

Dwa najpotężniejsze superkomputery w Europie wspierają walkę przeciwko koronawirusowi w ramach projektu EXSCALATE4CoV

Exscalate4CoV, to prywatno-publiczne konsorcjum, zrzeszające 18 partnerów z Europy (w tym Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej w Warszawie), wspierane przez unijny program „Horyzont 2020” i kierowane Dompé Farmaceutici . Ostatnie miesiące projektu to intensywnie symulacje komputerowe oddziaływań między białkami koronawirusa SARS-CoV-2 i cząsteczkami potencjalnych leków, aby opracować terapię skutecznie zwalczającą wirusa. Wykorzystuje się w nich europejskie centrów superkomputerowych w Eni, CINECA, Barcelona Supercomputing Center i FZ Juelich.

Działania grupy zadaniowej Exscalate4COV ds. Obliczeń Wysokiej Wydajności, koordynowanej przez Politecnico di Milano są teraz wspierane przez dwa najpotężniejsze superkomputery w Europie: nowy system HPC5 w firmie energetycznej Eni i system Marconi-100 we włoskim centrum superkomputerowym CINECA. Podczas wirtualnej konferencji ICS High Performance (czerwiec 2020), zostały uznane jednymi z najszybszych komputerów i znalazły się na [liście TOP500 najszybszych superkomputerów na świecie](#).

Numer jeden w Europie (numer sześć na liście TOP10 na świecie) to nowy system HPC5 zainstalowany w Eni, osiągający 35,5 PetaFLOPS (milion miliardów operacji zmiennoprzecinkowych na sekundę) i najwyższą wydajność 51,7 PetaFLOPS. HPC5 to system PowerEdge, zbudowany przez firmę Dell i zasilany procesorami Intel Xeon Gold, procesorami graficznymi NVIDIA Tesla V100 oraz siecią Mellanox HDR InfiniBand. Drugim najszybszym superkomputerem w Europie jest Marconi-100, zasilany procesorami IBM Power9, procesorami graficznymi NVIDIA V100 i dwuszynową siecią Mellanox EDR InfiniBand. Marconi-100 osiągnął wydajność 21,6 PetaFLOPS i szczytową wydajność 29,4 PetaFLOPS i stał się numerem 9 na liście TOP10 na świecie.

Planowane są kolejne inwestycje w Europie, a wśród nich m.in.: superkomputer Leonardo, który znajdzie się w Bolońskim Parku Naukowym we Włoszech oraz superkomputer MareNostrum 5, który zostanie umieszczony w Barcelońskim Centrum Superkomputerów w Hiszpanii. Systemy te, zakupione w ramach Europejskiego Wspólnego Przedsięwzięcia w dziedzinie Obliczeń Wielkiej Skali (European High-Performance Computing Joint Undertaking), będą miały zapewnioną trwałą wydajność, co pozwoli im znaleźć się wśród pięciu najpotężniejszych superkomputerów na świecie.

Obecnie superkomputery wykorzystywane przez konsorcjum przetwarzają już dane chemiczne z dużą prędkością, ale dzięki dostępności systemów HPC5 i Marconi-100 firmy Eni, prace w projekcie zostaną znacznie przyspieszone. Trzon projektu stanowi Exscalate (EXaScale smArt pLatform Against paThogEns), obecnie najmocniejsza i najbardziej efektywna inteligentna platforma superkomputerowa na świecie. Exscalate wykorzystuje „bibliotekę chemiczną” złożoną z 500 miliardów cząsteczek i stanowi potężne narzędzie do przyspieszania obliczeniowej fazy „in silico” rozwoju nowych terapii (zwanej wirtualnym procesem przesiewowym). Aby osiągnąć swoje cele i szybciej i skuteczniej zwalczać pandemię międzynarodowe, konsorcjum Exscalate4COV wykorzystuje nie tylko najpotężniejsze superkomputery w Europie, ale także jedne z najlepszych laboratoriów obliczeniowych i nauk przyrodniczych w Europie.

W ciągu ostatnich miesięcy przeprowadzono pierwszą wirtualną (in silico) fazę badań przesiewowych na superkomputerach konsorcjum , w celu przetworzenia ponad 400 000 cząsteczek (tj. bezpiecznych leków i produktów naturalnych), udostępnionych konsorcjum przez koordynatora projektu - Dompé farmaceutici oraz Instytut Fraunhofer (IME). Przetestowano ponad 7.000 cząsteczek o obiecujących właściwościach. Pierwszeństwo w testowaniu miały cząsteczki w fazie klinicznej lub już funkcjonujące na rynku. Jako główny

wynik pierwszej fazy projektu „in-silico”, Exscalate4Cov ogłosił niedawno, że lek Raloxifene jest skuteczny przeciwko SARSCov-2 in vitro, przeciwdziałając replikacji wirusa w komórkach.

Wykorzystanie Raloksyfenu przeciwko Sars-Cov2, w imieniu członków konsorcjum, zostało objęte ochroną własności intelektualnej. Dompé poprosił o dostęp do badań klinicznych w celu ustalenia skuteczności raloksyfenu u pacjentów z Covid-19.

W drugiej fazie wirtualnych testów przesiewowych, platforma Exscalate będzie wykorzystywać HPC5 i Marconi-100, dwa najpotężniejsze superkomputery w Europie, w celu znalezienia wysoce specyficznych nowych cząsteczek do opracowania terapii przeciw SARS-CoV-2 po wyjściu z fazy krytycznej obecnego kryzysu. W tym etapie, dzięki „bibliotece chemicznej” o możliwości przetwarzania ponad 3 milionów cząsteczek na sekundę, testy zostaną rozszerzone na 500 miliardów cząsteczek.

Najbardziej obiecujące substancje zostaną zweryfikowane w kolejnych etapach procesu tworzenia leków. W te intensywne prace doświadczalne włączą się członkowie konsorcjum – substancje zostaną zbadane pod kątem określenia struktur kompleksów, jak i w kierunku wyjaśnienia ich mechanizmu działania na poziomie biochemicznym i komórkowym.

Konsorcjum **Exscalate4Cov** (www.exscalate4cov.eu), wspierane przez unijny program „Horyzont 2020” w zakresie badań naukowych i innowacji, koordynowane jest przez Dompé farmaceutici i składa się z 18 instytucji członkowskich z siedmiu krajów europejskich: Politecnico di Milano (Dept. of Electronics, Information and Bioengineering), Consorzio Interuniversitario CINECA (Supercomputing Innovation and Applications), Università degli Studi di Milano (Department of Pharmaceutical Sciences), **Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie, MIBMiK (Warszawa, Polska)**, KU Leuven, Elettra Sincrotrone Trieste, Fraunhofer Institute for Molecular Biology and Applied Ecology, BSC Barcelona Supercomputing Centre, Forschungszentrum Jülich, Università degli Studi Federico II di Napoli (Department of Pharmacy), Università degli Studi di Cagliari, SIB Swiss Institute of Bioinformatics, KTH Royal Institute of Technology (Department of Applied Physics), Associazione Big Data, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Istituto nazionale per le malattie infettive Lazzaro Spallanzani and Chelonia Applied Science.

Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie bierze udział w eksperymentalnej części projektu i odpowiada za określenie struktur przestrzennych białek koronawirusa ze związanymi inhibitorami, w celu określenia mechanizmu ich działania. Ze strony MIBMiK projekt prowadzi prof. Marcin Nowotny, kierownik Laboratorium Struktury Białka.

Więcej informacji:

Strona projektu: www.exscalate4cov.eu

Oficjalna strona Komisji Europejskiej https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/ip_20_890

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