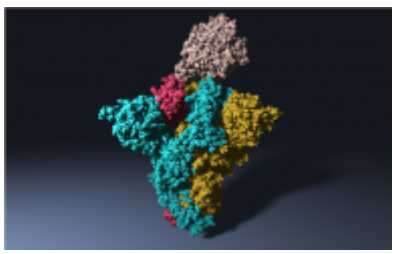
LA LUTTE CONTRE LE COVID-19 AU COEUR DES LABOS DU CNAM

Les chercheur·euse·s du monde du calcul haute performance livrent bataille au COVID-19 grâce au supercalculateur Jean Zay et parmi eux, une équipe du labo GBCM du Cnam !

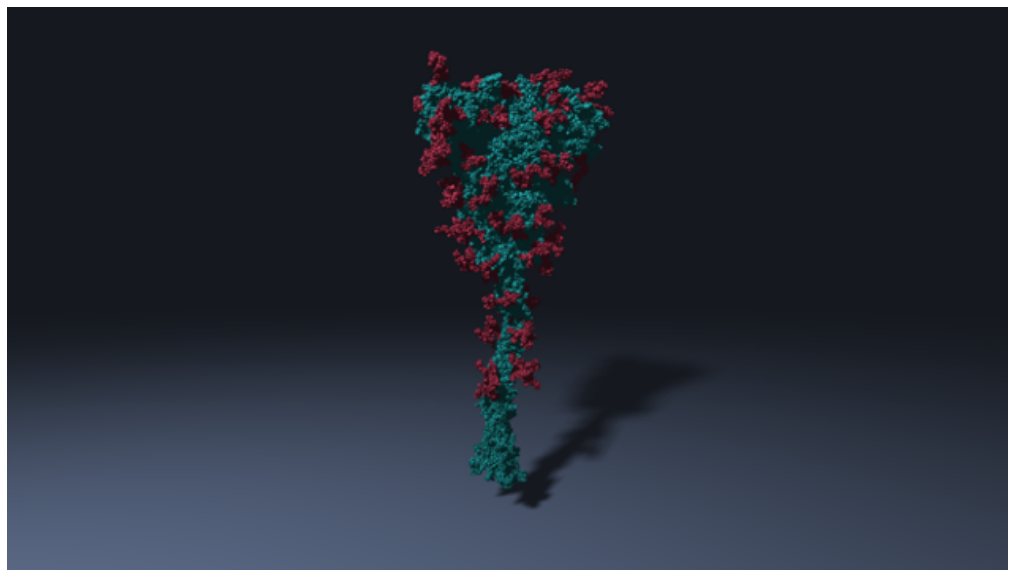
En mars 2020, Sorbonne Université à Paris s'allie à plusieurs chercheur.euse.s en France et dans le monde pour étudier la structure moléculaire du COVID-19 en collaboration avec l'Institut Pasteur, un institut leader mondial dans le domaine des maladies infectieuses émergentes. Parmi ces chercheur.euse.s, l'équipe de Matthieu Montes, enseignant-chercheur au laboratoire Génomique, bioinformatique et chimie moléculaire (GBCM) du Cnam.

Les chercheurs du monde du calcul haute performance livrent bataille au COVID-19 grâce au supercalculateur Jean Zay

