

# Iniziativa LISA: raccolta degli abstract dei progetti approvati

a cura di Paolo Ramieri

*CILEA, Segrate*

## NUcleosynthesis during EXplosions NUEx

*Angela Bracco, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano*

Per questo progetto ci proponiamo di risolvere le principali incertezze relative alla nucleosintesi durante eventi di supernove di tipo Ia (SNIa). In collaborazione con il gruppo di ricerca del Max-Planck Institute per l'Astrofisica di Monaco, abbiamo sviluppato gli strumenti per portare avanti studi teorici di nucleosintesi sulla base di modelli idrodinamici multidimensionali di SNIa.

Il gruppo di ricerca di Monaco ha una solida e storica tradizione in studi teorici di supernove. Questo in relazione anche ad una più generale attività di ricerca nel campo dell'astrofisica nucleare teorica, dove il gruppo di Monaco detiene una posizione di leader mondiale. Uno dei loro punti forti è stato sviluppare nuovi metodi per simulare fronti termonucleari turbolenti, molto importanti per lo studio di esplosioni di supernove. Il loro metodo si basa sul trattamento dell'onda d'urto come una discontinuità matematica e permette l'accoppiamento tra il fronte geometrico e lo scorrimento del campo. Questo metodo è stato applicato con successo in simulazioni di esplosioni di SNIa sia in 2 dimensioni che in 3 dimensioni.

Il gruppo italiano (Milano+Torino+Perugia) che sottomette la presente proposta, si affianca al gruppo di Monaco con una storica e forte esperienza nel campo dell'astrofisica nucleare e della nucleosintesi. Fino poco tempo fa, tutti i gruppi sulla scena internazionale hanno presentato calcoli di nucleosintesi in 1-D (una dimensione) direttamente all'interno del codice di evoluzione stellare. Dato che network nucleari con centinaia di isotopi sarebbero proibitivi in termini di CPU e memoria per modelli multidimensionali, la soluzione attualmente può solo trovarsi nel calcolo della nucleosintesi come post-processo (l'energia dovuta al bruciamento termonucleare può essere calcolata in buona approssimazione con un piccolo network di reazioni termonucleari direttamente all'interno del codice idrodinamico).

Usando uno schema Euleriano (dove la griglia è fissa nello spazio) o uno schema adattivo (dove la griglia si adatta automaticamente per risolvere i forti gradienti nelle soluzioni), il problema si traduce nell'ottenere i dati necessari al calcolo della nucleosintesi in un post-processo. Abbiamo trovato una soluzione aggiungendo una componente Lagrangiana allo schema Euleriano sotto forma di particelle traccia che seguono passivamente il corso del fluido. Di tali particelle si tiene traccia della loro storia in temperatura e densità (in funzione del tempo) interpolando le suddette quantità sulla griglia euleriana. Temperatura e densità sono le informazioni essenziali per i calcoli di nucleosintesi in ciascuna di queste particelle traccia. Tale calcolo di nucleosintesi in modelli multidimensionali di supernove è un progetto unico sulla scena internazionale, che richiede un team di esperti numerici, idrodinamici, e di astrofisica nucleare di alto livello. E al momento pochissimi gruppi sono in grado di essere competitivi in questi studi teorici.

Uno studio di risoluzione è uno dei goal di questo progetto, che sarà raggiunto aumentando il numero di particelle fino ad aver raggiunto risultati di nucleosintesi sufficientemente accurati, sia in 2 dimensioni che in 3 dimensioni. Un altro goal del progetto è l'analisi di diversi modelli di esplosione, esplorando sia modelli con pura detonazione sia modelli che includono un meccanismo di deflagrazione. Questo potrà avere un impatto internazionale molto importante per gli studi dei progenitori di supernove, per il contributo delle SNIa all'arricchimento chimico del Sistema Solare, e per il peso delle SNIa più vecchie all'evoluzione chimica di galassie ad alto redshift.

Relativamente al codice numerico e alle sue performance, esso utilizza come parametri di ingresso un set di informazioni derivanti dal modello idrodinamico, e fornisce come parametri in uscita un più

complesso set di dati incluse le abbondanze di tutti gli isotopi in funzione del tempo per ciascuna particella, in tempi scala dell'ordine di 100 secondi dopo l'esplosione di SNIa.

Il codice è parallelizzato con MPI. Ciascun core calcola una singola traccia, indipendentemente dagli altri core che stanno lavorando su altre tracce, massimizzando così il livello di parallelismo. L'output è scritto in file separati, un file per ciascuna particella.

## **SALI - Simulazione atomistica di liquidi ionici**

*Nicola Manini, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano*

Intendiamo simulare la penetrazione di una tip nanometrica in un film sottile di liquido ionico a temperatura ambiente. La simulazione proposta rappresenta l'analogo computazionale di misure sperimentali AFM (atomic force microscopy) descritte in letteratura. Utilizzeremo tecniche di dinamica molecolare all-atoms, basate su potenziali interatomici già validati.

I risultati permetteranno un confronto dettagliato con gli esperimenti, e favoriranno una migliore comprensione di proprietà strutturali e dinamiche di liquidi ionici all'interfaccia con superfici di solidi isolanti.

## **MODTUB: Modeling di microtubuli**

*Maurizio Sironi, Stefano Pieraccini*

*Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano*

La tubulina è una proteina che si autoassembla formando dei lunghi protofilamenti i quali si uniscono lateralmente fra loro formando dei lunghi cilindri cavi; queste strutture complesse sono chiamate microtubuli. I microtubuli hanno un ruolo essenziale nelle cellule eucariote, provvedendo a diversi ruoli sia strutturali che di trasporto e migrazione. Sono ad esempio implicati nel processo della divisione cellulare in quanto consentono il trasporto dei cromosomi nelle cellule figlie. Per esplicitare la loro azione, i microtubuli sono soggetti ad una complicata dinamica che consente loro, ad esempio, di andare incontro a fenomeni di rapida crescita seguiti da una rapida dissociazione. Questo comportamento dinamico consente ad esempio di formare dapprima dei filamenti per il trasporto dei cromosomi nelle due cellule figlie e quindi di ritrarsi per permettere la separazione delle cellule. L'attività di trasporto viene esplicitata da opportune proteine (motor proteins) che possono scorrere sulla superficie esterna dei microtubuli. Molecole che interagiscono con la dinamica dei microtubuli possono quindi interagire con il processo di divisione cellulare e per questa ragione i microtubuli sono un target per diverse molecole antitumorali. Una conoscenza approfondita a livello molecolare di tutte le interazioni che si instaurano all'interno di un microtubulo è pertanto essenziale per comprendere la natura dei microtubuli e le loro interazioni. Il nostro gruppo ha recentemente pubblicato su Nature Chemistry uno studio sulle interazioni che si instaurano fra due molecole di tubulina e che sono quindi di fondamentale importanza per la formazione del protofilamento. Ricercatori di diverse discipline hanno dedicato molta attenzione ai microtubuli per studiare la loro struttura, il meccanismo del loro comportamento dinamico e come questi aspetti siano influenzati dai farmaci. Tuttavia, nonostante questi sforzi, una completa conoscenza di queste problematiche e la loro interpretazione a livello molecolare non è stata ancora realizzata.

