

## Ricerca Coronavirus, supercalcolatori al lavoro per una terapia

I supercalcolatori del Cineca sono al lavoro per verificare l'efficacia di 10mila farmaci e 500 miliardi di molecole. Il progetto, guidato da Dompé, è stato finanziato dalla Ue con 3 milioni di euro

— pag. 15

# Virus, supercalcolo a caccia della terapia «Testeremo 500 miliardi di molecole»

## L'INTERVISTA

### CRISTINA SILVANO

Progetto guidato da Dompé  
Già in corso lo screening  
su 10mila farmaci esistenti

Al Politecnico di Milano  
il compito di accelerare  
il processo computazionale

Antonio Larizza

**D**a un mese il supercalcolatore Marconi del Cineca sta elaborando senza sosta, al ritmo di 50 milioni di miliardi di operazioni al secondo, le interazioni tra le proteine del Coronavirus Covid-19 e le molecole di 10mila farmaci presenti sul mercato, prevalentemente antivirali. Una corsa contro il tempo per capire su quali molecole puntare per una terapia capace di guarire le persone infette.

Lo strumento con cui si insegue questo obiettivo è la piattaforma Exscalate, realizzata da Politecnico di Milano, Cineca e gruppo biofarmaceutico Dompé, che ne è il proprietario.

Da qualche giorno l'attività, avviata d'urgenza un mese fa, può contare anche su 3 milioni di euro di fondi Ue. Risorse del programma Horizon 2020, che la Commissione ha destinato al consorzio Exscalate4CoV, creato *ad hoc* per questo progetto riunendo 18 centri di ricerca di 7 Paesi europei e coordinato da Dompé Farmaceutici.

Tra i 18 membri del consorzio c'è il Politecnico di Milano, che sarà impegnato nell'attività di «accelerazione del processo computazionale». Un ruolo chiave, vista la velocità con cui Covid-

19 si diffonde. Il Sole 24 Ore ha raggiunto Cristina Silvano, professore ordinario di architettura dei calcolatori: già responsabile del progetto di ricerca europeo Antarex, oggi guida il team del Polimi dedicato a Exscalate4CoV.

**Professoressa Silvano, per combattere il Covid-19 avete scelto un fronte virtuale.**

Sì, questa è stata la prima mossa. Come ha riconosciuto anche la Commissione Europea, decidendo di finanziare il progetto, la piattaforma Exscalate è un potente strumento per accelerare la fase iniziale dello sviluppo di nuove terapie, detta di *virtual screening*.

**Con quali armi?**

Exscalate può valutare 3 milioni di molecole al secondo, su 30 target biologici diversi, nello stesso momento.

**Come viene impiegata tanta potenza di calcolo?**

Si parte dalle proteine del virus da sconfiggere. Poi, con tecniche di supercalcolo, big data e intelligenza artificiale si combinano virtualmente queste proteine con le molecole dei vari farmaci. Le interazioni più promettenti vengono poi studiate e validate nelle fasi successive. È un processo noto nella ricerca del farmaco, che nel caso del Coronavirus deve essere accelerato il più possibile.

**Vi concentrerete solo su farmaci esistenti?**

No. Per ragioni ovvie, è stato deciso di iniziare dai farmaci già presenti sul mercato: nel caso alcuni di questi si dimostrassero potenzialmente efficaci durante il *virtual screening*, lo sviluppo di terapie sarebbe molto più veloce. Ma presto entrerà nel vivo anche la seconda fase del progetto.

**Che cosa succederà?**

Si valuteranno le interazioni del Covid-19 non più con i farmaci esistenti,

ma con i 500 miliardi di molecole presenti nella "biblioteca virtuale" di Exscalate. La più grande del mondo.

**Siete fiduciosi?**

In passato abbiamo già applicato Exscalate allo Zika virus, riuscendo a identificare molecole potenzialmente capaci di inibire cinque delle sette proteine virali del virus. Oggi queste molecole sono in fase di valutazione clinica in un laboratorio brasiliano, quella propedeutica al rilascio della terapia.

**Che cosa farete se troverete molecole potenzialmente capaci di inibire il Covid-19?**

Qualora dal *virtual screening* dovessero arrivare chiare indicazioni su singole molecole, l'Istituto nazionale per le malattie infettive Lazzaro Spallanzani (uno dei 18 membri del consorzio guidato da Dompé, ndr), è il centro ammissibile per i test nei pazienti.

**Quanto tempo vi servirà?**

Il progetto europeo dura 18 mesi. Ma anche se è difficile fare previsioni, il nostro orizzonte temporale è ovviamente molto più vicino. Viste le forze in campo, ci auguriamo di riuscire ad avere risultati concreti molto prima. Risultati promettenti da fornire agli altri istituti di ricerca del consorzio per le fasi successive di sviluppo della terapia, che peraltro richiedono anch'esse del tempo.

**L'Oms ha classificato l'emergenza**



**Coronavirus come pandemia. I tempi sono stringenti.**

Già oggi i supercalcolatori del Cineca elaborano informazioni al ritmo di 50 milioni di miliardi di operazioni al secondo. Il compito mio e del mio team, al Polimi, è quello di accelerare ulteriormente questa capacità di calcolo. Faremo di tutto per vincere questa corsa contro il tempo. E contro il virus.

© RIPRODUZIONE RISERVATA



**CRISTINA SILVANO**  
Professore ordinario di architettura dei calcolatori al Polimi



Al fianco dei medici. Il supercalcolatore Marconi del Cineca sta fornendo potenza di calcolo alla piattaforma di ricerca scientifica Exscalate4CoV, che ha lo scopo di trovare una terapia efficace per il Coronavirus