

# Le calcul sur GPU au CC:

Réunion des expériences utilisatrices 2017

**KOENSGEN FLORIAN**

*Laboratoire d'Innovation Thérapeutique, UMR 7200 CNRS-*

*Université de Strasbourg, 67041 Illkirch, France*

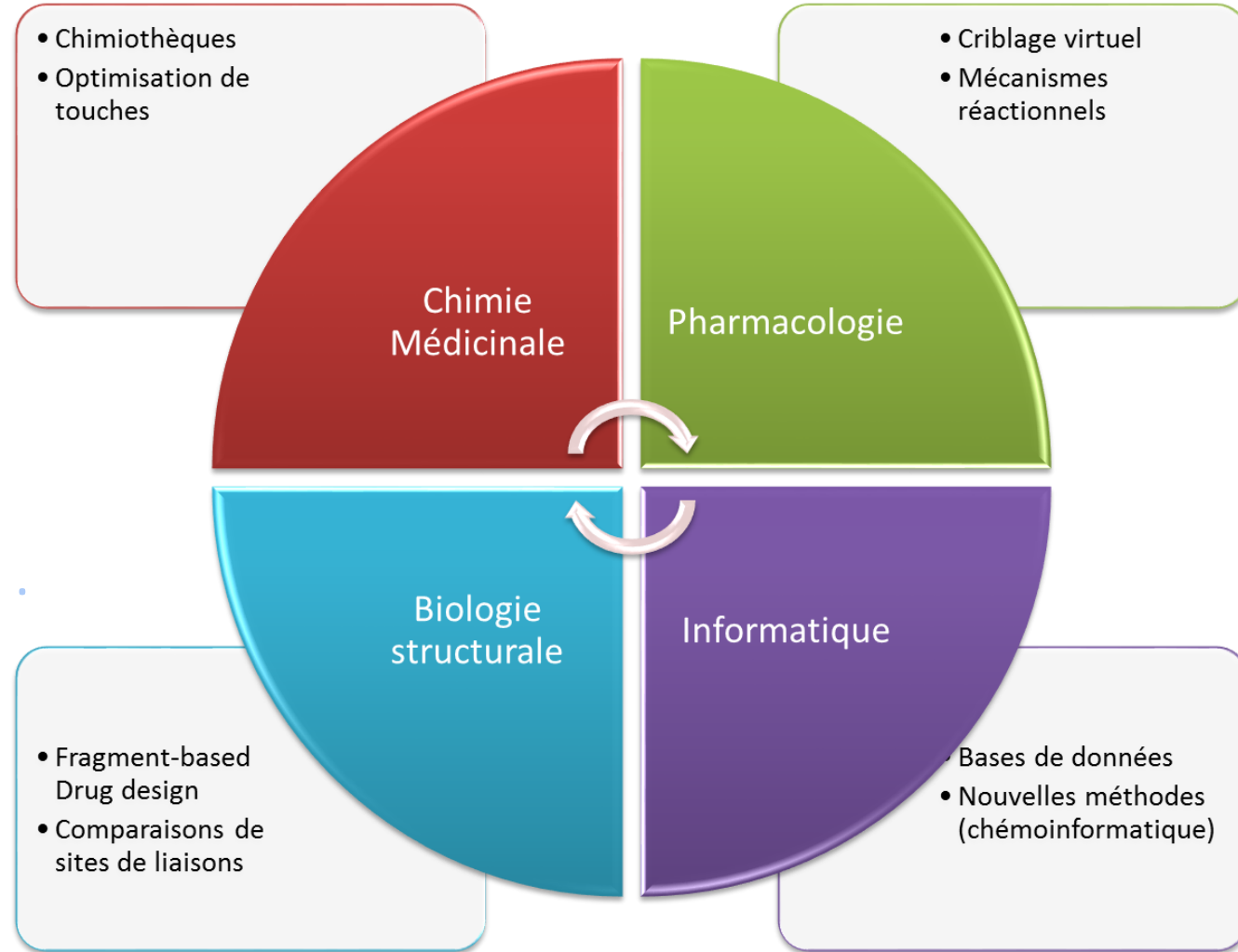
***koensgen@unistra.fr***

# Laboratoire d'innovation thérapeutique

## Equipe de Chémogénomique structurale



Rationaliser ...

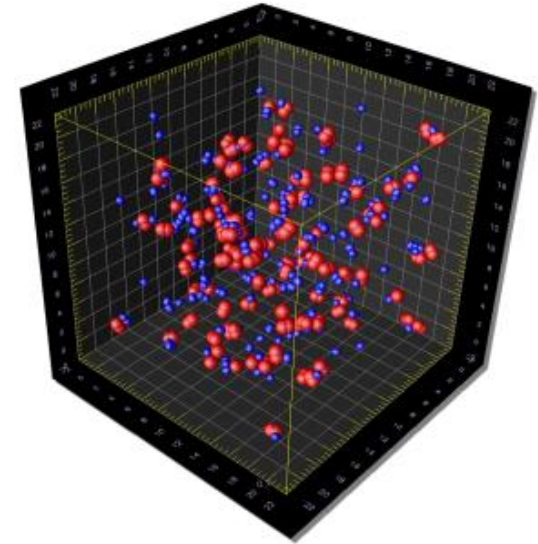


Accélérer ...

