



Da vaccini ad antibiotici contro super batteri, intelligenza artificiale rivoluziona la farmaceutica

Descrizione

(Adnkronos) È una delle più grandi sfide della chimica moderna: scoprire e sviluppare nuove molecole. Da nuovi farmaci a materiali sostenibili, tutto dipende dalla ricerca di nuove combinazioni di atomi con proprietà utili. In questa sfida negli ultimi anni si sta facendo avanti un "game changer": l'intelligenza artificiale. Appena il mese scorso, solo per fare un esempio, un team di un ateneo spagnolo, l'Universitat Rovira i Virgili (Urv) di Tarragona, annunciava sulla rivista scientifica "Nature Machine Intelligence" di aver sviluppato uno strumento di Ai in grado di generare milioni di nuove molecole che, pur essendo ancora sconosciute alla scienza, rispettano le leggi della chimica e potrebbero offrire inedite opportunità.

La descrizione di questo sistema è chiamato CoCoGraph, una sorta di ChatGpt delle molecole rende l'idea di quanto sia smisurato lo scenario che si apre: anche quando gli viene fornita una sola formula molecolare, ad esempio quella del paracetamolo, è in grado di costruire un vasto numero di combinazioni atomiche. L'enormità del numero di nuove molecole possibili si stima che potrebbe arrivare fino a 10^{24} , un numero di gran lunga superiore a quello delle molecole d'acqua presenti nell'oceano spiega Roger Guimerà del Dipartimento di Ingegneria Chimica dell'Urv, uno degli esperti che ha guidato la ricerca. Al contrario, il numero di molecole conosciute rappresenta solo una minuscola frazione di questa cifra. Questa vastità di combinazioni possibili fa sì che trovarne di effettivamente utili sia come cercare un ago in un pagliaio gigante. Al momento, dunque, la tecnologia messa a punto dagli scienziati è solo un primo passo. Ma se avrà successo, potrebbe davvero trasformare settori come la chimica, la farmacologia e la scienza dei materiali, accelerando la scoperta di nuove soluzioni in un universo chimico ancora praticamente inesplorato.

Se in questo caso si parla al futuro, le imprese dell'Ai nel campo della farmaceutica sono già realtà, come dimostra il caso del vaccino universale creato dall'Ai per fornire protezione contro diversi sarbecovirus, ampio gruppo di virus presenti in natura che include anche Sars-CoV-2, responsabile della pandemia di Covid-19. Questo vaccino, sviluppato dall'università di Cambridge con la sua società spin-out DIOSynVax, si è dimostrato sicuro in una sperimentazione condotta su 39 volontari sani. Ed è la prima volta, spiegano gli autori dello studio pubblicato sul "Journal of

Infezione, che un vaccino il cui componente attivo è stato progettato interamente tramite simulazioni al computer viene testato sugli esseri umani. Non è invece la prima volta che l'AI imprime una svolta nella ricerca di nuove molecole. Una delle sfide con cui si è misurata è la caccia ad armi innovative per combattere l'emergenza mondiale dei super batteri resistenti: si pensi ad esempio al lavoro del MIT (Massachusetts Institute of Technology) nell'ambito del quale l'AI ha progettato atomo per atomo due nuovi potenziali antibiotici che nei test di laboratorio e su modelli animali sono risultati in grado di uccidere il batterio della gonorrea resistente ai farmaci e uno *Staphylococcus aureus* multiresistente (MRSA). Questi composti dovranno continuare ad essere perfezionati e sperimentati, ma stanno già mostrando come l'AI potrebbe dare inizio a una seconda età dell'oro nella scoperta di antibiotici, dicono gli esperti.

E proprio di recente l'AI è stata schierata nella ricerca di nuove armi farmacologiche contro la rara specie di virus Ebola Bundibugyo che sta colpendo in Repubblica Democratica del Congo (RDC), con casi anche in Uganda: in Texas, al Southwest Research Institute (SwRI), è stato infatti condotto uno screening virtuale che ha permesso di identificare una ventina di composti antivirali che potrebbero potenzialmente avere un effetto sul patogeno. La promessa dell'AI di rovesciare paradigmi, come quello su cui si basa oggi la scoperta di farmaci, che inizia con un bersaglio molecolare noto, una proteina la cui modulazione dovrebbe invertire il decorso di una malattia. Il problema è che in molte patologie un tale bersaglio non sempre esiste o è stato sufficientemente definito. Nei giorni scorsi il Laboratorio di Bioinformatica strutturale e Biologia di rete dell'IRB di Barcellona, diretto da Patrick Aloy, ha proposto una nuova strategia per progettare molecole non in base a una proteina specifica, ma in base all'effetto che si desidera indurre nelle cellule. Per testare la metodologia, il team ha utilizzato diversi modelli cellulari, tra cui linee derivate da tumori pancreatici e cellule di controllo. Per la prima volta ha spiegato Aloy abbiamo progettato nuove entità chimiche utilizzando l'intelligenza artificiale, basandoci sull'effetto biologico che volevamo ottenere, e abbiamo dimostrato sperimentalmente che funzionano su cellule specifiche. Le molecole progettate con l'AI non solo hanno dimostrato un'attività superiore rispetto a quelle ottenute tramite strategie di screening convenzionali, ma molte si sono anche rivelate strutturalmente innovative e distinte dai composti chimici noti.

