



**WELCARE**  
 Esperti della Pelle - Alleati della Natura



Abbonati  
 alla rivista  
 Archivio  
 arretrati

CHI SIAMO | CONTATTI | SHOP | LAVORA CON NOI | LOGIN | REGISTRATI | VIDEO | FOTO

HOME | ABOUTPHARMA | PUBLISHING | FORMAZIONE E EVENTI | HTA | ABOUTJOB | CORSO DI MARKET ACCESS | DIGITAL AWARDS

ABOUTPHARMA<sub>ONLINE</sub>

Ricerca

SANITÀ E POLITICA | LEGAL & REGULATORY | REGIONI | PERSONE E PROFESSIONI | AZIENDE | **MEDICINA SCIENZA E RICERCA**

Medicina scienza e ricerca

## Ligate: la nuova iniziativa contro la pandemia finanziata dall'Ue con 5,9 milioni di euro

L'idea è sviluppare un software per la scoperta di farmaci, sfruttando il supercomputer e le risorse exascale che verranno acquisite in futuro. Consentirà di rispondere a una pandemia come quella in corso in meno di un giorno, grazie a una campagna di sviluppo farmaci tempestiva

di [Redazione Aboutpharma Online](#)

18 Febbraio 2021



Dopo il successo del progetto [Exscalate4cov](#), continua l'uso del supercomputing nella lotta contro Covid-19, con il supporto anche di intelligenza artificiale e machine learning per la scoperta di nuovi farmaci. Questa volta con Ligate, un [consorzio pubblico-privato fondato dall'Unione Europea](#) e dai paesi membri della JU (Joint Undertaking, Impresa comune) per i progetti innovativi con lo scopo di incentivare

l'utilizzo dell'HPC (High Performing Computing).

### L'Italia alla guida di Ligate

Ligate - che sarà coordinato da Dompé Farmaceutici - durerà 3 anni e riceverà un finanziamento complessivo di 5,9 milioni di euro, che include un contributo di 2,6 milioni di euro da parte dell'Impresa comune europea per il calcolo ad alte prestazioni (European High-Performance Computing Joint Undertaking). Sarà guidato dall'Italia, che ha ricevuto dalla Commissione europea l'incarico di sfruttare il potenziale del supercomputing, unitamente alle competenze di biologia disponibili in Europa, per affrontare in modo più rapido ed efficace le crisi pandemiche di interesse sovranazionale.

### Superare le prestazioni di Exscalate

L'obiettivo è superare le prestazioni attuali della piattaforma Exscalate di Dompé Farmaceutici, cioè la capacità di valutare 1 trilione di molecole per simulazione. Migliorando così la qualità delle simulazioni grazie a un'integrazione più profonda con tecnologie di intelligenza artificiale e machine learning, che consentiranno di aumentarne ulteriormente la

RUBRICHE DIGITALI

**Presente e futuro della Ricerca clinica digitale**  
 a cura di **EXON GROUP**

EVENTI E FORMAZIONE

**COLLABORARE CON IL NO-PROFIT**  
 Webinar  
 6 maggio 2021  
 ABOUTACADEMY WEBINAR

**Delivering life science**

FOLLOW US

velocità dati.

Già ora Exscalate è uno strumento indispensabile nel lungo processo di scoperta e sviluppo dei farmaci. Fornisce anche varie opzioni che consentono di esaminare i sistemi chimici sotto angolazioni diverse, al fine di generare informazioni che difficilmente si riuscirebbero a ottenere in un'analisi di laboratorio, con un impegno di tempo e denaro notevolmente inferiore rispetto agli esperimenti.

### I partner del consorzio

Il consorzio è formato da 11 istituti e aziende di cinque paesi europei, tra cui il Politecnico di Milano (Dipartimento di Elettronica, Informazione e Bioingegneria), **CINECA** Interuniversity Consortium (Supercomputing Innovation and Applications), E4 Computer Engineering, Università di Salerno, Università di Basilea, KTH Royal Institute of Technology (Dipartimento di Fisica applicata), Università di Innsbruck, tofmotion GmbH, IT4Innovations National Supercomputing Center e Chelonia Applied Science.

### Il ruolo del Politecnico di Milano

Il flusso di lavoro multidimensionale del progetto coinvolgerà diversi partner. Il Politecnico di Milano per esempio, svilupperà strumenti open source per supportare l'ottimizzazione e la sintonizzazione delle applicazioni parallele, e in particolare della piattaforma Exscalate, su nuove architetture eterogenee. Inoltre, dirigerà lo sviluppo della procedura di docking molecolare con l'integrazione di tecniche di machine learning, tenendo sempre presente lo scenario di elaborazione urgente.