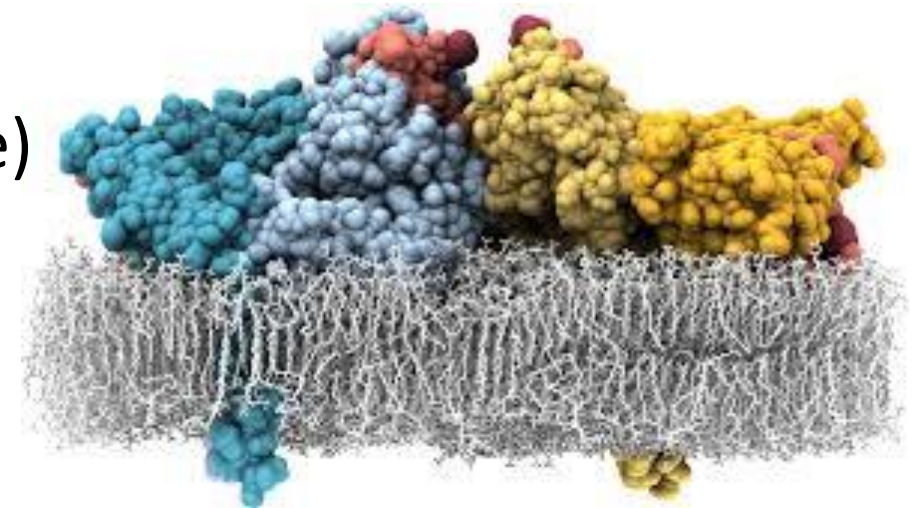
...la découverte de molécules bioactives

# L'utilisation de ferme de calcul : La dynamique moléculaire

- Etude d'un système atomique:
  - Par son mouvement
  - Par son Energie
- Résoudre l'équation du mouvement de Newton:
  - Approche classique (Champ de force)
  - Approche quantique (Semi-empirique, DFT, Hartree-Fock)



