

Su questo sito utilizziamo cookie tecnici e, previo tuo consenso, cookie di profilazione, nostri e di terze parti, per proporti pubblicità in linea con le tue preferenze. Se vuoi saperne di più o prestare il consenso solo ad alcuni utilizzi [clicca qui](#). Cliccando in un punto qualsiasi dello schermo, effettuando un'azione di scroll o chiudendo questo banner, invece, presti il consenso all'uso di tutti i cookie

le Scienze

edizione italiana di Scientific American

[NEUROSCIENZE](#)[MICROBIOLOGIA](#)[ASTROFISICA](#)[EPIDEMIOLOGIA](#)[INTELLIGENZA ARTIFICIALE](#)[NUCLEARE](#)

18 marzo 2020



Caccia ai farmaci contro Covid-19 con il supercomputer

di Riccardo Oldani



© Exscalate4CoV

E' italiano il supercomputer Marconi che, nel quadro del progetto europeo Exscalate4CoV, ha iniziato a testare virtualmente le possibili interazioni fra le molecole di 10.000 farmaci e il nuovo coronavirus per scoprire se qualcuna ha il potenziale per contrastarlo

In questo articolo parliamo di:

COMPUTER SCIENCE FARMACI

Nella corsa contro il tempo per mettere a punto farmaci in grado di contrastare con efficacia Covid-19, la malattia provocata dal nuovo coronavirus SARS-CoV-2, l'Italia ha un ruolo di primissimo piano, e non soltanto per lo sforzo compiuto sul

campo dagli epidemiologi e infettivologi che lavorano nei nostri ospedali.

Tra i progetti di ricerca in corso spicca **Exscalate4CoV**, finanziato con tre milioni dalla Commissione europea, che vede impegnato un folto gruppo di centri di ricerca del nostro paese nell'uso di tecnologie di supercalcolo e di *urgent computing* per contrastare la pandemia in corso. Il progetto è condotto da un consorzio, coordinato dall'azienda italiana Dompé Farmaceutici, che aggrega 18 istituzioni di 7 nazioni europee, di cui 9 italiane, fra le quali il Consorzio universitario **Cineca** e il Politecnico di Milano

Exscalate4CoV, già in piena corsa, sta usando il supercomputer Marconi del **Cineca** per passare in rassegna una vasta collezione di molecole: si tratta di farmaci già approvati per l'uso nell'uomo e pronti per nuovi studi clinici, ma anche di principi attivi nuovi non ancora testati sulla nostra specie.

Scopo della valutazione virtuale di queste molecole è verificare le loro potenziali capacità di contrastare il virus in modo efficace, migliorando il decorso di Covid-19. Attraverso lo screening virtuale di farmaci già approvati per uso umano, anche se per differenti indicazioni terapeutiche, è possibile selezionare un numero abbastanza ristretto di molecole da testare in tempi brevissimi sull'uomo, consentendo una risposta rapida all'emergenza generata dalla pandemia.

LEGGI ANCHE:



La chimica al computer

di Marco Motta

Andrea Beccari, coordinatore del progetto e responsabile delle piattaforme e dei servizi di ricerca e innovazione di Dompé, ci spiega l'articolazione di questo complesso sforzo. "Il punto di partenza – dice Beccari - è la piattaforma ExScalate, che raccoglie una libreria digitale di 500 miliardi di molecole di facile sintesi che, quindi, possono essere trasformate rapidamente in farmaci. Questo enorme database, sviluppato negli ultimi 15 anni da Dompé in collaborazione con il **Cineca** e messo a disposizione della comunità scientifica, consente di prevedere con tecniche computazionali l'attività farmacologica di un enorme numero di molecole. In sostanza vengono usate le informazioni strutturali delle proteine, già note a livello sperimentale o previste a computer grazie a cosiddetti modelli omologici. Si ricorre poi alle tecniche di *docking* molecolare, che consentono di predire la probabilità con cui esse si possono legare un enzima, un recettore o un'altra proteina connessi a una patologia, adesso Covid-19."



LE SCIENZE DI MARZO

Venezia affonda



LEGGI



MIND DI MARZO

La forza di un sorriso



LEGGI

I quaderni de Le Scienze



Dinosauri

Nuove scoperte e studi stanno riscrivendo la storia dell'ascesa e della caduta degli antichi dominatori della Terra

ACQUISTA

L'esperienza maturata sul virus Zika

Le potenzialità di ExScalate nell'individuare in tempi rapidi farmaci contro possibili epidemie virali o batteriche sono già state testate in passato nell'ambito del progetto europeo Antarex, coordinato da Cristina Silvano, docente di architettura dei calcolatori al Politecnico di Milano. "Nel corso di Antarex - ricorda Silvano - abbiamo simulato con il supercomputer Marconi un caso applicativo per individuare possibili molecole candidate alla cura del virus Zika, che nel 2016 arrivò a minacciare lo svolgimento delle Olimpiadi di Rio de Janeiro. Si è trattato del più grande esperimento di *virtual screening* effettuato con un software di simulazione fatto girare su *thread* paralleli, con una potenza di calcolo pari a 10 petaflop, cioè 10 milioni di miliardi di operazioni al secondo."

