



CSCS

Centro Svizzero di Calcolo Scientifico
Swiss National Supercomputing Centre

ETH

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Ulteriori progetti HP2C e i rispettivi promotori principali

Scienze dei materiali

Electroni in molecole e corpi solidi

La teoria del funzionale della densità (DFT) è uno dei metodi teorici più importanti nelle scienze dei materiali, nella fisica dei corpi solidi e nella chimica. Il codice BigDFT risolve le equazioni di meccanica quantistica all'interno della teoria del funzionale della densità e consente di determinare quasi tutte le proprietà fisiche e chimiche di nuovi materiali. BigDFT utilizza funzioni matematiche innovative, cosiddette «wavelets» per rappresentare le funzioni d'onda elettroniche e la distribuzione della carica elettronica. Un importante campo d'applicazione di BigDFT è la previsione dell'esistenza di nuovi nanomateriali.

BigDFT – Large Scale Density Functional Electronic Structure Calculations in a Systematic Wavelet Basis Set; Stefan Goedecker, professore presso l'Università di Basilea

Simulazione esatta di effetti di meccanica quantistica

MAQUIS è un ulteriore rilevante progetto nel campo della fisica dei corpi solidi, dove, attraverso simulazioni esatte di tutti gli effetti della meccanica quantistica, vengono studiate caratteristiche di materiali insolite e tecnologicamente interessanti.

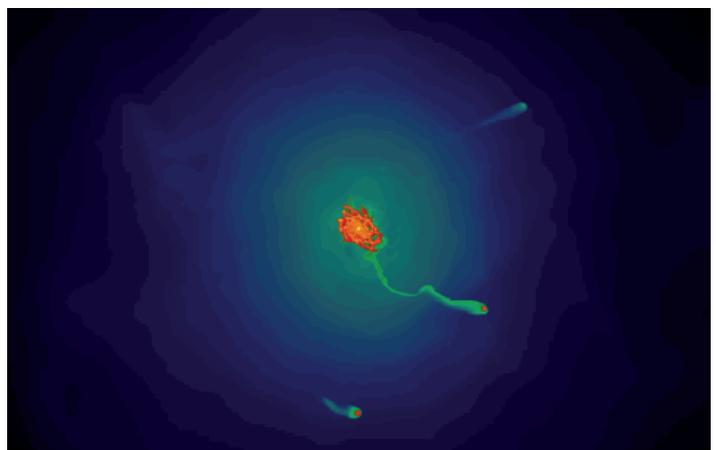
MAQUIS – Modern Algorithms for Quantum Interacting Systems; Thierry Giamarchi, professore presso l'Università di Ginevra

Astrofisica

Esplosioni stellari

Le supernove – esplosioni stellari – sono eventi chiave il cui studio consente di chiarire con maggior precisione la creazione di elementi pesanti e la loro distribuzione nell'universo. Inoltre i meccanismi d'esplosione non sono ancora ben compresi, e non è semplice rappresentare fedelmente un'esplosione stellare in un modello computazionale. Ciò viene reso ancora più difficile dalla complessa correlazione tra i numerosi processi fisici che si verificano a temperature e densità di materia estreme raggiungibili e analizzabili soltanto in esplosioni astrofisiche. Con il team concentrato sui processi ritenuti «essenziali» nello sviluppo degli algoritmi dovrebbe essere possibile simulare al computer realisticamente modelli affidabili anche in tre dimensioni.

SUPERNOVA – Productive 3D Models of Stellar Explosions; Matthias Liebendörfer, professore presso l'Università di Basilea



«Grazie all'HP2C siamo stati in grado di rivedere e migliorare i nostri modelli per la formazione delle galassie» dice Romain Teyssier. La squadra di ricerca dei cosmologi dell'Università di Zurigo adesso è in grado non solo di modellare la dinamica dell'ancora sconosciuta materia oscura (sopra), ma anche di simulare la materia visibile in un realistico disco ruotante come la nostra Via Lattea (parte centrale dell'immagine sotto). *(Immagine: Gruppo di Cosmologia di George Lake, Università di Zurigo)*