*FAU Erlangen*



*UTC Stuttgart*

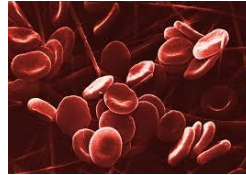


AMBER

# Standard AMBER 16

## Facteur anti-hémophilique B

- 2 492 atomes
- $\approx 52 \text{ \AA}$



*INSERM.fr*



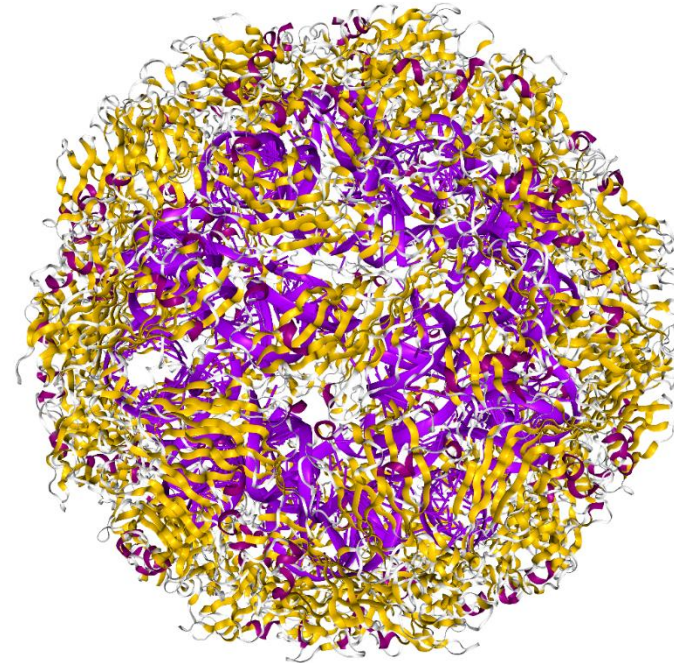
*RCFB PDB: id 1RFN*

## Virus de la mosaïque du tabac

- 25 095 atomes
- $\approx 150 \text{ \AA}$



*INRA.fr*

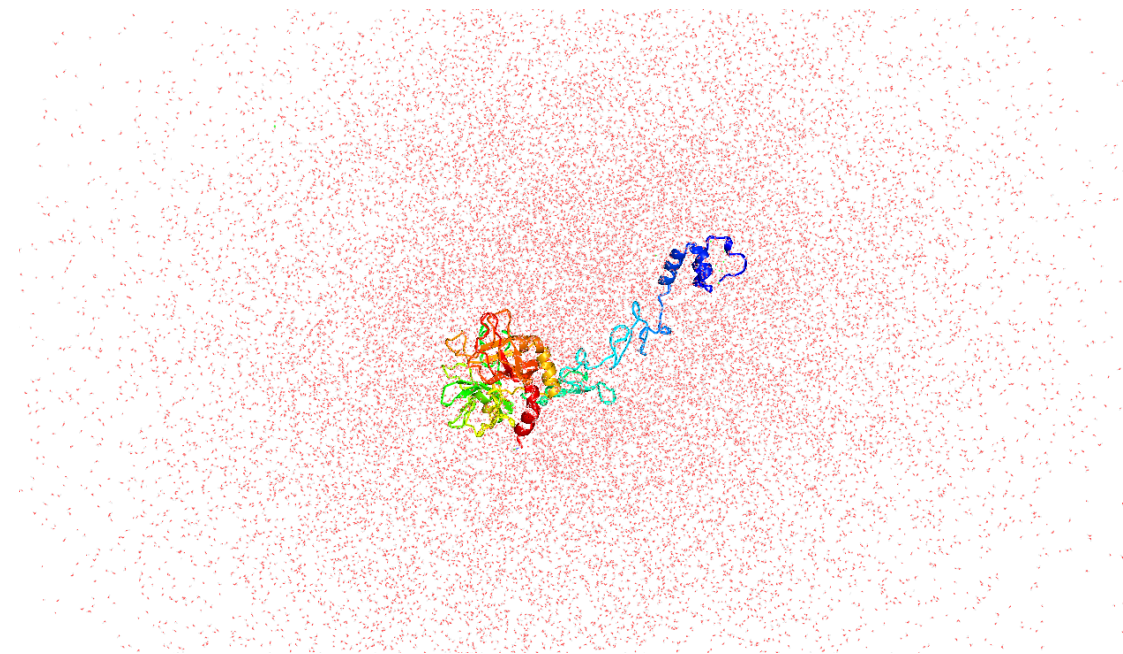
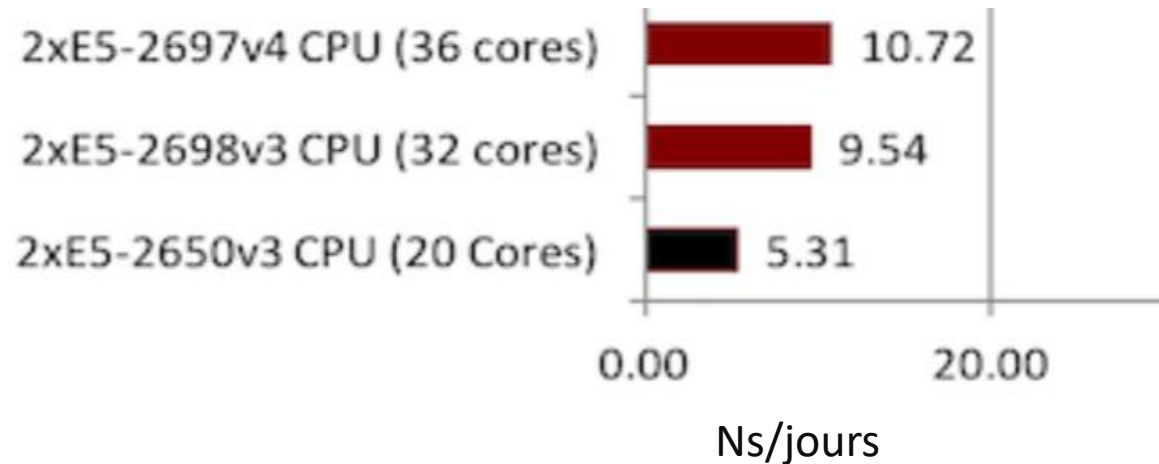


*RCFB PDB: id 4OQ9*



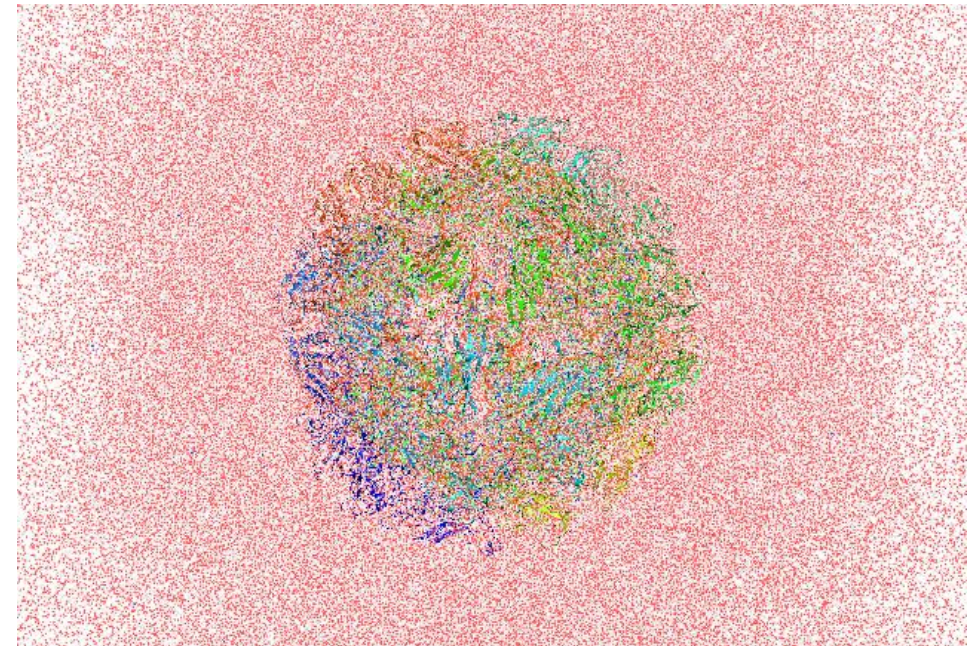
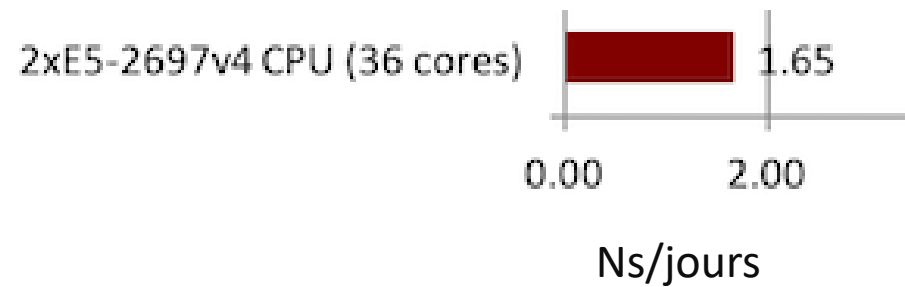
# Standard AMBER 16: Facteur anti-hémophilique B