Recentemente alcuni gruppi hanno studiato modelli estremamente semplificati di protofilamenti per estrarre informazioni sulle diverse forze che agiscono sulle singole molecole di tubulina, allo scopo di prevedere stabilità e struttura dei microtubuli. Simulazioni a livello atomico di piccoli aggregati di tubulina sono state utilizzate per parametrizzare semplici modelli che consentono di studiare le proprietà meccaniche dei microtubuli. Riteniamo che un accurato modelling della struttura dei microtubuli ed una corretta valutazione dei potenziali di interazione fra molecole di tubulina inserite NELLA struttura del microtubulo sia essenziale per poter descrivere i meccanismi che regolano la polimerizzazione dinamica ed il movimento delle cosiddette 'motor protein' sulla superficie del

microtubulo. Strutture di piccoli aggregati della tubulina, disponibili da esperimenti di diffrazione ai raggi X, sono già state utilizzate in alcuni studi di simulazione. Non esistono invece informazioni complete per quanto concerne la struttura della tubulina NEL microtubulo. Le parziali informazioni disponibili sono state ottenute da studi di docking utilizzati per riprodurre dati ottenuti da esperimenti di microscopia crioelettronica sui microtubuli. In questo progetto ci proponiamo di costruire un adeguato modello che rappresenti una opportuna sezione del microtubulo e che consenta di valutare le interazioni molecolari fra le diverse unità di tubulina al suo interno. Il modello base che verrà costruito è rappresentato da una struttura contenente 26 molecole di tubulina, ed è costituito da circa 800.000 atomi. La simulazione del modello verrà condotta attraverso l'utilizzo della dinamica molecolare. L'assistenza tecnica da parte dei tecnici del CILEA costituirà un punto essenziale per garantire di poter ottenere le migliori prestazioni dal software e dall'hardware utilizzato nel corso della ricerca.

## **Analisi delle forze agenti sui treni in presenza di crosswind con vari scenari. - ACRONIMO: CROSSWIND**

*Federico Cheli, Dipartimento di Meccanica, Politecnico di Milano*

La potenza di calcolo a disposizione oggi permette alla fluidodinamica numerica di riprodurre flussi molto complessi. Ad esempio al giorno d'oggi è possibile riprodurre con buona fedeltà il campo di moto attorno ad un treno soggetto a crosswind. Il vento trasversale è un problema per treni ad alta velocità, poiché le forze aerodinamiche diventano pericolose per il ribaltamento del treno stesso. Le prove in galleria del vento sono molto dispendiose sia in termini di denaro che di tempo, ed è quindi prevedibile che entro breve tempo possano essere sostituite da prove in galleria virtuale, ovvero con la fluidodinamica numerica (CFD). Questa offre grossi vantaggi sia in termini di tempo necessario che di complessità delle prove da effettuare, in particolare nel caso di treno in moto.

Le simulazioni verranno effettuate per diversi tipi di scenario (ballast and rail, viadotto, embankment, con barriere), al fine di verificare le sollecitazioni sul treno e le forze ed i momenti ribaltanti. Queste attività si inseriscono nelle ricerche da anni in atto presso il Dipartimento di Meccanica del Politecnico di Milano e finora svolte prevalentemente con l'ausilio della Galleria del Vento (CIRIVE).

I risultati ottenuti potranno essere utili all'interno delle Commissioni Europee che stanno attualmente mettendo a punto una nuova normativa per i treni ad Alta Velocità in Europa.

## **Parallelizzazione del modello di chimica e trasporto TCAM, per applicazioni di pianificazione della qualità dell'aria (PARTCAM)**

*Claudio Carnevale, Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione, Università degli Studi di Brescia*

Nell'ottica di utilizzare il sistema modellistico GAMES per la previsione online dell'inquinamento atmosferico, o la valutazione di scenari di controllo della qualità dell'aria, si propone in questo progetto di parallelizzare il codice di TCAM, in modo da poter sfruttare le capacità dei centri di supercalcolo presenti in Lombardia (vedi ad esempio le risorse del CILEA). Il progetto prevede inoltre una seconda fase che si concentrerà sulla applicazione del modello parallelizzato per la realizzazione di simulazioni in fase eterogenea, in modo da poter analizzare l'impatto delle differenti strategie di controllo emissivo sia su inquinanti in fase gas (principalmente ozono) che su inquinanti in fase aerosol (PM10 e PM2.5) la cui analisi risulta particolarmente importante per l'impatto che essi hanno sulla salute dell'uomo e sull'ecosistema. Più in dettaglio il lavoro proposto è articolato nelle seguenti attività:

FASE 1: parallelizzazione TCAM

- analisi del modello TCAM e profiling del codice, al fine di individuare le porzioni di codice maggiormente time-consuming;
- parallelizzazione del codice, utilizzando il paradigma di decomposizione geografica del dominio di simulazione (o altri paradigmi eventualmente proposti dallo staff del CILEA);

- test del codice parallelizzato, per analizzare la robustezza del codice parallelo ottenuto rispetto al codice iniziale (seriale).

#### FASE 2: caso studio

- predisposizione degli input meteorologici, utilizzando il modello meteorologico WRF, configurato con 5 differenti parametrizzazioni del PBL (Planetary Boundary Layer)
- predisposizione degli input emissivi e al contorno per il caso base;
- realizzazione di simulazioni annuali riguardanti il caso base;
- validazione dei risultati delle simulazioni per il caso base (2010), considerando le 5 differenti simulazioni effettuate con WRF; scelta della miglior configurazione meteo;
- predisposizione degli input emissivi per 2 scenari alternativi:
  - 2020CLE: emissioni al 2020, considerando l'attuale normativa;
  - 2020MFR: emissioni al 2020, considerando le migliori tecnologie di riduzione emissiva possibili per i differenti inquinanti.
- realizzazione di simulazioni annuali per i due scenari considerati;
- valutazione dell'impatto delle differenti politiche di controllo emissive ipotizzate.

## Tecniche GPU per la Modellazione Avanzata Statistica Spazio-Temporale (GPU4MASST)

*Michela Cameletti, Dipartimento di Matematica, Statistica, Informatica e Applicazioni  
Francesco Finazzi, Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione e Metodi Matematici  
Università degli Studi di Bergamo*

L'obiettivo del progetto di ricerca consiste nell'implementare algoritmi di algebra lineare in ambiente parallelo basato su processori grafici GPU. Il progetto, in particolare, si colloca nell'ambito della modellazione statistica avanzata per fenomeni ambientali con componenti spaziali e temporali. La complessità computazionale di questi modelli, e la conseguente necessità di calcolo ad alto parallelismo, deriva principalmente da due fattori: l'elevata dimensionalità dei dataset utilizzati e le procedure statistiche di stima e previsione spaziale che sono basate su algoritmi computazionalmente intensivi, come l'algoritmo Expectation-Maximization (EM) e i metodi Markov chain Monte Carlo (MCMC). In tale contesto, considerando altresì che è necessario operare aggiornamenti sequenziali dei parametri dei modelli, il gruppo di ricerca intende focalizzarsi sulla parallelizzazione a grana fine delle operazioni matriciali richieste ad ogni iterazione delle procedure EM e MCMC. Più precisamente, gli algoritmi che si intendono sviluppare riguardano principalmente la fattorizzazione e l'inversione di matrici di varianza e covarianza, le quali godono delle proprietà di simmetria e definita positività. Ciò consente di applicare algoritmi ad hoc, più efficienti in termini di occupazione di memoria e tempo di calcolo rispetto agli algoritmi per matrici generiche, ma di cui, ad oggi, le librerie di algebra lineare per applicazioni in ambiente GPU (CUBLAS, ad esempio) sono sfornite.

Il progetto è articolato secondo le seguenti fasi:

1. Implementazione in ambiente GPU degli algoritmi di algebra lineare per matrici di varianza e covarianza (principalmente fattorizzazione ed inversione).
2. Implementazione di alcuni modelli statistici spazio-temporali per la qualità dell'aria con l'introduzione degli algoritmi di cui sopra all'interno dei metodi EM e MCMC.
3. Interfacciamento con l'applicativo R (<http://www.r-project.org/>), software open-source particolarmente diffuso nella comunità scientifica degli statistici.

Ogni fase è da svolgersi in stretta collaborazione tra il personale CILEA e il gruppo di ricerca per garantire in maniera continuativa lo scambio delle conoscenze statistiche-informatiche necessarie per implementare algoritmi efficienti ed ottimizzati anche dal punto di vista del grado di parallelismo e della gestione della memoria.

