

Un'arma potenziale

L'algoritmo seleziona molecola già in commercio

Il nuovo candidato è un generico per l'osteoporosi

PAOLAMARIANO

Intelligenza Artificiale e una delle più potenti piattaforme di supercalcolo hanno scoperto in un farmaco generico per l'osteoporosi, il Raloxifene, una potenziale cura per i pazienti Covid con sintomi che non richiedono il ricovero: identificato dal consorzio europeo Exscalate4Cov, di cui Dompé Farmaceutici è capofila, il farmaco ha ricevuto l'ok dell'Aifa, l'Agenzia Italiana del Farmaco, per una sperimentazione clinica di fase 3. Avviata a gennaio, coinvolgerà fino a 450 pazienti.

«Speriamo di arrivare a risultati definitivi entro l'estate – dice Marcello Allegretti, direttore scientifico Dompé -. Lo studio ha l'obiettivo di fornire nuove armi di contrasto della pandemia, senza un interesse diretto, poiché si basa su una molecola low cost che non produciamo».

Il supercervellone ha selezionato il Raloxifene, riconoscendolo come potenzialmente efficace nel fermare la riproduzione del virus e quindi impedire il progredire dell'infezione nei casi moderati e lievi. Poiché già approvato contro l'osteoporosi, il Raloxifene è entrato rapidamente in sperimentazione clinica, bypassando gli step preliminari necessari quando si sviluppa un farmaco da zero. «L'identificazione di una molecola già in uso con altre indicazioni come in questo caso – spiega Allegretti - accorcia anche di 10 anni lo svi-

luppo di una terapia e ne riduce enormemente i costi».

Composto da 18 partner e supportato dal programma europeo Horizon 2020, Exscalate4Cov usa una combinazione unica di capacità di calcolo ad alte prestazioni e IA. Il cervello ne fruga dentro Exscalate (EXaSCale smArt pLatform Against paThogEns), una «biblioteca chimica» di 500 miliardi di molecole, messa a disposizione da Dompé Farmaceutici, testando oltre 5 milioni di molecole al secondo. La piattaforma, infatti, ha una potenza di calcolo di circa 120 petaflop (1 petaflop equivale a 1 milione di miliardi di calcoli al secondo), forniti da 4 dei maggiori supercalcolatori europei (Marconi del Cineca di Bologna; Hpc5 di Eni, MareNostrum4 del Barcelona Supercomputing Center, Juwels del centro Julich).

Partita la scorsa primavera, la prima fase del progetto si è basata sullo screening virtuale di 400 mila molecole (prodotti in fase avanzata o già sul mercato), fornite da Dompé e dal Fraunhofer Institute. Sono state inizialmente selezionate 7 mila molecole dalle caratteristiche promettenti, fino ad arrivare a 40, capaci di contrastare il virus nelle cellule animali. Il lavoro ha portato infine a identificare il Raloxifene, ora al centro di uno studio clinico di fase 3 in pazienti Covid. Coordinato dall'Irccs Lazzaro Spallanzani di Roma, lo studio coinvolge l'Irccs Humanitas di Milano e Bergamo, Le Molinette di Torino e si punta a estenderlo anche ad altri centri. —