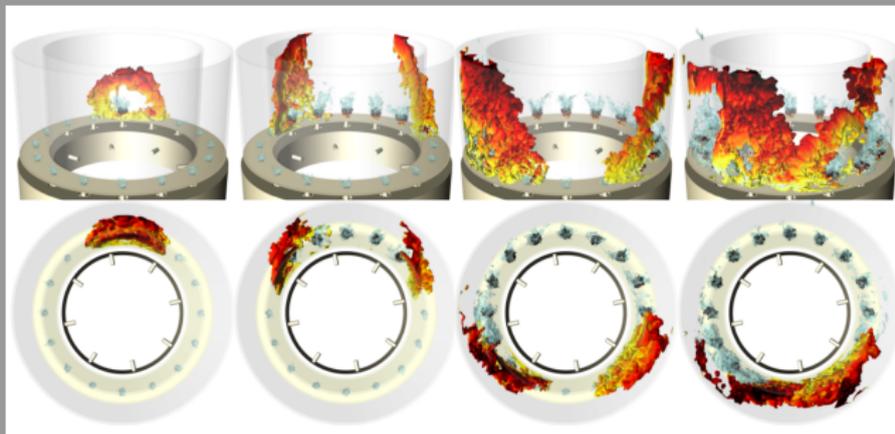


Mésocentre de Centrale Paris

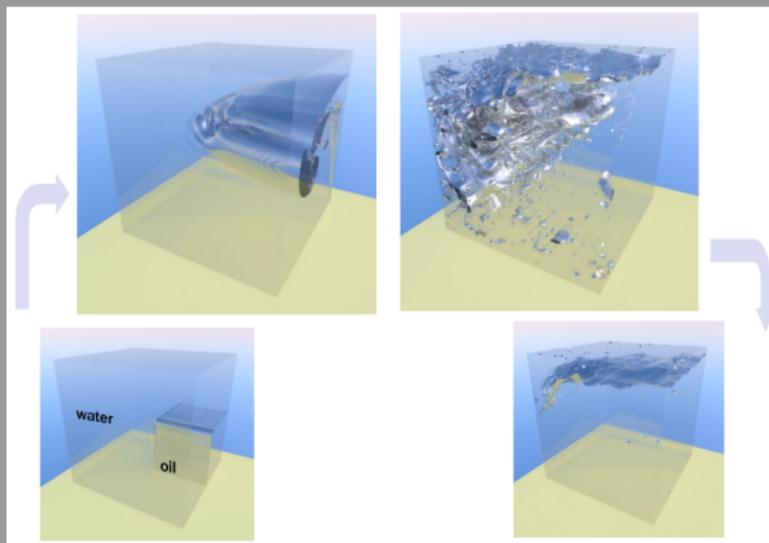
<http://www.mesocentre.ecp.fr/>



- ▶ Quatre instants successifs de la séquence d'allumage d'une chambre de combustion à 16 injecteurs.
Calculs de test à échelle réduite et post-traitement/visualisation sur le mésocentre, calcul complet sur Calculateur Curie (1.5 million d'heures sur 6144 coeurs).
Code AVBP (Cerfacs/IFPEN)
- ▶ EM2C
- ▶ **dizaines de milliers d'heures / 156 coeurs**

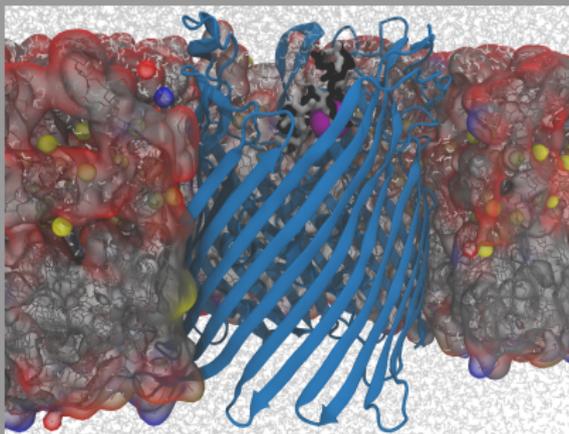
CALMIP Toulouse

<http://www.calmip.univ-toulouse.fr>



- ▶ Oil/Water Phase inversion. Maillage = 512^3
- ▶ Code JADIM - Institut Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)
- ▶ **180 000 heures / 2048 coeurs**

