

## **Exscalate4CoV<sup>1</sup> può contare sui due supercomputer più potenti in Europa nella corsa contro il coronavirus.**

**30 June 2020** - **Exscalate4CoV**, il consorzio pubblico-privato supportato dal programma Europeo Horizon 2020 per la ricerca e l'innovazione, guidato da Dompé Farmaceutici e attualmente in rappresentanza di 18 partner, ha utilizzato negli ultimi mesi le competenze e le risorse dei centri di supercalcolo Europei installati presso Eni, CINECA, Barcelona Supercomputing Center e FZ Jülich per simulare le interazioni tra le proteine del coronavirus SARS-CoV-2 e le molecole di potenziali farmaci terapeutici, in una corsa contro il tempo per identificare una terapia per combattere efficacemente il virus.

Le attività della task force **Exscalate4COV** su High Performance Computing coordinata dal partner Politecnico di Milano, possono ora contare sui **due più potenti supercomputer in Europa**. Secondo la classifica TOP500 dei supercomputer più veloci al mondo, annunciato il 22 giugno 2020 alla conferenza virtuale ICS High Performance, i due supercomputer più veloci in Europa sono installati in Italia: il nuovo sistema **HPC5** presso l'azienda energetica Eni e il sistema **Marconi-100** presso il centro di supercalcolo Italiano CINECA.

Il numero uno in Europa (numero sei nella lista mondiale TOP10) è il nuovo sistema HPC5 di Eni che raggiunge 35,5 PetaFLOPS (milioni di miliardi di operazioni al secondo) e 51.7 PetaFLOPS di picco. HPC5 è un sistema PowerEdge realizzato da Dell e dotato di processori Intel Xeon Gold, GPU NVIDIA Tesla V100 e rete Mellanox HDR InfiniBand. Il secondo supercomputer più veloce in Europa è Marconi-100, dotato di processori IBM Power9, GPU NVIDIA V100 e rete Mellanox EDR InfiniBand dual-rail. Marconi-100 raggiunge 21,6 PetaFLOPS e 29.4 PetaFLOPS di picco e si colloca al numero nove nella lista mondiale TOP10.

Grazie ai recenti investimenti pianificati in Europa, sono in allestimento due nuovi sistemi: il supercomputer **Leonardo**, che sarà installato presso il Bologna Science Park, in Italia, e il supercomputer **MareNostrum 5** presso Barcelona Supercomputing Center, Spagna. Tali sistemi, finanziati dall'iniziativa EuroHPC e cofinanziati al 50% dagli Stati partecipanti ospitanti, raggiungeranno prestazioni tali per cui gli permetteranno di entrare nella top list tra i cinque supercomputer più potenti al mondo.

---

<sup>1</sup> Il Consorzio pubblico privato **Exscalate4CoV (E4C)** ([www.exscalate4cov.eu](http://www.exscalate4cov.eu)) è coordinato da Dompé Farmaceutici ed è composto da diciotto istituzioni e centri di ricerca di sette paesi in Europa: Politecnico di Milano (DEIB), CINECA (Supercomputing Innovation and Applications), Università degli Studi di Milano, Katholieke Universiteit Leuven, International Institute of Molecular and Cell Biology in Warsaw (IIMCB), Elettra-Sincrotrone Trieste, Fraunhofer Institute for Molecular Biology and Applied Ecology, Barcelona Supercomputing Center, Forschungszentrum Jülich, Università Federico II di Napoli, Università degli Studi di Cagliari, SIB Swiss Institute of Bioinformatics, KTH Royal Institute of Technology, Associazione Big Data, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Istituto Nazionale per le Malattie Infettive Lazzaro Spallanzani and Chelonia Applied Science.

Attualmente, i supercomputer di Exscalate4COV stanno già elaborando dati chimici ad alta velocità. Con la disponibilità dei sistemi HPC5 e Marconi-100, Exscalate4COV aumenterà ulteriormente le prestazioni per vincere la corsa contro il tempo, e contro il virus. Al centro del progetto c'è **Exscalate** (EXaSCale smArt pLatform Against paThogEns), attualmente la piattaforma di supercalcolo intelligente più potente (ed economica) al mondo. La piattaforma Exscalate sfrutta una "biblioteca chimica" di 500 miliardi di molecole. **Exscalate** rappresenta un potente strumento per accelerare la fase computazionale "in silico" dello sviluppo di nuove terapie, chiamata processo di screening virtuale, sfruttando al massimo le risorse di calcolo. Per raggiungere i suoi obiettivi, il consorzio Exscalate4COV può fare leva non solo sui più potenti supercomputer in Europa, ma anche su alcuni dei migliori laboratori di ricerca computazionali e di scienze biologiche Europei per contrastare la pandemia più velocemente.

Negli ultimi mesi, è stata condotta la prima fase di screening virtuale (in silico) sui supercomputer del Consorzio per elaborare più di 400.000 molecole (farmaci sicuri per l'uomo e prodotti naturali) rese disponibili da Dompé Farmaceutici e dal partner Fraunhofer (IME). Nel complesso sono state testate 7.000 molecole con caratteristiche promettenti. La priorità nei test è stata data alle molecole in fase clinica o già sul mercato. Come risultato principale di questa prima fase "in silico", Exscalate4COV ha recentemente annunciato che il **Raloxifene**, si è dimostrato efficace in-vitro contro il virus Sars-Cov2 nel contrastare la replicazione del virus nelle cellule. L'IP per il suo utilizzo contro Sars-Cov2 è già stato protetto a nome dei membri del Consorzio. Dompé ha richiesto l'accesso a studi clinici per stabilire l'efficacia del Raloxifene in pazienti Covid 19.

Nella seconda fase dello screening virtuale, la piattaforma Exscalate sfrutterà **HPC5** e **Marconi-100**, i due supercomputer più potenti in Europa per trovare nuove molecole altamente specifiche per lo sviluppo di soluzioni post-emergenza per SARS-CoV-2. Durante la seconda fase, lo screening virtuale sarà quindi esteso alla biblioteca chimica complessiva di 500 miliardi di molecole, grazie alla capacità di elaborazione Exscalate di oltre 3 milioni di molecole al secondo. Le interazioni più promettenti saranno quindi studiate e validate nelle fasi successive della pipeline di scoperta dei farmaci. Questo enorme sforzo riceverà una convalida sperimentale dalle capacità dei partner del Consorzio, sia nella direzione dell'elucidazione dei complessi strutturali sia nella direzione dell'elucidazione meccanicistica a livello biochimico e cellulare.

*Links:*

TOP500 List, June 2020: <https://www.top500.org/lists/top500/2020/06/>

Coronavirus: utilizzando il supercalcolo Europeo, un progetto di ricerca finanziato dall'UE annuncia risultati promettenti per un potenziale trattamento, sito Web ufficiale della Commissione europea, 06/18/2020 [https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/ip\\_20\\_890](https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/ip_20_890)