

Dompé lancia un supercalcolatore per prevenire le epidemie

È stato sviluppato con **Cineca** e PoliMi



Biotech

di **Fabio Savelli**

Si chiama «urgent computing» ed è la grande sfida della comunità internazionale. Come trovare una risposta farmacologica in pochi giorni in caso di pandemie? Come affrontare gli effetti di un'epidemia su larga scala trovando una sintesi chimica efficace in grado di bloccarla o circoscriverla? L'Italia stavolta diventa un punto di riferimento internazionale grazie all'eccellenza della nostra capacità di calcolo, alle competenze ingegneristiche, agli investimenti del gruppo biofarmaceutico Dompé. Perché è italiana la piattaforma Exscalate, cioè la biblioteca chimica frutto della

collaborazione tra il Politecnico di Milano, il consorzio **Cineca** (uno dei maggiori centri di calcolo al mondo) e appunto il gruppo controllato dalla famiglia Dompé. Si tratta di un archivio di oltre 500 miliardi di molecole, che può valutare più di tre milioni di molecole al secondo su 30 target biologici differenti in contemporanea. Con un costo per lo screening di circa 1 miliardo di molecole di 4mila euro. Prestazioni che superano di molto gli attuali limiti quantificabili, rivela un recente articolo della rivista *Nature*, nell'ordine di centinaia di milioni di molecole.

Multipli diversi grazie alla componente di accelerazione tecnologica fornita dal Politecnico di Milano e alle potenzialità del supercalcolatore Marconi, tra i più importanti cervelloni al mondo. Sul quale **Cineca**, il consorzio patrocinato dal ministero della pubblica istruzione, ha permesso di adattare l'applicazione e di

farla «girare» per questo obiettivo. Exscalate trova il suo primo campo di applicazione sulla crisi epidemiologica causata dal virus Zika, ad oggi ancor privo di cure efficaci. La piattaforma ha identificato molecole potenzialmente capaci di inibire cinque delle sette proteine virali (NS5, NS1, NS2B/NS3, NS3 e la proteina di membrana) ora in fase di sperimentazione biologica. I cui risultati saranno resi pubblici appena possibile sul sito di Antarex, il progetto europeo a cui ha aderito il consorzio pubblico-privato attingendo ad un finanziamento di tre milioni di euro.

Racconta Andrea Beccari, responsabile di Exscalate e della piattaforma Drug Discovery di Dompé che «si è in grado di ridurre drasticamente il processo di selezione virtuale su obiettivi farmacologicamente rilevanti per giungere a nuovi composti attivi». Aggiunge Carlo Cavazzoni, re-

sponsabile ricerca e sviluppo di **Cineca** che «presto l'Europa diventerà uno dei maggiori attori nel supercalcolo grazie al potenziamento dell'attuale infrastruttura grazie con un investimento di più di un miliardo di euro». Rileva la prof.ssa Cristina Silvano del Politecnico di Milano e coordinatrice del progetto Antarex che «la piattaforma consente di approssimare in modo intelligente la logica di esecuzione dell'applicazione in modo da consumare meno risorse di supercalcolo migliorando l'efficienza energetica».

D'altronde l'obiettivo della comunità internazionale è anche quello di trovare il miglior compromesso tra le prestazioni e il consumo energetico, visti i limiti Ue di un megawatt di consumo per calcoli così sofisticati. Aspetto non secondario della piattaforma è che si presta al progresso delle prestazioni anche per gli obiettivi di altre compagnie farmaceutiche.

© RIPRODUZIONE RISERVATA

Il supercomputer Marconi usato per trovare composti da una biblioteca chimica di miliardi di molecole

La velocità

La valutazione di 3 milioni di molecole al secondo su 30 target in contemporanea

