

Contribution de MUST

... pour accélérer la recherche sur le SARS-Cov2

SARS-Cov2 : le virus, COVID-19 : la maladie (d = disease)

Mésocentre de Calcul et de Stockage Université Savoie Mont Blanc

- Au service d'une dizaine de laboratoires de l'université
- Tier 2 (ATLAS, LHCb) depuis 2007, ouvert sur la grille EGI
- Plateforme labellisée par l'IN2P3/CNRS en 2017
(V. Beckmann dans le comité de pilotage annuel)



Demande exceptionnelle pour l'utilisation des ressources de calcul MUST (validée par la direction)

- Projet : Criblage virtuel de cinq cibles enzymatiques exprimées par le SARS-Cov2
- Programme de recherche de l'AFMB, laboratoire Architecture et fonction des macromolécules biologiques (CNRS/Aix-Marseille Université)
- Equipe Bruno CANARD <http://www.afmb.univ-mrs.fr/replicases-virales-structure>

*« Comprendre les mécanismes de réplication des virus émergents » ...
...pour être en mesure de concevoir des molécules ayant un potentiel antiviral*

Quel rapport avec l'informatique ? Intérêt de MUST ?

- Technique informatique en soutien : Criblage virtuel ou in-silico
- Le criblage vive à sélectionner des molécules existantes (parmi des millions) répondant à un cahier des charges bien précis et méritant d'être testées expérimentalement
- in-silico (ref. silicium) par opposition aux techniques in-vivo, in-vitro
- Algorithmes capables de passer au crible des millions de molécules afin de sélectionner celles qui seront ensuite testées expérimentalement.

Pour en savoir plus :

- Article du Journal du CNRS :

<https://lejournald.cnrs.fr/sars-cov-2>

“La science fondamentale est notre meilleure assurance contre les épidémies” (Bruno Canard)

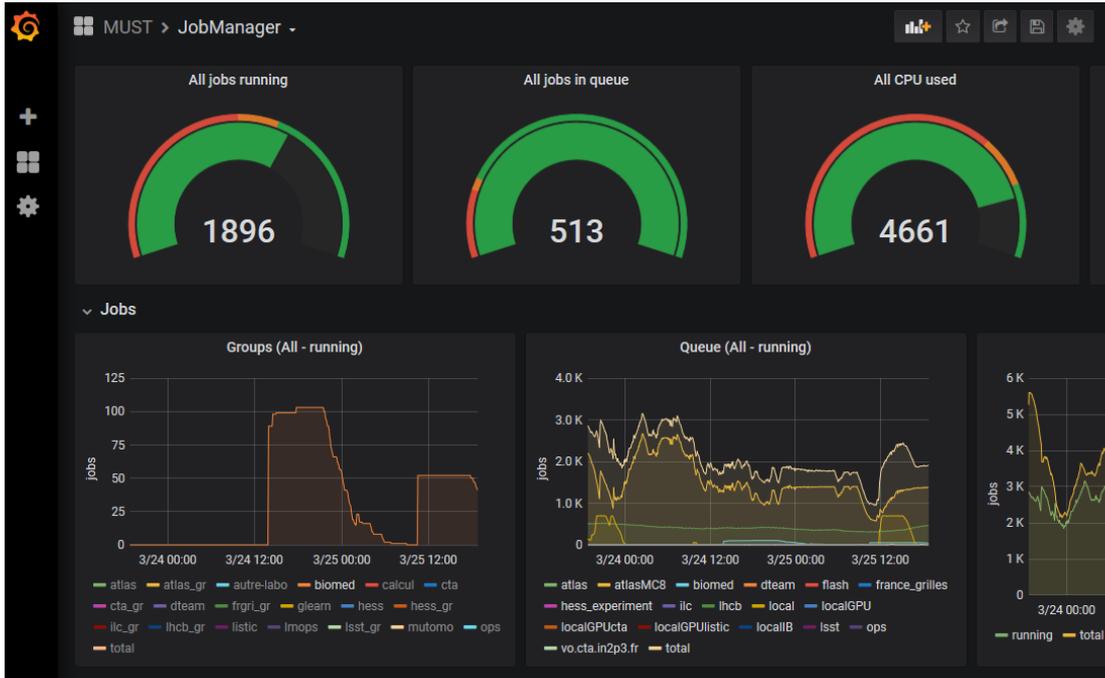
- 20 projets de recherche sélectionnés par le ministère de l’enseignement supérieur et de la recherche

<https://www.sup-recherche.gouv.fr/cid150211/covid-19-20-projets-de-recherche-selectionnes-pour-lutter-contre-l-epidemie.html>

Bruno Canard fait partie des porteurs de projets de recherche

- Plus concrètement :
 - Utilisation de MUST sur une période limitée (quelques semaines)
 - Tâches de calcul soumises via la grille européenne EGI par la communauté « Biomed » (recherche biomédicale)
 - Pas de besoin de stockage
 - tâche mono-cœur exécutée au sein de conteneurs (Singularity) distribués via CernVM-FS (système de fichiers globalisé web-based en lecture seule)
 - IPHC et CPPM également contributeurs
 - Contacts au sein de notre communauté :
 - Jérôme Pansanel (IPHC)
 - Sorina Camarsu Pop (CREATIS)
 - Travail de (re)configuration pour autoriser « Biomed » sur le cluster MUST
 - Premiers tests validés
 - Vérification empreinte mémoire en cours
- Autres initiatives avec le CERN émergent (en attente d'information)

Outils de surveillance :



Service Overview For Host Group 'serveurs-wn-grille'

Serveurs WN MUST (serveurs-wn-grille)

Host	Status	Services	Actions
lapp-wn002.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn004.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn005.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn006.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn007.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn008.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn009.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn011.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn013.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn014.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn015.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn025.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn027.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn030.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn032.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn034.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn036.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn037.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn038.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn040.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn042.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn043.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn044.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn045.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn046.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]
lapp-wn047.in2p3.fr	UP	8 OK	[Icons]