Publicado en Madrid el 30/04/2020

# [GENCI, CEA, CPU y Atos arman con superordenadores a los científicos europeos contra COVID19](http://www.notasdeprensa.es)

## Dos de los supercomputadores más poderosos de Francia, Joliot-Curie, operado en el centro de supercomputación del CEA (TGCC), y Occigen, operado en el centro de supercomputación de la CPU (CINES), están proporcionando acceso urgente a grandes recursos informáticos a los equipos de investigación europeos que participan en la lucha contra COVID-19

 El objetivo es realizar estudios epidemiológicos de la propagación del virus COVID-19, comprender su estructura molecular y su comportamiento, y examinar y probar masivamente posibles moléculas futuras, para acelerar la búsqueda de una vacuna eficaz y apoyar la lucha mundial contra el virus. Ambas supercomputadoras están basadas en la plataforma BullSequana de Atos, líder mundial en transformación digital. Después de sólo unas semanas de acceso rápido a COVID 19 de GENCI, la agencia nacional francesa de computación de alto rendimiento, anuncia que hay ahora más de 20 proyectos COVID19 científicamente diversos en funcionamiento en sus 3 supercomputadores nacionales, entre los que se encuentran Joliot-Curie y Occigen (junto con Jean Zay en IDRIS), con la ayuda dedicada de equipos de apoyo en estos centros. Joliot-Curie en el TGCC Joliot-Curie, con sus 22 petaflop/s, es el supercomputador más potente de Francia dedicado a la investigación abierta académica e industrial. En el marco de PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), los científicos europeos confían en Joliot-Curie para llevar a cabo hoy tres proyectos a gran escala de COVID-19 en el contexto de la convocatoria de PRACE COVID-19 Fast Track call. Uno de los proyectos simula las proteínas funcionales del virus del SARS-CoV-2 construidas a partir de millones de átomos para comprender los mecanismos de la infección del virus con el fin de desarrollar una terapéutica. El otro proyecto utiliza la detección computacional, una técnica bien conocida utilizada en el descubrimiento de drogas, para identificar y mejorar los inhibidores de proteínas virales, moléculas que son capaces de bloquear el Proteína SARS-Cov-2. Este proyecto podría ayudar a apoyar el desarrollo de un tratamiento para frenar el brote de COVID-19. El último proyecto combina el estudio del efecto de los fármacos antipalúdicos en varios tipos de ritmo cardíaco humano teniendo en cuenta una variedad de comorbilidades que pueden estar presentes en la población infectada, y también utiliza la dinámica de fluidos computacional (CFD) para comprender mejor la compleja hemodinámica asociada al Síndrome Norte-Sur. Además de estos proyectos de la Vía Rápida PRACE COVID-19, equipos de investigadores están llevando a cabo simulaciones preparatorias sobre las asignaciones nacionales prioritarias de capacidad de computación en el supercomputador Joliot-Curie. Por ejemplo, investigadores del Instituto de Investigación Interdisciplinaria de Grenoble (IRIG) y del Instituto Joliot del CEA están trabajando en la búsqueda de inhibidores en COVID-19. La proteína SPIKE permite al virus penetrar en la membrana celular. Gracias a la simulación de la estructura electrónica de la proteína y del inhibidor asociado, es posible proporcionar información precisa sobre la fuerza de la inhibición, pero también información estructural para identificar los aminoácidos en cuestión y sus polaridades asociadas. Esta labor inicial permitió validar el enfoque y, por lo tanto, presentar un proyecto de 15 millones de horas al PRACE para estudiar los factores microscópicos y termodinámicos que pueden o no favorecer la interacción entre la principal proteasa del SARS-CoV-2 y nuevos y prometedores inhibidores. El objetivo es construir una herramienta de ab initio in silico para estimar con precisión las propiedades de interacción de las proteínas que interactúan con todos los tipos de familias de ligandos. Occigen en CINES Entre los proyectos relacionados con COVID-19 sobre el occigen, los investigadores están realizando simulaciones para estudiar las enzimas de la helicasa SARS-Cov-2 con mayor detalle, a fin de comprender mejor la composición genética del virus. También se está utilizando masivamente -diariamente más de 40.000 núcleos, alrededor de la mitad de la capacidad total del occigenio formado por 86.000 núcleos para 3,5 petaflop/s- con métodos de detección computacional, para probar virtualmente más de 1.500 millones de moléculas, mil de las cuales serán sintetizadas y probadas en laboratorios por su capacidad de inhibir el SARS-Cov-2. La escala de esta prueba virtual no tiene precedentes y sólo es posible gracias a la potencia de cálculo del supercomputador. Stéphane Requena, CTO de GENCI, dijo: "Estamos orgullosos de que los 3 centros nacionales estén en la lucha contra COVID-19 y que nuestras potentes capacidades de supercomputación e inteligencia artificial sean utilizadas por los investigadores para contribuir a estos esfuerzos. Esperamos que estos hallazgos computacionales de los más de 20 proyectos que se están ejecutando actualmente en nuestros sistemas, apoyen a los investigadores y científicos a comprender más sobre el virus y, en última instancia, ayuden a desarrollar un tratamiento para detener esta pandemia". Pierre Barnabé, Jefe del Sector Público y Defensa y Jefe de Big Data y Ciberseguridad, de Atos, añadió: "Nos sentimos honrados de apoyar a esos investigadores y científicos en su trabajo para ayudar a luchar contra COVID-19. Al utilizar la capacidad de nuestros supercomputadores BullSequana, que funcionan miles de veces más rápido que los computadores estándar, les permitimos ahorrar un tiempo valioso y ayudamos a encontrar una cura para esta pandemia". Christine Ménaché, Directora del Centro de Computación Muy Grande del CEA (TGCC) y Boris Dintrans, Director de CINES declaran conjuntamente: "Todos los equipos de apoyo de TGCC y de CINES se han movilizado con un fuerte espíritu de solidaridad para responder a las expectativas de todos los usuarios y en particular a estos proyectos científicos en relación con el Covid19". Los supercomputadores tienen decenas de miles de procesadores que trabajan juntos para realizar grandes cálculos, procesar y analizar grandes cantidades de datos utilizando algoritmos de Inteligencia Artificial. Los sistemas de supercomputación combinados de GENCI representan hoy en día más de 41 petaflop/s de capacidad de computación y 100 petabytes de almacenamiento masivo de datos.

**Datos de contacto:**

Paula Espadas

620 059 329

Nota de prensa publicada en: [https://www.notasdeprensa.es/genci-cea-cpu-y-atos-arman-con](http://www.notasdeprensa.es/educalivecom-disfruta-de-cursos-presenciales-y-clases-particulares-a-traves-de-internet)

Categorias: Internacional Programación Madrid E-Commerce Software



[**http://www.notasdeprensa.es**](http://www.notasdeprensa.es)