- 90 906 atomes
- Contrôle de température et pression
- Pas de 2 femtosecondes

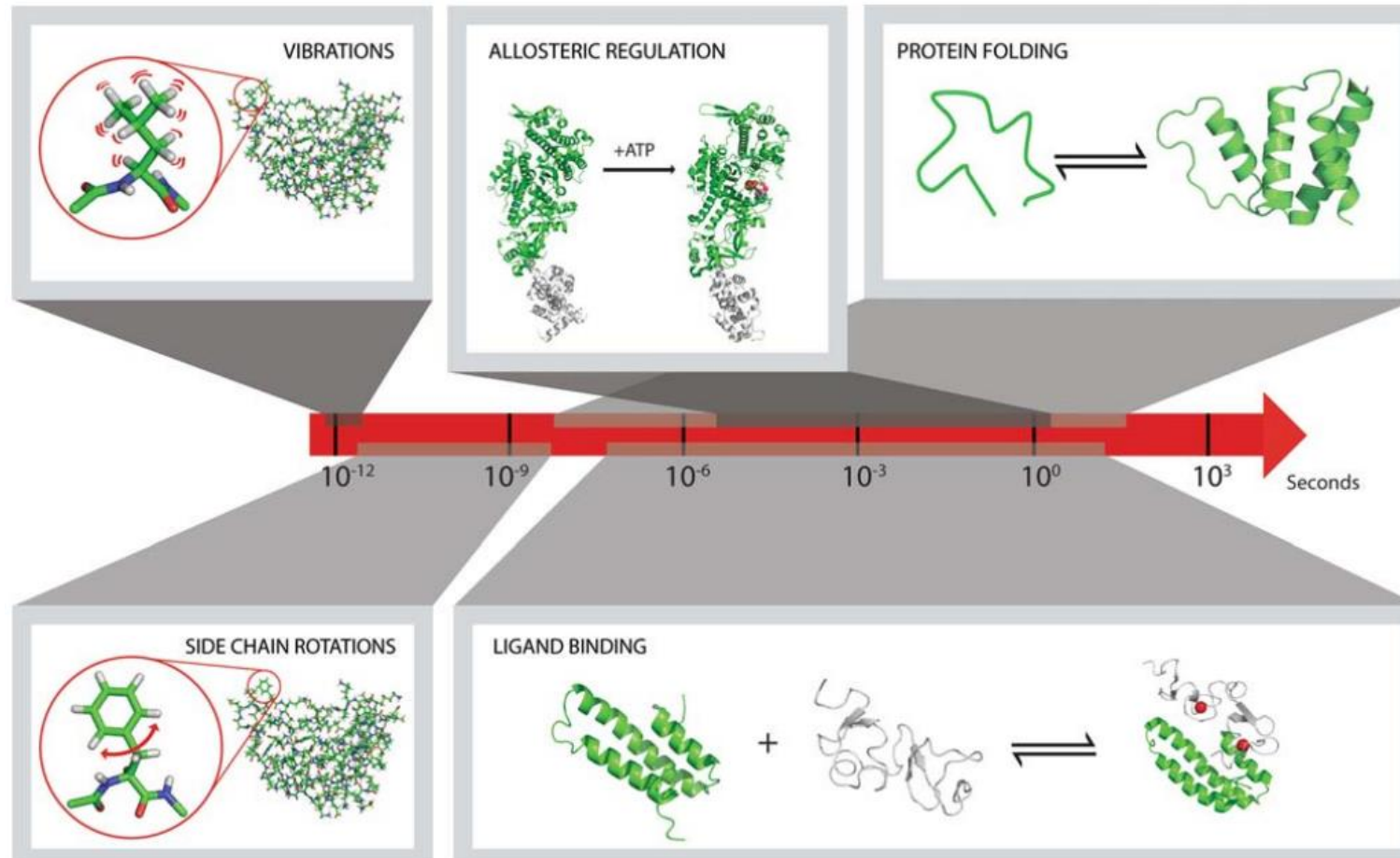


# Standard AMBER 16: Virus de la mosaïque du tabac

- 1 067 095 atomes
- Contrôle de température et de pression
- Pas de 4 femtosecondes



# Echelle de temps en biologie cellulaire



Pour 1 microseconde de dynamique:

Facteur anti-hémophilique B

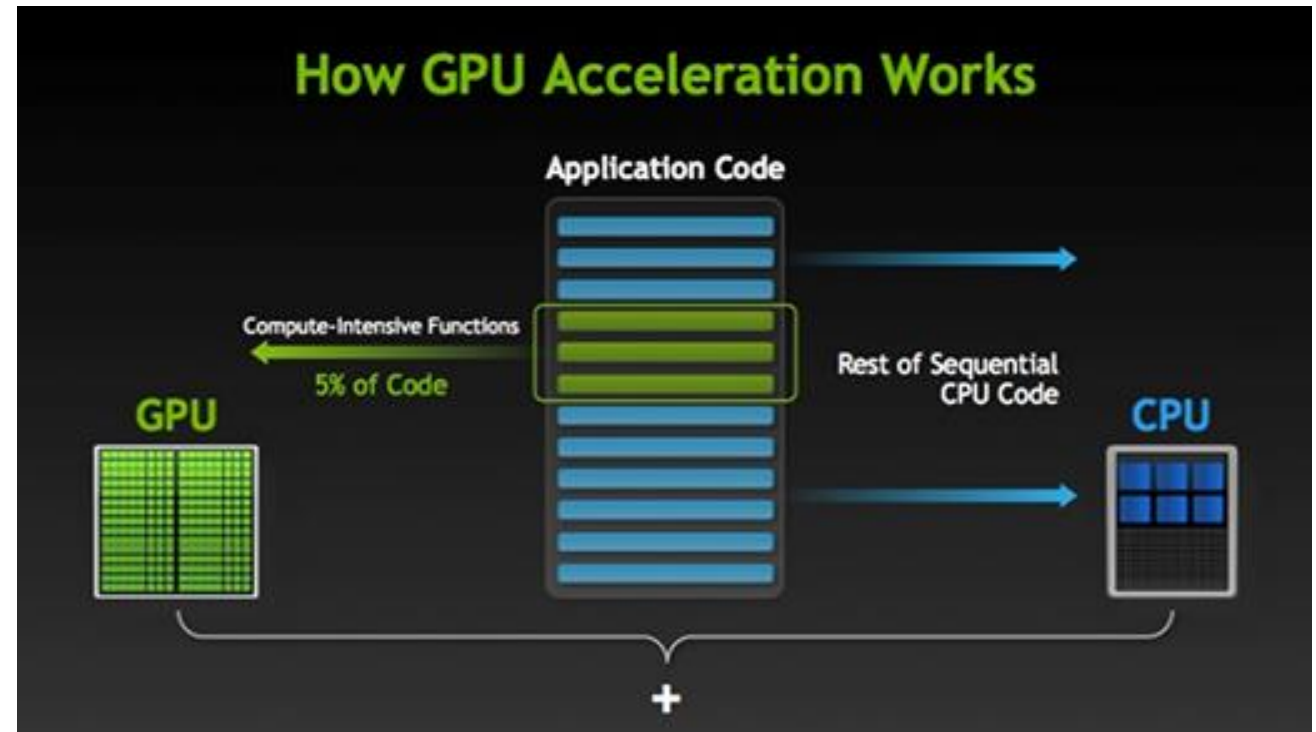
100 jours

Virus de la mosaïque du tabac

1000 jours

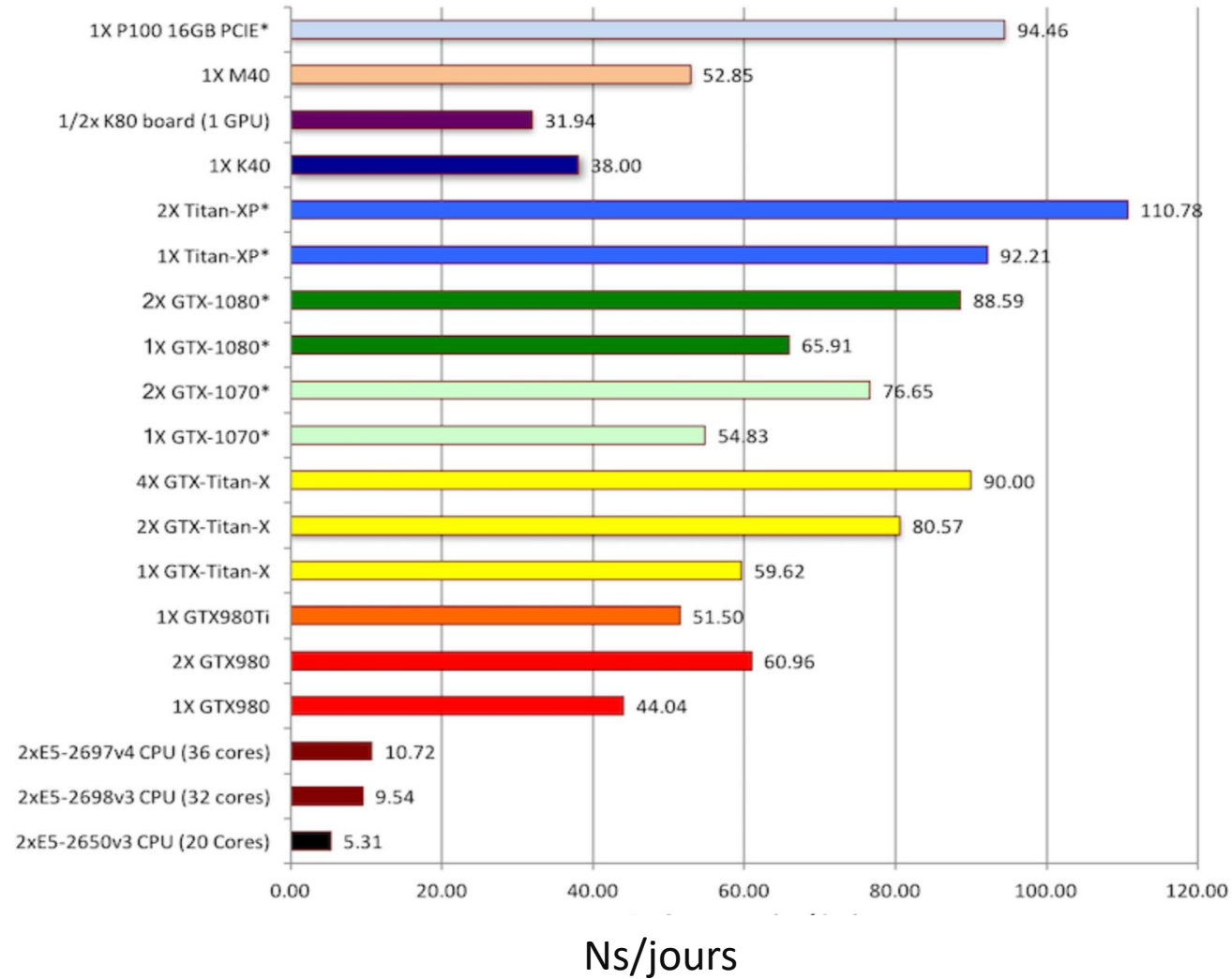
## Le calcul sur GPU au CC

- paralléliser certaines tâches
- accélérer tout ou une portions du code
- **A l'In2p3 :**
  - 10 cartes graphiques K80
  - 4 GPU par carte (4 992 cœurs)