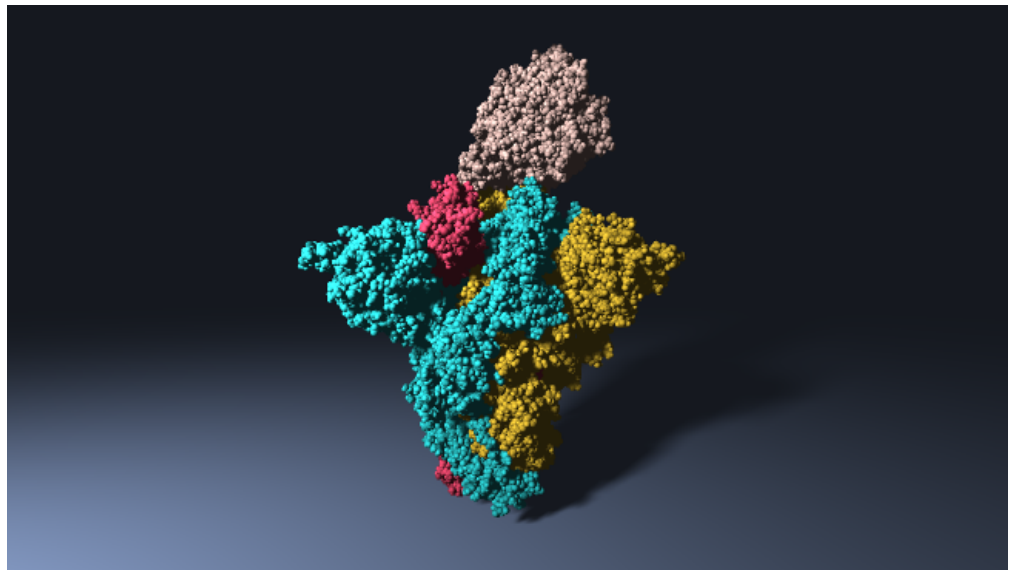


En mars 2020, Sorbonne Université à Paris s'allie à plusieurs chercheurs en France et dans le monde pour étudier la structure moléculaire du COVID19 en collaboration avec l'Institut Pasteur, un institut leader mondial dans le domaine des maladies infectieuses émergentes.

Pour mieux comprendre la structure moléculaire du virus, sous l'impulsion de Jean-Philip Piquemal, des scientifiques du monde entier, issus de six institutions renommées (Sorbonne Université, Conservatoire national des arts et métiers, Université de Limoges, Université du Texas à Austin, Université du Nord-Texas et Université de Washington à Saint Louis), collaborent pour simuler et cibler les protéines fonctionnelles du virus COVID19. Ces modèles informatiques aideront les scientifiques à concevoir de nouveaux médicaments capables de neutraliser le coronavirus en l'empêchant de pénétrer dans les cellules humaines ou en bloquant ses mécanismes internes.



Représentation du trimère la protéine Spike (S) qui joue un rôle-clé dans l'entrée du virus Covid-19 dans la cellule cible humaine. Image issue de simulations HPC réalisées à Sorbonne Université à l'aide de la machine Jean Zay et du logiciel Tinker-HP (crédit image : Université de Limoges/CNAM, visualiseur VTX).



Représentation de l'interaction de la protéine Spike (S) avec le récepteur ACE-2 de la cellule-cible humaine (en gris). Image issue de simulations HPC réalisées à Sorbonne Université à l'aide de la machine Jean Zay et du logiciel Tinker-HP (crédit image : Université de Limoges/CNAM, visualiseur VTX).

Les chercheurs s'appuient sur un accès prioritaire (urgent computing) à Jean Zay, le supercalculateur convergé HPC et IA (16 PFlop/s) le plus performant en Europe et sur l'approche multi-GPU massivement parallèle la plus rapide existante pour les simulations de dynamique moléculaire de nouvelle génération #Tinker-HP.

Optimisée par HPE, IDRIS et les développeurs de l'application, la solution logicielle Tinker-HP, offre d'ores et déjà un environnement de calcul haute performance permettant d'accéder à la modélisation de systèmes complexes comptant jusqu'à des millions d'atomes. Il s'agit de l'approche la plus rapide actuellement opérationnelle et disponible pour réaliser des simulations de dynamique moléculaire de pointe avec un modèle d'énergie polarisable à haute résolution permettant de modéliser les mécanismes d'infection virale dans les détails les plus réalistes.



(Crédits Cyril FRESILLON / IDRIS / CNRS Photothèque)

Le supercalculateur Jean Zay conçu par HPE (Hewlett Packard Enterprise) et inauguré en janvier 2020 a été acquis par GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif), l'agence française de calcul intensif, et est exploité au sein de l'IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique), le plus grand centre d'Intelligence Artificielle et de simulation numérique du CNRS (Centre National de Recherche Scientifique).

