



Agenzia nazionale per le nuove tecnologie,
l'energia e lo sviluppo economico sostenibile

Calcolo ad alte prestazioni sul sistema CRESCO: contributi degli utenti 2008-2009

Luglio 2010



**Agenzia nazionale per le nuove tecnologie,
l'energia e lo sviluppo economico sostenibile**

Calcolo ad alte prestazioni sul sistema CRESCO: contributi degli utenti 2008-2009

Luglio 2010

INDICE

Presentazione

1. Valutazione delle concentrazioni in aria dei principali inquinanti:
CO, SO₂, NO_x, PM10, PM2.5, O₃, COV *pag. 7*
2. Calcolo delle emissioni dei principali gas atmosferici *pag. 13*
3. Ricostruzione di campi meteorologici ad alta risoluzione
nell'ambito del progetto MINNI *pag. 19*
4. Simulazioni MonteCarlo per la progettazione di facility nucleari *pag. 25*
5. Stoccaggio di idrogeno in matrici di MgH₂: studio di un'interfaccia
Mg-MgH₂ utilizzando un codice di dinamica molecolare Car-Parrinello
sulla risorsa di calcolo dell'ENEA-CRESCO *pag. 33*
6. Modellistica e simulazione della combustione *pag. 39*
7. Rapporto in merito all'utilizzo dell'infrastruttura CRESCO
per l'esecuzione di calcoli di neutronica a sostegno della progettazione di
ELSY – European Lead-cooled System *pag. 45*
8. Bruciamento con metodi MonteCarlo applicati al reattore a piombo (ELSY) *pag. 51*
9. Metodi di simulazione predittivi per sistemi di combustione turbolenta *pag. 55*
10. Studio teorico e modellazione di membrane metalliche
per la separazione di idrogeno *pag. 59*
11. Compilazione e test di codici utilizzati per il calcolo della struttura
elettronica, il rilassamento della struttura atomica, la dinamica molecolare *pag. 63*
12. Analysis of LH Launcher Arrays (Like the ITER One) using the TOPLHA
code on CRESCO cluster *pag. 69*
13. Simulazione per lo studio delle proprietà conformazionali dell'enzima
galattosio-1-fosfato uridiltransferasi e delle variazioni conformazionali
di peptidi derivati dall' α s2-caseina *pag. 75*
14. Studio *ab-initio* della dinamica rotazionale dell'acqua supercritica *pag. 79*
15. Numerical CFD activities performed in the frame of the Vega program *pag. 83*

16. Simulazione di reazioni chimiche catalizzate da metalli di transizione e di docking proteina-proteina	<i>pag. 87</i>
17. Distributed computing on the ENEA-GRID: applications in acoustics and in network transmission	<i>pag. 91</i>
18. Implementazione della componente oceanica del modello climatico regionale Protheus	<i>pag. 99</i>
19. CRESCO HPC system integrated into ENEA-GRID environment	<i>pag. 103</i>

PRESENTAZIONE

Presentiamo in questo volume una prima raccolta di lavori scientifici realizzati con l'apporto decisivo del sistema di calcolo CRESCO, attualmente in funzione presso il Centro ENEA di Portici (NA).

Con il cofinanziamento del PON Ricerca 2000-2006 del MUR, l'ENEA ha portato a termine il progetto CRESCO - Centro Computazionale di Ricerca sui Sistemi Complessi, realizzando un Polo di supercalcolo e sviluppando numerose linee di attività di Ricerca & Sviluppo con partner pubblici e privati.

L'infrastruttura, inaugurata nel maggio 2008, è costituita, fra l'altro, da oltre 2750 processori organizzati in 3 sezioni distinte per rispondere a diverse tipologie di utenza, un sistema di storage da 160 TByte, un sistema di backup per complessivi 300 TByte, 35 nodi di servizio.

Attraverso la connessione a 2 Gbit/sec alla rete GARR, il sistema è completamente integrato nella griglia computazionale ENEA-GRID, un'infrastruttura sviluppata nell'Agenzia a partire dal 1998, implementando numerose soluzioni tecnologiche originali per la condivisione in GRID di piattaforme di calcolo eterogenee e la remotizzazione di strumenti scientifici di grande complessità.

I lavori raccolti nel presente volume si riferiscono alla prima fase di piena operatività della *facility* (fine 2008-2009), e testimoniano della varietà di tematiche affrontate e della numerosità dei gruppi di ricerca che hanno potuto utilizzarla con vantaggio nelle loro attività.

Oggi, a due anni dal suo avvio, l'utenza dell'infrastruttura CRESCO satura in modo sostanzialmente completo le macchine, ed anzi si può dire che la domanda di tempo di calcolo ha largamente superato la potenza computazionale a disposizione. Ciò testimonia sia della velocità del cambiamento che si registra, oggi come sempre, nel settore ICT, sia dell'ottima capacità complessivamente dimostrata dai ricercatori nel mettere a frutto queste nuove tecnologie disponibili.

Ci auguriamo, pertanto, che il Centro CRESCO tenga fede al proprio nome, e che possano presto trovarsi nuove occasioni per un suo potenziamento o per la realizzazione di un'infrastruttura di nuova generazione, che aiuti l'ENEA a consolidare l'esperienza fin qui svolta ed a confermare la propria posizione di assoluto rilievo nel panorama italiano dell'High Performance Computing.

Unità Tecnica Sviluppo Sistemi per l'Informatica e l'ICT
Il Gruppo di Lavoro CRESCO

1. VALUTAZIONE DELLE CONCENTRAZIONI IN ARIA DEI PRINCIPALI INQUINANTI: CO, SO₂, NO_x, PM₁₀, PM_{2.5}, O₃, COV

Gino Briganti

ENEA - ACS - PROTGERIF
C.R. Pisa

INTRODUZIONE

Da Luglio 2008, parte del personale ACS dislocato presso la Sede Enea di Pisa è coinvolto nel Progetto MINNI (www.minni.org). MINNI è un sistema modellistico a scala nazionale in grado di simulare, su lungo periodo (tipicamente un anno), le concentrazioni e le deposizioni (secche e umide) dei principali inquinanti atmosferici. Nato nell'ambito dell'Accordo di programma ENEA-Ministero dell'Ambiente in collaborazione con ARIANET Srl e IIASA (International Institute for Applied Systems Analysis, Laxemburg AT), MINNI si propone di fornire alle Istituzioni Italiane un valido strumento di supporto per l'analisi delle politiche di riduzione delle emissioni. Il Dott. Briganti si occupa di fisica dell'atmosfera ed ha messo a punto delle procedure automatiche (bash script) per i run del codice di dispersione atmosferica FARM.

