



Press release

GENCI, le CEA, la CPU et Atos arment les scientifiques européens pour lutter contre le COVID-19 grâce au Calcul Haute Performance

Paris, le 28 avril 2020 - Deux des supercalculateurs les plus puissants de France, Joliot-Curie, opéré au TGCC (Très Grand Centre de Calcul 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 à des équipes de recherche européennes participant à la lutte contre le COVID-19. Il s'agit notamment d'études épidémiologiques de la propagation du COVID-19, de 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 contre le SARS-CoV-2. Ces deux supercalculateurs sont basés sur la plateforme BullSequana d'Atos, leader mondial de la transformation numérique.

L'agence nationale du calcul intensif GENCI indique ainsi que plus de 20 projets scientifiques liés au COVID-19 bénéficient aujourd'hui de la puissance de calcul des trois supercalculateurs nationaux, dont font partie Joliot-Curie et Occigen (avec la machine Jean Zay à l'IDRIS), et ce, après seulement quelques semaines d'ouverture des machines en mode « urgent computing », grâce surtout au support technique des équipes locales des trois centres concernés.

Joliot-Curie au Très Grand Centre de Calcul du CEA

Joliot-Curie, avec ses 22 pétaflop/s, est le supercalculateur le plus puissant en France dédié à la recherche académique et industrielle ouverte. Dans le cadre de l'infrastructure PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), les scientifiques européens ont recours au supercalculateur Joliot-Curie pour mettre en œuvre à ce jour trois projets COVID-19 à grande échelle dans le cadre de l'appel FastTrackCOVID-19 de PRACE.

Ainsi, 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.

Un 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 de COVID-19.

Enfin, un 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 (CFD) pour mieux comprendre le complexe hémodynamique associé au syndrome Nord-Sud.

En complément de ces projets FastTrack COVID-19 de PRACE, des équipes de chercheurs réalisent des simulations préparatoires sur des allocations nationales prioritaires des capacités de calcul du supercalculateur Joliot-Curie. À titre d'exemple les travaux de chercheurs de l'Institut de recherche interdisciplinaire de Grenoble (IRIG) et de l'Institut Joliot du CEA qui travaillent sur la recherche d'inhibiteurs au COVID-19. La protéine SPIKE permet au virus de pénétrer dans la membrane de la cellule. Grâce à la simulation de la structure électronique de la protéine et de l'inhibiteur associé, il est ainsi possible de fournir des informations précises sur la force de l'inhibition mais aussi des informations structurales pour identifier les acides aminés concernés et leurs polarités associées. Ces premiers travaux ont permis de valider l'approche et ainsi de déposer un projet de 15 millions d'heures dans le cadre de PRACE pour étudier les facteurs microscopiques et thermodynamiques favorisant ou non l'interaction entre la principale protéase SARS-CoV-2 et de nouveaux inhibiteurs prometteurs. L'objectif est de construire à terme un outil *ab initio in silico* permettant d'estimer avec précision les propriétés d'interaction des protéines interagissant avec tout type de familles de ligands.

Occigen au CINES

Parmi les projets 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.

L'ampleur de ces tests virtuels est sans précédent et n'est rendue possible que grâce à la puissance de calcul du supercalculateur Occigen, utilisant actuellement 40 000 cœurs par jour, soit environ la moitié de la capacité globale d'Occigen constituée de 86 000 cœurs

pour une puissance crête de 3,5 pétaflop/s. Une équipe dédiée d'ingénieurs support en HPC est mobilisée sur ces deux projets pour accompagner au mieux les chercheurs.

Stéphane Requena, Directeur Technique et innovation de GENCI, a déclaré :

« Avec les 3 centres de calcul nationaux, nous sommes fiers de mettre à disposition des chercheurs nos puissantes capacités de calcul haute performance et d'Intelligence Artificielle pour contribuer à la lutte contre le COVID-19. Nous espérons que les résultats obtenus par la vingtaine de projets calculant sur nos systèmes aideront les chercheurs et les scientifiques à mieux comprendre le virus et, à terme, les aideront à développer un traitement pour arrêter cette pandémie ».

Pierre Barnabé, Directeur Général des activités Secteur Public & Défense

ainsi que Big Data & Cybersécurité chez Atos, a ajouté : *« Nous sommes honorés de soutenir ces chercheurs et scientifiques dans leur travail de lutte contre le COVID-19. En utilisant la capacité de nos supercalculateurs BullSequana, qui fonctionnent des milliers de fois plus rapidement que les ordinateurs standard, nous leur permettons de gagner un temps précieux et de trouver un remède à cette pandémie ».*

Christine Ménaché, responsable du Très Grand Centre de Calcul au CEA et

Boris Dintrans, Directeur du CINES, précisent : *« Toutes les équipes support du TGCC et du CINES se sont mobilisées dans une démarche forte de solidarité pour répondre aux attentes de l'ensemble des utilisateurs et en particulier de ces projets scientifiques en lien avec le Covid19 ».*

Les supercalculateurs disposent de dizaines de milliers de processeurs qui travaillent ensemble pour effectuer des calculs massifs, traiter et analyser de grandes quantités de données à l'aide d'algorithmes d'Intelligence Artificielle. L'ensemble des supercalculateurs de GENCI, tous combinés, représente aujourd'hui plus de 41 pétaflop/s de capacité de calcul et 100 pétaoctets de stockage de données massives.

