

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