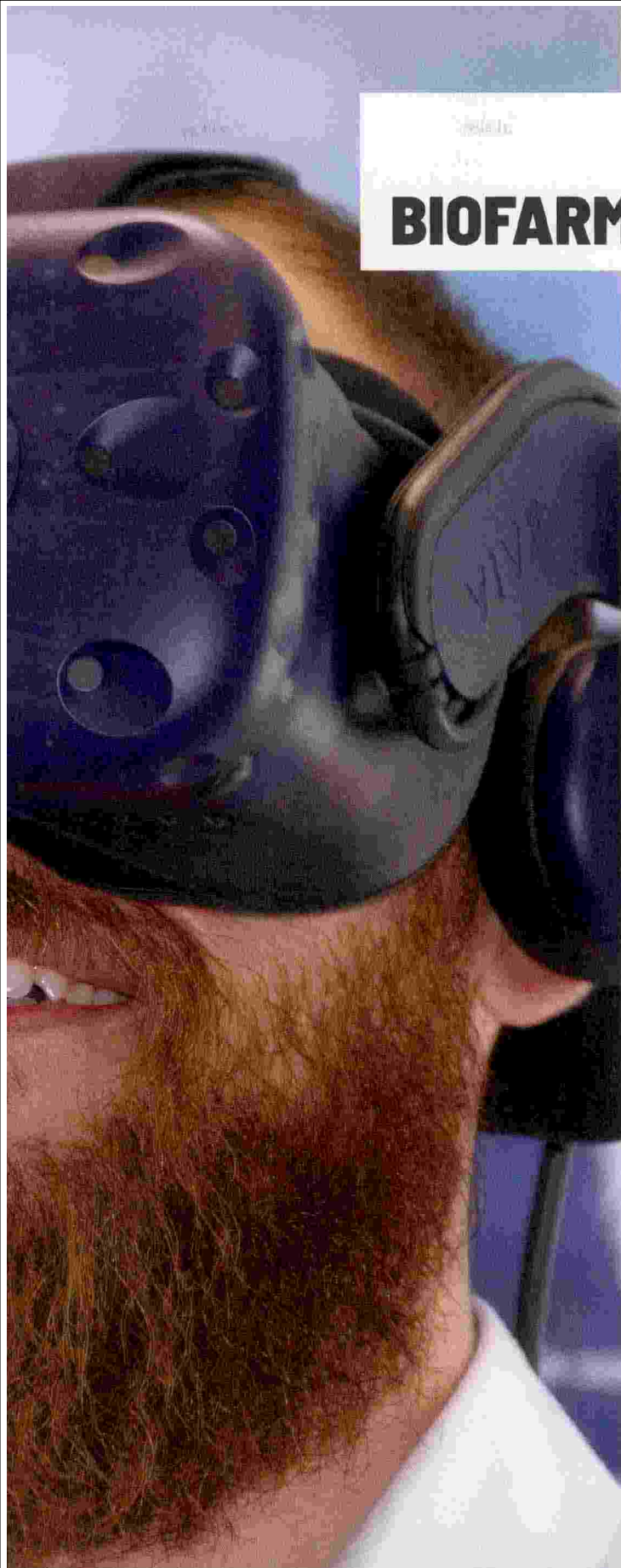




30 | Class | Maggio 2020

EXSCALATE BIOFARMA E SUPERCALCOLO



L'emergenza ha consentito la nascita in tempo record del consorzio pubblico-privato Exscalate4CoV, a cui hanno aderito 18 istituzioni e centri di ricerca di sette paesi europei. «Come Dompé, abbiamo offerto gratuitamente l'utilizzo della piattaforma di calcolo Exscalate (EXaSCale smArt pLatform Against paThogEns) non appena, a metà gennaio, si è resa disponibile la sequenza genetica di SARS-CoV-2», spiega Andrea Beccari BU head, R&D Platforms & Services di Dompé. «I software che "girano" su Exscalate permettono di mettere a confronto le strutture chimiche dei farmaci con quelle delle proteine virali e di definirne il grado di interazione, cioè di potenziale efficacia. Attraverso processi di machine learning, l'IA del supercomputer Marconi del **Cineca** impara quali sono le caratteristiche dell'interazione. All'aumentare delle analisi, aumenta l'informazione appresa e quindi la velocità di calcolo. Oggi il software Exscalate, al ritmo di 3 milioni di molecole diverse analizzate contro 30 target virali al secondo, sta verificando le possibili

interazioni tra le proteine di Covid-19 e i circa 2.000 farmaci in commercio. Non solo. Stiamo valutando la possibilità di testare alcune delle altre 10mila molecole che non sono mai state commercializzate; ad esempio, è possibile che una molecola inizialmente in ricerca e sviluppo per una patologia cardiaca, e dimostratasi non adatta, sia invece attiva contro il virus. Stiamo poi passando in esame i 500 miliardi di molecole ancora sconosciute, contenute nella libreria molecolare di Exscalate. Con potenze di calcolo normali sarebbero necessari molti mesi, ma unendo le forze di tutti i partner lo stiamo facendo in poche settimane. Abbiamo anche lanciato una sorta di crowdfunding per chiedere a tutti i centri di ricerca pubblici e privati in Europa e negli Usa di inviarci le proprie molecole in fase di sviluppo clinico, indipendentemente dalla patologia per cui sono state studiate, per testarle virtualmente contro il virus. L'idea è far diventare Exscalate, a partire da questa esperienza, un hub mondiale per la valutazione delle molecole». (C.B)
© Riproduzione riservata