Il codice FARM (Flexible Atmospheric Regional Model) (Silibello et al., 2005) è un modello Euleriano tridimensionale con chiusura della turbolenza di tipo K, che tratta il trasporto, la trasformazione chimica e la deposizione degli inquinanti atmosferici. Il codice, derivato da STEM (Carmichael et al., 1998), è predisposto per l'integrazione di diversi schemi chimici; attraverso il pre-processore chimico FCM (Flexible Chemical Mechanism) (Kumar et al., 1995), vengono infatti preparati i files e le subroutines specifiche di un certo meccanismo, consentendo virtualmente l'integrazione nel codice di qualunque modulo chimico. In questa applicazione su GRID sono stati usati lo schema fotochimico SAPRC-90 (Carter, 1990) ed il modello per gli aerosol AERO3. Quest'ultimo è accoppiato al modello fotochimico SAPRC-90 ed è basato su un approccio modale, in cui la distribuzione dei diametri del particolato è rappresentata come sovrapposizione di tre distribuzioni lognormali: "Aitken mode", "accumulation mode" and "coarse mode" (Binkowski and Roselle, 2003).

Scopo dell'applicazione è stata la valutazione delle concentrazioni in aria, al livello del suolo, per gli anni 1999 e 2005, degli inquinanti principali, usualmente presi in considerazione nelle politiche della qualità dell'aria: CO, SO₂, NO_x, PM₁₀, PM_{2.5}, O₃, COV. A partire dagli input emissivi e dalla meteorologia, sono state calcolate le concentrazioni medie orarie e le deposizioni secche ed umide al suolo per i diversi inquinanti. Sono stati salvati in output campi 3D che, in linea di principio, non sarebbero necessari per le successive valutazioni statistiche richieste dalla normativa, ma che sono utili per eventuali future applicazioni a scala più piccola (nesting).

Le simulazioni, condotte con il codice FARM, sono state condotte in due successivi stadi: una prima simulazione su una griglia 20x20 ed una seconda con griglia innestata 4x4. Considerazioni sui tempi di calcolo e gestione della memoria hanno suggerito la suddivisione del dominio nazionale (IT0) in 5 sottodomini: Nord-Italia (NI0), Centro-Italia (CI0), Sud-Italia (SI0), Sardegna (SA0) e Sicilia (SC0).

DOMINIO DI CALCOLO: 20x20

IT0 20x20

FARM usa il dominio della meteorologia, facendo i calcoli con schema a corpo centrato.

Coord. dell'estremo SW del reticolo: (150, 3900) km

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 67, 75, 12 per l'anno 1999

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 67, 75, 16 per l'anno 2005

Dimensioni delle celle (x, y): 20, 20 km

Livelli verticali (1999): 20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500 m

Livelli verticali (2005): 20, 75, 150, 250, 380, 560, 800, 1130, 1570, 2160, 2970, 4050, 5500, 7000, 8500, 10000 m

DOMINI DI CALCOLO: 4x4

NI0 4x4

Coord. dell'estremo SW del reticolo: (310, 4840) km

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 146, 96, 12 (1999)

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 146, 96, 16 (2005)

Dimensioni delle celle (x, y): 4, 4 km

Livelli verticali (1999): 20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500 m

Livelli verticali (2005): 20, 75, 150, 250, 380, 560, 800, 1130, 1570, 2160, 2970, 4050, 5500, 7000, 8500, 10000 m

CIO 4x4

Coord. dell'estremo SW del reticolo: (550, 4560) km

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 121, 96, 12 (1999)

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 146, 96, 16 (2005)

Dimensioni delle celle (x, y): 4, 4 km

Livelli verticali (1999): 20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500 m

Livelli verticali (2005): 20, 75, 150, 250, 380, 560, 800, 1130, 1570, 2160, 2970, 4050, 5500, 7000, 8500, 10000 m

SIO 4x4

Coord. dell'estremo SW del reticolo: (890, 4200) km

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 116, 121, 12 (1999)

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 146, 96, 16 (2005)

Dimensioni delle celle (x, y): 4, 4 km

Livelli verticali (1999): 20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500 m

Livelli verticali (2005): 20, 75, 150, 250, 380, 560, 800, 1130, 1570, 2160, 2970, 4050, 5500, 7000, 8500, 10000 m

SA0 4x4

Coord. dell'estremo SW del reticolo: (410, 4300) km

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 46, 71, 12 (1999)

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 146, 96, 16 (2005)

Dimensioni delle celle (x, y): 4, 4 km

Livelli verticali (1999): 20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500 m

Livelli verticali (2005): 20, 75, 150, 250, 380, 560, 800, 1130, 1570, 2160, 2970, 4050, 5500, 7000, 8500, 10000 m

SC0 4x4

Coord. dell'estremo SW del reticolo: (750, 4060) km

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 86, 61, 12 (1999)

Nr. of punti di griglia (x, y, z): 146, 96, 16 (2005)

Dimensioni delle celle (x, y): 4, 4 km

Livelli verticali (1999): 20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500 m

Livelli verticali (2005): 20, 75, 150, 250, 380, 560, 800, 1130, 1570, 2160, 2970, 4050, 5500,
7000, 8500, 10000 m

STRUTTURA DEGLI SCRIPT BASH

Il codice FARM è inizializzato, all'inizio di ogni mese (convenzionalmente scelto di lunghezza pari a 30 giorni, fatta eccezione per il dodicesimo che è di 35), con i campi calcolati dal modello EMEP (Fagerli et al., 2003; Simpson et al., 2004). Questa soluzione è risultato il migliore compromesso per ottimizzare i tempi di calcolo (parallelizzando i jobs il più possibile) e, contestualmente, non re-inizializzare il modello troppo frequentemente (ciascuna re-inizializzazione comporta un certo periodo di assestamento per avere output affidabili).

Le condizioni al contorno 20x20 (top, laterali) sono fornite dal modello EMEP e sono assegnate ogni tre ore. Quelle 4x4, invece, sono direttamente estratte dagli output 20x20.

Gli input meteorologici ed emissivi sono stati calcolati da altri utenti GRID.

Per quanto concerne le simulazioni nazionali (IT0), sono stati lanciati 12 mesi in parallelo su code seriali; per i n. 5 sottodomini, invece, l'ideale sarebbe stato di lanciare 5x12 jobs tutti in parallelo, anche se ciò non è risultato possibile (v. criticità riscontrate).

La struttura dei codici di comando relativi agli script, localizzati nella directory /afs/enea.it/project/minnifarm/soft/soft_ARIANET/script_farm (*figura 1,1*) è del tipo:

nome_comando zona anno [decade|mese] [opzioni]

esempi:

- farm.20x20.loop_ini_files.bash SI0 1999 "1 2 3"
- farm.run.bash IT0 2005 "all"
- farm.4x4..BC.bsub.bash "SA0 SI0" 2005 "all"

Le stime dei tempi di calcolo sono riassunte in *tabella 1.1*. Le memorie richieste per gli output sono invece riportate nella *tabella 1.2*.

