

L'intelligenza artificiale dentro l'enigma della vita

La scoperta di DeepMind (Google): così si «piegano» le proteine

Corriere della Sera · 2 dic 2020 · 1 · Di Paolo Virtuani

Dopo 50 anni di dilemmi svelato l'enigma della vita: cioè il modo in cui si «piegano» le proteine. Per la biologia è una svolta epocale da usare per produrre nuovi farmaci. Un modello in 3D riprodotto da un sistema di intelligenza artificiale creato da DeepMind, società collegata a Google.



Per la biologia molecolare capire come una proteina si piega su se stessa è un balzo che può essere paragonato a quello del primo uomo sulla Luna. La forma finale che assume, infatti, condiziona le proprietà della proteina sotto l'aspetto fisiologico e patologico. Nel 1969, lo stesso anno di Apollo 11, un biologo molecolare americano disse che non sarebbe stata sufficiente la durata dell'universo per trovare quella corretta tra tutte le combinazioni possibili in cui una proteina si può ripiegare. «Si pensava che ci sarebbero voluti decenni per arrivare a questo risultato», ha detto Venki Ramakrishnan, Nobel 2009 per la chimica. Grazie all'intelligenza artificiale (AI), invece, è diventato già oggi possibile modellare in 3D con una precisione superiore al 90% il piegamento di una proteina a partire da una sequenza monodimensionale di aminoacidi, i «mattoni» che la costituiscono. Ciò favorirà la creazione di nuovi farmaci e la comprensione di dettagli che ancora ci sfuggono nella biologia e nella struttura di componenti essenziali per la vita come le proteine.

«Negli anni si sono sviluppati vari metodi bioinformatici per predire come avviene il piegamento, ma con ampi margini di errore», spiega Daniela Corda, direttore del Dipartimento di Scienze biomediche del Cnr. «Questo nuovo mezzo è importante per velocizzare la messa a punto dei farmaci, scavalcando una fase lunga e laboriosa che finora passava attraverso la purificazione e la cristallizzazione della proteina da studiare».

DeepMind, società londinese legata a Google tramite la holding Alphabet, ha annunciato di essere venuta a capo del dilemma che durava da oltre 50 anni grazie ad AlphaFold, il suo sistema di AI che ha partecipato a una competizione specifica, Casp (Critical Assessment of Structure Prediction), in cui vari modelli computazionali da un quarto di secolo si confrontano e si sfidano per riuscire a risolvere il mistero di come si piegano le proteine.

Ma perché è così importante comprendere il modo in cui lo fanno? «Il Dna che contiene il genoma di tutti gli esseri viventi per poter funzionare deve essere tradotto in lunghi filamenti di aminoacidi che poi formano le proteine, le quali per diventare attive si piegano più volte in strutture particolari di varie forme», prosegue Corda. «Dal modo di piegarsi dipende sia l'interazione con le altre proteine che la formazione di complessi molecolari, essenziali per la creazione di strutture cellulari complesse».

AlphaFold non è un normale programma informatico ma è strutturato con connessioni che simulano il cervello umano. «Per arrivare al risultato con un margine di errore pari al diametro di un atomo», dice Alessio Bechini, docente di Bioinformatica nel corso di Ingegneria biomedica all'Università di Pisa, «è stato determinante l'aumento della potenza di calcolo ottenuto negli ultimi anni. Uno strumento come AlphaFold richiede una potenza di calcolo inimmaginabile solo dieci anni fa».

È ancora incerto se DeepMind condividerà la tecnologia con la comunità scientifica. Demis Hassabis, co-fondatore e ad della società, ha riferito che è in programma la pubblicazione dei dettagli, ma non prima del 2021. Forse non si farà in tempo a utilizzare questa nuova arma per combattere il Sars-CoV-2, ma certamente è uno strumento che aiuterà a contrastare con risposte rapide ed efficaci possibili future pandemie che ci potrebbero cogliere di sorpresa come il Covid-19. «Quando sarà disponibile lo userò senza dubbio», conclude la ricercatrice del Cnr. «È un enorme passo avanti per trovare nuovi farmaci».