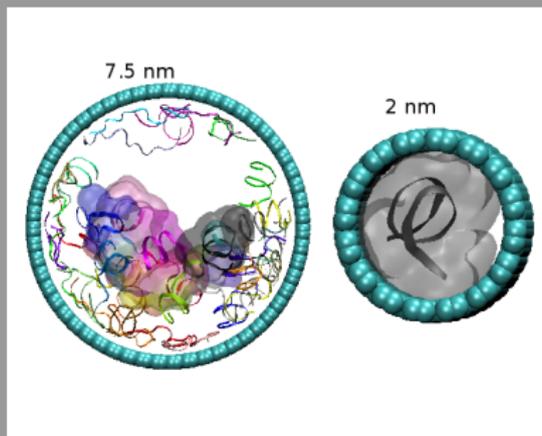
<http://www.mecs.u-picardie.fr>



- ▶ Modélisation par dynamique moléculaire de l'absorption de fer par la bactérie *Pseudomonas aeruginosa*, responsable d'infections nosocomiales, afin de bloquer cette absorption et d'éviter ainsi la propagation de ces infections.
150 000 atomes
- ▶ **100 0000 heures**

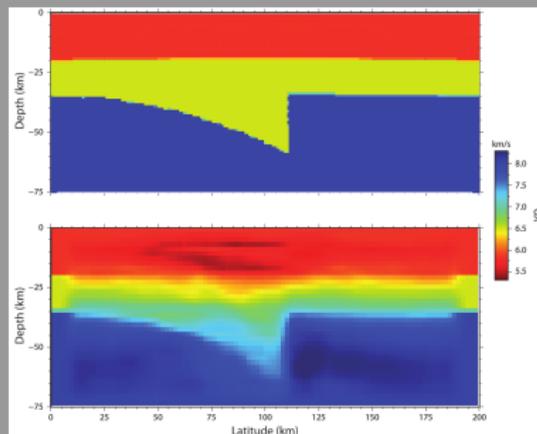
Mésocentre de Franche-Comté

<http://meso.univ-fcomte.fr>

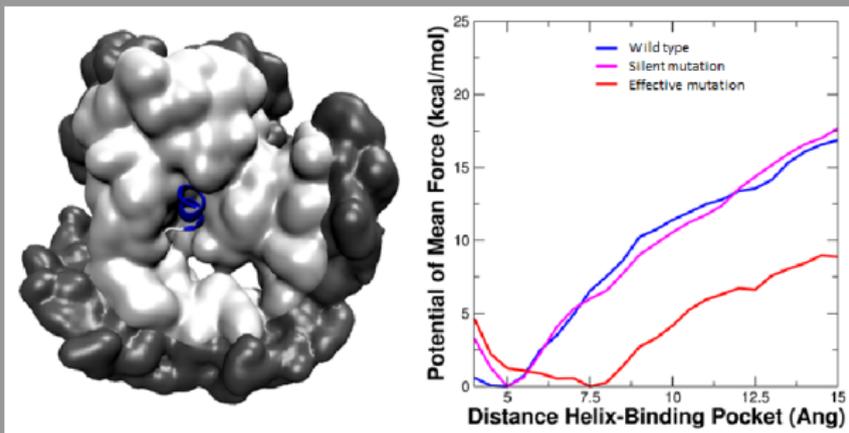


- ▶ Optimisation du diamètre d'un nanotube de carbone pour l'insertion d'une protéine canal (gramicidine A).
Calculs réalisés et publiés avec NAMD
- ▶ **160 000 heures**

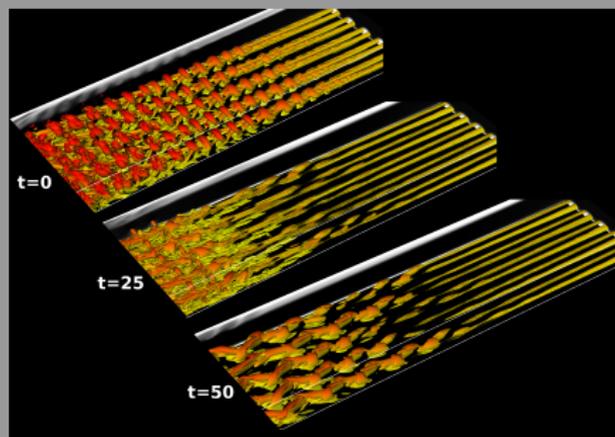
<http://cbrl.up.univ-mrs.fr/~mesocentre>