TEMPI DI CALCOLO DI EMMA/FARM su GRID - 1999

	IT0 20x20 67x75	NI0 4x4 146x96	SI0 4x4 116x121	CI0 4x4 121x96	SC0 4x4 86x61	SA0 4x4 46x71	Tempo effettivo
Emma (1 decade)	4h	33 h	13 h	15 h	5 h	4 h	2 g
Boundary Conditions		9 h	9 h	8 h	4 h	2 h	1 g
Farm (1 mese)	19 h	106 h	118 h	89 h	47 h	30 h	10 gg
Totale	23 h	148 h	140 h	112 h	56 h	36 h	13 gg

TEMPI DI CALCOLO DI EMMA/FARM su GRID – 2005 (stime)

	IT0 20x20 67x75	NI0 4x4 146x96	SI0 4x4 116x121	CI0 4x4 121x96	SC0 4x4 86x61	SA0 4x4 46x71	Tempo effettivo
Emma (1 decade)	2h	5 h	3 h	3 h	1 h	1 h	1 g
Boundary Conditions		12 h	12 h	11 h	6 h	3 h	1 g
Farm (1 mese)	25 h	141 h	157 h	119 h	63 h	40 h	13 gg
Totale	27 h	158 h	172 h	133 h	70 h	44 h	15 gg

Tabella 1.1: Tempi di calcolo.

1999	INPUT			OUTPUT	Totale	
	EMISSION MB	BOUND MB	METEO MB	FARM MB	Tot day MB/day	Tot year GB/year
SI0	53	145	260	1279	1737	620
NI0	54	146	258	1277	1735	619
CI0	44	124	214	1059	1441	514
SA0	13	45	61	299	418	149
SC0	21	64	97	479	661	236
IT0	27	14	90	459	590	211
Tot. Day (MB/day)	212	538	980	4852	6582	2347
Tot. Year (GB/year)	76	192	350	1730	2347	

2005	INPUT			OUTPUT	Totale	
	EMISSION MB	BOUND MB	METEO MB	FARM MB	Tot day MB/day	Tot year GB/year
SI0	53	159	315	1740	2267	809
NI0	54	160	315	1738	2267	809
CI0	44	136	261	1440	1881	671
SA0	13	52	74	407	546	195
SC0	21	73	118	626	838	299
IT0	35	15	110	624	784	280
Tot. Day (MB/day)	220	595	1193	6575	8583	3060
Tot. Year (GB/year)	79	213	426	2344	3060	

Tabella 1.2: allocazioni di memoria necessarie per input ed output.

CRITICITA' RISCONTRATE

- Sono state individuate, specialmente per gli ultimi mesi del 2008, instabilità della cella AFS e una lentezza collegamento PISA-AFS.
- Si è dovuto fare fronte ad un sovraffollamento della GRID, ed è risultato raro poter lanciare più di 40-50 job alla volta. Sarebbe auspicabile avere a disposizione una coda esclusivamente per FARM.
- Sono stati individuati problemi di scrittura contemporanea di più jobs su AFS da CRESCO. Questo limite ha interrotto molti job in esecuzione: per eludere l'inconveniente, si è pertanto scelto di leggere i dati di input su AFS e scaricare gli output su GPFS, con successivo trasferimento dei dati su AFS.
- Problema di allocazione spazio AFS. Il 2005 a 16 livelli richiede un 40% in più di spazio da 4.7 a 6.5 TB e si sta attendendo una tale assegnazione di memoria. Temporaneamente, gli output 2005 4x4 sono allocati sotto GPFS (/afs/enea.it/tri/user/briganti/PFS/por).

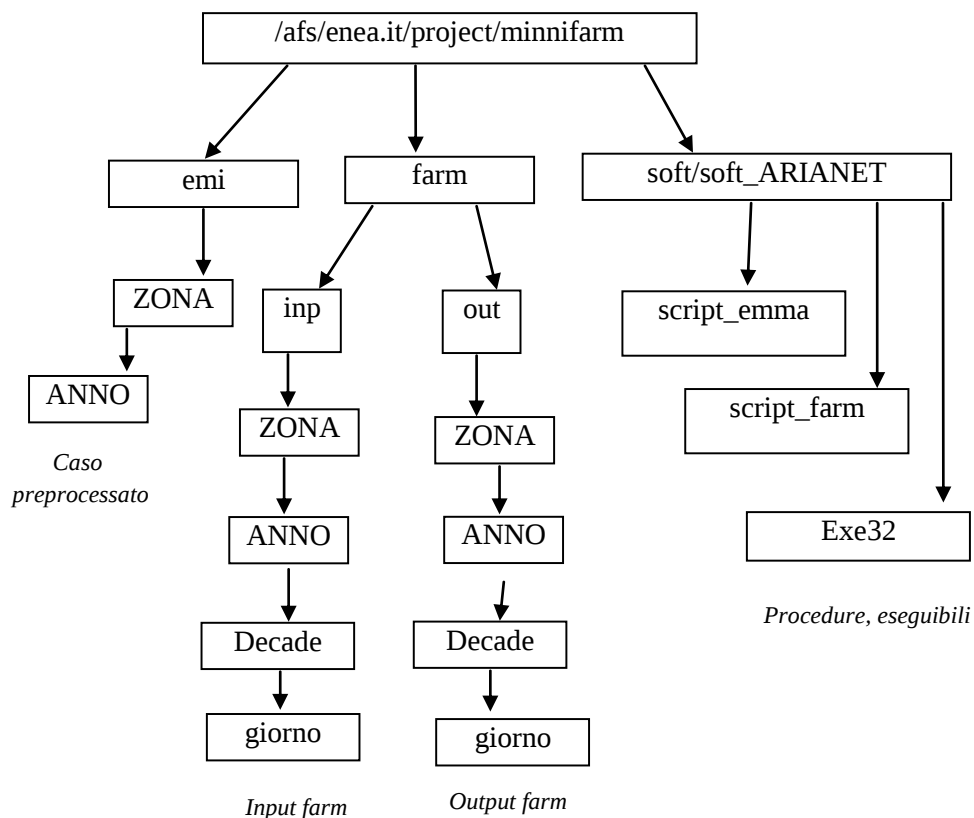


Figura 1.1: schema della struttura ad albero delle applicazioni di MINNI

BIBLIOGRAFIA

Binkowski F.S., Roselle S.J., 2003. Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) model aerosol component 1. Model description. *Journal of Geophysical Research*, 108 (D6) 4183.

Carter W.P.L., 1990. A detailed mechanism for the gas-phase atmospheric reactions of organic compounds. *Atmospheric Environment*, 24 A (3), 481-518.

Carmichael G.R., Uno I., Phadnis M.J., Zhang Y., Sunwoo Y., 1998. Tropospheric ozone production and transport in the springtime in east Asia. *Journal of Geophysical Research*, 103, 10649–10671.

Fagerli H., Simpson D., Tsyro S., 2004. Transboundary acidification, eutrophication and ground level ozone in Europe: Unified EMEP model. *EMEP/MSC-W Report, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo*, EMEP Status Report 1/2004, Updates, 11-18.

