

FLOPS CONTRO VIRUS

Dopo l'alleanza tra Eni e Cineca, è ora la volta di un accordo tra Eni-Enea per mettere a disposizione gratis i propri supercomputer nella lotta al coronavirus. Le due società parteciperanno al progetto scientifico dell'Università di Firenze che, nell'accedere allo spazio computazionale, potrà contare anche sull'aiuto di esperti

Le operazioni gratuite offerte all'ateneo fiorentino sono state valutate in centinaia di migliaia di euro

di **SERGIO BOCCONI**

Perfino nell'Italia tradizionalmente riluttante a unire le forze, la pandemia del Covid-19 ha convinto molti a cambiare strada. E fra i molti spiccano i proprietari e gestori pubblici e privati dei supercomputer. Accanto ai big Cineca ed Eni ora anche Enea ha messo a fattor comune, pur con qualche differenza nelle direzioni operative scelte, la propria potenza di calcolo. E per i tre protagonisti di questa lotta contro il coronavirus si parla di possibilità computazionali che si collocano nei vertici mondiali, figurando nelle classifiche un po' fantascientifiche dell'informatica globale.

Cineca, il Consorzio interuniversitario nazionale, è 39esimo nelle classifiche mondiali con Marconi, supercomputer da 50 petaflop (50 milioni di miliardi di calcoli al secondo) e ha concepito e gestisce Leonardo, il supercomputer pre-exascale che a regime si piegherà fra i primi al mondo grazie a una potenza di calcolo di 270 petaflop ospitato negli spazi messi disposizione dal Tecnopolo di Bologna. Eni nel febbraio di quest'anno ha avviato Hpc5, il supercalcolatore che, affiancato alla versione precedente Hpc4, è capace di compiere fino a 70 milioni di miliardi di operazioni al secondo, installato presso il Green data center del gruppo. Si tratta del più potente al mondo a livello industriale e il quinto nella graduatoria mondiale Top500 per prestazioni, dominata da americani e cinesi

Enea, l'agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile, dispone dell'infrastruttura Hpc Cresco6, operativa presso il centro di Portici, vicino a Napoli, in grado di effettuare fino a 1,4 milioni di miliardi di operazioni al secondo, capacità per la quale è previsto il raddoppio entro la metà del prossimo anno, con nuove funzionalità legate alla tecnologia delle schede grafiche. È la seconda pubblica dopo il Cineca e si pone intorno al posto numero 400 fra le Top500.

L'agenzia pubblica guidata da Federico Testa

ha in questi giorni promosso un accordo con Eni, con il quale ha già in atto collaborazioni strategiche nel campo della fusione nucleare, grazie al quale potrà appoggiarsi sul supercalcolatore del gruppo petrolifero per le ricerche in corso sul coronavirus. Un'alleanza che si muove nella stessa direzione di quella formalizzata nelle scorse settimane fra Eni e Cineca: Eni collaborerà al progetto europeo Exscalate4CoV, la cordata guidata dall'azienda biofarmaceutica Dompé, che aggrega istituzioni e centri di ricerca in Italia, tra i quali appunto il Cineca di Bologna, e altri Paesi europei per individuare i farmaci più sicuri nella lotta al coronavirus. Il team congiunto di Eni e Cineca effettuerà la simulazione dinamica molecolare di proteine virali ritenute rilevanti nel meccanismo di infezione da Covid 19, per identificare, mediante l'impiego di banche dati contenenti 10 mila composti farmaceutici noti, quelli più efficaci. Poi sarà sviluppata un'attività per la ricerca di nuove molecole specifiche anti-virali attraverso lo screening di miliardi di strutture.

L'agenzia Enea non parteciperà al progetto Dompé, ma si appoggerà a Eni per procedere nel percorso scientifico iniziato con l'Università di Firenze. Hpc Cresco6 è a disposizione del team di ricercatori dell'Università di Firenze, coordinato da Piero Procacci, che sta lavorando a un processo per bloccare alla radice il meccanismo di replicazione del coronavirus e, quindi, lo sviluppo del virus.

In particolare il supercomputer svolge un ruolo determinante per testare l'efficacia dei composti sotto indagine, fornendo in poche ore una previsione affidabile della loro efficacia inibitoria, basata su simulazioni a dettaglio atomistico effettuate su migliaia di processori in parallelo. In pochi giorni di test con il team 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, e ora con le capacità ulteriori possibili grazie all'accordo con Eni, verrà utilizzato per cercare di individuare la struttura molecolare ottimale per un possibile farmaco antivirale specifico per il Covid-19.

Ma il progetto con Firenze non esaurisce l'attività in questa emergenza del supercomputer Enea, utilizzato finora dagli scienziati e ricercatori dell'agenzia per l'elaborazione di modelli previsionali su cambiamenti climatici e

inquinamento dell'aria con dettaglio territoriale, lo studio di nuovi materiali per la produzione di energia pulita, le simulazioni per la gestione delle infrastrutture critiche, le biotecnologie; la chimica computazionale, la fluidodinamica per il settore aerospaziale, lo sviluppo di codici per la fusione nucleare.

Tutte aree di operatività che ora Enea potrebbe mettere temporaneamente e almeno parzialmente in stand-by per consentire l'accesso pubblico e gratuito allo spazio computazionale da parte di chi, laboratori, università, centri di ricerca pubblici e privati, sta lavorando sul coronavirus. Da metà marzo l'agenzia ha messo a disposizione risorse computazionali a chi lo richiede, precisando ovviamente la ragione e le necessità. «Con la possibilità di accesso gratuito allo spazio computazionale si riceve anche la collaborazione dei nostri tecnici, che sono circa una trentina», dice Gian Piero Celata, direttore dipartimento tecnologie energetiche (che comprende anche l'It) di Enea, «un'opportunità per laboratori che altrimenti non disporrebbero di capacità e personale a sufficienza. In poche ore si ottengono risultati altrimenti ottenibili in mesi. Per non parlare poi del trattamento dei Big data, in questo caso indispensabile».

La potenza di calcolo del supercomputer non viene venduta come servizio, perciò cederla free non rappresenta un problema per il bilancio dell'agenzia. Però è possibile calcolarne il beneficio per chi ne chiede l'accesso. Spiega Celata che il costo orario della macchina per una richiesta tipica (come quella dell'Università di Firenze, per esempio) è di circa 100 euro. Costo che include i consumi elettrici per il funzionamento e il condizionamento e il costo del personale dedicato, mentre non comprende il software eventualmente dedicato. Per Firenze sono stati condotti al momento circa 300 run ("girate" di 24 ore continuative) perciò si può facilmente stimare che l'accesso gratis "vale" centinaia di migliaia di euro.

© RIPRODUZIONE RISERVATA