

# SUPERCOMPUTER

# VS

# CORONAVIRUS

## L'INCHIESTA

di MASSIMO SIDERI

# SUPERCALCOLO (+ HOMO SAPIENS) CONTRO COVID-19

È capace di cercare in una biblioteca chimica di 500 miliardi di molecole quella che potrebbe aiutarci a trovare un vaccino, riducendo i test sui pazienti umani. Ecco l'AI (anche made in Italy) amica dell'uomo

Il progetto Exscalate  
aveva già permesso  
di trovare molecole efficaci  
su 5 delle 7 proteine dannose  
di Ziga. Con il pc Leonardo

la risposta potrebbe passare  
da 86 ore a 30 minuti  
La sfida ora è usare  
questi supercomputer  
con il Coronavirus

**S**upercalcolo contro Coronavirus. In queste ore di emergenza mondiale si sta combattendo anche questa battaglia lontano dagli ospedali, dai cordoni sanitari, dalle ansie delle persone e dal sacrificio di dottori, infermieri e volontari. L'intelligenza artificiale sta macinando grandi ammassi globulari di dati per

accelerare la sintesi e la cristallizzazione delle proteine pericolose all'interno del Covid-19. Sta cercando tra 500 miliardi di molecole stipate nella propria memoria, con impazienza e un'avidità di informazioni che nessun gruppo umano potrebbe avere, per vedere quale potrebbe creare una reazione interessante sul Coronavirus. La

capacità di elaborazione è pari a 3 milioni di molecole al secondo, un lavoro di scrematura che, per inciso, in assenza di supercomputer, richiederebbe sì l'esperienza dei virologi, ma anche il cosiddetto uso caritatevole, cioè la sperimentazione di alcune di queste molecole in pazienti in fin di vita. Che i supercomputer del Cineca che

usano la piattaforma in parte made in Italy Exscalate (citata da *Nature* come la più avanzata al mondo in questo campo) risolvano o meno le equazioni del Covid-19, il futuro è segnato: macchine super «intelligenti» che aiutano l'umanità nel progresso scientifico e industriale. Non robot che ci battono a scacchi o ci rubano il posto di lavoro. Può sembrare fantascienza, ma è già scienza. Un misto di capacità di calcolo, big data e *open science*. Come quella dimostrata da un'email arrivata a Milano dall'Università del Texas: «Sono contento di condividere con lei le mie ricerche». Su cosa?

Per capirlo bisogna fare un passo indietro: un virus è in sostanza un ammasso di proteine. Alcune fanno solo da involucro, altre, in questo caso 4 o 5, sono quelle pericolose. Dopo aver completato la mappatura del genoma del Coronavirus quello che si sta facendo nei laboratori di tutto il mondo è creare i cristalli in 3D di queste 4-5 proteine. La prima è stata portata a compimento in Cina. Pochi giorni fa, il 19 febbraio, il professore dell'Università del Texas, Jason McLellan, ha postato su LinkedIn l'articolo di *Science* in cui parlava del successo del suo team su un nuovo cristallo. Letta questa informazione su LinkedIn, il responsabile della *Drug Discovery Platform* di Dompé e della piattaforma Exscalate, Andrea Beccari, ha scritto a McLellan. Ed è così che si è visto rispondere con l'email dal Texas che gli dava accesso a informazioni che sul mercato potrebbero anche avere un valore. È la rivoluzione della scienza aperta avviata tanti anni fa da scienziati come Ilaria Capua e che oggi rischiamo di dare per scontata. Quelle stesse informazioni sono state digerite ora dal supercomputer Cineca e tra pochi giorni, grazie all'upgrade Marconi 100, potranno lavorare 24 ore su 24, 7 giorni su 7 senza sentire la fatica umana, per dare il proprio contributo in termini di capacità di calcolo e simulare le interazioni tra proteine del virus e molecole dei farmaci, in commercio o comunque già in fase di test.

