

<b>Nom de la plateforme</b>	P3M-MaSCA
<b>Responsable</b>	Pr Manuel Dauchez
<b>Personne contact</b>	
<b>E-mail</b>	manuel.dauchez@univ-reims.fr
<b>Téléphone</b>	326913320
<b>Adresse complète</b>	Moulin de la Housse
<b>Etablissement d'affiliation</b>	Université de Reims Champagne-Ardenne
<b>Site internet</b>	p3m.univ-reims.fr
<b>Type d'activité de la plateforme</b>	R&D
<b>Domaine d'activité</b>	Bio-informatique, Imagerie, Biologie structurale, Modélisation
<b>Description</b>	La plateforme de Modélisation Moléculaire Multiéchelle P3M est une plateforme constituante de la Maison de la Simulation de Champagne-Ardenne (MaSCA) et de son calculateur ROMEO. Elle propose de s'intéresser aux interactions structures/fonctions/dynamiques par bioinformatique structurale et simulations numériques. Les objectifs sont de permettre aux projets structuraux d'apporter une dimension de simulation numérique par des techniques de dynamique moléculaire, de Monte-Carlo, d'arrimage moléculaire (docking). Les travaux sont abordés en interaction directe avec les équipes impliquées en collaboration ou en fournissant les outils et environnement pour traiter le problème à partir de données structurales moléculaires issues de méthodes expérimentales (cristallographie, RMN, ME) ou à partir d'approche de reconstruction par homologie. Les interactions moléculaires sont évaluées par différentes approches de simulations numériques. Possibilité de criblage virtuel in silico, de travaux de chimie quantique sur des petites molécules ou des zones actives de macromolécules. Accès à des appareils de dichroïsme circulaire et de VCD.
<b>Mots clés</b>	Modélisation-Simulation-Visualisation
<b>Gouvernance</b>	La Maison de la Simulation de Champagne-Ardenne (MaSCA) regroupe 3 PFs: P3M-MaSCA (Plateau de Modélisation Moléculaire Moléculaire): Pr Manuel Dauchez, Dr Nicolas Belloy IGR Chef de projet Romeo-MaSCA (mésocentre de calcul), Pr Michael Krajecki, Dr Arnaud
<b>Secteur</b>	Public
<b>Localisation</b>	La plateforme est hébergée en Champagne-Ardenne mais l'essentiel des services est accessible à distance.
<b>Outils et techniques proposées</b>	modélisation moléculaire de macromolécules biologiques. Simulations numériques de dynamique moléculaire, de simulations de Monte-Carlo, de modélisation par homologie, de docking et de criblage virtuelle et études d'interactions protéines/peptides, protéines/protéines... Mécanique quantique de systèmes modèles, docking quantique... Simulations numériques HPC et hybride CPU/GPU, mise à disposition de centre de calculs et de logiciels, possibilité de stockages Visualisation et manipulation 3D, reconstruction d'images, utilisation d'outils de réalité virtuelle et d'outils haptiques; Développements logiciels dédiés imageries biologiques et/ou médicales. Imprimante 3D permettant une matérialisation des échelles nanoscopiques à visée d'interprétation et d'amélioration Utilisation des techniques de dichroïsme circulaire et vibrationnel (à venir), et de fluorescence.
<b>Utilisations actuelles et potentielles</b>	Les utilisations sont développées sur un ensemble de projets dépendant de l'échelle d'études (de l'électronique au tissulaire). Les développements et les utilisations sont effectuées avec les utilisateurs intéressés et participant aux

	<p>projets.</p> <p>Modélisation 1D-4D de macromolécules biologiques, simulations de dynamique moléculaire, de modes normaux et de grands mouvements sont possibles sur structures connues expérimentalement ou par homologie.</p> <p>Travaux de criblages virtuels, de docking moléculaire et quantique, développements de workflows dédiés. Utilisation de bases de données de la littérature pour réaliser les travaux. Développements d'outils de simulations et de prédictions de données physico-chimiques.</p> <p>Développements de logiciels de calculs HPC en CPU ou GPU, adaptation de projets à l'environnement matériel disponible. Stockage de données.</p> <p>Reconstruction de données biologiques et virtualisation possible.</p> <p>Développements de logiciels et d'outils de visualisation 3D autostéréoscopique.</p> <p>Développements potentiels dans les 3 aspects (modélisation-simulation-visualisation) en fonction des projets et des faisabilités (à contacter)</p>
<b>Prestations</b>	<p>Selon le projet, nous pouvons intervenir sous la forme de prestations ou dans le cadre de collaboration. Pour toute autre prestation contacter la PF pour évaluer faisabilité et coût qui pourraient être associés. Possibilité d'utiliser des logiciels libres et commerciaux. Contacter les chefs de projets.</p>
<b>Utilisateurs</b>	<p>12 à 15 laboratoires de l'Université de Reims Champagne-Ardenne, 2 laboratoires de l'Université de Picardie, 1 de l'Université de Nancy et 1 de l'université de Besançon</p> <p>Collaborations internationales (Allemagne, Belgique, Italie, Algérie)</p>
<b>Activité cancer</b>	15 %
<b>Équipements</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mésocentre de Calcul ROMEO (Supercalculateur hybride CPU/GPU, 255 Tflops)</li> <li>- Salle de modélisation et stations pré et post-simulations</li> <li>- Logiciels de modélisation et de simulations</li> <li>- Imprimante 3D</li> <li>- Salle de réalité virtuelle</li> <li>- Ecrans 3D autostéré</li> </ul>
<b>Valeur totale approximative des équipements</b>	2,8 M€
<b>Constitution d'une base de données</b>	Utilisation de BDD en ligne.
<b>Effectif de la plateforme</b>	1,5 sur P3M, 1,5 sur CI, 4 sur Romeo
<b>Labellisation</b>	P3M-MaSCA IBISA
<b>Certification</b>	NA
<b>Financements</b>	ETAT, CPER, DRRT, Université, Région Champagne-Ardenne, ReimsMétropole, projets PIA (3 projets validés), FUI, ANR.
<b>Réseaux</b>	<p>ROMEO-MaSCA réseau GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif), equip@meso et PRACE (Europe)</p> <p>P3M-MaSCA réseau IFB (Institut Français de Bioinformatique) et Elixir (Europe)</p> <p>CI-MaSCA réseau FUI neurosécurité.</p>
<b>Partenaires et collaborations</b>	<p>Partenariat fort avec ATOS/BULL et NVIDIA</p> <p>Sociétés de cosmétologie et pharmaceutique</p> <p>CEA, CNRS.</p>
<b>Perspectives et projets à court terme</b>	<p>Les techniques et matériels gravitant dans le domaine de l'informatique évoluent sans cesse et conduisent donc à une évolution permanente tant du point de vue matériels que logiciels. Renouvellement de l'environnement dans le futur CPER à envisager.</p> <p>Toutes les collaborations avec biologistes, biochimistes, médecins conduisent à une plus-value permettant de proposer des outils et des approches</p>

## Plateformes technologiques et d'expertises de l'interrégion Est

	transversales dans lesquels "les informatiques" prennent toute leur dimension.
<b>Références</b>	
<b>Besoins</b>	Equipements
<b>Commentaires</b> Quels sont vos attentes vis-à-vis du Cancéropôle ?	Avoir une réunion comme celle menée par exemple à Bruxelles en Novembre 2014 intitulée "HPC & Health" avec une vision plus transrégionale, avec un accent mis sur la complémentarité des approches et pas simplement de la sous-traitance et de l'utilisation ponctuelle.