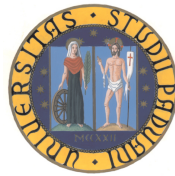


## Il Calcolo Scientifico presso il Dipartimento di Fisica

Alberto Garfagnini

Università degli studi di Padova

19 Dicembre 2007



## I gruppi coinvolti

Ambiti di ricerca, gruppi di fisica della materia.

### Fisica Computazionale della Materia Condensata

- Francesco Ancilotto
- PierLuigi Silvestrelli
- Flavio Toigo
- Luca Salasnich

### Meccanica Statistica

- Attilio Stella
- Enzo Orlandini
- Fulvio Baldovin
- Boris Marccone

### Fisica Biologica

- Flavio Seno
- Amos Maritan
- Antonio Trovato

## Risorse computazionali esistenti (locali)

### Server per calcolo parallelo (anno: 1999)

4 Digital DS-20 (2-processori)

1 Digital ES-20 (4-processore)

connessi da una rete Myrinet ad alta velocità

### Cluster INFM

<http://www.padova.infm.it/Calcolo/default.htm>

- **FarmINFM01** - Cluster OpenMosix Diskless (anno: 2002)  
16 processori Intel Xeon con 16GB ram
- **FarmINFM02** - Cluster PBS Pro (anno: 2004)  
8 processori Intel Xeon con 4GB ram
- **FarmINFM03** - Cluster PBS Pro (anno: 2004)  
8 processori Intel Xeon con 8GB ram
- **FarmINFM04** - MPI - Cluster PBS Pro (anno: 2004)  
8 processori Intel Xeon con 8GB ram

### Tecnologie utilizzate

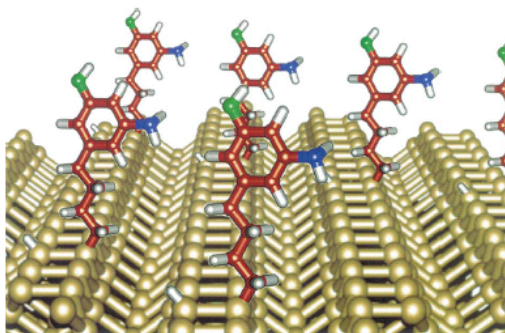
**Linguaggi:** Fortran 90, C++, C

**Compilatori:** Intel Fortran e C++, gcc

**Librerie:** LAPACK / NAG / MPI

## Studio da principi primi di proprietà di superfici

- “Funzionalizzazione” mediante molecole organiche → area emergente per **sviluppo di dispositivi** e **materiali** basati su semiconduttori
- La formazione di strati organici sulla superficie di un semiconduttore consente di ottenere **nuove proprietà**: chimiche, fisiche, ottiche, etc.



- superficie di **Si (1, 0, 0)** ricoperta con **molecole organiche**

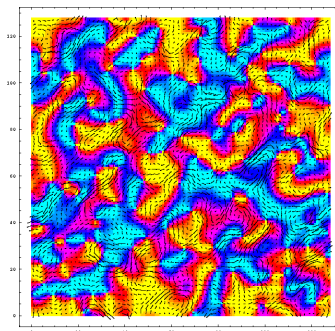
Fig. 1. Illustration of organic molecules attached to a silicon substrate in the initial stages of film deposition. Layered organic/semiconductor materials are being explored for possible application in sensor development, molecular electronics, and biocompatible implants.

## Studio da principi primi di proprietà di superfici

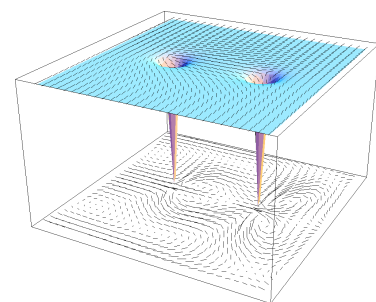
- Simulazione **realistica** con:
  - ~ 1000 atomi di Silicio
  - ~ 100 molecole organiche (es. Benzene o Acetilene)
  - ~ 30 GByte di Memoria
  - ~ 100 ore (reali) di processing (con 10 nodi)
- simulazioni eseguite sul **cluster IBM Linux 1350 (MPI)** del **CINECA**

## Dinamica dello switching in celle di cristalli liquidi (LC)

- Capire, con simulazioni basate sull'algoritmo di Lattice Boltzmann, l'effetto dell'**idrodinamica** e della **dinamica dei difetti** e delle condizioni al contorno sul processo di switching.