Kumar N., Lurmann F.W., Carter W.P.L., 1995. Development of the Flexible Chemical Mechanism Version of the Urban Airshed Model. *Report to California Air Resources Board, Agreement no. 93-716*, Document No. STI-94470-1508-FR, Sonoma Technology, Inc. Santa Rosa, CA, August, 1995.

Silibello C., Calori G., Brusasca G., Giudici A., Angelino E., Fossati E., Peroni E., Buganza E., Degiarde E., 2005. Modelling of PM10 concentrations over Milan urban area: validation and sensitivity analysis of different aerosol modules. In: *Proceedings of Fifth International Conference on Urban Air Quality, Valencia, Spain, March 2005*, 29–31.

Simpson D., Fagerli H., Jonson J.E., Tsyro S., Wind P., Tuovinen J.P., 2003. Transboundary acidification and eutrophication and ground level ozone in Europe: Unified EMEP Model Description. *EMEP/MSC-W Report, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo*, EMEP Status Report 1/2003 Part I.

2. CALCOLO DELLE EMISSIONI DEI PRINCIPALI INQUINANTI ATMOSFERICI

Andrea Cappelletti

ENEA-ACS-PROTINN
C.R. Pisa

INTRODUZIONE

Da Luglio 2008, parte del personale ACS dislocato presso la Sede Enea di Pisa è coinvolto nel Progetto MINNI (www.minni.org). MINNI è un sistema modellistico a scala nazionale in grado di simulare, su lungo periodo (tipicamente un anno), le concentrazioni e le deposizioni (secche e umide) dei principali inquinanti atmosferici. Nato nell'ambito dell'Accordo di programma ENEA-Ministero dell'Ambiente in collaborazione con ARIANET Srl e IIASA (International Institute for Applied Systems Analysis, Laxemburg AT), MINNI si propone di fornire alle Istituzioni Italiane un valido strumento di supporto per l'analisi delle politiche di riduzione delle emissioni.

L'Ing. A. Cappelletti si occupa di sviluppo e applicazione di modelli numerici nelle matrici acqua ed aria e, nell'ambito di MINNI, ha messo a punto delle procedure automatiche (bash script) per i run del codice EmMa (Emission Manager) per il calcolo delle emissioni e per il codice FARM. La sua attività è stata portata avanti di concerto con tutti gli altri utenti della GRID afferenti al progetto MINNI, in special modo con l'utente Briganti.

EMMA (EMission MANager), è un insieme di procedure, comandi shell ed eseguibili fortran atti a produrre l'input emissivo per modelli di qualità dell'aria in casi complessi (ARIA, 1999, 2006; ARIANET 2006). Il sistema è basato essenzialmente sull'uso dell'utility make e della bash shell, entrambi disponibili ed ampiamente utilizzati per l'ambiente unix e window.

Nel lavoro qui presentato il modello di riferimento per le emissioni è FARM, un modello chimico euleriano ed il sistema operativo è linux, sia a 32 che 64 bit, l'ambiente di lavoro è GRID Enea.

EMMA è organizzato in moduli e la preparazione dei file di input emissivi avviene per fasi, ciascuna fase utilizza un modulo o un gruppo di moduli a seconda della fase di elaborazione e del tipo di emissione. Il punto di partenza è costituito dalle emissioni provenienti da specifiche inventory (ad esempio emissioni annuali su base provinciale) o da output di modelli/sistemi di monitoraggio. Nel nostro caso i dati di partenza provengono dagli inventories APAT. Ai fini della comprensione di come è stato organizzato il calcolo di EMMA su GRID Enea può essere sufficiente sintetizzarne le caratteristiche essenziali:

- le emissioni per il codice FARM sono classificabili geometricamente in: areali, cioè distribuite su una superficie e puntuali, concentrate cioè in un punto. EMMA produce due tipi di files: pointemi.dat per le sorgenti puntuali e diffemi.bin che raccoglie le sorgenti areali;
- i dati di partenza vengono dapprima "spazializzati" cioè trasferiti dalle aree geografiche di riferimento presenti nel dataset (province, comuni) alla griglia di calcolo del modello FARM e successivamente le specie chimiche presenti nel database vengono convertite nelle variabili incognite presenti nel modello, "speciazione";
- infine l'emissione a livello di cella viene modulato nel tempo, cioè il valore complessivo di emissione annua viene distribuito nei vari giorni dell'anno, secondo funzioni temporali "ad hoc".

Le fasi del calcolo sono sostanzialmente due. Nella prima, detta pre processamento, si procede alla spazializzazione e speciazione, nella seconda, indicata da qui in poi come “farm” stage, si completa l'operazione con la modulazione temporale.

Per compiere queste operazioni EMMA necessita di tre directories: la directory dei dati, quella degli eseguibili e una directory di lavoro.

Queste tre directories possono essere dislocate ovunque nel filesystem ma per comodità si possono pensare raccolte sotto una unica directory, che rappresenta dunque un CASO emissivo.

Eseguire EMMA in multiseriale significa scomporre un CASO in più sottocasi, organizzare per ciascuno di essi una directory strutturata come sopra descritto e lanciare EMMA in ciascun sottocaso. La scomposizione è possibile sia in senso spaziale (pre processing) che temporale (farm stage). EMMA durante il pre processing lavora infatti su un certo numero di file grezzi che descrivono le emissioni puntuali ed areali in modo del tutto indipendente gli uni dagli altri. E' possibile dunque lavorare contemporaneamente su tutti i files di partenza. Similmente la fase di modulazione temporale opera su ciascun giorno dell'anno in modo indipendente gli uni dagli altri ed è perciò possibile suddividere l'anno in periodi e lavorare contemporaneamente su tutti i periodi in parallelo, purché anche in questo caso per ciascuno di essi si organizzi il lavoro di EMMA seguendo lo schema delle directories già descritto.

Le emissioni sono state calcolate nei domini di FARM e le simulazioni sono state condotte in due successivi stadi: una prima simulazione su una griglia 20x20 ed una seconda con griglia innestata 4x4. Considerazioni sui tempi di calcolo e gestione della memoria hanno suggerito la suddivisione del dominio nazionale (IT0) in 5 sottodomini: Nord-Italia (NI0), Centro-Italia (CI0), Sud-Italia (SI0), Sardegna (SA0) e Sicilia (SC0). Gli anni di riferimento sono, alla data del presente documento, il 1999 e 2005. (tabella 2.1)

	Italia intera	Sottodomini Italia				
	IT0 20 x 20	NI0 4x4	CI0 4x4	SI0 4x4	SA0 4x4	SC0 4x4
Coordinate dell'estremo SW del reticolo (km)	(150 3900)	(310 4840)	(550 456	(890 4200)	(410 430)	(750 4060)
Nr. of punti di griglia 1999 (x,y,z)	67, 75, 12	146, 96, 12	121, 96, 12	46, 71, 12	46, 71, 12	86, 61, 12
Nr. of punti di griglia 2005 (x,y,z)	67, 75, 16	146, 96, 16	121, 96, 16	46, 71, 16	46, 71, 16	86, 61, 16
Dimensioni delle celle (km)	20 x 20	4 x 4				
Livelli verticali 1999 (m)	20, 65, 120, 190, 285, 420, 620, 920, 1355, 2000, 3000, 4500					
Livelli verticali 2005 (m)	20, 75, 150, 250, 380,560,800,1130,1570, 2160, 2970, 4050,5500,7000, 8500,10000					