La stessa piattaforma da 12 petaflops usata nel caso del virus Zika lavorò per 84 ore con un milione di operazioni in parallelo. In altri termini quando avremo oltre 3.600 supercomputer Exscale (un miliardo di miliardi di operazioni al secondo ciascuno) potremo ottenere la risposta su una molecola in un solo secondo. Anche questa per ora è un'ambizione

fuori scala: i computer Exscale sono in fase di costruzione. C'è grande attesa per El Capitan del Livermore National Laboratory in California che ha richiesto un investimento di 600 milioni di dollari e che a regime sarà il più potente computer al mondo costruito con finalità scientifiche (è chiaro che in queste classifiche che si possono trovare su *top500.org* non rientrano tutti gli apparati militari top secret che gli Stati non vogliono certo pubblicizzare). Leonardo, gestito sempre dal Cineca e costruito con 240 milioni grazie a un finanziamento europeo, avrà una potenza di 270 petaflops, dunque impiegherebbe 3-4 ore (al posto delle 84 ore effettive del progetto già concluso) a trovare le molecole potenzialmente capaci di inibire 5 delle 7 proteine virali di Zika, virus ancora senza cura.

I test sui pazienti rimangono per ora lo standard. Per esempio, per il primo paziente positivo al Coronavirus individuato a Pavia, l'infettivologo Raffaele Bruno sta usando un cocktail di farmaci che contengono anche un vecchio farmaco contro l'Hiv. Una volta individuato il genoma del virus si procede con l'esperienza. Ma la grande rivoluzione informatica in corso (per gli appassionati un passaggio dalla vecchia Cpu alle Gpu, cioè a microprocessori nati per la grafica) permette simulazioni virtuali con la possibilità di analizzare gli effetti dell'incontro di una data molecola con una data proteina. È la stessa tecnologia che El Capitan userà per simulare la prima reazione atomica virtuale senza la necessità di far esplodere realmente, in un test, una bomba atomica. O, ancora, quella che viene usata per progettare i motori degli aerei in Cina senza costruire il prototipo.

Ora il consorzio pubblico-privato dell'Exscalate che, tra gli altri, comprende oltre a Dompé, il Politecnico di Milano, il Cineca, il Katholieke Universiteit Leuven, il Fraunhofer e lo Spallanzani, ha avviato la procedura per sottoporre il piano al vaglio della Commissione europea.

Per inciso, a dimostrare che la società aperta è pronta a cogliere la sfida della sostenibilità, l'Eni — che ha appena portato la propria capacità di supercalcolo complessiva a un picco di 70 milioni di miliardi di operazioni con virgola mobile al secondo (70 petaflops) — ha messo a disposizione una parte di essa. Se questa disponibilità non fosse stata accettata per questioni non tecniche sarebbe un errore. Non c'è spazio per antagonismi o protagonismi.

Per l'Europa è un'al-

tra chiamata da non lasciare senza risposta per non dare riprova di una vecchia battuta, probabilmente apocrifa, che si fa risalire a Henry Kissinger: «È nata l'Unione europea? E quale numero di telefono devo fare?».

Il virus oggi sembra piatto. Come poteva apparire il mondo dopo l'arrivo di Internet. Ma è proprio non lasciandosi andare a facili considerazioni sul nostro rapporto con la tecnologia e il progresso che il mondo potrà tornare ad essere tondo.

[msideri@corriere.it](mailto:msideri@corriere.it)

© RIPRODUZIONE RISERVATA



**Virologa**  
Ilaria Capua (53 anni)  
è nota per i suoi studi  
sui virus influenzali,  
in particolare,  
sull'influenza aviaria



**Presidente**  
Milanese, Sergio Dompè  
(64 anni)  
è ceo della società  
biofarmaceutica  
omonima



**Politico**  
Di origine ebraica, Henry  
Kissinger (96 anni),  
è membro del Partito  
repubblicano, è stato  
segretario di Stato Usa