



I supercalcolatori di Elettra per neutralizzare Covid-19

Finanziamento di 3 milioni dalla Ue per un team formato da 18 Istituti scientifici
Paola Storici: «L'obiettivo è identificare molecole terapeuticamente efficaci»

Lorenza Masè

TRIESTE Vecchi, nuovi o potenziali farmaci che potrebbero funzionare contro il coronavirus da poter utilizzare in tempi rapidi grazie all'intelligenza artificiale e alla potenza di calcolo dei super computer in grado di esaminare virtualmente l'efficacia di oltre 500 miliardi di piccole molecole come antivirali efficaci. Questo il cuore del progetto emanato con carattere d'urgenza e approvato in tempi rapidissimi dalla Commissione Europea con un finanziamento di 3 milioni di euro a cui partecipa anche Elettra Sincrotrone a fianco dell'Istituto nazionale per le malattie infettive Lazzaro Spallanzani di Roma. Si chiama Exscalate4CoV (E4C) ed è uno dei 17 progetti di ricerca dell'Unione Europea volti a contrastare l'epidemia Covid-19 con un finanziamento totale di 47,5 milioni di euro che inizialmente dovevano essere solo 10 milioni. Spiega la dottoressa Paola Storici, biochimica che guida il team di ricercatori di Elettra coinvolti: «L'obiettivo è duplice: da un lato vogliamo identificare molecole terapeuticamente efficaci contro il Covid-19, dall'altro sviluppare e consolidare nel tempo uno strumento efficiente per contrastare future epidemie virali».

Si tratta di sfruttare le potenzialità di supercalcolo integrate con le migliori competenze scientifiche in ambito life-science presenti in Europa

per fronteggiare al meglio e in tempi rapidi situazioni di pandemia di interesse sovranazionale. Il fulcro del progetto è il sistema di supercalcolo più performante a livello globale grazie alla sua "biblioteca chimica" di 500 miliardi di molecole, in grado di valutare di più di 3 milioni di molecole al secondo, sviluppato da Dompè Farmaceutici Spa che coordina un consorzio pubblico-privato composto da 18 istituzioni e centri di ricerca di 7 paesi europei tra cui Politecnico di Milano (Dipartimento di Elettronica, Informazione e Bioingegneria), Consorzio Interuniversitario Cineca (Supercomputing Innovation and Applications), Università degli Studi di Milano, solo per citarne alcuni.

«Si tratta di una piattaforma sviluppata da Dompè farmaceutici per identificare nuovi farmaci - dichiara Federica Mantovani dell'Ufficio Relazioni Industriali di Elettra - supportata da processi di calcolo intelligente e dall'enorme potenza di moderni super computer che è stata messa in campo per la prima volta l'anno scorso per sviluppare un farmaco contro il virus Zika».

«Nel progetto - commenta Paola Storici - sono coinvolti i più potenti centri di calcolo italiani ed europei proprio per processare la più grossa quantità possibile di informazioni in grado di combinare la ricerca di potenziali farmaci, rivalutando anche piccole molecole chimiche già presenti sul mercato perché studiate per altre patologie e già testate

per essere sicure nell'uomo, con uno screening virtuale per colpire i punti di attacco e di propagazione del virus e bloccare i meccanismi di azione e di mutazione del virus Covid-19". Il ruolo di Elettra consiste nella progettazione di nuove molecole, potenziali farmaci, applicando strumenti di biologia strutturale necessari per convalidare i modelli virtuali originati dalla piattaforma Exscalate.

In particolare il laboratorio di biologia strutturale di Elettra e le linee di luce dedicate alla bio-cristallografia, saranno impegnate nella determinazione delle strutture delle proteine bersaglio per i potenziali farmaci, forniranno cioè gli strumenti, come la luce di sincrotrone per validare alcuni passaggi sperimentali necessari a dare i dati alla piattaforma di super calcolo". Commenta la dottoressa Storici: «Il lavoro di Elettra non prevede l'utilizzo di virus o assemblati virali potenzialmente patogeni, ma si concentrerà esclusivamente sull'utilizzo di proteine ricombinanti, del tutto analoghe a quelle correntemente espresse ed analizzate ad Elettra». —

© RIPRODUZIONE RISERVATA



IL PICCOLO



La biochimica Paola Storici



La sala sperimentale Fermi al centro di ricerca Elettra Sincrotrone di Trieste