## **Modellazione Numerica avanzata agli Elementi Discontinui: Applicazioni e Supercalcolo (MONEDAS)**

*Antonella Abbà<sup>1</sup>, Paolo Barbante<sup>1</sup>, Francesco Bassi<sup>2</sup>, Luca Bonaventura<sup>1</sup>, Edie Miglio<sup>1</sup>, Giacomo Bruno Persico<sup>3</sup>, Stefano Rebay<sup>4</sup>, Marco Restelli<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> *MOX-Dipartimento di Matematica, Politecnico di Milano*

<sup>2</sup> *Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università degli Studi di Bergamo*

<sup>3</sup> *Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano*

<sup>4</sup> *Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Industriale, Università degli Studi di Brescia*

Il progetto si propone di creare e consolidare un gruppo di lavoro congiunto che coinvolga l'Università degli Studi di Brescia, l'Università degli Studi di Bergamo, il CILEA ed il Politecnico di Milano, con competenze a livello di eccellenza nella simulazione numerica con metodi di Galerkin agli elementi finiti discontinui per problemi complessi di fluido-dinamica, con applicazioni in ambito sia ingegneristico che geofisico. Elementi distintivi del progetto sono la rilevanza data al calcolo parallelo e l'attenzione alla visualizzazione grafica avanzata dei risultati, entrambe motivate dalla elevata complessità dei problemi in esame.

## **Applicazioni LES per supporto alla ricerca industriale (LES4INdustry)**

*Fabio Inzoli, Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano*

Negli anni più recenti si è assistito ad un sempre maggiore impiego di modellistica LES (Large Eddy Simulation) nella simulazione di campi di moto turbolenti. Il vantaggio di un approccio LES, rispetto al più tradizionale approccio RANS, è una migliore accuratezza nella predizione delle strutture vorticosi e del loro impatto nel trasporto e nella miscelazione di componenti scalari e/o nello studio di fisiche complesse (multifase, combustione, acustica). L'approccio LES richiede ingenti risorse computazionali, soprattutto per applicazioni in campo industriale.

Un utilizzo consapevole della LES in ambito industriale/ingegneristico richiede la definizione di chiare linee guida per le procedure di calcolo e di criteri per valutare l'affidabilità dei risultati. L'obiettivo del progetto proposto è valutare le potenzialità ed i limiti di utilizzo della modellazione LES per applicazioni di interesse industriale e mettere a punto una procedura adeguata per valutare l'affidabilità dei risultati. Particolare rilevanza verrà data alla possibilità di coordinare i tempi di calcolo richiesti dalle simulazioni LES con quelli caratteristici della progettazione industriale. Tali potenzialità saranno misurate sia in relazione alle capacità di tali codici di sfruttare appieno l'alto parallelismo richiesto dall'approccio LES sia in relazione alla forte interconnessione tra la numerica ed i risultati LES.

Si intende strutturare il progetto avendo in mente applicazioni sulla combustione e sfruttando la sinergia con il centro ricerche Centro Sviluppo Materiali (CSM) di Dalmine, il Dipartimento di Ingegneria Chimica del Politecnico di Milano e l'Istituto di Ricerche sulla Combustione - CNR di Napoli. Il progetto sarà articolato in due distinte fasi. Nella prima fase si validerà l'approccio LES su un test-case di riferimento, combustione turbolenta non premiscelata in un combustore assiale, per il quale esistono dati sperimentali largamente accettati e diverse simulazioni LES di riferimento. Nella seconda fase si prevede di applicare la modellistica LES ad un caso di rilevante interesse industriale e per il quale è in corso una campagna di sperimentazione presso il CSM: combustione flame-less in un forno industriale per il trattamento dei metalli.

Il progetto sarà coordinato dal gruppo di ricerca del CFDLab del Dipartimento di Energia del Politecnico di Milano. In termini di personale, sono coinvolti complessivamente 10 ricercatori.

Si richiede al CILEA disponibilità di risorse di calcolo per un ammontare di 500k ore-core, da sfruttare nell'arco dei 12 mesi oggetto del bando. In media, una simulazione richiederà circa 256 core, 4Gb di RAM per core e circa 4Tb di spazio su disco per l'archiviazione dei dati ed il post-processing. Si richiede contestualmente la disponibilità delle piattaforme software OpenFOAM e Fluent-Ansys.

## Studio di teorie di gauge sul reticolo mediante simulazioni numeriche

*Leonardo Giusti, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano Bicocca*

La simmetria di gauge non abeliana è una proprietà fondamentale della Cromodinamica Quantistica, la teoria delle interazioni forti in Natura. Nelle teorie di Yang--Mills l'auto-interazione del campo di gauge suggerisce l'esistenza delle glueballs, stati legati di gluoni.

L'obiettivo a lungo termine di questo progetto è di ottenere delle solide evidenze teoriche dell'esistenza di queste particelle nella teoria SU(3), e successivamente di ottenere una determinazione precisa della massa e della molteplicità delle glueballs più leggere in ogni settore di simmetria della teoria. I calcoli necessari saranno effettuati mediante tecniche di integrazione Monte Carlo.

Simuleremo la teoria su un reticolo spazio-temporale con un nuovo metodo numerico, che abbiamo recentemente proposto e testato, a volumi e passi reticolari mai tentati fino ad ora. Il metodo Monte Carlo "symmetry constrained" si basa sull'osservazione che l'integrale sui cammini di una teoria di campo quantistica con una simmetria esatta può essere decomposto in una somma di integrali funzionali, ad ognuno dei quali contribuiscono stati della teoria con definite proprietà di simmetria. Le regole di composizione degli elementi della matrice di trasferimento possono essere sfruttate per disegnare un algoritmo di integrazione numerica a molti livelli che non è affetto dal problema della decrescita esponenziale del rapporto segnale su rumore come nel caso delle procedure standard utilizzate fino ad oggi.

## Simulazione ab-initio delle trasformazioni sotto pressione di materiali a cambiamento di fase per memorie non volatili (HIGHPHASE)

*Marco Bernasconi, Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università degli Studi di Milano Bicocca.*

I materiali a cambiamento di fase sono largamente usati nelle memorie ottiche (DVD) e costituiscono la parte attiva delle più promettenti memorie non volatili di nuova concezione, le celle PCM (Phase Change Memory). Questi dispositivi sfruttano la grande variazione di conduttività ottica ed elettrica tra la fase cristallina metallica e la fase isolante amorfa di una lega di calcogenuro. Il cambiamento di fase è indotto dal riscaldamento prodotto da impulsi di corrente nelle PCM o da irraggiamento laser nei DVD. Il calcogenuro  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  (GST) è al momento il materiale d'elezione per applicazioni nelle PCM grazie alle sue migliori prestazioni in termini di velocità di trasformazione e stabilità della fase amorfa. Nonostante il grande interesse tecnologico di questi materiali, il meccanismo dettagliato delle loro trasformazioni di fase è ancora in gran parte sconosciuto. D'altra parte, una migliore conoscenza delle proprietà microscopiche di questi materiali sarebbe di grande aiuto nella ricerca di nuove composizioni in grado di superare le limitazioni del GST, ad esempio per applicazioni ad alta temperatura. Utili informazioni sulle transizioni di fase si possono ottenere inducendo la trasformazione non per riscaldamento, ma per applicazione di una pressione esterna. E' stato infatti recentemente dimostrato sperimentalmente che il GST amorfizza alla pressione di 20 GPa e che la fase amorfa, a sua volta, si trasforma in una nuova fase cristallina sopra i 30 GPa. La sequenza di transizioni di fase dipende tuttavia dalla geometria della fase di partenza del GST che può essere cubica od esagonale.