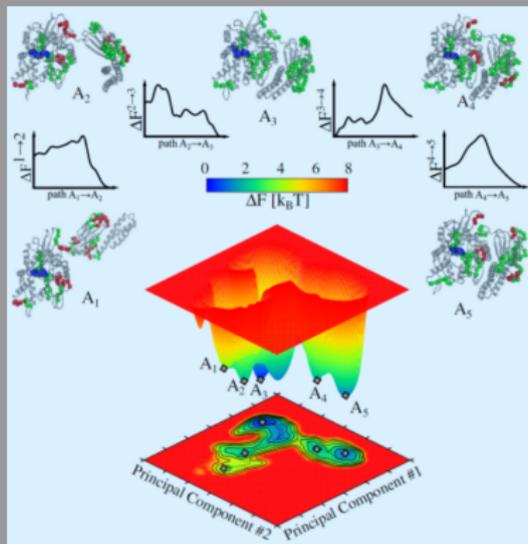
- ▶ Reconstruction acoustique en aveugle par inversion de la forme d'onde acoustique complète et à très haute fréquence (en bas) d'un modèle exact donné (en haut). Logiciel parallèle MPI haute-performance SPECFEM3D
- ▶ CNRS + AMU + Ecole Centrale
- ▶ **200 000 heures**



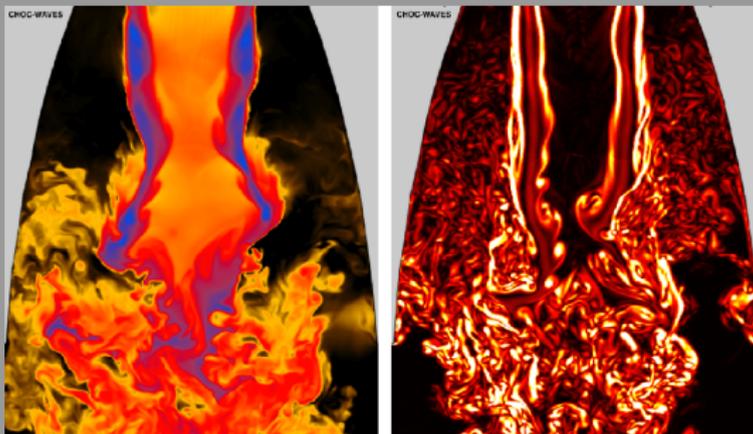
- ▶ Enhanced design of an enzymatic photoreceptor.
Thermodynamics of an essential step of the photoresponse, i.e., the unbinding of an α -helix (shown in blue) from the active site (shown in white).
Free-energy profile for this process for the wild type protein (blue line) and with an effective mutation (red line) that would potentially improve the photo-response
- ▶ LBMC



- ▶ Visualisation in-situ de l'écoulement transitionnel dans la région d'entrée d'un canal plan. L'amplitude de la perturbation a été modifiée (diminuée par 2) entre le temps 25 et 50 et la transition passe d'un mode variqueux à un mode sinucieux. Film réalisé in-situ, plus de 3000 images (27To).
- ▶ UCBL-Méca + LMFA
- ▶ **2048+512 coeurs**



- ▶ Dynamique conformationnelle et paysage d'énergie libre des protéines chaperonnes Hsp70. Applications thérapeutiques potentielles dans le cancer et la maladie d'Alzheimer. Dynamique moléculaire : 142000 atomes, temps simulé 3 μ s
- ▶ ICB-PHaP
- ▶ **2 millions heures**

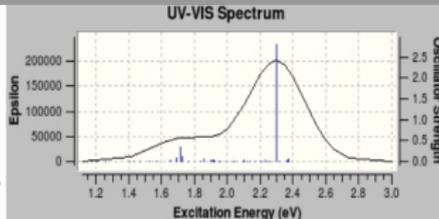
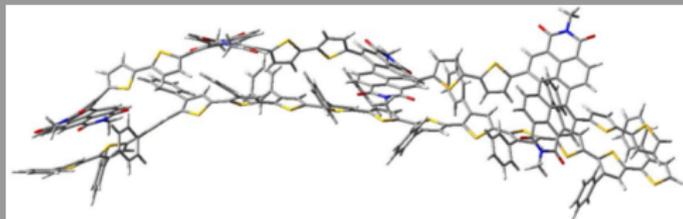


- ▶ Turbulence en sortie d'une tuyère de moteur-fusée fonctionnant en régime décollé avec un rapport de compression de 10 : champs instantanés de température (à gauche) et de vorticit  (à droite).

