

Deux supercalculateurs mis à disposition des scientifiques par la CPU, le CEA, Atos et Genci

Paris - Publié le mardi 28 avril 2020 à 14 h 33 - Actualité n° 181813

La [CPU](#), le [CEA](#), [Atos](#) et [Genci](#) annoncent, le 28/04/2020, mettre à disposition deux supercalculateurs des scientifiques européens afin de lutter contre le Covid-19 grâce au calcul de haute performance.

« Deux des supercalculateurs les plus puissants de France, Joliot-Curie, opéré au [TGCC](#) du CEA, et Occigen au [Cines](#) (centre national de calcul de la CPU) fournissent depuis quelques semaines un accès prioritaire d'une grande partie de leurs ressources de calcul aux équipes de recherche européennes participant à la lutte contre le Covid-19 », indiquent-ils. Ces supercalculateurs sont « basés sur la plateforme BullSequana d'Atos », précisent les acteurs.

Les équipes de recherche travaillent notamment sur :

- « des études épidémiologiques de la propagation du Covid-19 ;
- des travaux visant à comprendre la structure moléculaire et le comportement du virus ou encore à cribler massivement des protéines et tester des potentielles futures molécules qui permettront d'accélérer la recherche d'un vaccin efficace ».

« Plus de 20 projets scientifiques liés au Covid-19 bénéficient aujourd'hui de la puissance de calcul des trois supercalculateurs », avec la machine Jean Zay de l'[Idris](#), indique l'agence nationale du calcul intensif, Genci. Et ce, « après seulement quelques semaines d'ouvertures des machines en mode "urgent computing", grâce au support technique des équipes locales des trois centres concernés ».

Les projets en cours dans les deux supercalculateurs

Joliot-Curie

Dans le cadre de l'appel à projets Prace (*Partnership for advanced computing in Europe*), les scientifiques européens ont recours au supercalculateur Joliot-Curie du [CEA](#) pour mettre en œuvre trois projets :

- « Le premier projet simule les protéines fonctionnelles du virus Sars-Cov-2, constituées de millions d'atomes, pour comprendre les **mécanismes de l'infection virale** afin de développer une **approche**

thérapeutique.

- Le second projet utilise le criblage informatique, une technique bien connue utilisée dans la création de médicaments, pour **identifier et améliorer les inhibiteurs de protéines virales**, notamment des molécules capables de bloquer le Sars-Cov-2. Ce projet pourrait aider au développement d'un **traitement** qui ralentirait l'épidémie.
- Le troisième projet combine l'étude de l'**effet des médicaments antipaludiques** sur divers types de rythme cardiaque humain en tenant compte d'une variété de comorbidités qui peuvent être présentes dans la population infectée. Il utilise en parallèle **la dynamique des fluides computationnelle** pour mieux comprendre le complexe hémodynamique associée au syndrome Nord-Sud ».

Occigen

Parmi les projets sur le Covid-19 qui utilisent la machine Occigen, les chercheurs effectuent des simulations pour étudier plus en détail les **enzymes hélicases Sars-Cov-2**, afin de mieux comprendre la constitution génétique du virus.

Un autre projet, s'appuyant sur des méthodes de criblage informatique, teste virtuellement plus d'un 1,5 milliard de molécules dont mille seront synthétisées et testées en laboratoire pour leur capacité à **inhiber le Sars-Cov-2**.

Les acteurs indiquent que « l'ampleur de ces tests virtuels est sans précédent et n'est rendue possible que grâce à la puissance de calcul de supercalculateur Occigen », précisant qu'une équipe dédiée d'ingénieurs support est mobilisée sur ces deux projets pour accompagner les chercheurs.

Conférence des présidents d'université



Association qui réunit une centaine de membres votant (présidents d'université, directeurs d'écoles normales supérieures, d'INP, d'INSA, administrateurs généraux) et des membres associés.

Elle s'appuie sur l'Amue (Agence de mutualisation des universités et établissements) qui contribue à l'élaboration d'une offre logicielle et à la formation des personnels de l'enseignement supérieur.

Conférence des présidents d'université

103 boulevard Saint-Michel
75005 Paris - FRANCE



Fiche n° 1765, créée le 05/05/14 à 12:19 - MàJ le 13/05/19 à 11:29

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives



Le CEA est un organisme de recherche dont la mission est de développer toutes les applications issues des sciences de l'atome.

Catégorie : Organisme de recherche publique

Entité(s) affiliée(s) :

- CEA Leti
- CEA List
- INSTN - CEA

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

25 rue Leblanc
75015 Paris - FRANCE



Fiche n° 1958, créée le 05/05/14 à 12:27 - MàJ le 07/04/15 à 10:01

© News Tank 2020 - Code de la propriété intellectuelle : « La contrefaçon (...) est punie de trois ans d'emprisonnement et de 300 000 euros d'amende. Est (...) un délit de contrefaçon toute reproduction, représentation ou diffusion, par quelque moyen que ce soit, d'une oeuvre de l'esprit en violation des droits de l'auteur. »