In questo progetto ci proponiamo di studiare il comportamento del GST ad alta pressione con simulazioni atomistiche ab-initio basate sulla teoria del funzionale della densità. Si utilizzerà una particolare tecnica di simulazione di dinamica molecolare, denominata metadinamica, in cui la cella di simulazione può cambiare forma e dimensioni sotto l'azione della pressione esterna. La metadinamica permette di simulare transizioni di fase solido-solido anche in presenza di grandi barriere di entalpia tra le due fasi. Le simulazioni permetteranno di chiarire il ruolo della struttura della fase di partenza nel determinare il comportamento del materiale ad alta pressione ed in particolare permetteranno di identificare il processo di nucleazione della fase cristallina nella matrice amorfa. I risultati ottenuti saranno di grande aiuto anche per la comprensione del meccanismo di cristallizzazione a bassa

pressione. Una descrizione microscopica di quest'ultimo processo è di grande importanza per stabilire una relazione tra composizione della lega e stabilità della fase amorfa che possa guidare la ricerca sperimentale di nuovi materiali con migliori prestazioni per l'applicazione delle celle PCM alle alte temperature richieste in campo automobilistico. Questo progetto si inserisce in una più ampia attività teorica che il nostro gruppo svolge dal 2007 in collaborazione con la società Numonyx (Agrate Brianza), attualmente leader mondiale nello sviluppo di questi dispositivi. Le simulazioni ab-initio ci hanno già permesso di identificare la struttura microscopica della fase amorfa del GST, oggetto di una lunga controversia negli anni passati. Ci aspettiamo che anche i risultati di questo progetto possano avere utili ricadute sulla ricerca industriale.

## **PARAllelizzazione del modello idrologico FEST (PARA-FEST)**

*Giovanni Ravazzani, DIAR, Politecnico di Milano*

I modelli idrologici distribuiti fisicamente basati discretizzano l'area di studio secondo una griglia costituita da celle elementari di calcolo a cui vengono assegnati i parametri direttamente legati alle caratteristiche fisiche dei bacini. Il continuo sviluppo di questi modelli ha permesso di aumentare l'accuratezza delle simulazioni al costo di un incremento notevole del numero dei parametri e dei processi simulati con un aumento dei tempi di calcolo. Applicazioni che prevedono la simulazione di lunghi periodi temporali, come le analisi finalizzate allo studio dei cambiamenti climatici su bacini idrografici di grandi dimensioni, richiedono dunque tempi di calcolo molto elevati valutabili nell'ordine dei giorni o settimane.

Il progetto proposto prevede dunque la parallelizzazione di un modello idrologico distribuito fisicamente basato sviluppato presso il Politecnico di Milano. Il progetto si inquadra nell'ambito del progetto di ricerca ACQWA finanziato dalla comunità europea avente lo scopo di analizzare gli impatti dei cambiamenti climatici sulle risorse idriche dell'area alpina.

## **Dinamica della Magnetizzazione in Nanosistemi**

*Fausto Borgonovi, Dipartimento di Matematica e Fisica, Università Cattolica di Brescia*

Il seguente progetto è focalizzato sullo studio teorico del comportamento ferromagnetico di nanosistemi, con lo scopo di ampliare la comprensione dei meccanismi non convenzionali che causano il ferromagnetismo (FM) a temperatura ambiente. Recentemente è stata discussa la possibilità di indurre FM in isolanti non magnetici creando difetti puntuali intrinseci in alternativa al più tradizionale metodo del drogaggio con ioni magnetici. In realtà negli ossidi a shell chiusa (ad esempio biossido di titanio,  $\text{TiO}_2$ , dove lo ione Ti è formalmente  $3d^0$ ) è stato misurato ferromagnetismo (FM) a temperatura ambiente. I meccanismi alla base del FM sono ancora oggetto di studio; quelli convenzionali non sembrano essere adatti a spiegarlo, per una serie di ragioni, tra cui l'assenza di un ordinamento FM tra spin vicini, la bassa densità di spin nel reticolo e la mancanza di portatori delocalizzati che possono supportare un accoppiamento di tipo RKKY.

Apparentemente lo scopo principale della maggior parte degli studi teorici è quello di scoprire se sia possibile un accoppiamento ferromagnetico tra spin, mentre le curve di magnetizzazione del sistema ( $M$  vs  $T$ ,  $M$  vs  $H$ ) sono trattate tramite teorie di campo medio. E' risaputo che l'approssimazione di campo medio sottostima l'effetto delle fluttuazioni termiche, sovrastimando quindi il valore della temperatura critica di transizione. Inoltre l'approccio di campo medio trascura completamente gli effetti dinamici che verranno inclusi invece in questo progetto. La nostra idea è quella di utilizzare simulazioni Monte Carlo (Algoritmo di Metropolis) per il calcolo del tempo di demagnetizzazione in sistemi generici di spin interagenti e applicarle ai casi dei film ultrasottili e di nanostrutture studiati negli esperimenti, ad esempio nei film sottili e nelle nanoparticelle di  $\text{TiO}_2$ . L'utilizzo di simulazioni Monte Carlo è fondamentale per un raffronto quantitativo con i dati sperimentali, infatti è possibile avere un comportamento ferromagnetico, dovuto a grandi tempi di rilassamento, senza una temperatura critica.

## **MODellistica TRIdimensionale in Pianura Padana: ricostruzione delle caratteristiche idrogeologiche per simulazioni di flusso e di trasporto (MODTRIPP)**

*Angelo Cavallin, Dipartimento Ambiente e Territorio, Università degli Studi di Milano Bicocca*

La ricostruzione delle caratteristiche idrogeologiche tridimensionale del sottosuolo della Pianura Padana è un importante ambito di ricerca avanzata che impegna ricercatori di geologia applicata del DISAT a partire dagli inizi degli anni '90, col fine ultimo di predisporre una base utile alla costruzione di modelli di flusso e trasporto regionali. La metodica seguita comporta l'utilizzo di banche dati e di strumenti innovativi in campo informatico che riguardano codici di interpolazione tridimensionale e di codici di flusso e trasporto, oltre alla predisposizione di programmi che ne consentano l'interconnessione; pertanto tale complessità di approccio chiede rilevanti investimenti in particolare temporali.

La ricerca riveste notevole importanza nel campo della gestione della risorsa idrica sotterranea soprattutto in Pianura Padana, dove le acque sotterranee costituiscono il 90% della risorsa idrica utilizzata, consentendo la quantificazione dei volumi d'acqua disponibili, la valutazione delle variazioni idriche nello spazio e nel tempo, l'impostazione di modelli di flusso e di trasporto per la valutazione dell'impatto di opere di eventi di contaminazione.

L'attuale possibilità di calcolo per le ricostruzioni tridimensionali necessita di tempi di calcolo, nelle normali condizioni di utilizzo su personal computer, molto lunghi (giornate) per ogni singola elaborazione. E' inoltre molto difficile realizzare una resa grafica ad alte prestazioni per la complessità di visualizzare più tematismi contemporaneamente (punti, linee, poligoni, griglie di calcolo). In questo quadro, gli obiettivi della ricerca sono molteplici: introdurre metodi di calcolo in parallelo volti a migliorare la ricostruzione tridimensionale della struttura del sottosuolo, per comprendere i flussi migratori e le vie preferenziali di movimento dell'acqua e, di conseguenza, anche di eventuali inquinanti; implementare modelli di flusso idrogeologici che possano riprodurre il sistema idrogeologico reale, con sistemi di calcolo più veloci e stabili che consentano di produrre un maggior numero di simulazione in tempi ragionevoli; sviluppare procedure di scambio di dati tra differenti software.