Calcul LES avec 166 Millions de Points

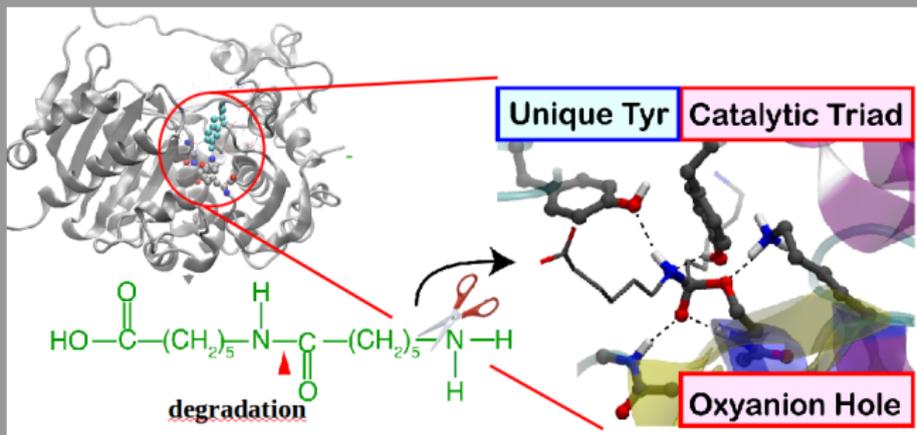
- ▶ CORIA
- ▶ **200 000 heures / 568 coeurs**

Mésocentre de l'université de Cergy-Pontoise

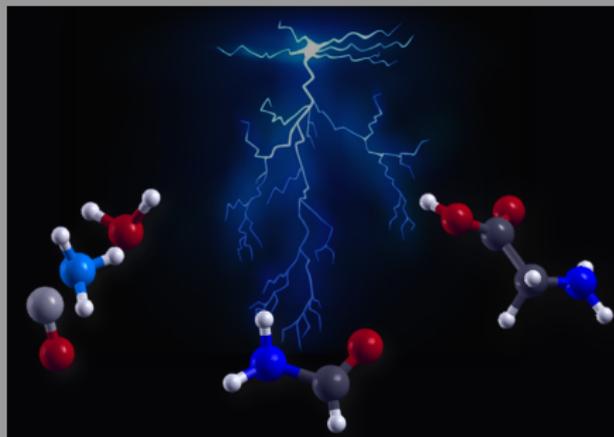


- ▶ Modèles de polymères donneur et accepteur d'électrons, utilisés dans certaines cellules photovoltaïques. Organisation structurale possible à l'interface donneur-accepteur. Calcul du spectre d'absorption optique.
- ▶ **15 000 heures**

<https://hpc.unistra.fr/>



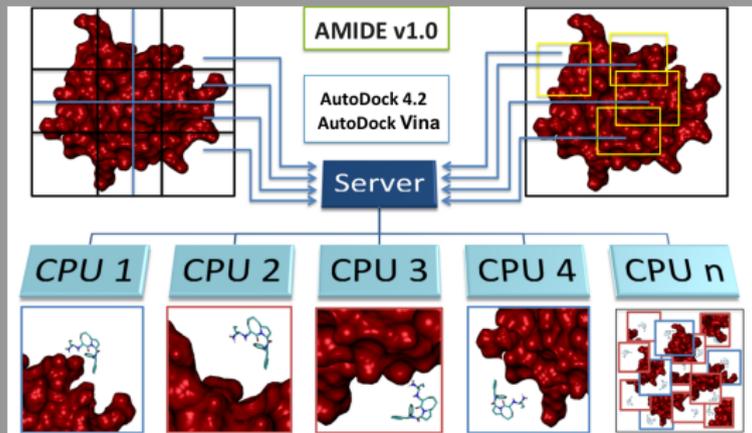
- ▶ Nylon-6 byproduct-degrading enzyme. This specific enzyme promotes cleavage reactions in unnatural amide compounds. This, clearly discloses new perspectives in environmentally sustainable waste disposal.
- ▶ **150 000 heures**



- ▶ Expérience de Miller à l'ordinateur, ou comment le champs électrique induit la synthèse de la glycine à partir de molécules simples, telles l'eau, l'ammoniac, le méthane, le monoxyde de carbone, via l'intermédiaire du formamide.
Dynamique moléculaire et métadynamique ab initio, 250 ps de trajectoires. 1 million d'heures au total
- ▶ **100 000 heures**

