

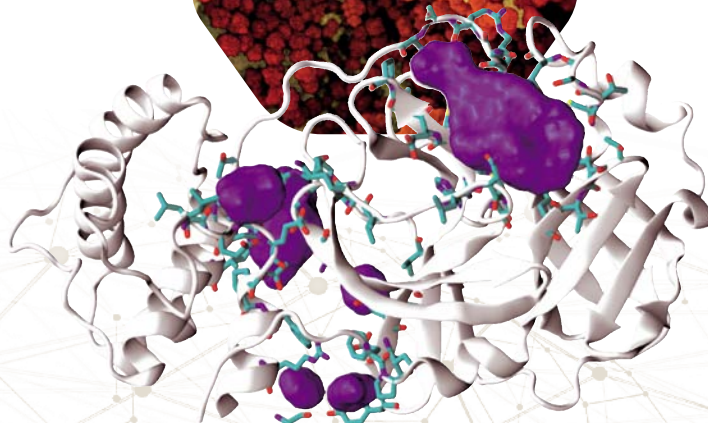
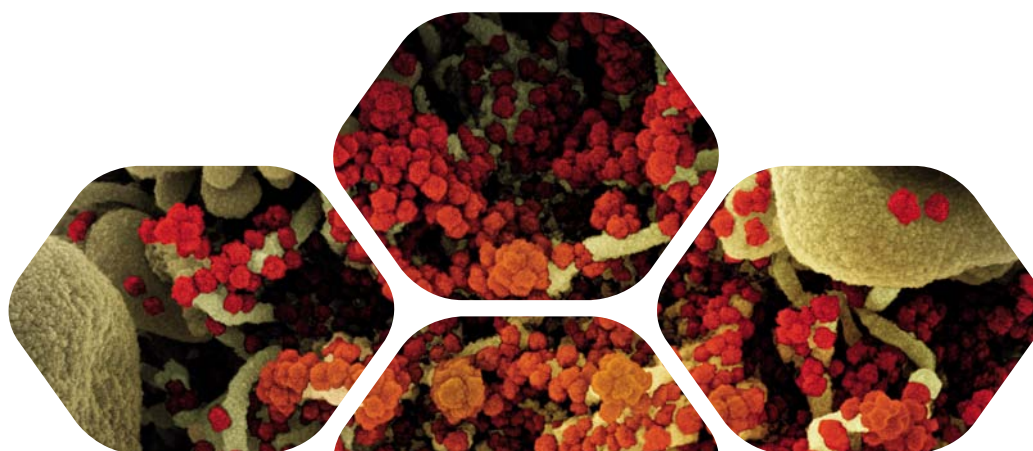


# calcul intensif

ACCÉLÉREZ VOS SIMULATIONS ET TRAITEMENT DE DONNÉES  
AVEC LE SUPERCALCULATEUR MYRIA

## **COURSE** **CONTRE LE** *Sars-CoV-2*

*Un exemple d'utilisation des ressources du Criann  
par le Centre d'études et de recherche sur le médicament  
de Normandie (CERMN), Université de Caen Normandie*



### **Challenge JEDI Covid-19**

Traitement massif distribué  
en *docking* moléculaire à  
l'échelle mondiale

### **620 millions de molécules sur 3 protéines cibles**

Soit 1,8 milliard de cas étudiés  
par l'équipe normande  
en un mois

### **120 To de données 40 millions de fichiers**

Pour traitement sur le  
calculateur du Criann



**CRIANN**

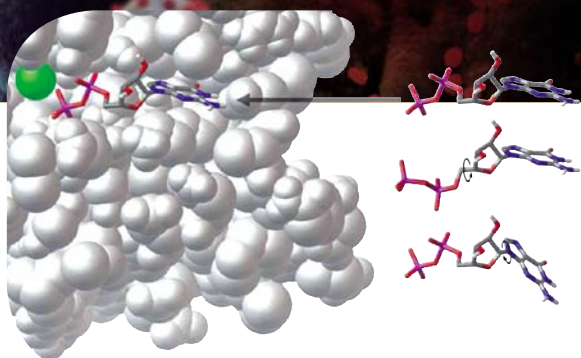
CENTRE RÉGIONAL INFORMATIQUE  
ET D'APPLICATIONS NUMÉRIQUES  
DE NORMANDIE



Normandie Université

Un exemple d'utilisation des ressources du Criann

# Une approche disruptive dans la recherche d'un traitement thérapeutique



Parmi 54 milliards de molécules répertoriées, l'une d'elles pourrait-elle être efficace contre le virus du Sars-CoV-2 ? Tel est le challenge proposé en mai 2020 par la fondation JEDI à 130 équipes de chercheurs des meilleures institutions mondiales, dont une équipe de l'université de Caen. L'usage des supercalculateurs couplé au *machine learning* a permis d'atteindre une échelle jamais vue auparavant dans la recherche *in silico*.

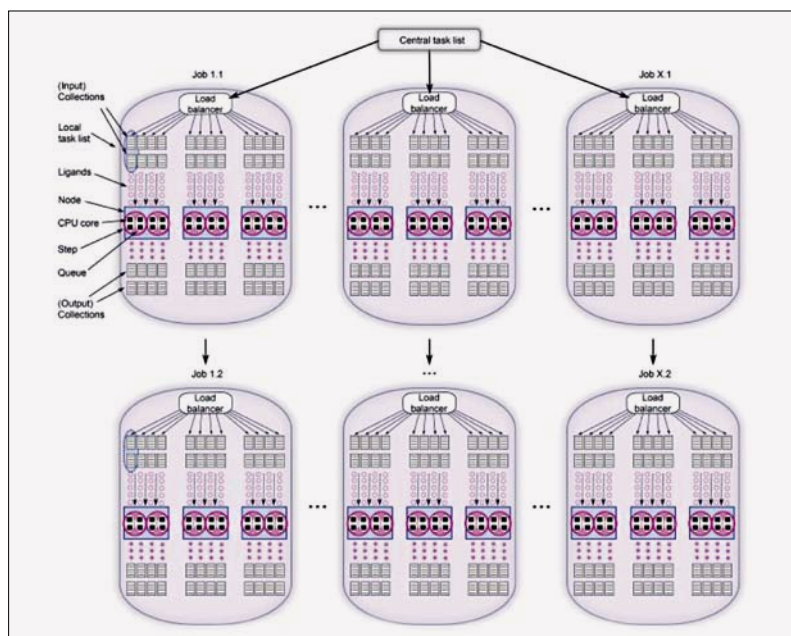


Illustration de la distribution parallèle des travaux sur les nœuds de calcul par le logiciel Virtual Flow (Gorgulla et al., *Nature*, 2020 n° 580). Une tâche centrale (*jobline*) distribue les travaux sur les CPU des nœuds de calcul, chaque CPU traite une collection de quelques milliers de molécules puis écrit ses résultats. Un grand nombre de molécules est ainsi traité simultanément (jusqu'à 350 millions au Cines) et le stockage des résultats constitue un point de blocage : il s'est avéré plus efficace de rapatrier, au travers du réseau Renater, les fichiers générés au Cines à Montpellier afin de les post-traiter au Criann à Rouen.

## Équipe

Pr. Ronan Bureau, CERMN - Université de Caen Normandie, dans les 20 finalistes du challenge au niveau mondial

Équipe support du Criann  
Patrick Bousquet-Mélou et  
Béatrice Charton

## Supercalculateurs Criann et Cines-Genci

3,6 millions d'heures.cœur

## Programme

Fondation JEDI  
(The Joint European Disruptive Initiative)