## **Sviluppo di un codice di calcolo parallelo per la simulazione di eventi sismici e processi di frattura in solidi tridimensionali**

*Angelo Carini, DICATA, Università degli Studi di Brescia*

Costituisce oggetto della presente richiesta il finanziamento di un'attività di realizzazione di un codice di calcolo parallelo agli elementi al contorno di tipo "general purpose", di particolare interesse per la simulazione di scenari di scuotimento sismico al suolo e di processi evolutivi di fratture e difetti in solidi tridimensionali. I due problemi sono scientificamente interconnessi, essendo il moto sismico al suolo essenzialmente generato da moti di faglie – dunque fratture – profonde. La riduzione del rischio sismico cui è naturalmente esposta la popolazione è un grande problema sia per l'Italia che per gli Stati Uniti. A questo scopo, la determinazione del moto del suolo cui una struttura è esposta durante il suo ciclo di vita è un elemento critico nella progettazione secondo criteri anti-sismici di nuove strutture e nel consolidamento di quelle esistenti. Come dimostrato dai record storici di recenti importanti eventi sismici, effetti locali di sito infatti possono essere estremamente significativi: sembra opportuno dunque che vengano considerati quantomeno per strutture di particolare pericolosità o importanza sociale. La difficoltà di identificare tali effetti locali è peraltro causa della loro limitata presenza nelle normative antisismiche italiane e americane. Alla luce delle precedenti considerazioni, la ricaduta socioeconomica del progetto è enorme. In tema di tutela della vita umana innanzitutto, sia in termini preventivi (zonazione e identificazione di siti ottimali per opere ad alta pericolosità quali discariche, centrali



nucleari, basi ed edifici militari, impianti industriali ad alta potenzialità inquinante, scuole, ospedali) che di pianificazione di un intervento post-sismico. Ma anche di impatto economico – il controllo della fessurazione di componenti strutturali costituisce la prima fonte del costo di manutenzione di componenti meccanici (in aerei, navi, treni solo per citarne alcuni).

## **Theoretical Multi-scale studies of Collagen tissues in the context of Osteogenesis Imperfecta disease (TMC-OI)**

*Alfonso Gautieri, Dipartimento di Bioingegneria, Politecnico di Milano*

Obiettivi del progetto. L'obiettivo del presente progetto è quello di sviluppare modelli teorici dei tessuti a base di collagene fisiologici e patologici che comprendano ciascun livello della loro architettura gerarchica.

Fondamento scientifico. Il collagene è la proteina strutturale più importante nel regno animale ed è responsabile della resistenza e integrità di molti tessuti tra i quali ossa, denti, tendini, cartilagine e pelle. Le proprietà meccaniche di questi tessuti sono determinate dalla loro struttura gerarchica. Tuttavia, una precisa conoscenza della relazione tra struttura e le proprietà meccaniche complessive di questi tessuti non è nota, così come non è chiaro il contributo di ciascun livello gerarchico. Di conseguenza, la comprensione dei meccanismi alla base di malattie che colpiscono il collagene (come l'Osteogenesis Imperfecta) è tuttora mancante.

Stato dell'arte. Studi sperimentali hanno cercato una correlazione tra il tipo di mutazione, la sua posizione e la gravità del fenotipo. Alcuni trend sono evidenti, ad esempio la gravità dell'OI aumenta quando le mutazioni sono posizionate vicino al terminale carbossilico o quando la glicina è sostituita da aminoacidi molto voluminosi o dotati di carica. Al momento, tuttavia, le correlazioni tra genotipo e fenotipo sono troppo deboli per predire accuratamente l'effetto fenotipico di una particolare mutazione. La risposta a come una singola mutazione puntuale nella molecola di collagene possa causare il fallimento dei tessuti in cui è coinvolto (ossa, tendini, ...) rimane sconosciuta. In particolare, non è noto a quale livello della struttura la mutazione abbia effetto e tramite quale meccanismo. Per far luce su questi punti è necessario condurre studi a tutte le rilevanti scale gerarchiche, a partire dal livello molecolare.

Impatto scientifico e risultati rilevanti attesi. L'approccio multi-scala utilizzato in questo studio permetterà per la prima volta di studiare sistematicamente l'effetto di mutazioni e altre alterazioni strutturali sulle proprietà a livello molecolare, fibrillare e della fibra. Ciò potrà essere in futuro utile per la diagnosi della malattia (ad esempio predicendo gli effetti e i sintomi attesi per una specifica mutazione) e per lo sviluppo di trattamenti.

## **Modelli paziente specifici agli elementi finiti di valvole cardiache da immagini come strumento per il planning chirurgico (FEM2Plan)**

*Alberto Redaelli, Dipartimento di Bioingegneria, Politecnico di Milano*

I dati raccolti tra il 1998 e il 2005 dall'American Heart Association (Heart Disease and Stroke Statistics - 2009 Update) indicano che la mortalità dovuta a patologie valvolari cardiache negli Stati Uniti è stimata a 20.000 pazienti all'anno. In particolare, due sono le patologie valvolari più frequenti: la valvola aortica bicuspidale (BAV) e il prollasso mitralico (PM).

La BAV è un'anomalia congenita che colpisce l'1-2% della popolazione occidentale. Dei soggetti affetti da BAV, almeno il 33% è da complicazioni letali che richiedono terapia chirurgica: stenosi o insufficienza valvolare, dissezione o aneurisma dell'aorta ascendente. Il PM della valvola mitralica (VM) con rigurgito severo è una delle patologie valvolari più frequenti nei paesi industrializzati, e si

accompagna ad un alto rischio di morbilità e mortalità. La riparazione valvolare rappresenta attualmente il trattamento clinico primario. Infatti, consentendo il mantenimento dell'intero apparato mitralico, esso consente di preservare la geometria e la funzione ventricolare sinistra (VS), aumentando la sopravvivenza a lungo termine.

Un approccio basato sui modelli agli elementi finiti (FEM) permette di simulare diverse condizioni valvolari avendo il controllo di ogni aspetto dello scenario clinico in esame. Negli ultimi anni, l'interesse verso questo approccio è andato crescendo sia nell'ambito della ricerca clinica che accademica e i FEM sono stati utilizzati per riprodurre il comportamento della valvola fisiologica, per studiarne le patologie e correzioni chirurgiche.

L'obiettivo del presente progetto è la realizzazione di modelli pazienti - specifici di valvola aortica e mitrale ricostruite con diverse tecniche di imaging, ossia ecocardiografia tridimensionale real - time (RT3DE) e risonanza magnetica cardiaca (CMR), rese disponibili da nostri partners di ricerca quali il Centro Cardiologico Monzino (Milano), l'A.O. Niguarda Ca' Granda (Milano) e l'A.O. Monaldi (Napoli).

In particolare l'attività si articolerà in: i) FEM strutturale della VM fisiologica, ii) FEM strutturale paziente-specifico di VM patologica, iii) simulazioni di scenari postoperatori della VM, iv) FEM strutturale di radice aorta fisiologica, v) FEM strutturale della radice aortica affetta da BAV congenita. Le simulazioni FEM verranno effettuate con il codice commerciale ABAQUS.

L'obiettivo a lungo termine della modellizzazione paziente-specifica di patologie valvolari a partire da immagini biomedicali quali RT3DE e CMR è la creazione di uno strumento di supporto ai cardiocirurghi nel planning di interventi riparativi. In particolare, il fine ultimo di questo approccio è quello di sviluppare una piattaforma computazionale che permetta al chirurgo una valutazione dei diversi scenari post-operatori in real-time, ossia la possibilità di analizzare gli effetti di diversi tipi di tecniche chirurgiche al variare di parametri quantitativi in tempi compatibili con la pratica chirurgica, ovvero nell'arco di poche ore.

## **BIO-FSI: Simulazione interazione fluido struttura (FSI) per la valutazione dell'impatto della compliance aortica sulla fisiologia valvolare**

*Ferdinando Auricchio, Dipartimento di Meccanica Strutturale, Università degli Studi di Pavia*

Il Progetto si focalizza su una specifica malattia cardiovascolare: la dilatazione della radice aortica con conseguente incompetenza valvolare. Se la valvola nativa è strutturalmente sana e l'incompetenza è esclusivamente dovuta alla dilatazione della radice aortica, la competenza può essere ristabilita con una

procedura AVS, in cui il tratto aortico ascendente è sostituito con una protesi tubulare. I tubi protesici attualmente in uso non sono in grado di riprodurre le caratteristiche funzionali ed anatomiche della radice nativa. Il Progetto si pone l'obiettivo di: i) valutare l'impatto di protesi con compliance differenti sulla meccanica della valvola nativa avvalendosi di strumenti e tecniche computazionali, come le simulazioni di interazione fluido-struttura (FSI) (il software commerciale Abaqus sarà utilizzato come solutore numerico); ii) integrare le capacità del solutore commerciale con algoritmi dedicati sia di preprocessing (come elaborazione immagini mediche) che di post-processing da sviluppare in collaborazione con il CILEA.

