



Agenzia nazionale per le nuove tecnologie,
l'energia e lo sviluppo economico sostenibile



Roma, 30 marzo 2020 - Uno dei supercomputer più potenti d'Italia sarà a disposizione della ricerca scientifica pubblica e privata impegnata contro il coronavirus. Si tratta dell'infrastruttura CRESCO6, operativa presso il Centro ENEA di Portici, vicino Napoli, in grado di effettuare fino a 1,4 milioni di miliardi di operazioni matematiche al secondo. Per sottoporre una richiesta di risorse computazionali sui sistemi HPC CRESCO occorre inviare una mail a crescoforcovid19@enea.it.

“Crediamo che il supercomputer possa dare un contributo vitale in questo momento così cruciale per il nostro Paese per la ricerca di farmaci, vaccini e l'elaborazione di dati”, sottolinea il Presidente dell'ENEA Federico Testa.

“Ad oggi è già a disposizione del team di ricercatori dell'Università di Firenze, coordinato dal professor Piero Procacci, che sta lavorando a un processo per bloccare alla radice il meccanismo di replicazione del COVID-19 e, quindi, lo

sviluppo del virus”, aggiunge Testa.

HPC

CRESCO6 è la seconda infrastruttura di calcolo per ordine di importanza in ambito pubblico in Italia dopo quella di Cineca e sta svolgendo un ruolo chiave per testare l'efficacia dei composti sotto indagine, fornendo in poche ore una previsione affidabile della efficacia inibitoria di tali composti, basata su simulazioni a dettaglio atomistico effettuate su migliaia di processori in parallelo.

In

pochi giorni di test con il team del professor Procacci dell'Università di Firenze sono stati individuati almeno due composti con caratteristiche promettenti, uno dei quali disponibile commercialmente. Dopo questa prima fase di messa a punto strutturale dei composti ottenuti, HPC CRESCO6 verrà utilizzato per cercare di individuare la struttura molecolare ottimale per un possibile farmaco antivirale specifico per il COVID-19.

Dal

2018, CRESCO6 figura nella prestigiosa TOP500, la classifica dei primi 500 supercomputer mondiali grazie al raddoppio della potenza arrivata a 1,4 milioni di miliardi di operazioni matematiche al secondo (1.4 PetaFlops). L'ingresso al 420° posto è stato annunciato al SuperComputing 2018 di Dallas, la principale conferenza nel campo del calcolo scientifico.

Tra

i campi di applicazione di CRESCO6: l'elaborazione di modelli previsionali su cambiamenti climatici e inquinamento dell'aria con dettaglio territoriale molto accurato; studio di nuovi materiali per la produzione di energia pulita; simulazioni per la gestione delle infrastrutture critiche; biotecnologie; chimica computazionale; fluidodinamica per il settore aerospaziale; sviluppo di codici per la fusione nucleare.

I

ricercatori di istituzioni pubbliche e private che intendono sottoporre una richiesta per avvalersi delle risorse computazionali ENEA possono scrivere a

crescoforcovid19@enea.it, indicando:

- Contatto di riferimento con nome e cognome, mail e telefono;
- Organizzazione di appartenenza con link al sito;
- Ruolo nell'organizzazione;
- Campo applicativo:
 - modellistica numerica;
 - intelligenza artificiale;
 - analisi dati;
- Descrizione scientifica del progetto di calcolo rilevante per l'emergenza COVID-19;
- Quadro di riferimento del progetto;
- Risorse computazionali attualmente utilizzate e quelle desiderate.