



Asiago-Gallio, 19 settembre 2020 - “500 miliardi di molecole sono state studiate al fine di verificare come possono interferire sul Coronavirus, per trovare quali di queste possono rallentare o fermare la replicazione del virus SARS-COV-2”. La notizia inedita è stata lanciata ieri dal Direttore di Cineca David Vannozzi, durante la settima edizione della Summer School di Motore Sanità in corso ad Asiago-Gallio.

“Questa tecnica - ha precisato Vannozzi - ha consentito di individuare già a fine aprile le prime 50 molecole da immettere negli studi in vitro, e a fine giugno tre molecole da avviare agli studi in vivo sono state notificate a tutti i centri di ricerca. Alcune di queste molecole hanno già caratteristiche farmacologiche, per cui non necessitano di ulteriori studi di implementazione industriale”.

“Tra i progetti di ricerca in corso spicca Exscalate4CoV, finanziato dalla Commissione Europea, che vede impegnato un folto gruppo di centri di ricerca, anche del nostro Paese. Ricorriamo all’uso di tecnologie di supercalcolo e di ‘urgent computing’ per velocizzare le azioni di contrasto alla pandemia in corso. Il progetto è condotto da un consorzio che aggrega 18 istituzioni di 7 nazioni europee, di cui 9 italiane, fra le quali il Consorzio InterUniversitario Cineca”.

“Exscalate4CoV sta quindi utilizzando il supercomputer Marconi100 del Cineca per passare in rassegna una vasta collezione di molecole: si tratta di farmaci già approvati per l’uso nell’uomo e pronti per nuovi studi clinici, ma anche di principi attivi nuovi non ancora testati sulla nostra specie. Scopo della valutazione

virtuale di queste molecole è verificare le loro potenziali capacità di contrastare il virus in modo efficace”.

“Attraverso

lo screening virtuale di farmaci già approvati per uso umano, anche se con differenti indicazioni terapeutiche, è possibile selezionare un numero abbastanza ristretto di molecole da testare in tempi brevissimi sull'uomo, consentendo una risposta rapida all'emergenza generata dalla pandemia”.

“Il punto di partenza è la piattaforma ExScalate, che raccoglie una libreria digitale di 500 miliardi di molecole di facile sintesi che, quindi, possono essere trasformate rapidamente in farmaci. Questo enorme database, sviluppato negli ultimi 15 anni e messo a disposizione della comunità scientifica, consente di prevedere con tecniche computazionali l'attività farmacologica di potenziali nuove terapie efficaci”, ha concluso Vannozzi.