## Metodi di calcolo Multi scala e Multi fisica per micro-sistemi elettromeccanici (MEMS) M<sup>2</sup>-MEMS

Stefano Mariani, Dipartimento di Ingegneria Strutturale, Politecnico di Milano

Si propone l'analisi con metodi di calcolo innovativi, *multi-scala* e *multi-fisica*, di problemi di affidabilità di micro-sistemi (MEMS). Dato che la geometria dei MEMS è caratterizzata dalla compresenza di diverse scale spaziali, metodi di calcolo tradizionali e caratterizzati da discretizzazioni spaziali omogeneamente accurate implicherebbero infatti tempi di calcoli proibitivi. La presenza di gerarchie strutturali comporta inoltre forti interazioni tra fenomeni fisici diversi, che devono essere studiati in modo accoppiato con efficienti metodi di calcolo di tipo *multi-fisica*.

Concretamente, in questo progetto ci si concentrerà sul silicio policristallino che costituisce le parti mobili dei sensori MEMS. Si simuleranno i seguenti fenomeni dissipativi, fortemente influenzati da dettagli micro-strutturali (cioè dalla morfologia del polisilicio): processi di rottura a seguito di sollecitazioni statiche, dinamiche, termiche; problemi accoppiati termo-meccanici e chemio-meccanici. Nelle analisi alla micro-scala si utilizzerà principalmente un codice per elementi finiti in-house accoppiato con tecniche Monte Carlo, allo scopo di tenere in debita considerazione gli effetti stocastici indotti dalla micro-struttura.

## Sollecitazioni idrodinamiche su strutture immerse (SISSI)

Stefano Malavasi, DIAR Idraulica, Politecnico di Milano

La presente proposta di collaborazione ha come scopo la determinazione delle azioni idrodinamiche agenti su strutture sommerse e semi-sommerse in correnti e moti ondosi, e la previsione del loro movimento e stato di sollecitazione. In particolare, la finalità della ricerca è quella di definire, riferendosi a geometrie di base (es.: corpi cilindrici e sfere), dei casi benchmark al fine di accoppiare modellazione fisica e numerica per la definizione di modelli adatti allo studio di casi più complessi.

Sebbene questo tipo di fenomeni è largamente studiato, la letteratura scientifica riporta soprattutto studi sperimentali, mentre l'approccio numerico è principalmente rivolto a strutture fisse. Il progetto di ricerca nasce dall'esigenza sempre crescente di affiancare ed integrare l'approccio sperimentale a quello numerico, con lo scopo di ottenere il reciproco affinamento dei due approcci e quindi un maggior dettaglio nell'analisi fluidodinamica. A tale scopo, la modellazione numerica e sperimentale verranno sviluppate parallelamente. Focalizzando l'attenzione sul caso particolare di una sfera vincolata a mezzo di un'asta deformabile immersa in un flusso stazionario a superficie libera si osserva come le oscillazioni della sfera complichino notevolmente la fisica del problema e in particolare la struttura del campo di moto. Per l'approccio computazionale, la natura fortemente instazionaria e tridimensionale del fenomeno e lo sviluppo di tecniche ad hoc di visualizzazione di dataset complessi e di grande dimensione richiedono notevoli risorse di calcolo e umane anche in virtù dell'integrazione numerico-sperimentale dell'analisi dati. Una possibile scansione temporale del progetto di ricerca, su una base di due anni di collaborazione, prevede le seguenti fasi:

- Primo anno: sviluppo di alcune geometrie di base (es. sfera, corpi cilindrici) sia da un punto di vista sperimentale che numerico con definizione di una idonea metodologia di indagine per ottimizzare l'integrazione delle informazioni ottenute congiuntamente con questi due approcci. Parallelamente a queste si svilupperanno le tecniche di visualizzazione e analisi necessarie per una più idonea trattazione della natura tridimensionale del fenomeno.
- Secondo anno: prosecuzione del lavoro del primo anno mirata ad incrementare la complessità delle geometrie trattate unitamente alla possibile utilizzazione di modellazioni più complesse, quali LES al posto delle tradizionali RANS, oltre che condizioni al contorno più gravose quali ad esempio il moto ondoso.

Considerando delle simulazioni conformi a quelle svolte per la sfera si quantificano le risorse di calcolo necessarie in indicativamente in 200.000 ore-core con 64 processi in parallelo per job tipico. Lo spazio disco richiesto per l'intero progetto è stimato pari a 450 GB, pari a circa 2 GB per simulazione.

Per concludere si osserva come la presente ricerca trovi una naturale applicazione nei problemi di interazione fluido-struttura. I risvolti più pratici riguardano le strutture galleggianti o semigalleggianti quali strutture di supporto per aerogeneratori off-shore, breakwaters, tunnel sommersi.

## **Modellazione numerica del flusso multifase attraverso singolarità - MONUMAS**

*Stefano Malavasi, DIIAR Idraulica, Politecnico di Milano*

Il presente Progetto di Ricerca riguarda la modellazione numerica del flusso di miscele bifase attraverso singolarità impiantistiche ricorrenti. Malgrado la notevole importanza del tema trattato da un punto di vista delle applicazioni, specialmente in ambito industriale, il materiale di letteratura ad ora disponibile è relativamente scarso. Inoltre le ricerche sono state prevalentemente condotte per via sperimentale, e i risultati ottenuti hanno una validità fortemente ristretta a particolari condizioni di flusso, e non presentano, quindi un carattere "universale". L'uso della Computational Fluid Dynamics sembrerebbe essere una possibile strategia per ovviare a questi problemi: usando il medesimo strumento, infatti, è possibile simulare il flusso di miscele molto differenti attraverso singolarità di vario tipo. D'altra parte, la complessità delle equazioni coinvolte comporta l'esigenza di disporre di adeguate risorse di calcolo ad alto parallelismo: in particolare, si stima che il progetto necessiti di 100.000 ore-core con 32 processi in parallelo per job tipico, e uno spazio disco per l'archiviazione dei dati pari a 450 GB.

Più in dettaglio, il progetto ha due obiettivi:

1. Studio delle configurazioni di flusso che si instaurano nell'intorno di vari tipi di singolarità impiantistiche ricorrenti (bruschi allargamenti, bruschi restringimenti, diaframmi, curve, valvole), al variare della loro geometria e delle caratteristiche della miscela.
2. Sviluppo di relazioni pratiche per la stima del moltiplicatore adimensionale di pressione al variare dei parametri maggiormente significativi. Si vuole, in particolare, proporre modelli di validità quanto più possibile "universale", e non limitata a particolari condizioni operative.

## **SIMOX - Simulazioni quantistiche di ossidi per applicazioni in fotocatalisi e nanocatalisi**

*Gianfranco Pacchioni, Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università degli Studi di Milano Bicocca*

Gli ossidi inorganici trovano applicazione dalla microelettronica alla produzione di energia, dagli isolanti ai superconduttori, dai materiali biocompatibili ai catalizzatori, ecc. La simulazione computazionale della struttura elettronica e delle proprietà degli ossidi è di fondamentale importanza per la progettazione di materiali e dispositivi di nuova generazione.

In questo progetto intendiamo perseguire due linee principali; per ognuna di queste linee il progetto prevede una collaborazione diretta tra ricercatori dell'Università Milano Bicocca e del CILEA per l'ottimizzazione dei codici di calcolo.

