

*Un gruppo di scienziati pronti a condividere metodi e pratiche su una piattaforma nuova di zecca, il PLUMED-NEST repository. Così, dicono i promotori, si favorisce la trasparenza e la riproducibilità della ricerca. L'iniziativa si racconta su Nature Methods*



Milano, 1 agosto 2019 - Un sistema open source nel campo delle simulazioni molecolari, una comunità di scienziati pronti a lavorare insieme per favorire la trasparenza, la riproducibilità e la qualità in questo ambito. E una nuova piattaforma per rendere tutto questo realtà.

Nato 10 anni fa, PLUMED è un plugin creato da un ristretto gruppo di ricercatori per fornire metodi diversi nel campo della dinamica molecolare, quella sorta di microscopio computazionale che rappresenta oggi una delle pratiche più di frontiera della ricerca, con applicazioni che vanno dalla fisica alla chimica, dalla biologia alle scienze dei materiali.

Quel progetto, che oggi si racconta con un articolo pubblicato su “Nature Methods”, si allarga ora in nuove iniziative volte a espanderne le potenzialità. Prima fra tutte il PLUMED Consortium, la cui missione è quella di massimizzare l’impatto e la condivisione della ricerca nel settore grazie, in particolare, a uno strumento, il PLUMED-NEST repository, sorta di archivio dove tutti i membri potranno inserire tutti i dati, i file e i protocolli necessari a replicare le simulazioni presenti nelle diverse pubblicazioni scientifiche. Con un ovvio vantaggio in termini di innovazione, unione dei saperi e formazione delle nuove leve di studiosi.

L’articolo pubblicato sulla prestigiosa rivista porta la firma del PLUMED Consortium che vede tra i suoi principali promotori Massimiliano Bonomi dell’Istituto Pasteur di Parigi, Giovanni Bussi della SISSA, Carlo Camilloni dell’Università di Milano e Gareth A. Tribello della Queen’s University of Belfast.

### **Esperimenti al computer per studiare le molecole**

Le simulazioni di dinamica molecolare sono oggi uno strumento indispensabile per comprendere i meccanismi più raffinati delle molecole, per predirne il comportamento e per interpretare i risultati

ottenuti con gli esperimenti. Le innovazioni nel campo stanno emergendo sempre più in fretta, con applicazioni in campo medico, industriale e di ricerca, mentre un grande sforzo viene fatto per definire le migliori pratiche e per assicurare il massimo beneficio a chi lavora in questo settore. “Molte di queste sfide non possono essere vinte da soli - scrivono gli autori nel testo di *Nature Methods* - per questo uno sforzo condiviso è richiesto dall’intera comunità”.

### **La sfida di PLUMED**

Le sfide, in effetti, sono tante. Di carattere tecnico, innanzitutto. Un esempio? “Metodi di simulazione che hanno un forte potenziale in differenti campi non possono essere incorporati in diversi tipi di software dal momento che ognuno dei codici utilizzati è ottimizzato per specifiche applicazioni e può essere scritto in un diverso linguaggio di programmazione” spiegano gli scienziati.

“Una strategia per risolvere il problema fu proprio la creazione, piuttosto pionieristica, di PLUMED - raccontano gli studiosi - Il progetto voleva fornire diversi servizi di carattere tecnico per superare questi limiti in un campo specifico, quello delle cosiddette ‘enhanced molecular simulations’, in cui si studiano eventi che avvengono su scale di tempo molto lunghe grazie a un’accelerazione dei processi”.

Col tempo PLUMED è diventato una piattaforma ampiamente utilizzata in cui nuove tecniche implementate hanno potuto essere rapidamente condivise, rendendole così accessibili e facili all’uso per tutti. Usando una sintassi comune per tutti i programmi, PLUMED permette così la validazione incrociata di diversi esperimenti di dinamica molecolare e, anche, la contaminazione di idee tra aree molto diverse, quali la chimica, la biofisica e le scienze dei materiali.

### **Dal PLUMED CONSORTIUM al PLUMED-NEST**

Ma non c’è solo questo, spiegano gli autori dell’articolo, in cui si annuncia la fondazione del PLUMED Consortium, formato da decine di scienziati e programmatori attivi in tutti il mondo nel campo della dinamica molecolare. Obiettivo dell’iniziativa? Tra gli altri, quello di aumentare la riproducibilità degli esperimenti, accrescere l’impatto delle ricerche e promuovere le buone pratiche per la simulazione, con un approccio community-driven.

Per farlo, gli scienziati del consorzio si impegnano a condividere i file e i protocolli delle simulazioni utilizzati nei loro lavori scientifici in un vero e proprio archivio, chiamato PLUMED-NEST.

“Un’iniziativa utile anche per la formazione perché permetterà a tutti i giovani scienziati che si avvicinano a questo mondo di fare pratica e ripetere gli esperimenti fatti da altri. Con un valore formativo molto importante” spiegano gli autori. Che concludono: “Crediamo fortemente che questa nuova organizzazione rappresenti un bell’esempio di progetto community-driven che è il cuore dello sviluppo dei software open source. Per questo, tutti coloro che condividono la nostra visione sono assolutamente benvenuti nella community”.