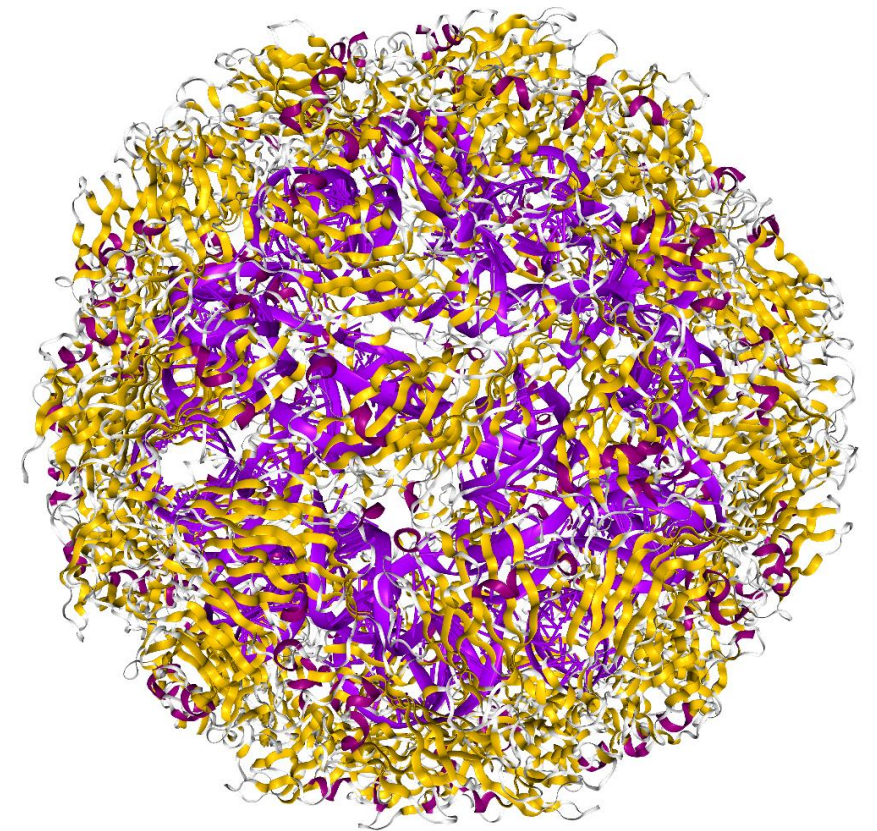
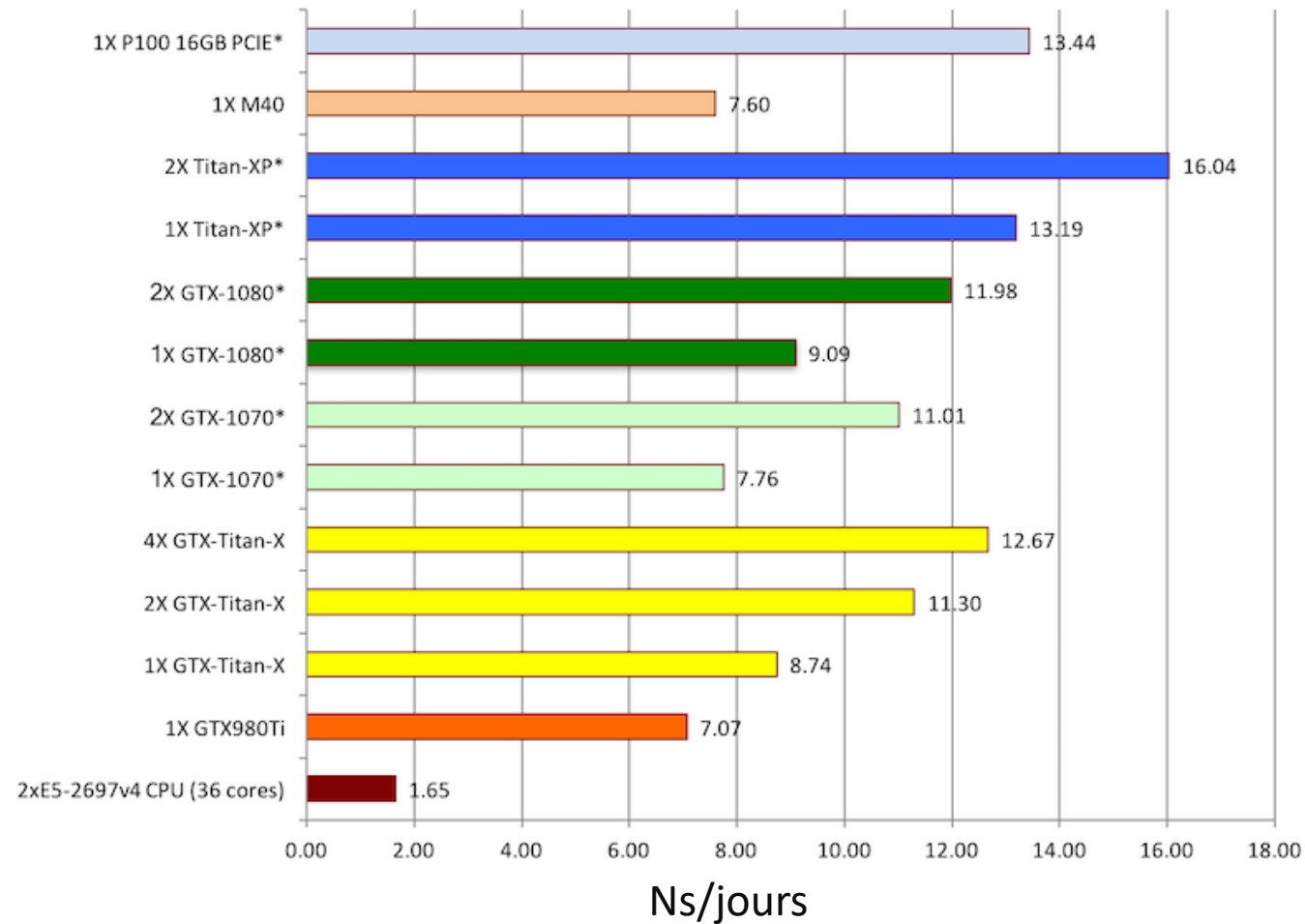