- (1) Modellizzazione di proprietà elettroniche di ossidi semiconduttori ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{WO}_3$ , ecc.) in grado di assorbire radiazione solare e trasformarla in energia o di favorire processi fotocatalitici (riduzione di inquinanti, produzione di idrogeno, ecc.). Le simulazioni saranno basate sul codice quantistico periodico CRYSTAL. Parte integrante del progetto è la messa a punto di una versione "massive parallel" del codice in grado di sfruttare al massimo le potenzialità di calcolo parallelo del CILEA.
- (2) Recentemente sono state dimostrate le straordinarie potenzialità di film ultrasottili di ossidi (di pochi strati atomici di spessore) depositati su supporti metallici come materiali di nuova generazione con interesse in nanocatalisi. Intendiamo modellizzare la reattività di alcuni di

questi sistemi e di nanoparticelle metalliche supportate. Una parte essenziale del progetto consisterà nella ottimizzazione della versione parallela del codice di calcolo quantistico a onde piane VASP per il trattamento di grandi supercelle.

## **Confronto numerico-sperimentale del campo aerodinamico attorno a un elicottero (AEROELI)**

*Luigi Vigevano, Dipartimento di Ingegneria Aerospaziale, Politecnico di Milano*

La corrente attorno a una configurazione di elicottero completa è non stazionaria e caratterizzata da forti effetti tridimensionali e non lineari, regioni transoniche sulle pale avanzanti e stallo dinamico sulle pale retrocedenti, scie vorticosi con geometria complessa che influenzano i carichi aerodinamici sulla fusoliera, sul rotore principale e su quello di coda. Nonostante queste difficoltà, negli ultimi anni le capacità di predizione dei carichi aerodinamici su rotori e fusoliera hanno fatto notevoli progressi. Tra i software sviluppati in Europa per l'aerodinamica dell'elicottero è compreso il codice ROSITA (ROtorcraft Software ITAly), sviluppato al Dipartimento di Ingegneria Aerospaziale (DIA) del Politecnico di Milano.

La più grande difficoltà per qualificare questi metodi numerici quali strumenti di progetto resta la mancanza di dati sperimentali per la validazione. Per questo motivo si è svolto il progetto europeo GOAHEAD, cui il DIA ha partecipato, che ha consentito di effettuare delle prove sperimentali con un modello di elicottero completo e di costruire un considerevole data base di misure sperimentali.

L'obiettivo del presente progetto di ricerca è di completare la validazione della capacità del codice ROSITA di simulare l'aerodinamica di un elicottero completo (fusoliera, rotore principale, rotore di coda) per mezzo del confronto con le misure sperimentali presenti nel data base del progetto GOAHEAD. Con questa attività di validazione si vogliono raggiungere i seguenti risultati:

- Migliore comprensione fisica dei fenomeni caratteristici dell'aerodinamica dell'elicottero, quali interazione pala-vortice, stallo dinamico, effetti di comprimibilità, fenomeni di interferenza.
- Determinazione del livello di accuratezza delle simulazioni ottenute con ROSITA e dell'influenza dei parametri di discretizzazione spaziale e temporale sui risultati numerici
- Formulazione di linee guida (*best practices*) per l'impiego di un codice URANS per la previsione dell'aerodinamica dell'elicottero

## **Implementazione su piattaforma GPU di un metodo Lagrangiano ad elementi finiti per la simulazione di problemi di fluidodinamica in presenza di superfici libere**

*Umberto Perego, Dipartimento di Ingegneria Strutturale, Politecnico di Milano*

Problemi di fluidodinamica in presenza di superfici libere sono spesso rilevanti dal punto di vista ingegneristico. Questo giustifica un crescente interesse per la simulazione numerica di tali fenomeni.

Una possibilità per risolvere tali problemi in modo efficiente consiste nell'utilizzare un approccio Lagrangiano per il problema fluidodinamico, nel quale le equazioni di Navier-Stokes vengono scritte nelle coordinate materiali che vengono aggiornate iterativamente. Con questo approccio sia la posizione della superficie libera che la creazione e la propagazione di onde vengono automaticamente determinati.

Tuttavia, per evitare un'eccessiva distorsione della mesh, è necessario un remeshing continuo del dominio fluido.

Nell'affrontare problemi ingegneristicamente rilevanti, i tempi di calcolo di questo approccio possono crescere significativamente. In questo lavoro si propone di trasportare su piattaforma GPU il metodo sviluppato per la soluzione numerica di problemi di fluidodinamica in presenza di superfici libere. In particolare, si è interessati al trasporto su GPU delle parti computazionalmente più dispendiose che

sono la soluzione dei sistemi lineari e la generazione della mesh. L'obiettivo di questo progetto è quindi la creazione di un solutore di sistemi lineari su piattaforma GPU e l'implementazione di un triangolatore che permetta di generare mesh 2D e 3D sempre su piattaforma GPU, in modo da ridurre in modo significativo i tempi di calcolo.

## **SCAffold: studio della fluidodinamica con il metodo LAttice Boltzmann (SCALABO)**

*Alberto Redaelli, Dipartimento di Bioingegneria, Politecnico di Milano*

La fluidodinamica computazionale rappresenta uno strumento molto potente per la analisi della microfluidodinamica all'interno di scaffold per la ingegneria dei tessuti, in quanto consente di ottenere una descrizione dettagliata non solo delle forze di frizione che agiscono sulle cellule in coltura, ma anche dei fenomeni di trasporto che si stabiliscono nel microambiente in cui si trovano le cellule stesse. Lo scopo di questo progetto è lo sviluppo di modelli computazionali attraverso il metodo Lattice Boltzmann, basato su un codice "open source" con accesso a strutture di calcolo HPC (High Performance Computing).

Questi codici si stanno rapidamente sviluppando in quanto sembrano permettere un livello di efficienza e scalabilità su architetture parallele HPC nettamente superiori ad altre tecniche numeriche ad oggi più sviluppate (Elementi Finiti e Volumi Finiti).

I modelli numerici che si vogliono qui studiare devono consentire di caratterizzare le funzionalità e le performance degli scaffold in termini di trasporto sia convettivo che diffusivo, fornendo strumenti per analizzare e visualizzare l'effetto della presenza di sollecitazioni meccaniche indotte dal flusso all'interno degli scaffold. Tecnicamente, le risorse di calcolo che possono essere messe a disposizione dal CILEA sono tali da consentire test sui codici open source applicati al problema fluidodinamico specifico difficilmente eseguibili in altre strutture, rendendo disponibili potenze di calcolo tali da permettere simulazioni con 1000 cores.

## **Quantum Dynamics via Inverse Problems" Quantum-vIP**

*Davide Emilio Galli, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano*

I metodi Quantum Monte Carlo (QMC) rappresentano metodologie estremamente accurate per indagare le proprietà di equilibrio di sistemi quantistici di materia condensata. Per quanto riguarda i sistemi bosonici tali metodi infatti forniscono stime numericamente esatte. Malgrado la limitazione dovuta al *problema del segno*, anche nel caso di fermioni è possibile ottenere risultati di accuratezza quanto meno confrontabile se non superiore a quanto si può raggiungere con altre metodologie, quali teorie a molti corpi o funzionale densità. L'estensione a proprietà dinamiche (spettri di eccitazione o proprietà di trasporto) è di estremo interesse per una gran quantità di sistemi fisici, quali superfluidi, liquidi di Fermi, sistemi elettronici e gas ultrafreddi. A livello metodologico il problema è delicato: in primo luogo per l'insorgere di problemi di inversione mal posti dovuti alla necessità di estrarre informazioni dalla dinamica in tempo immaginario tipica dei metodi QMC; inoltre, nel caso di fermioni, esiste la difficoltà di descrivere in modo adeguato la dinamica stessa in tempo immaginario, a causa del già citato problema del segno. Il superamento di queste limitazioni attraverso l'utilizzo di approcci alternativi è quindi di estremo interesse. Applicheremo nuove tecniche di analisi statistica dei problemi inversi per estrarre informazioni sulla dinamica di sistemi quali  $^3\text{He}$  liquido e gas quantistici da funzioni di correlazione in tempo immaginario calcolate con metodi QMC.