### La missione di **Cineca**

La missione istituzionale di **Cineca** consiste invece nell'avvicinare le aziende del settore industriale e della pubblica amministrazione alle tecnologie avanzate di università e istituti di ricerca. Nell'ambito del progetto Ligate, **Cineca** avrà soprattutto il compito di convalidare e implementare la soluzione Cadd nei suoi sistemi, incluso il sistema EuroHPC pre-exascale Leonardo, mettendolo a disposizione degli utenti accademici e industriali.

### Le Università di Innsbruck, Salerno e Basilea

La piattaforma Exscalate verrà adattata a vari cluster di acceleratori eterogenei moderni basati sulla piattaforma Celerity, che sfrutta lo standard settoriale emergente SYCL 2020 di Khronos per la programmazione degli acceleratori. Il quale verrà rilasciato come open source dalle Università di Innsbruck e di Salerno, anch'esse partner del progetto.

Nel corso del progetto Ligate, l'Università di Basilea effettuerà invece un benchmark delle soluzioni per la scoperta di farmaci basata su strutture sviluppate all'interno del progetto stesso, utilizzando set di dati consolidati della comunità e convalidandole tramite casi di utilizzo reali e rilevanti.

Grazie alle tecnologie LIGATE, tofmotion sarà in grado di fornire una simulazione più rapida e precisa delle telecamere 3D a tempo di volo (Time-to-Flight).

### Il KTH Royal Institute of Technology

KTH valuterà lo sviluppo dei moduli basato sugli strumenti open source, per fornire un motore di calcolo completamente automatizzato ed efficiente dell'energia libera, che include sia la parametrizzazione dei composti, sia la configurazione e l'esecuzione automatica di tutte le simulazioni necessarie. Tale motore potrebbe essere sfruttato insieme alle attività di supporto commerciali, anche se prevediamo che tutto il software sarà messo gratuitamente a disposizione di tutte le comunità di ricerca accademiche.

### IT4Innovations

IT4Innovations fornirà i miglioramenti del software nello stack HyperLoom per il progetto LIGATE. Tutti gli aggiornamenti e i miglioramenti saranno open source e verranno utilizzati in altri progetti correlati alle pipeline scientifiche. IT4Innovations provvederà inoltre a convalidare e utilizzare la soluzione LIGATE nei suoi stessi sistemi, incluso il sistema

### Nuove professioni nell'healthcare



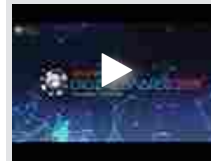
#### VIDEO



AboutFuture Leaders' Talks 2020: il Talk Show



AboutPharma Digital Awards 2019 - il video report



AboutPharma Digital Awards 2019 - il video completo

#### MEDICINA SCIENZA E RICERCA

Ligate: la nuova iniziativa contro la pandemia finanziata dall'Ue con 5,9 milioni di euro  
Dalla "gadgetologia" alla cardiologia clinica: cosa possono fare i wearable nella prevenzione cardiovascolare  
Covid-19, J&J annuncia richiesta di approvazione condizionata all'Ema per il vaccino di Janssen

EuroHPC petascale Karolina.

## E4 Computer Engineering SpA

Nell'ambito del progetto, E4 Computer Engineering SpA fornirà accesso remoto a numerose piattaforme hardware CPU/GPU/Tensor eterogenee, per consentire agli sviluppatori degli strumenti per la scoperta di farmaci basata su struttura di testare gli strumenti open source su piattaforme plug-and-play avanzate.

TAGS: [Comissione Europea](#) - [Covid-19](#) - [Dompé Farmaceutici](#) - [Exscalate](#) - [Ligate](#)

SHARE: [Tweet](#) [Salva](#) [Share](#) [Like](#) [Share](#) Sign Up to see what your friends like

TI POTREBBE INTERESSARE ANCHE...



Aifa autorizza studio italiano contro Covid-19



Covid-19, via libera di Aifa al vaccino di AstraZeneca per persone fino a 65 anni



La Commissione europea lancia l'incubatore Hera, una bio-difesa contro Covid-19



Covid-19, la Commissione europea chiude un contratto da 300 milioni di dosi con Moderna



ABOUTPHARMA | PUBLISHING | FORMAZIONE | HTA | ABOUTJOB

HPS Srl P.IVA 07106000966

CONTATTI | CHI SIAMO | PRIVACY POLICY | CODICE ETICO | POLITICA QUALITÀ | CERTIFICAZIONE ISO 9001:2015