# Standard AMBER 16: Facteur anti-hémophilique B



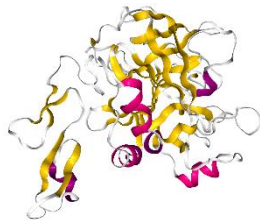
# Standard AMBER 16: Virus de la mosaïque du tabac



# Récapitulatif des standards Amber 16

- Pour 1 microseconde de dynamique:

Facteur anti-hémophilique B

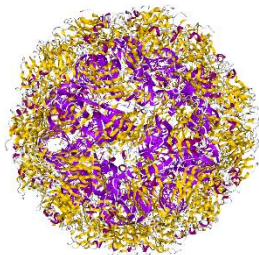


100 jours



31 jours

Virus de la mosaïque du tabac



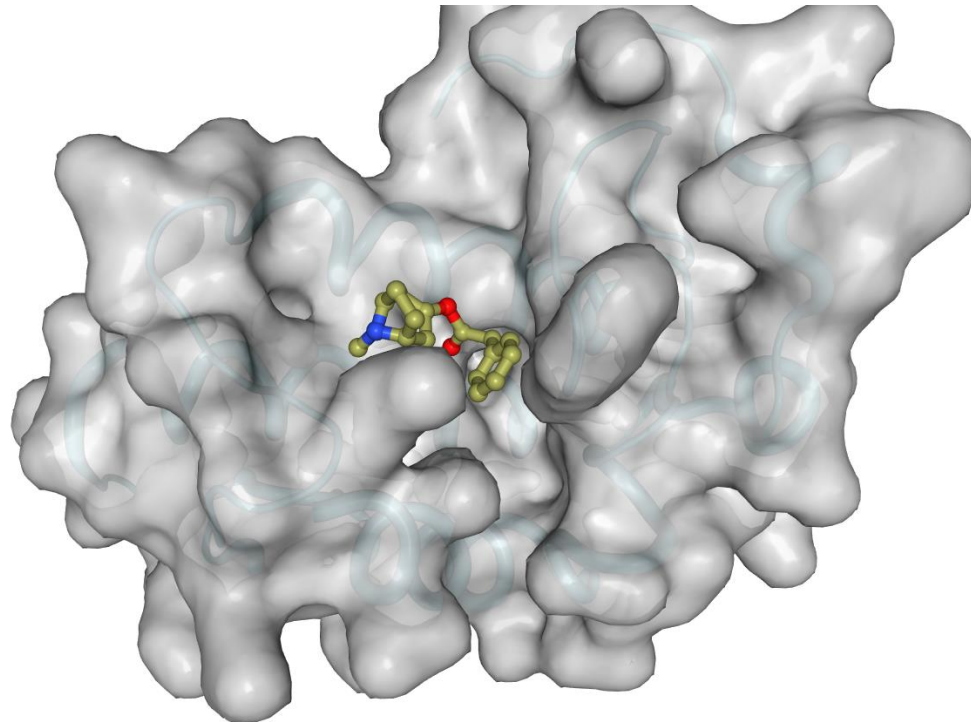
1000 jours



141 jours

# Cas pratique 1: Complexe d'atropine naturel avec la Phospholipase A2

**Crystal Structure at 1.2 Å resolution**

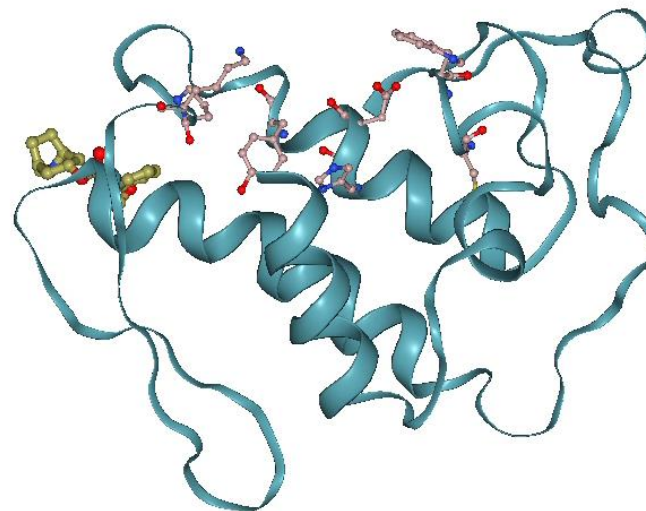


- Association de ligand: AceMD
- Compatible avec plusieurs logiciels et champs de forces de dynamique moléculaire
- Phospholipase A2:
  - Cible grandement étudiée
  - Rôle dans la réponse inflammatoire
  - Bonne résolution de la structure de la protéine