## **Simulazioni Lagrangiane di Flussi Multifase – Lagrangian MultiPhase flow simulations – LAMPHA**

*Stefano Sibilla, Dipartimento di Ingegneria Idraulica e Ambientale, Università degli Studi di Pavia*

Il progetto proposto riguarda la simulazione numerica di flussi multifase mediante tecniche di tipo Lagrangiano. Tale tipo di simulazioni presenta in generale una struttura dati variabile nel corso della simulazione, rendendo meno efficiente l'ottimizzazione del codice di calcolo e portando quindi a tempi di calcolo anche molto superiori a quelli richiesti da simulazioni realizzate mediante tecniche di tipo Euleriano.

La parallelizzazione dei codici di calcolo è realizzata in modo efficiente, suddividendo in gruppi le particelle computazionali caratteristiche della simulazione Lagrangiana e distribuendo l'onere computazionale relativo a tali gruppi sui diversi processori, permettendo di realizzare in tempi ridotti simulazioni di casi applicativi di interesse ingegneristico.

Il progetto proposto è suddiviso in due parti distinte, in cui diversi problemi applicativi di tipo ingegneristico sono affrontati con tecniche Lagrangiane diverse, di volta in volta più adatte al tipo di problema trattato.

La prima parte del progetto di ricerca riguarda la simulazione numerica di correnti idrauliche multifase utilizzando il codice in-house OpenMP *NSPH*, che sfrutta la tecnica SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics). In particolare, si intende approfondire l'applicazione della tecnica SPH all'analisi delle correnti di torbidità e di fenomeni di erosione localizzata.

La seconda parte del progetto di ricerca prevede la simulazione, attraverso una tecnica "one way coupling" Euleriana-Lagrangiana, di un getto turbolento multifase acqua-ossigeno impiegato per l'ossigenazione e la miscelazione dei reattori biologici di impianti a fanghi attivi per il trattamento delle acque reflue. La simulazione è realizzata utilizzando il codice in-house OpenMP *PALLINE*.

## **Large Eddy Simulation for Experimental Wind Tunnel Sails Data (LES4EXP)**

*Emanuela Colombo<sup>1</sup>, Ignazio Maria Viola<sup>2</sup>, Fabio Inzoli<sup>1</sup>, Paolo Lampitella<sup>1</sup>, Richard Flay<sup>3</sup>, Peter Richards<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> *Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano (Italy)*

<sup>2</sup> *Yacht Research Unit, Mechanical Engineering Department, University of Auckland (New Zealand), since Sep. 2009 School of Marine Science and Technology, Newcastle University (UK)*

<sup>3</sup> *Yacht Research Unit, Mechanical Engineering Department, University of Auckland (New Zealand)*

Il presente progetto di ricerca è dedicato alla messa a punto e validazione di un modello numerico tridimensionale, basato su tecniche Large Eddy, per lo studio dell'aerodinamica delle vele. La validazione del modello è resa possibile grazie alla disponibilità di dati sperimentali acquisiti in galleria del vento con tecniche di misura innovative su modello di imbarcazione classe Coppa America (AC33) in scala 1:15. In particolare, la distribuzione di pressione sulla randa e sullo spinnaker asimmetrico permetterà la validazione con misure puntuali e la misura delle forze aerodinamiche agenti sul modello permetterà la validazione con misure globali. La simulazione si propone di cogliere gli aspetti fondamentali dell'aerodinamica della vela, quali la separazione laminare al bordo di ingresso e il riattacco turbolento, la separazione al bordo di uscita e la tridimensionalità del flusso dovuto al basso allungamento della vela; aspetti che tecniche CFD convenzionali basati sulla media di Reynolds difficilmente sono in grado di modellare correttamente. Il principale risultato atteso è la comprensione della relazione tra la distribuzione di pressione sulle vele e il campo di moto intorno alle vele, nonché l'analisi delle strutture turbolente che lo caratterizzano. La simulazione richiederà di risolvere il campo di moto con un elevato numero di gradi di libertà, pertanto sarà necessario sviluppare delle strategie di salvataggio dati e di gestione degli stessi al fine di estrarre e visualizzare le informazioni di interesse. La durata del progetto è di un anno, a conclusione del quale i risultati del progetto saranno pubblicati su riviste scientifiche.

## **Studio della turbolenza di Galleria del Vento e creazione di un database di storie temporali del flusso turbolento mediante simulazioni CFD LES non stazionarie. Due applicazioni pratiche: carichi sui palazzi e sulle turbine eoliche. "Turbolenza"**

*Alberto Zasso, Dipartimento di Meccanica, Politecnico di Milano*

La fluidodinamica numerica è in una fase di grande sviluppo grazie al rapido aumento delle capacità di calcolo delle macchine attuali. La ricerca attualmente si sta indirizzando alla modellazione di campi di moto sempre più complessi e sempre più dettagliati, quali per esempio quelli associati allo strato limite del vento terrestre. Di notevole interesse applicativo è infatti la riproduzione e lo studio dell'interazione non stazionaria tra flusso turbolento incidente e strutture immerse nello stesso.

Il presente lavoro si focalizza sulla generazione di un data base di flussi turbolenti, rappresentativi dello strato limite reale simulato sperimentalmente in Galleria del Vento (Campus Bovisa POLIMI), per una validazione numerico-sperimentale tra simulazioni CFD e misure di pressione non stazionarie in Galleria del Vento inerenti le azioni non stazionarie a cui sono soggette strutture immerse nel flusso turbolento a strato limite associato al vento terrestre.

In una prima fase vengono generate diverse storie spazio-temporali rappresentative di differenti esempi di strato limite terrestre simulato sperimentalmente in Galleria del Vento, con differenti valori di intensità di turbolenza, lunghezza di scala integrale per condurre le analisi successive in differenti condizioni di flusso.

Viene inoltre studiata una logica di salvataggio dei dati così ottenuti in modo da renderli disponibili per successive simulazioni, oltre al salvataggio dei dati per permettere la visualizzazione del flusso turbolento generato e la creazione di uno strumento di visualizzazione adeguato al problema. La seconda fase riguarda l'interazione del flusso con le strutture proposte: per questi è possibile la diretta verifica dettagliata numerico-sperimentale per quanto riguarda le distribuzioni di pressione non stazionarie misurate a parete sui modelli realizzati per le prove sperimentali in Galleria del Vento. Come esempio applicativo si fa riferimento a un modello di edificio di forma non convenzionale di notevole interesse scientifico, analizzando la distribuzione non stazionaria dei carichi di pressione dovuti all'azione del vento per permettere il dimensionamento strutturale delle facciate esterne. Una seconda analisi verrà condotta sull'analisi dell'interazione del flusso turbolento con una turbina eolica ad asse orizzontale.

In entrambi i casi esistono dati sperimentali con cui confrontarsi per analizzare la qualità della simulazione e dei risultati.

## **Simulazione ed ottimizzazione con OpenFOAM (OptimFOAM)**

*Nicola Parolini, Dipartimento di Matematica, Politecnico di Milano*

Questo progetto di ricerca si propone di investigare le potenzialità della libreria OpenFOAM nell'ambito della simulazione numerica di flussi turbolenti e a superficie libera con possibili applicazioni in diversi contesti industriali.

Sulla base dell'esperienza accumulata dal gruppo di ricerca nell'utilizzo e integrazione di modelli di tipo RANS implementati in codici commerciali, intendiamo effettuare una massiccia campagna di validazione dei solutori per flussi incomprimibili presenti in OpenFOAM in modo da valutarne il possibile utilizzo in diversi campi di applicazione. La disponibilità di ingenti risorse di calcolo, nonché la collaborazione con il personale tecnico del CILEA, consentirà di estendere questo lavoro di validazione a problemi di grande scala computazionale, e di ottimizzarne le performance in funzione delle caratteristiche tecniche del server di calcolo. Questa prima fase è preliminare all'implementazione di nuovi modelli all'interno della libreria OpenFOAM. In particolare, svilupperemo algoritmi per l'ottimizzazione di forma e di controllo ottimale considerando, per la determinazione della variazione della funzione costo, sia approcci che utilizzano derivate di sensitività basate su differenze finite sia tecniche basate sulla soluzione di un problema aggiunto.