- Suggestire lo **sviluppo di geometrie** più **efficienti** (risposte più rapide allo switching) nelle **celle** per **dispositivi LC**



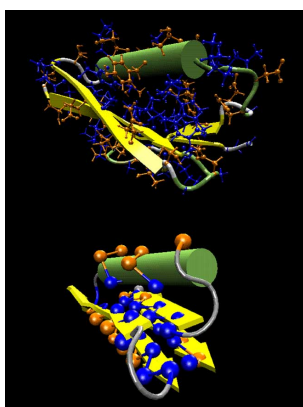
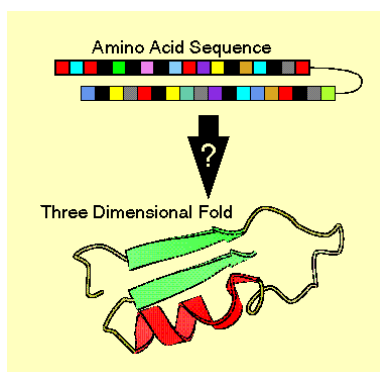
## Dinamica dello switching in celle di cristalli liquidi (LC)

- Problema fisico si presta molto bene alla **parallelizzazione (3D)**
- Sviluppo di **programmi paralleli (C++ con librerie parallele MPI)**
- Per simulare una **cella** di **dimensioni lineari L** occorre  **$L^3 \times 20 \times 8$  bytes**
- **Dimensioni tipiche** del reticolo  **$L = 500$  passi**  
 $\Rightarrow$  **70 GBytes**

### Esigenze / Limiti attuali

- Si richiedono **grandi quantitativi** di **memoria** e **potenza di calcolo**
- Attualmente sono necessari **svariati giorni di calcolo**

## Folding di proteine



- La **comprensione** dei **meccanismi** alla base del **folding** (ripiegamento) delle proteine ha **enorme rilevanza** per le **scienze bio-mediche**
- Simulazione mediante **Dinamica Molecolare** di **modelli dettagliati** di **proteine**
- Molte **malattie neuro-degenerative** (**Alzheimer's**, **Parkinson**) sono in relazione con un **"misfolding"** e **aggregazione** di **Fibrille Amiloidi**. I **dettagli strutturali** su scala atomica di tali fibrille **non sono noti**.

# Folding di proteine

- Il problema ha **molti** (troppi) **gradi di libertà**
- Si utilizzano **modelli "coarse-grained"**:  
tutti gli atomi  $\Rightarrow$  un **unico atomo** per **amminoacido**
- Il problema più semplice coinvolge **100-200 amminoacidi**
- Occorrono **2-3 giorni** per seguire la **traiettoria di folding**

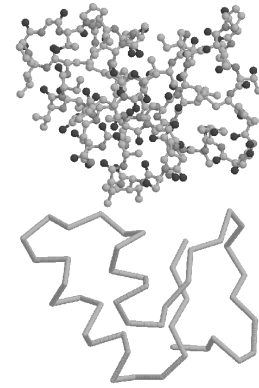


Figure 2.1: Top: Atomic representation of the protein crambin (46 amino acid residues). The linearly connected nature of the structure is not apparent. Bottom: The same protein with only the  $\alpha$ -carbon backbone visible.

## Esigenze/Limiti attuali

- Nei modelli attuali l'**interazione** con il solvente viene di **molto semplificato** (potenziale efficace di Lennard-Jones)
- Molto importante lo **studio dell'aggregazione delle proteine** (es. Fibrille Amiloidi per malattie neuro-degenerative):
  - richiedono lo studio di **svariate sequenze di amminoacidi**
  - necessita di **potenze di calcolo ordini di grandezza superiori** rispetto a quelle utilizzate attualmente

# Esigenze e progetti futuri

## Progetti futuri

- Studio di **sistemi superfici/interfacce** (organico-semiconduttore) estese
- Studi di **aggregazione delle proteine, folding** a livello dettagliato con **solvente**
- Necessità di elaboratori con un **numero elevato di nodi** e collegati con una **rete ad alta velocità**

Spazio disco ~ 10 TBytes	Numero di nodi 100-200	Memoria RAM 2-4 GBytes/nodo
-----------------------------	---------------------------	--------------------------------