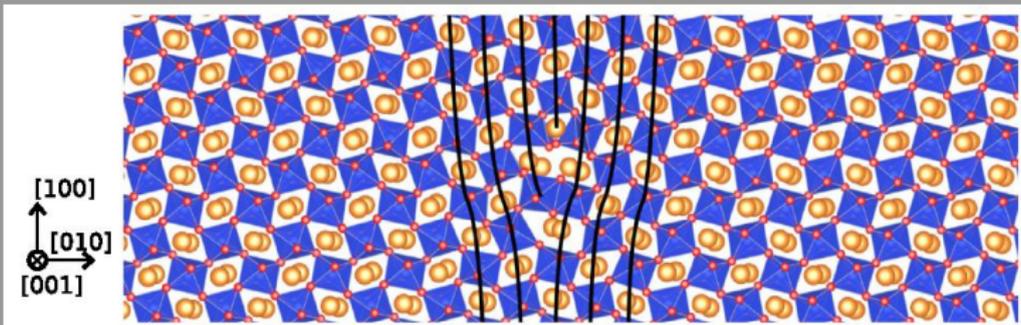
Maison de la Simulation Champagne-Ardenne MaSCA

<http://romeo.univ-reims.fr>



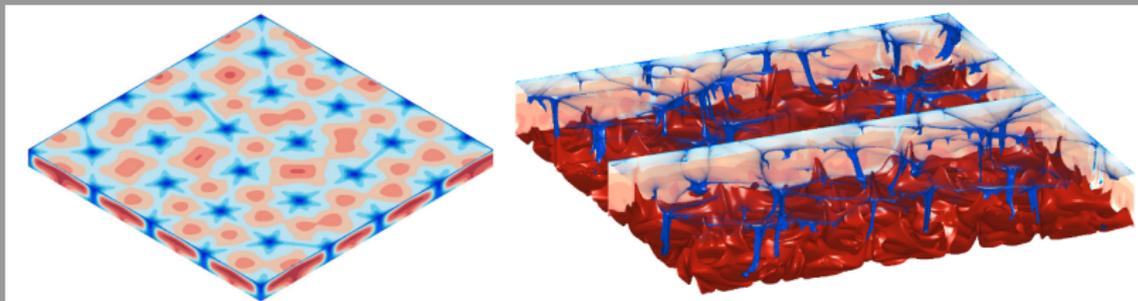
- ▶ AMIDE : "Automatic Molecular Inverse Docking Engine".
Développement d'une méthode de distribution de calculs de docking moléculaire pour le criblage inverse de protéines à haut débit
- ▶ MEDyC
- ▶ **3 000 000 heures / 2 080 coeurs**

<http://calcul-wiki.univ-lille1.fr>

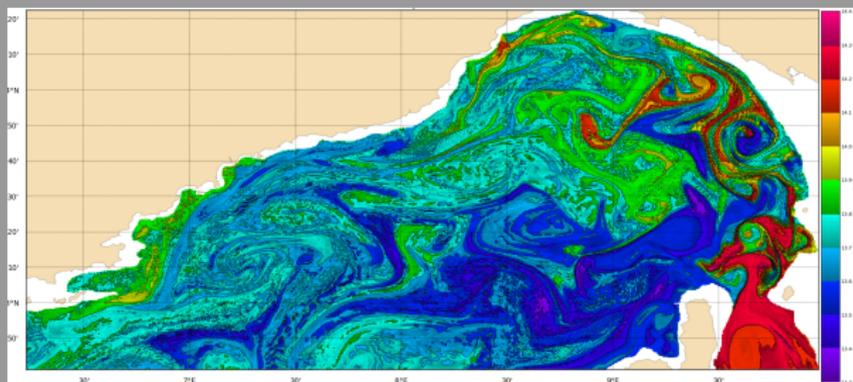


- ▶ Atomic configuration reached under an applied pressure of 80 GPa of an edge dislocation of Burgers vector $[010]$ in MgSiO₃ perovskite. Black lines highlight the locking configuration so-called climb-dissociation.
Code LAMMPS
- ▶ UMET

<http://webpublix.ipgp.fr/rech/scp/>



- ▶ Motif en étoile de la convection thermique dans le cas d'un fluide possédant uniquement des sources de chaleur internes (gauche). Effets de la transition de l'état de spin du fer dans le ferropériclase présent dans la manteau inférieur sur la dynamique du manteau terrestre (droite)
- ▶ IPGP
- ▶ **55 000 heures / 64-256 coeurs**



- ▶ Modélisation réaliste du mélange des masses d'eau à la sortie du Canal de Corse. Deux masses d'eau (les courant Est/Ouest-Corse) présentent pour une densité identique des caractéristiques différentes en salinité et température faisant de cette dernière un traceur passif témoin de l'activité méso-échelle. In situ, cela se traduit par un "feuilletage" des masses d'eau. Code MARS3D.
- ▶ IFREMER/DYNECO
- ▶ **65 000 heures / 128 coeurs**