Nowotny, J. M. Conlon., Peptidomic analysis of the host-defense peptides in skin secretions of *Rana graeca* provides insight into phylogenetic relationships among Eurasian *Rana* species. *Comparative Biochemistry and Physiology, Part D*, 2019, 228-234.
15. Plancot B., Gügi B., Mollet J.-C., Loutelier-Bourhis C., Lerouge P, Follet-Gueye M.L., Vicré M., Alfonso C., Nguema-Ona E., Bardor M.* and Driouich A.* (2019) Desiccation tolerance in plants: Structural characterization of the cell wall hemicellulosic polysaccharides in three *Selaginella* species. *Carbohydrate polymers*. Volume 208, Pages 180-190. doi: 10.1016/j.carbpol.2018.12.051. * Equal contribution of the authors.
16. Renault K, Guillou C, Renard PY, Sabot C, Investigation of tetrazine reactivity towards C-nucleophiles: pyrazolone-based modification of biomolecules, *Org Biomol Chem*. 2019 Jan 2;17(2):388-396
17. Soussi S, Essid R, Hardouin J, Gharbi D, Elkahoui S, Tabbene O, Cosette P, Jouenne T, Limam F. Utilization of Grape Seed Flour for Antimicrobial Lipopeptide Production by *Bacillus amyloliquefaciens* C5 Strain. *Appl Biochem Biotechnol*. 2019 Apr;187(4):1460-1474.
18. Tahrioui A, Duchesne R, Bouffartigues E, Rodrigues S, Maillot O, Tortuel D, Hardouin J, Taupin L, Groleau MC, Dufour A, Déziel E, Brenner-Weiss G, Feuilloley M, Orange N, Lesouhaitier O, Cornelis P, Chevalier S. Extracellular DNA release, quorum sensing, and PrrF1/F2 small RNAs are key players in *Pseudomonas aeruginosa* tobramycin-enhanced biofilm formation. *NPJ Biofilms Microbiomes*. 2019 May 23;5:15. doi: 10.1038/s41522-019-0088-3.
19. Zhang P, Burel C., Plasson C., Kiefer-Meyer M.C., Ovide C., Gügi B., Wan C., Teo G., Mak A., Song Z., Driouich A., Lerouge P and Bardor M (2019) Characterization of a GDP-Fucose Transporter and a Fucosyltransferase Involved in the Fucosylation of Glycoproteins in the Diatom *Phaeodactylum tricorutum*. *Front in Plant Science* 10: 610. doi: 10.3389/fpls.2019.00610. eCollection 2019.

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 Héléne Lavanant, Laurent Joubert et Vincent Tognetti : voir projets n° 2013005, 2018009, 2018012