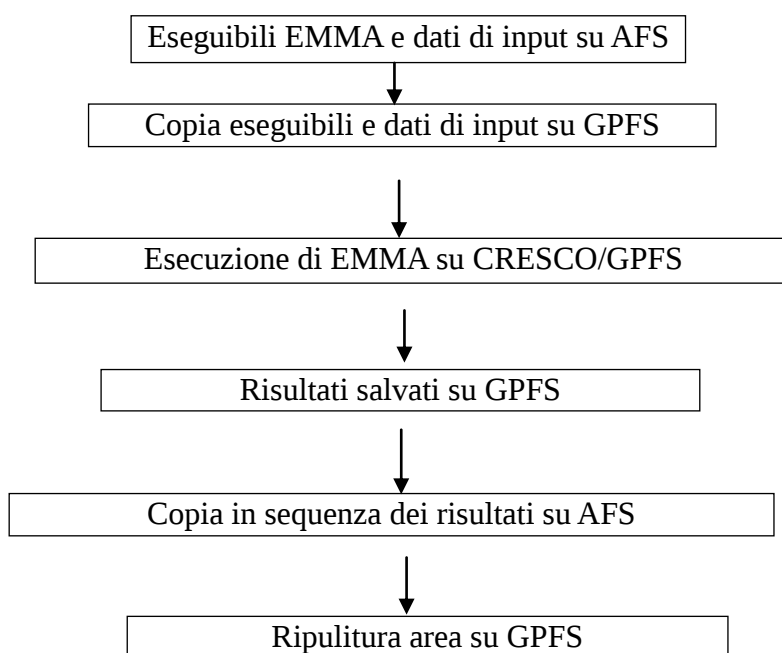
Tabella 2.1: Simulazione di emissione inquinanti realizzate con EMMA

METODOLOGIA SEGUITA

La scelta dei sottocasi è operata in modo diverso a seconda della fase di EMMA. Nella eventualità si decida di suddividere una operazione di pre processamento in più casi da lanciare in parallelo, viene creato un sottocaso per ogni file di emissioni areali (files con estensione srf) presenti nel caso originario. In più viene creato un ulteriore sottocaso che raccoglie tutte le emissioni puntuali (file con estensione gsp). Nel caso invece che si voglia suddividere una fase “farm” in più sottocasi la suddivisione di tipo temporale è la decade: un anno viene suddiviso in 37 decadi, 36 di 10 giorni ciascuna e l'ultima di 5. Ciascun sottocaso i quindi calcola le emissioni per 10 giorni consecutivi: dal giorno giuliano $(i-1) \times 10 - 1$ al giorno giuliano $i \times 10$, ad eccezione dell'ultima decade che finisce al giorno 365. Sebbene ciascun caso emissivo può essere calcolato in modo interattivo, l'utilità di sottomettere il calcolo alla GRID Enea è che questa dispone di un numero così grande di processori da svolgere tutti i calcoli relativi a più casi contemporaneamente. In genere un caso EMMA corrisponde ad uno o più runs (o jobs) sottomessi alla GRID.

L'esecuzione di ciascun (sotto)caso di EMMA comporta la creazione di files intermedi le cui dimensioni sono in generale decisamente più grosse di quelle dei files finali. Nel momento in cui vengono eseguiti decine o centinaia di casi contemporaneamente c'è bisogno dunque di una area di lavoro sufficientemente grande da ospitare tutti i files intermedi. In genere tuttavia lo spazio disponibile dagli utenti su AFS è limitato e quotato e difficilmente può riservare uno spazio così grande. La GRID Enea dispone tuttavia di una vasta area non quotata accessibile dalla macchine CRESCO, chiamata GPFS, indirizzabile da ciascun utente tramite il link simbolico `~/PFS/por`. Allo stato attuale le caratteristiche del collegamento fra le due aree di lavoro, GPFS e AFS non consentono il transito contemporaneo dei flussi di dati provenienti dai casi di EMMA in esecuzione su CRESCO, pena il sovraccarico della linea ed il degrado delle prestazioni. Pertanto alla fine del processamento di ciascun caso di EMMA i files finali rimangono salvati sull'area GPFS e vengono successivamente trasferiti in modo seriale su AFS da una apposita procedura.

Lo schema è il seguente:



Gli output prodotti da EMMA sono in genere di notevoli dimensioni. Per questo è stato deciso di suddividere i files di input ed output, di tutti i modelli, in files giornalieri organizzando l'albero delle directories in questo modo:

ZONA → ANNO → DECADE → GIORNO GIULIANO

Fa eccezione l'input e l'output della fase di pre processamento di EMMA in quanto si tratta di dati non modulati nel tempo. Per questi dunque ci si ferma all'anno. La radice per i casi pre processati è /afs/enea.it/minnifarm/project/emi; per l'input di farm è /afs/enea.it/minnifarm/project/farm/inp” Le procedure di EMMA su GRID Enea sono sette. Sei di queste svolgono in modo interattivo le operazioni tipiche di EMMA, quali pre processamento, modulazione temporale, copia su AFS.

La settima si impiega per sottomettere ad una coda di GRID le operazioni di pre processing e di modulazione temporale, che sono le più impegnative come impiego di risorse di calcolo.

Le procedure sono di seguito sinteticamente descritte nella seguente *tabella 2.2*.

Operazione	Procedura	Argomenti
Ripulitura di un caso pre processato	emma.clean.bash	zona anno
Pre processamento di un caso	emma.prep.bash	zona anno
Fase “farm” di un caso già pre processato	emma.farm.bash	zona anno gg_iniz gg_fin flag
Divide un caso “cleaned” in più sottocasi	emma.split.bash	zona anno
Riunisce in un solo caso i sottocasi pre processati	emma.merge.bash	zona anno
Copia da GPS ad AFS i risultati di emma.farm.bash	emma.copy.bash	zona anno “decadi”
Master script. Riunisce in un solo comando le operazioni di ripulitura, pre processamento e farm stage	emma.grid.bash	opzione zona anno [decadi mesi] opzione=decad,week,days decad:approccio per decadi week: approcci per settimana tipo days: approccio per giorni tipo

Tabella 2.2: Procedure di EMME su GRID

Qui di seguito (*tabella 2.3*) sono riportati i tempi di calcolo per le emissioni relative all'anno di riferimento 1999. Per il 2005 i tempi del pre processing sono di circa 2 h e per le altre fasi i tempi, rispetto al 1999 sono maggiori del 30% circa. In totale il 2005 necessita di **48 h** per l'espletamento di tutte le operazioni.

