

SPECIALE SALUTE E BENESSERE

QUANDO L'HPC TRAE VANTAGGIO DA SFORZI CONDIVISI

Il supercomputing mette il turbo alla ricerca di nuove terapie

La testimonianza di **Dompé** farmaceutici, partner del progetto EuroCC. Prima fase chiusa con rilevanti risultati

Riccardo Cervelli

■ Scoprire come sfruttare al massimo i fenomeni dell'infinitamente piccolo richiede sforzi enormemente grandi. Incombenze che possono essere portate a termine solo con l'aiuto di tecnologie non convenzionali: i «supercomputer». Parliamo di grandi infrastrutture informatiche che solo poche industrie o enti di ricerca possono possedere internamente, ma che sempre più spesso sono realizzate da alleanze nazionali e internazionali. Come è il caso di EuroCC, una piattaforma di servizi legati all'«High Performance Computing» (HPC) e ai «Big Data» con centro di competenza il Cineca, Consorzio Interuniversitario senza scopo di lucro formato da 112 enti pubblici con sede a Bologna.

EuroCC, che a fine anno chiuderà il suo primo ciclo di lavoro, è uno dei progetti nati

in Europa nell'ambito dell'iniziativa Ue per il supercalcolo, la cosiddetta «HPC Joint Undertaking». Tra i partner italiani c'è **Dompé** farmaceutici. «Insieme ad altri partner industriali del calibro di Leonardo ed Eni - spiega Domenico Bonanni, Exscalate Discovery Platform Specialist dell'azienda, ed esperto di chimica computazionale - contribuiamo alla creazione di competenze e servizi specializzati in ambito HPC. Nello specifico, sono quattro i temi di ricerca che stiamo esplorando insieme al Cineca, negli ambiti della Dinamica Molecolare, del *Deep Learning*, del *Quantum Computing* e della Fluidodinamica Computazionale».

L'azienda biofarmaceutica italiana si è già distinta in passato per la vocazione a investire nella «trasformazione digitale». E nel farlo, oltre a lanciare proprie iniziative (come la piattaforma Exscalate per la *drug*

discovery, ossia l'individuazione automatizzata di molecole potenzialmente in grado di affrontare determinate sfide terapeutiche), ha da sempre adottato un approccio *open innovation* collaborando con accademie, centri di ricerca e *start-up*.

«La rete di collaborazioni consolidata dalla partecipazione a progetti come EuroCC ha un ruolo fondamentale nelle nostre ricerche. Se siamo e restiamo competitivi a livello internazionale nell'ambito della *drug discovery* computazionale lo dobbiamo anche ai nostri partner. Vorrei citare un esempio per tutti: l'efficacia terapeutica recentemente confermata da due studi clinici della molecola di Raloxifene, identificata dal consorzio Exscalate4CoV come potenziale trattamento domiciliare per i casi lievi e moderati di Covid-19».

Altrettanto entusiasmante si è rivelato il primo bilancio dell'esperienza EuroCC. «Due

dei quattro progetti avviati da **Dompé** sulla dinamica molecolare e il *quantum computing*, hanno già prodotto risultati confluiti in due studi che, nelle prossime settimane saranno sottomessi al vaglio di una rivista scientifica internazionale e un terzo lavoro è in scrittura. Il progetto di ricerca nella fluidodinamica computazionale ci permetterà, entro 6 mesi, di ridurre gli scarti dei processi produttivi di un farmaco con la previsione della dimensione media delle particelle di granulato e le relative traiettorie, in funzione dei valori dei parametri di processo selezionabili dall'operatore di produzione. Infine, sviluppando quanto già presente in letteratura scientifica, il progetto di ricerca sul *Deep Learning* ha dato vita a un *tool* per la predizione della conformazione più probabile di una molecola all'interno di una proteina d'interesse terapeutico».



STRATEGIA **Dompé** farmaceutici continua a investire con successo nella «trasformazione digitale»