Équipe du Prof. J-P Piquemal (ERC EMC2, grant agreement No 810367), LCT, UMR 7616 CNRS, Sorbonne Université, Paris, France

Équipe du Prof. M. Montes (ERC ViDock, grant agreement 640283), GBCM, CNAM, Hésam Université, Paris, France

Équipe du Dr. M. Maria, XLIM,UMR 7252 CNRS, Université de Limoges, France

Équipe du Dr. M. Nilges, Structural Bioinformatics, UMR 3528 CNRS, Institut Pasteur, Paris, France

Équipe du Prof. P. Ren, Dept of Biomedical Engineering, University of Texas at Austin, TX, USA

Équipe du Prof. J. W. Ponder, Dept of Chemistry, Washington University in Saint Louis, MO, USA

Équipe du Prof. G. A. Cisneros, Dept of Chemistry, University of North Texas, TX, USA

+ L'information en ligne sur le site de Genci



7 avril 2020

Genci

La calcul intensif au service de la connaissance

En charge de mettre à disposition des moyens de calcul et de traitement de données massives performants, GENCI a pour mission, au niveau national et européen, de favoriser l'usage du calcul intensif associé à l'Intelligence Artificielle au bénéfice des communautés de recherche académique et industrielle.

➕ En savoir plus

L'équipe Bioinformatique structurale du laboratoire GBCM

Le laboratoire GBCM, Génomique, bioinformatique et chimie moléculaire, compte trois équipe de recherche. L'équipe de bioinformatique structurale, modélisation moléculaire et drug design (M2D2) est spécialisée dans l'analyse des interactions protéine-protéine ou protéine-petite molécule. Depuis sa création, l'équipe développe et utilise des méthodes de modélisation moléculaire et de criblage in silico et les applique à l'identification de molécules à visée thérapeutique pour cibler les interactions protéine-protéine. Elle a, depuis, étendu son champ d'activités. L'équipe M2D2 a développé de nombreuses collaborations, internes au Cnam avec les équipes ILJ et MSDMA du Cedric et le laboratoire Satie et nationales avec notamment des équipes Inserm de l'institut Imagine et de Paris Descartes, de l'université de Nice Sophia Antipolis/CNRS, le LCT de Sorbonne Universités/CNRS et le Liris de l'Insa/CNRS/Lyon. Son savoir-faire repose sur différentes méthodes de modélisation moléculaire des interactions protéine-protéine et protéine-petite molécule, des méthodes de criblage structure ou ligand-based et de méthodes de représentation et de visualisation de la structure et des propriétés des protéines. ➕ **En savoir plus**

Clin d'oeil au Cray-2 conservé au musée des Arts et Métiers, supercalculateur utilisé dans les années 80!

Issu du supercalculateur Cray-1 conçu en 1976 par l'ingénieur américain Seymour Cray, le Cray-2 est au moment de sa sortie l'ordinateur le plus puissant au monde, le second à dépasser la barre du gigaflop (un milliard d'opérations par seconde), un an après le M-13 russe.
Il met en œuvre le principe du calcul vectoriel, selon lequel une seule instruction provoque une cascade de calculs effectués simultanément par plusieurs processeurs. Il dispose d'une architecture très compacte en forme de C pour diminuer les distances entre composants et augmenter la vitesse de calcul. Pour dissiper la chaleur produite par ses centaines de milliers de puces, l'ensemble baigne dans un liquide conducteur de chaleur et isolant, refroidi par de l'eau. Le Cray-2 était l'outil idéal des gros centres de calcul scientifique pour les domaines de la météorologie ou de la dynamique des fluides. Cet exemplaire a été utilisé à l'École polytechnique de 1985 à 1993. *Lionel Dufaux, responsable des collections Énergie et Transports au musée des Arts et Métiers.* ➕ **En savoir plus**