

A Bologna

di Francesca Basso
e Fabio Savelli

Il «supercervellone» che cerca la cura con miliardi di calcoli

In gara per i 10 milioni stanziati dall'Ue

Per battere il coronavirus, appena ribattezzato Covid19, occorre trovare una terapia efficace che blocchi la sua capacità di infezione e la sua replicabilità. Per farlo servono supercalcolatori come il Marconi a disposizione del Cineca di Bologna — il consorzio interuniversitario nazionale — tra i più potenti del mondo e in procinto di convertirsi, nel 2021, in un super-cervellone di classe pre-exascale: un supercomputer con elevatissime capacità di elaborazione, in grado di eseguire 150 milioni di miliardi di calcoli al secondo.

Il Cineca sta lavorando da giorni con l'azienda biofarmaceutica Dompé sul coronavi-

rus, da quando l'istituto Spallanzani ha reso disponibile il rilascio della sequenza genomica. Sta lavorando sulla piattaforma Exscalate, cioè la biblioteca chimica costruita con Dompé che ha archiviato oltre 500 miliardi di molecole. Il supercomputer Marconi — attingendo da questo immenso archivio di principi attivi già testato per il virus Zika — ne può valutare più di tre milioni al secondo su 30 target biologici differenti in contemporanea. Con un costo di 4 mila euro per lo screening di circa un miliardo di molecole. D'altronde sviluppare una molecola da immettere sul mercato costa tra i 2-3 miliardi e tra i 7 e i 10 anni per le varie fasi di sperimentazione.

Ecco perché le prestazioni del Marconi proiettano l'Italia tra i leader in Europa nel settore del supercalcolo. Solo un paio di settimane fa il commissario Ue al Mercato interno, il francese Thierry Breton, ha lanciato una «call» da 10 milioni di euro, che chiude oggi alle 17, per progetti di ricerca finalizzati alla risposta alle emergenze di sanità pubblica, a cui hanno partecipato il Cineca e il Supercomputing Center di Barcellona. I due centri hanno anche già offerto la propria disponibilità a collaborare e a mettere a disposizione i supercalcolatori per i progetti di ricerca sul Coronavirus. Racconta Sanzio Bassini, direttore della divisione

supercalcolo del Cineca, che «il database esistente di farmaci è stato confrontato con il virus e i primi risultati sono previsti entro 20 giorni. Parallelamente, i team stanno già lavorando alla fase II, allo sviluppo di nuove molecole potenzialmente in grado di inibire le proteine virali prima che il virus attacchi il corpo». Aggiunge Andrea Beccari, responsabile della piattaforma Drug Discovery di Dompé, che «Exscalate è fondamentale per incrociare miliardi di dati in pochi secondi con un processo di selezione virtuale su obiettivi farmacologicamente rilevanti, come quello di ridurre la replicabilità del virus costruendo terapie farmacologiche efficaci basate su nuovi composti attivi».



Sanzio Bassini,
direttore della
divisione
supercalcolo
del Cineca

© RIPRODUZIONE RISERVATA