IT0 20x20	NI0 4x4	SI0 4x4	CI0 4x4	SC0 4x4	SA0 4x4	Cpu	Elapsed
Pre processing (h) ^{1/2}	22	6	5 ½	1	½	22	44
“farm” stage (h) ²	9	4 ½	7 ½	2 ½	1 ½	9	18
Copia da GPFS a AFS (h) ^{1 ½}	2	2 ½	2	1 ½	1	2 ½	12
Totale (h) ⁴	33	13	15	5	4	33	74

Tabella 2.3: Tempi di calcolo

CRITICITA' RISCONTRATE

Ad aprile 2009 le procedure su GRID Enea per l'esecuzione in multiseriale di EMMA sono operative ed hanno permesso il calcolo delle emissioni annuale, su base giornaliera delle emissioni 20x20 su base nazionale e 4x4 sui sottodomini per gli anni 1999 e 2005. Nel corso del lavoro sono emerse alcune criticità:

- per gli ultimi mesi 2008 instabilità della cella AFS e una lentezza collegamento PISA-AFS;
- sovraffollamento della GRID, ed è risultato raro poter lanciare più di 40-50 job alla volta;
- difficoltà nella scrittura contemporanea di più jobs su AFS da CRESCO. Questo limite ha interrotto molti job in esecuzione: per eludere l'inconveniente, si è pertanto scelto di leggere i dati di input su AFS e scaricare gli output su GPFS, con successivo trasferimento dei dati su AFS;
- esigenza di maggiore spazio per le simulazioni 2005 a 16 livelli

3. RICOSTRUZIONE DI CAMPI METEOROLOGICI AD ALTA RISOLUZIONE NELL'AMBITO DEL PROGETTO MINNI

Giandomenico Pace

ENEA-ACS-PROTINN

C.R. Bologna

INTRODUZIONE

Il progetto **MINNI** (“**M**odello **I**ntegrato **N**azionale a supporto della **N**egoiazione internazionale sui temi dell’**I**nquinamento atmosferico”) è nato nell’ambito di accordi di programma tra ENEA e Ministero dell’Ambiente, della Tutela del Territorio e del Mare. Si tratta di un sistema modellistico per la simulazione a scala nazionale dei fenomeni chimico-fisici connessi alle tematiche dell’inquinamento atmosferico. All’interno del progetto è prevista la produzione di campi meteorologici ad alta risoluzione sia come input per il modello chimico di trasporto (FARM¹) della catena modellistica di MINNI sia come prodotto da fornire al Ministero e rendere disponibile alle Regioni per studi di qualità dell’aria a scala locale. I campi meteorologici vengono prodotti a 12 km di risoluzione sul dominio di riferimento nazionale e successivamente ad alta risoluzione (4 km) su 5 sottodomini illustrati in *figura 3.1*. Le simulazioni ricoprono interi anni meteorologici con passo temporale orario.

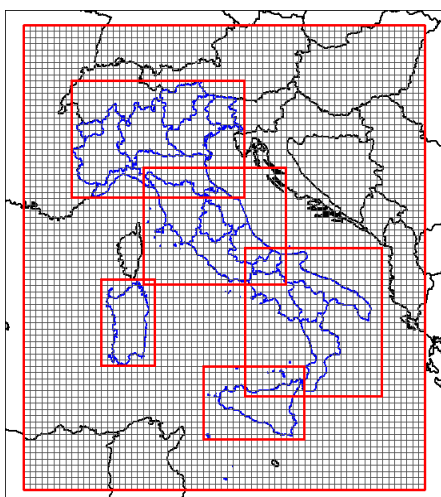


Figura 3.1: Dominio di calcolo nazionale (risoluzione 12x12 km²) e sottodomini ad alta risoluzione (4x4 km²) del modello MINNI.

Le simulazioni sono state effettuate utilizzando il modello prognostico non-idrostatico RAMS (*Regional Atmospheric Modeling System*), sviluppato dall’Università del Colorado (Cotton et al., 2003).

La ricostruzione modellistica di campi meteorologici ad alta risoluzione richiede un impegno rilevante per la preparazione delle informazioni in input ai codici di calcolo, per l’esecuzione delle simulazioni e per l’archiviazione dei risultati.

¹ Anche le simulazioni del modello chimico di trasporto FARM sono state condotte sul CRESCO (cfr [SuserBriganti](#))

I tempi di calcolo richiesti dai codici prognostici dipendono infatti dal numero di punti che costituiscono le griglie di calcolo e dalla loro risoluzione spaziale, crescendo in modo rilevante al diminuire del passo di griglia. L'onerosità computazionale delle simulazioni e la richiesta di ingenti risorse per l'immagazzinamento dei dati ha suggerito di utilizzare le risorse di calcolo offerte dalla GRID ENEA in particolare dal nuovo sistema HPC CRESCO di Portici.

Installazione del codice RAMS sul cluster CRESCO

Sono state necessarie le preliminari operazioni di installazione e di test del codice RAMS sulle macchine linux del cluster CRESCO. Effettuata la compilazione di tutte le librerie necessarie, testate le diverse opzioni di compilazione, sono state compilate due diverse versioni del codice RAMS, una per l'esecuzione scalare delle simulazioni e l'altra per l'esecuzione parallela. L'esecuzione parallela è stata predisposta in ambiente MVAPICH (MPICH per Infiniband) recentemente integrato sul cluster CRESCO.

Sviluppo delle shell di comandi per l'esecuzione automatica dei run meteorologici annuali

E' stato sviluppato l'insieme degli scripts necessari per eseguire tutte le fasi delle simulazioni: pre-processing dei dati di input, simulazione meteorologica con RAMS, post-processing dei dati di output.

Il pre-processing consiste nella preparazione dei seguenti dati di input, disponibili negli archivi di ECMWF e utilizzati dal pre-processore ISAN per le analisi meteorologiche: osservazioni superficiali sinottiche, dati di radiosondaggio e campi di background. Dagli archivi ECMWF sono state estratte anche le temperature superficiali del mare con risoluzione spaziale e temporale congruente con i campi di analisi meteorologica. Tali dati preparati nell'opportuno formato di archivio hanno sostituito i campi climatologici su base mensile distribuiti insieme al codice RAMS.

La simulazione meteorologica con RAMS prevede a sua volta tre fasi: preparazione dei campi statici; preparazione con il pre-processore ISAN dei campi di analisi meteorologica (utilizzati poi come condizioni iniziali e come campi per il nudging); simulazione prognostica.

Il post-processing comprende svariate operazioni che consentono sia di produrre i files meteo di input al modello FARM sia di elaborare alcune statistiche di interesse (valori medi, massimi, minimi, valori cumulati, ecc..) per verifiche e confronti.

Per ciascuna delle fasi sono state scritte le shell di comandi finalizzate da un lato ad eseguire in modo automatico gli onerosi run annuali e dall'altro a gestire in modo corretto ed efficace il dialogo tra i nostri codici e il sistema LSF di gestione delle risorse nell'ambiente di CRESCO.