# Cas pratique 1: Association de ligan

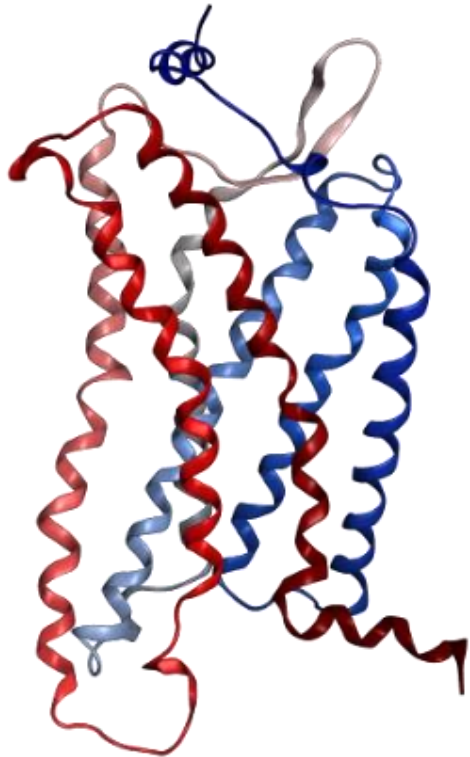
- Dans une boîte d'eau
- 32 680 atomes
  
- $\approx 36$  h
- 30 ns de simulation



❖ 15 ns/jours

# Cas pratique 2: Dimerisation de la protéines membranaires CCR5

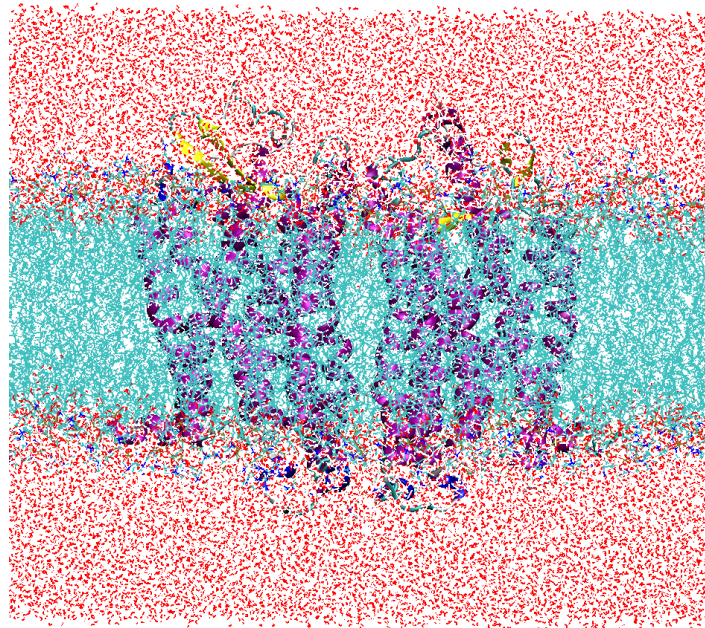
Modified crystal Structure at 2.7 Å resolution



- Voie d'accès du VIH dans une cellule
- Voire le rôle des dimer dans l'infection
- Pas de structures de dimer
- Trouver des formes stables de dimer

# Cas pratique 2: Dimerisation de la protéines membranaires CCR5

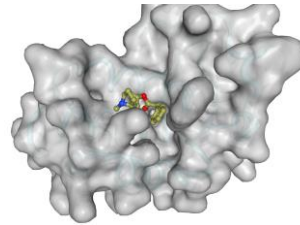
- Membrane bi-lipidique
- 143 798 atomes
  
- 30 jours (30 x 17 h)
- 300 ns de simulation



❖ 14 ns/jours

# Récapitulatif des cas pratiques

Phospholipase A2



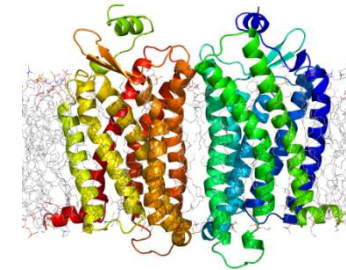
Atomes:

32 680



15 ns/jours

Dimer de CCR5



143 798

14 ns/jours



# Le calcul sur GPU au CC:

- Un gain de temps
- Un gain faisabilité
  
- Gestion des queues ?
- Problème d'efficacité
  - $100 \% < \text{Efficience} < 900 \%$



Computational Finance	16	Oil and Gas	26
Climate, Weather and Ocean Modeling	2	Research: Higher Education and Supercomputing:	
Data Science & Analytics	8	COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND BIOLOGY	72
Defense and Intelligence	20	NUMERICAL ANALYTICS	3
Deep Learning and Machine Learning	17	PHYSICS	20
Manufacturing: CAD and CAE	67	SCIENTIFIC VISUALIZATION	14
Media and Entertainment	123	Safety & Security	13
Medical Imaging	1		

# Remerciements



Esther KELLENBERGER  
Didier ROGNAN



Franck DA SILVA  
Guillaume BRET  
Priscila GOMEZ  
Malgorzata DRWAL

