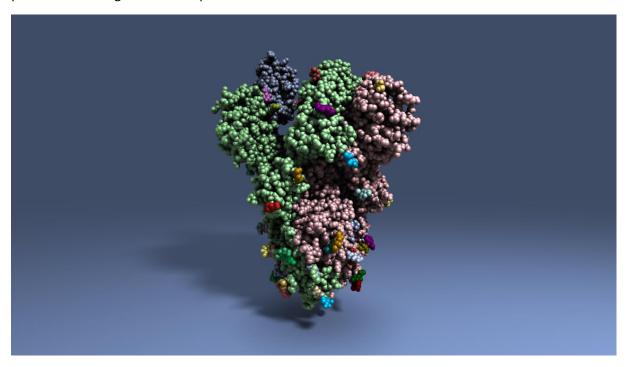
Afin d'analyser la structure et le comportement du virus SARS-CoV-2 (responsable du COVID-19) pour ensuite identifier de potentiels inhibiteurs de son activité, des simulations à grande échelle sont actuellement en cours de réalisation sur le supercalculateur Jean Zay (cf. <a href="http://www.genci.fr/fr/node/1043">http://www.genci.fr/fr/node/1043</a>). Une visualisation précise des molécules concernées, de leurs propriétés et de leurs interactions physico-chimiques est essentielle à la compréhension des résultats.

Dans le cadre de ce projet, les travaux menés à XLIM (ASALI/SIR), en collaboration avec l'équipe M2D2 du CNAM, consistent à concevoir des méthodes d'informatique graphique innovantes, mises en œuvre au sein d'un nouvel outil permettant la visualisation de ces résultats en temps-réel ainsi que la production d'images de haute-qualité à des fins de communication.



Représentation de la molécule Spike (PDB id 6VSB) du SARS-COV-2 qui permet l'interaction du virus avec les cellules humaines. Image générée avec le logiciel VTX, développé par M. MARIA<sup>1,2</sup>, S. GUIONNIERE<sup>2</sup> et M. MONTES<sup>2</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Laboratoire XLIM (axe ASALI, équipe SIR), UMR CNRS 7252 – Université de Limoges

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Laboratoire GBCM (équipe M2D2), EA 7528 – Conservatoire National des Arts et Métiers, Paris