À propos d'Atos

Atos est un leader international de la transformation digitale avec 110 000 collaborateurs dans 73 pays et un chiffre d'affaires annuel de 12 milliards d'euros. Numéro un européen du Cloud, de la cybersécurité et des supercalculateurs, le Groupe fournit des solutions intégrées de Cloud Hybride Orchestré, Big Data, Applications Métiers et Environnement de Travail Connecté. Partenaire informatique mondial des Jeux Olympiques et Paralympiques, le Groupe exerce ses activités sous les marques Atos, Atos|Syntel, et Unify. Atos est une SE (Société Européenne) cotée sur Euronext Paris et fait partie de l'indice CAC 40.

La raison d'être d'Atos est de contribuer à façonner l'espace informationnel. Avec ses compétences et ses services, le Groupe supporte le développement de la connaissance, de l'éducation et de la recherche dans une approche pluriculturelle et contribue au développement de l'excellence scientifique et technologique. Partout dans le monde, Atos permet à ses clients et à ses

collaborateurs, et plus généralement au plus grand nombre, de vivre, travailler et progresser durablement et en toute confiance dans l'espace informationnel.

Contact presse

Laura Fau | laura.fau@atos.net | +33 6 73 64 04 18 | @laurajanefau

À propos de GENCI

GENCI est une société civile de droit français détenue à 49% par l'État représenté par le Ministère de l'Enseignement Supérieur de la Recherche et de l'Innovation (MESRI), 20% par le CEA, 20% par le CNRS, 10% par les Universités représentées par la Conférence des Présidents d'Université et 1% par Inria. Créée en 2007 par les pouvoirs publics français, GENCI vise à placer la France parmi les premiers pays européens et sur la scène internationale du HPC et de l'IA. Dans ce contexte, GENCI a pour mission de mettre en œuvre la stratégie nationale française en équipant en matériels de calcul intensif et en ressources de stockage de données massives, les trois centres nationaux afin de soutenir la recherche scientifique ouverte, de contribuer à la construction d'un écosystème HPC européen intégré et de promouvoir la simulation numérique par le calcul intensif et l'usage de l'intelligence artificielle au sein des milieux de la recherche académique et industrielle.

www.genci.fr

Contact presse

Annabel Truong | annabel.truong@genci.fr | Tel: +33 6 03 18 09 02

À propos du CEA

Le CEA est un acteur clé de la recherche, le développement et l'innovation dans les domaines de la défense et de la sécurité, des énergies bas carbone (nucléaire et renouvelables), de la recherche technologique industrielle et de la recherche fondamentale en physique et sciences de la vie. Le CEA est pleinement engagé dans la stratégie nationale et européenne de calcul intensif (HPC) et du traitement de données massives. Le Très Grand Centre de calcul du CEA (TGCC) et son supercalculateur Joliot-Curie, dont la mise en œuvre, l'exploitation et l'assistance utilisateurs sont assurées par la Direction des applications militaires du CEA, en sont des éléments clés. Au TGCC, les chercheurs français et européens bénéficient d'un environnement de pointe, d'une expertise au plus haut niveau, afin de les aider à mieux comprendre et vaincre le Covid-19.

www-hpc.cea.fr

Contact presse

Camille Decroix | camille.decroix@cea.fr | Tel: +33 6 63 68 52 83

Tuline Laeser | tuline.laeser@cea.fr | Tel: +33 6 12 04 40 22

À propos de la CPU

La Conférence des Présidents d'Université (CPU) est une association Loi de 1901 qui rassemble les dirigeants exécutifs des universités et établissements d'enseignement supérieur et de recherche (ESR) afin de porter la voix et les valeurs des universités dans le débat public. Elle comprend actuellement une centaine de membres votant (présidents d'université, directeurs d'écoles normales supérieures, d'INP, d'INSA, administrateurs généraux) mais également des membres associés.

Contact presse: Johanne Ferry- Dély | jfd@cpu.fr | Tel: +33 6 07 53 06 66

À propos du CINES

Le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur situé à Montpellier) est le centre de calcul national rattaché à la CPU qui accueille et opère le supercalculateur Occigen de GENCI avec des équipes HPC dédiées (admin et support). En plus de cette mission importante dans le calcul intensif, le CINES est le centre d'archivage numérique de l'ESR et héberge aussi les moyens informatiques d'une quinzaine d'établissements via son statut de datacentre national.

www.cines.fr

Contact presse: Boris Dintrans | boris.dintrans@cines.fr | Tel: +33 6 08 72 62 80