In questi anni l'intelligenza artificiale ha aperto una finestra inedita sul mondo delle proteine, come dimostra il premio Nobel per la Chimica 2024 assegnato ai ricercatori di AlphaFold, il progetto di Google DeepMind che con l'AI è stato in grado di predire la struttura 3D delle proteine, una sfida con cui gli scienziati si misuravano da decenni. Questo passo avanti è stato cruciale per il mondo della medicina, perché molti percorsi di scoperta di farmaci e anticorpi si concentrano proprio sulle proteine della membrana cellulare, caratterizzate da una struttura complessa. Quando le molecole di un potenziale farmaco si legano a queste proteine, come una chiave che entra in una serratura, innescano cascate chimiche che alterano il comportamento cellulare. Comprendere dunque come le proteine si ripiegano e si muovono è essenziale per lo sviluppo di farmaci.

E dal 2024 ad oggi l'AI è andata ancora più avanti anche rispetto alle conquiste di AlphaFold. Se infatti questo sistema, come la maggior parte di quelli disponibili, si concentra sulla produzione di istantanee statiche delle proteine, un team di scienziati dell'Ecole Polytechnique Federale di Losanna (EPFL) è riuscito a svilupparne uno che produce insiemi strutturali completi, a livello atomico, di proteine e dei loro movimenti. Le proteine sono come minuscole macchine che

danzano e si accendono e si spengono per funzionare, ma generare questo "film" in ogni dettaglio era un nodo irrisolto», ha spiegato la ricercatrice del Laboratorio di Ingegneria delle proteine e delle cellule Aditya Sengar, che ha lavorato al progetto. E il nuovo framework messo a punto ora apre la strada alla progettazione di nuovi farmaci che prendono di mira il comportamento dinamico di una proteina, non solo la sua forma», ha aggiunto Patrick Barth, uno degli esperti che ha guidato il lavoro.

Per tornare dal futuro al presente, l'AI sta individuando nuove missioni per vecchi farmaci (drug repurposing), sta velocizzando la scoperta di nuovi composti da testare e migliorando i processi del design farmaceutico, riuscendo anche a ridurre il numero di esperimenti sugli animali necessari per arrivare alla meta. Secondo gli esperti di Fossc, Forum che raggruppa 75 società scientifiche dei clinici ospedalieri e universitari italiani, l'applicazione dell'intelligenza artificiale può ridurre del 25% i costi per lo sviluppo di un farmaco e diminuire del 40% i tempi complessivi per la realizzazione di una nuova terapia. Un vantaggio non da poco, se si considera che dal momento dall'avvio della ricerca di base fino all'approvazione del trattamento, dopo gli indispensabili studi clinici, possono trascorrere anche 10 anni e che i costi medi dell'intera operazione ammontano a oltre 2 miliardi di euro.

I campi in cui si potrebbe sfruttare l'aiuto dell'AI sono davvero illimitati. Basta pensare alla più grande "farmacia" che abbiamo a disposizione: la natura, patrimonio ancora in buona parte inesplorato di sostanze medicinali. Già qualche anno fa un team di ricercatori dell'Eth di Zurigo aveva dimostrato con successo come i metodi di intelligenza artificiale possano essere utilizzati in modo mirato per individuare nuove applicazioni farmaceutiche per i prodotti naturali. E c'è ancora tanto da scoprire, se si pensa che oltre agli organismi terrestri ci sono quelli marini e negli oceani del mondo, che coprono circa il 71% del pianeta, solo meno del 5% degli abissi marini è stato esplorato in qualche modo e meno dello 0,01% del fondale marino profondo è stato campionato in dettaglio.

Persino per le erbe medicinali cinesi, che sono da tempo alla base della medicina tradizionale cinese e hanno prodotto molecole fondamentali come l'antimalarica artemisinina, si è pensato a un approccio basato sull'AI per accelerare lo screening e la scoperta di farmaci innovativi, come spiegano in uno studio esperti del Beijing Institute of Radiation Medicine (Pechino).

Ma in ognuno di questi progetti a fare la differenza sarà sempre e comunque la qualità dei dati, come suggerito da Pierre Vanderghenst, uno degli scienziati che ha lavorato al sistema di AI per generare modelli completi di proteine in movimento. «Molti presumono che alimentare i modelli di intelligenza artificiale con enormi set di dati risolverà automaticamente i problemi scientifici o sostituirà i ricercatori. Tuttavia ha evidenziato che gran parte di questi dati è rumorosa o valutata in modo inadeguato. Abbiamo bisogno di scienziati umani per produrre dati puliti e parametri di riferimento rigorosi che l'AI richiede, proprio come abbiamo bisogno di giornalisti per proteggerci dalla disinformazione».

»

cronaca

webinfo@adnkronos.com (Web Info)

Categoria

1. Comunicati

Tag

1. Ultimora

Data di creazione

Giugno 5, 2026

Autore

redazione

default watermark