Nascita del Cosmo

Il progetto ha l'obiettivo di modellare la formazione e lo sviluppo di strutture di grandi dimensioni e galassie nell'universo. Partendo dalle condizioni iniziali che possono essere osservate direttamente attraverso la radiazione cosmica di fondo nella lunghezza delle microonde, gli scienziati lasciano che il loro uni-



CSCS

Centro Svizzero di Calcolo Scientifico
Swiss National Supercomputing Centre

ETH

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

verso virtuale evolve per oltre 13 miliardi di anni sotto l'effetto della legge gravitazionale e delle leggi della meccanica dei fluidi. La simulazione della formazione e dello sviluppo del cosmo è di fondamentale interesse per la scienza poiché rappresenta un test per i modelli dei ricercatori. Solo tramite simulazioni è possibile verificare se le osservazioni astronomiche corrispondono ai risultati ottenuti con le leggi fisiche.

COSMOLOGY – Computational Cosmology on the Petascale; George Lake, professore presso l'Università di Zurigo

Medicina

Sistema cardiocircolatorio

L'obiettivo degli scienziati è quello di simulare l'elettrofisiologia e la meccanica del cuore in combinazione con la circolazione sanguigna. Le simulazioni rivestono un'utilità fisio-patologica nelle applicazioni pratiche consentendo diagnosi migliori in caso di malattie vascolari, permettendo una migliore pianificazione degli interventi chirurgici fino a offrire un trattamento migliore e la guarigione di malattie vascolari infiammatorie.

CARDIOVASCULAR/LIVE5 – HPC for Cardiovascular System Simulations; Alfio Quarteroni, professore presso l'EPF Losanna

Simulare l'orecchio

L'obiettivo è la simulazione dell'orecchio umano partendo da realistiche basi biofisiche al fine di sviluppare apparecchi acustici migliori.

EAR MODELING – Numerical Modeling of the Ear: Towards the Building of new Hearing Devices; Bastien Chopard, professore presso l'Università di Ginevra

Biologia

Selezione naturale

La selezione secondo Darwin spiega l'adattamento di organismi viventi al loro ambiente naturale. Per poter identificare le tracce della selezione in un genoma, gli scienziati devono trovare

testimonianze di eventi piccoli e rari. Tipicamente si tratta di cambiamenti adattivi avvenuti decine o centinaia di milioni di anni fa in una piccola percentuale di una proteina. Per poter identificare gli eventi selettivi in decine di migliaia di geni di centinaia di genomi serve un'efficace scansione dei dati con l'ausilio di supercomputer. Il progetto «Selectome» ottimizza a tal fine il software in ambito HP2C.

SELECTOME – Selectome, looking for Darwinian Evolution in the Tree of Life; Marc Robinson-Rechavi, professore presso l'Università di Losanna

Clima

Quali sono le ripercussioni dei cambiamenti climatici sulle Alpi?

Acquisendo maggiori conoscenze, i modelli climatici diventano sempre più complessi. Allo stesso tempo sono importanti i modelli locali ad alta risoluzione, per comprendere meglio, per esempio, gli effetti del mutamento climatico sull'arco alpino. Attraverso l'elaborazione o la sostituzione di codici e algoritmi esistenti, il progetto ha l'obiettivo di rendere più efficiente il modello meteorologico e climatico regionale COSMO-CCLM utilizzato dall'ETH Zurigo e da MeteoSvizzera e di adattarlo a nuove architetture dei computer.

Cosmo-CCLM – Regional Climate and Weather Modeling on the Next Generations High-Performance Computers: Towards Cloud-Resolving Simulations; Isabelle Bey, Executive Director di C2SM (Center for Climate Systems Modeling) presso l'ETH Zurigo

Previsioni meteorologiche più precise

Il progetto OPCODE è strettamente collegato a COSMO. Il suo scopo principale è quello di far progredire le simulazioni meteorologiche locali. In questo progetto, tra le altre cose, si prevede di portare avanti la parte ancora mancante ma essenziale nello sviluppo di COSMO, per riadattare i modelli alle più recenti architetture dei computer contenenti processori grafici.

OPCODE – Operational COSMO Demonstrator; Oliver Fuhrer, MeteoSvizzera