

Le centre britannique Hartree mobilise le supercalculateur d'Atos pour la recherche d'un traitement contre le COVID-19

Londres, Paris, 14 avril 2020 - Atos, leader international de la transformation digitale, annonce que [BullSequana X1000](#), l'un des ses supercalculateurs les plus puissants installé au Centre des installations scientifiques et technologiques (STFC) [Hartree](#), participe à l'effort mondial de recherche d'un traitement contre le COVID-19.

Le centre Hartree collabore avec l'école de médecine de l'université de Washington, à la tête de l'initiative Folding@home. Cette initiative permet à tout individu possédant un ordinateur de mettre ses capacités informatiques non utilisées au service de la recherche, créant ainsi une machine virtuelle puissante qui servira notamment à simuler les interactions entre le virus SARS-CoV-2 et des médicaments potentiels. La puissance de calcul générée par ce réseau d'ordinateurs est importante¹, mais l'ensemble du processus – et notamment la création de la structure des médicaments à simuler – est très complexe et réclame énormément de mémoire, entraînant un engorgement de l'infrastructure et nécessitant des supercalculateurs.

En exploitant une partie des capacités² du supercalculateur Atos BullSequana X1000, l'équipe du centre Hartree accélère le processus de recherche et la création de formulations de médicaments, qui peuvent ensuite être entièrement simulées grâce à la puissance de calcul distribuée du réseau Folding@home.

Les systèmes Atos BullSequana X1000 du centre Hartree sont également utilisés par CompBioMed, le Centre d'Excellence Européen de Biomédecine Computationnelle, dans le cadre d'un effort global de lutte contre le COVID-19 qui mobilise des centaines de chercheurs à travers les Etats-Unis et l'Europe. En attendant la production d'un vaccin, des médicaments sont nécessaires pour réduire la sévérité des symptômes ou prévenir la maladie. Pour réaliser des simulations avancées de milliers d'assemblages de protéines, les chercheurs ont besoin de capacités de calcul de haut niveau fournies par les systèmes

¹ La puissance agrégée dépasse un exaflop

² +800 nœuds de processeurs Intel Knights Landing

du centre Hartree et d'autres supercalculateurs, réunis dans un réseau mondial exceptionnel.

Alison Kennedy, directrice du Centre Hartree du STFC, explique : « *Le centre Hartree dispose d'une incroyable puissance de calcul que nos équipes souhaitaient naturellement exploiter pour combattre la pandémie actuelle. Le projet Folding@home étudie des composants chimiques et simule leurs interactions avec le virus en utilisant le calcul informatique. Cela ne permet pas de produire un vaccin, mais si des molécules antivirales étaient identifiées, elles pourraient aider à traiter les patients qui ont contracté le virus et ainsi accélérer leur guérison ou réduire la pression sur les services de santé.* »

L'équipe espère mettre au jour des solutions thérapeutiques capables d'inhiber certaines des protéines nécessaires au cycle de vie du COVID-19, afin d'empêcher la propagation du virus.

Andy Grant, Global VP, Large Strategic HPC Deals, Atos, ajoute : « *L'analyse de données complexes par des supercalculateurs peut s'avérer déterminante dans la découverte de traitements contre le Covid-19, en testant de nouveaux composés chimiques ou en simulant leurs interactions avec le virus de manière extrêmement rapide. Le Royaume-Uni est à la pointe de la science et de la médecine ; son implication dans ce gigantesque projet international est une excellente nouvelle.* »

Le partenariat entre [Atos et le centre Hartree](#), basé au laboratoire de Daresbury, témoigne de l'importance de la collaboration entre les acteurs du domaine académique et du secteur privé en matière de puissance de calcul et de deep learning.

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

About Folding@home

Folding@home (F@h) is a distributed computing project for simulating protein dynamics such as protein folding and movement, essential in understanding mechanisms of disease. It brings together a community of citizen scientists who volunteer to run simulations of protein dynamics on their personal computers with insights from this work helping scientists to better understand protein interactions, providing new opportunities to develop therapeutics.

F@h released the first wave of projects for simulating protein targets for COVID-19 on 10 March 2020 and will continue to release new simulation projects as more data becomes available.

Anyone with a personal computer can contribute directly to the project

The Folding@home project is playing an essential role in understanding the mechanisms of disease, and most importantly COVID-19. It is bringing together a community of 'citizen scientists' who are volunteering to run simulations of protein dynamics on their personal computers with insights from this work helping scientists to better understand protein interactions, providing new opportunities to develop therapeutics.

Find out more about Folding@home, including what you can do to help at the website.

Information on how to get started and download the software at <https://foldingathome.org/start-folding/>.

The Folding@home team recently held a Reddit #AskMeAnything for the public to ask questions about the project. Read more here.