I risultati sul virus Zika sono stati sottoposti a una procedura di valutazione e validazione che oggi può essere messa a frutto anche dal progetto ExScalate4CoV, per il quale la validazione sarà condotta dall'Università cattolica di Lovanio, in Belgio.

Il progetto Antarex, quindi, è stato un antesignano di ExScalate4Cov e ha consentito di definire procedure e di accumulare esperienze oggi molto utili sia per la ricerca su SARS-CoV-2, sia ottimizzare le operazioni di supercalcolo. "Oggi - prosegue Silvano - il supercomputer Marconi, tra i 20 più potenti al mondo, sta già lavorando a una velocità ancora superiore: a 50 petaflop. E grazie agli investimenti decisi dall'Italia e dall'Europa è in corso un ulteriore upgrade che lo porterà a 150 petaflop, che potrebbe collocarlo tra i 5 supercomputer più potenti del mondo. Parliamo di macchine che si basano su architetture di sistemi eterogenei: combinano cioè l'uso di processori standard con GPU, cioè unità di elaborazione grafica usate come acceleratori della computazione."

Come sta procedendo allora la ricerca sul nuovo coronavirus? "Non appena, il 17 gennaio scorso, è stato reso noto il genoma del virus, per fortuna abbastanza semplice - dice Beccari - siamo partiti con una prima valutazione di tutte le molecole già disponibili per l'uso umano. Si tratta di un database 'ristretto' di circa 10.000 principi attivi che i medici, dati i numeri, non possono provare direttamente su pazienti."

LEGGI ANCHE:

**Il futuro ancora più veloce dei supercomputer**

di Katherine Bourzac/Nature

Questa prima fase del progetto ExScalate4CoV potrebbe portare ad risultati

**In cerca di altri mondi**

La caccia ai pianeti extrasolari è solo agli inizi, nella speranza di trovare il gemello perfetto della Terra

ACQUISTA

**Intelligenza artificiale**

Luci e ombre degli straordinari progressi di una tecnologia sempre più potente e pervasiva

ACQUISTA

**Coscienza**

Le neuroscienze e il problema irrisolto dell'esperienza cosciente

ACQUISTA

**Le collane di Le Scienze**

Colleziona i volumi in formato digitale

preliminari, cioè a isolare un ristretto numero di farmaci potenzialmente attivi contro il coronavirus SARS-CoV-2 e di pronta produzione, nell'arco di due o tre settimane. I candidati identificati saranno sottoposti ad altre valutazioni, per arrivare a strutturare insieme con la European Medicine Agency (EMA), un modello di sperimentazione efficace delle molecole per velocizzarne l'uso terapeutico. La ricerca si estenderà poi a tutto il resto della piattaforma ExScalate e, quindi, in prospettiva a tutti i 500 miliardi di molecole del database.

La potenza di calcolo richiesta dalla simulazione di un numero così elevato di molecole è enorme. "Le proteine - spiega Beccari - sono entità dinamiche, che si muovono nell'ambiente biologico in cui si trovano. Perché la simulazione sia accurata occorre applicare particolari tecniche di 'dinamica molecolare', che diano al modello virtuale la dinamicità e plasticità delle molecole reali, così da valutare la loro effettiva capacità di legare le molecole testate. I calcoli necessari a questo tipo di simulazione sono molto lunghi e per questo il **Cineca** di Bologna ci ha messo a disposizione tutta la sua potenza di calcolo."

Lo screening su 10.000 farmaci

Il progetto ExScalate4CoV ha destato grande interesse in tutta la comunità scientifica e sono giunte subito proposte di collaborazione da tutto il mondo, sia da centri di ricerca che da aziende private. La pandemia, però, ha colto di sorpresa tutto il sistema mondiale, ed evidenziato che, per eventi di questo tipo, il coordinamento deve essere su una scala sempre più ampia, non solo europea, ma mondiale.

"Appena iniziato il lavoro di screening molecolare - dice ancora Beccari - abbiamo iniziato a porci anche il problema di come reperire e produrre in tempi brevi le 10.000 molecole del primo livello di valutazione. Quando avremo un risultato positivo dagli screening si porrà infatti il problema di come procurarsi o sintetizzare velocemente il farmaco per i test sull'uomo, e a questa eventualità dobbiamo prepararci in anticipo. Un altro aspetto importante che in futuro potrà accelerare l'identificazione di trattamenti efficaci è rendere subito disponibili i patogeni, in questo caso SARS-CoV-2, ai centri più qualificati a livello mondiale per effettuare lo screening dei possibili farmaci e consentire di avviare i test in tempi brevi."

Se c'è una lezione da imparare da Covid-19 è proprio che certe minacce vanno affrontate tutti insieme, e non in ordine sparso. E che le infrastrutture che devono intervenire in caso di emergenza devono essere tenute sempre attive e pronte.

Contenuti correlati:



Romanzo matematico



A richiesta con «Le Scienze» di febbraio, il libro di Mickaël Launay



Brevi lezioni di psicologia

"Farmaci e sostanze" a richiesta con «Mind» di marzo il libro di Lev Iversen



Il mio abbonamento

Scopri tutte le iniziative e le offerte per ricevere la rivista a casa tua