

Abstract Alberto Manganaro – VIVIpet 2010

Con metodi in-silico vengono indicate tutte le metodologie e gli strumenti basati su computer, che permettono di lavorare senza utilizzare direttamente gli animali. Un campo in particolare sviluppo è quello dei modelli QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship), che consistono in modelli matematici in grado di predire una determinata attività biologica a partire dalla struttura di un composto chimico.

Questo porta concretamente allo sviluppo di software al quale vengono passate le molecole in formato digitale (quindi, eventualmente, senza neppure la necessità che siano state realmente sintetizzate) e

restituisce una predizione per l'attività biologica, più delle informazioni di supporto per valutare se e quanto la predizione sia affidabile. L'utilizzo di questa metodologia appare sempre più interessante soprattutto con l'entrata in vigore della normativa europea REACH, che richiede all'industria di produrre una gran mole di informazioni tossicologiche su quanto producono. In questa ottica lo sviluppo di strumenti che risparmino test sugli animali, e che risultino anche veloci ed economici, è fortemente auspicato, tanto è vero che nello stesso testo del REACH si prevede e si incoraggia l'uso del QSAR e di altri metodi alternativi. Ad oggi sono già disponibili molti strumenti commerciali che implementano modelli per determinate attività di interesse (tossicologiche ed ecotossicologiche), e anche strumenti gratuiti (ad esempio, il progetto CAESAR, finanziato proprio dalla Comunità Europea in vista dell'applicazione all'interno del REACH).

Queste metodologie rappresentano quindi un filone di ricerca scientifica in forte sviluppo, capaci di coniugare i benefici di alti contenuti scientifici al valore aggiunto di essere molto più economici e veloci dei test su animali.