Esecuzione di run annuali

Tra il gennaio-febbraio 2009 e nel marzo 2009 si sono calcolati i campi meteorologici nazionali a 12x12 km² per l'anno 2003 adoperando due diverse parametrizzazioni della convezione.

E' bene evidenziare che tra i 20-30 km ed i 2 km di risoluzione le parametrizzazioni della convezione non funzionano correttamente per cui si sono testate queste due parametrizzazioni allo scopo di verificare quali fornisse i migliori risultati sul dominio nazionale.

Per effettuare il primo si è utilizzata la parametrizzazione di Kuo (Kuo, 1974) mentre per la seconda quella di Kain-Fritsch (Kain and Fritsch, 1993; Kuo et al., 1997).

Sinteticamente la parametrizzazione sviluppata da Kuo assume che:

- la convezione sia causata dalla convergenza dell'umidità;
- la convergenza dell'umidità venga ridistribuita nel contenuto colonnare di umidità e in precipitazione;
- il profilo termodinamico converga verso il profilo adiabatico umido.

La parametrizzazione di Kain-Fritsch si basa sul calcolo del coefficiente "istantaneo" di instabilità convettiva (CAPE) ed è attivata quando il moto verticale di una particella d'aria riesce a superare sia il

livello di convezione forzata (LCL-lifting condensation level) che quello di libera convezione (LCF-level of free convection). Questa parametrizzazione è fisicamente più complessa di quella sviluppata da Kuo tanto da considerare i moti ascendenti e discendenti e la fase solida dell'acqua.

In *figura 3.2* sono mostrate le precipitazioni cumulate a livello annuale così come calcolate da RAMS utilizzando le due parametrizzazioni.

I corrispondenti valori misurati nelle stazioni della rete SINAnet, forniti attraverso il sistema SCIA, sono riportati nella stessa scala colore utilizzata per i risultati del modello e visualizzati come punti sulla nostra penisola.

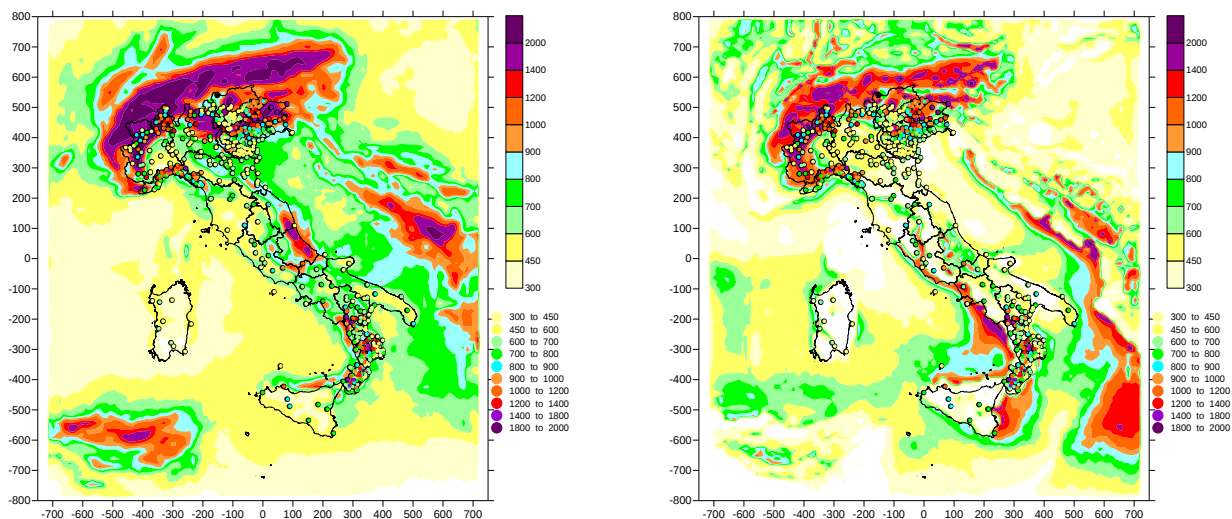


Figura 3.2: Precipitazioni cumulate annuali (mm) calcolate da RAMS utilizzando la parametrizzazione di Kuo (sinistra) e di Kain-Fritsch (destra) a confronto con dati misurati nelle stazioni della rete SINAnet.

Complessivamente le precipitazioni previste dal modello sottostimano quelle osservate specialmente utilizzando la parametrizzazione di Kain-Fritsch, che rispetto alla parametrizzazione di Kuo, mostra consistenti precipitazioni sul mare ed in particolare sulle coste del medio e basso tirreno e sulle coste dell'ex Jugoslavia.

Specialmente considerando le forti sottostime presenti nel centro e nel sud Italia probabilmente si adotterà la parametrizzazione di Kuo.

Durante le due simulazioni si è intercorsi in diversi crash dei singoli run attribuibili a diverse cause legate all'implementazione del codice in ambiente AFS/CRESCO, a problemi inerenti i file di analisi ed all'uso delle parametrizzazioni utilizzate.

Particolarmente importante è stata l'osservazione nei campi di inizializzazione e di analisi (derivati dai campi ECMWF, dalle osservazioni al suolo e dai radiosondaggi) di masse d'aria estremamente secche che sono state in qualche modo corrette in un'analisi preliminare.

Analisi e confronto dei risultati

E' stata effettuata una prima analisi dei risultati confrontando i campi al suolo con le statistiche meteorologiche delle postazioni dalla rete SINAnet.

Scopo dell'analisi è fornire una "veloce stima" della ragionevolezza dei risultati ottenuti dal run a 12 x 12 km². Questa è una fase irrinunciabile e da compiersi al più presto dato che i campi a 12 km saranno utilizzati per la creazione delle analisi su cui si effettueranno i run a 4 km.

L'analisi più quantitativa dei campi meteorologici ottenuti è un processo che richiede alcuni mesi e sarà forse effettuata nei prossimi anni.

La presentazione dei dati avviene in maniera analoga a quanto mostrato per i dati di precipitazione.

I campi del modello (ottenuti utilizzando la parametrizzazione di Kuo) sono rappresentati mediante curve di livello mentre i dati misurati nelle stazioni della rete SINAnet sono riportati mediante singoli punti con un corrispondente codice colore

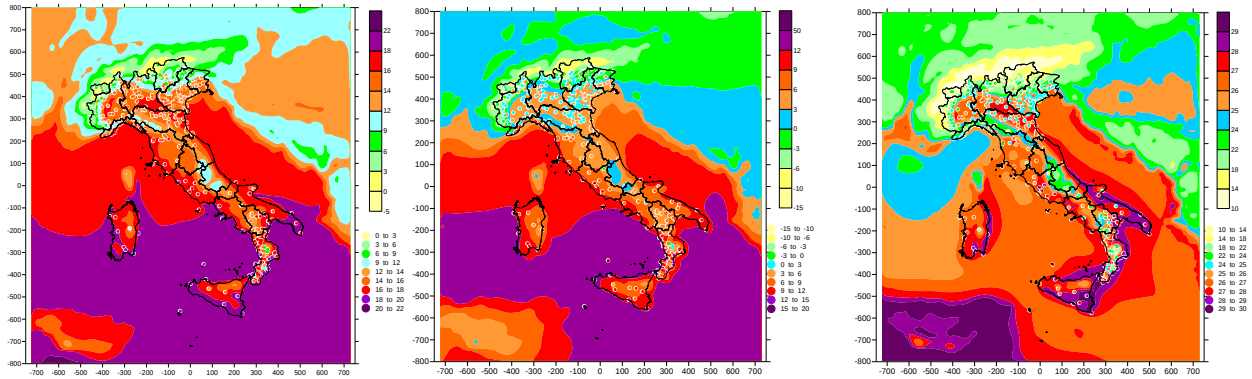


Figura 3.3: Temperatura (°C): media annuale (sinistra), media mensile di gennaio (centro), media mensile di luglio(destra) a confronto con i corrispondenti dati misurati nelle stazioni della rete SINAnet.

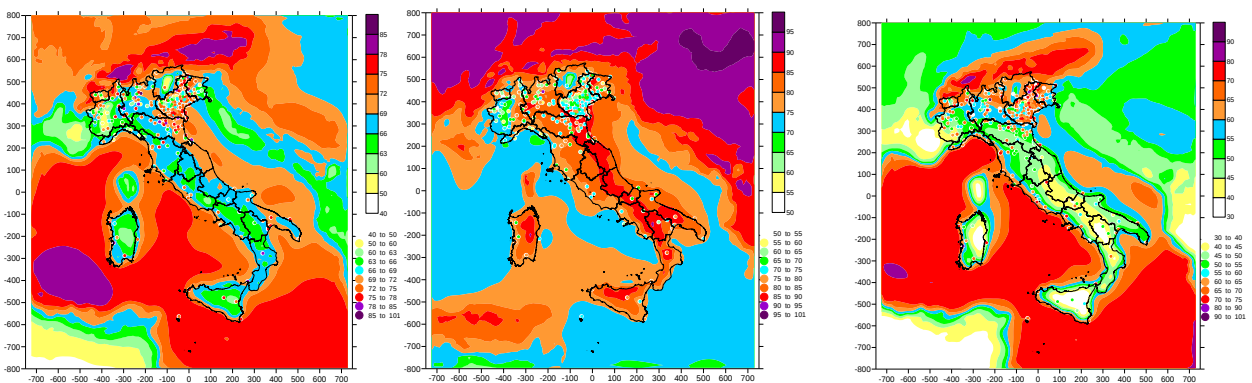


Figura 3.4: Umidità Relativa (%): media annuale (sinistra), media mensile di gennaio (centro), media mensile di luglio(destra) a confronto con i corrispondenti dati misurati nelle stazioni della rete SINAnet.

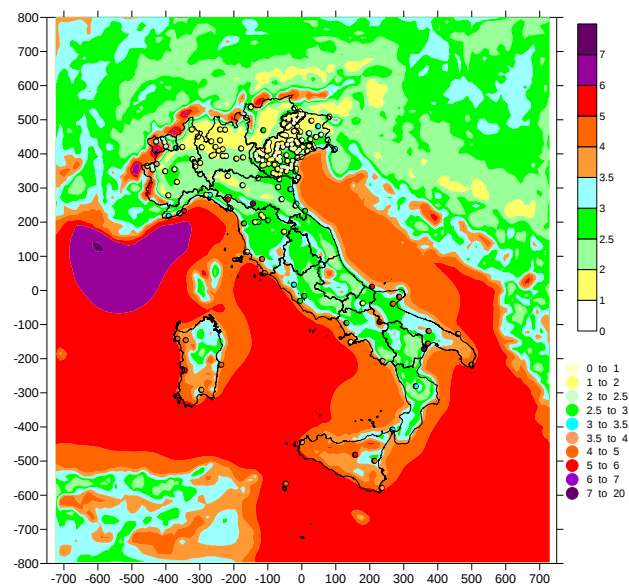


Figura 3.5: Intensità del vento (m/s): media annuale a confronto con i corrispondenti dati misurati nelle stazioni della rete SINAnet.

BIBLIOGRAFIA

Cotton W.R., Pielke R. A., Walko R. L. , Liston G. E., Tremback C. J., Jiang H., McAnelly R. L., Harrington J. Y., Nicholls M. E., Carrio G. G. and McFadden J. P., (2003): RAMS 2001: Current status and future directions. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **82**, 5-29.

Kuo, H.-L., 1974: Further studies of the parameterization of the influence of cumulus convection on the large scale flow. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1232-1240.

Kain, J.S., and J.M. Fritsch, 1993: Convective parameterization for mesoscale models: The Kain- Fritsch scheme. The representation of cumulus convection in numerical models. *Meteor. Monogr.*, No. 24, Amer. Meteor. Soc., 165-170.

Kuo, Y.-H., J. Bresch, M.-D. Cheng, J. S. Kain, D. B. Parsons, W.-K. Tao, and D.-L. Zhang, 1997: Summary of a Mini-Workshop on Cumulus Parameterization for Mesoscale Models. *Bulletin of the American Meteorological Society*, **78**, 475-49.

4. SIMULAZIONI MONTE CARLO PER LA PROGETTAZIONE DI FACILITY NUCLEARI

Nunzio Burgio Alfonso Santagata

ENEA-FPN-FISION

C.R. Casaccia

INTRODUZIONE

L'uso dei Metodi Monte Carlo (MC) ha radici lontane e ben consolidate nella storia della scienza [1-4] . Nel campo della simulazione del trasporto di particelle nucleari questa metodologia, che richiede grosse risorse di calcolo, è stata portata a livelli di maturità notevole [5-8]. Grazie all'impiego delle macchine parallele codici come MCNP, FLUKA e GEANT4 [9-12] sono divenuti degli strumenti di progettazione ed interpretazione molto affidabili. I calcoli descritti nel presente documento sono stati effettuati con il codice MCNPX 2.5.0 che gode di un elevato grado di parallelizzazione grazie all'uso delle funzioni di libreria del sistema Message Passing Interface. In generale la natura dei problemi da noi affrontata non richiede impegni di calcolo formidabili (16-32 cpu) però, in alcune fasi dei progetti l'impiego di un numero più elevato di processori permette di esaminare più opzioni accorciando i tempi di lavoro.

IL CODICE MCNPX 2.5.0

MCNPX è un codice di trasporto MC sviluppato nei laboratori nazionali di Los Alamos ed è rilasciato con licenza individuale di esportazione controllata ai ricercatori che ne fanno richiesta dietro verifica delle tipologie di impiego. Tramite inferenza statistica il codice è in grado di stimare grandezze fondamentali della teoria del trasporto come flussi e correnti di particelle, tassi di reazione, deposizioni di energia in geometrie tridimensionali la cui composizione può essere descritta fino a livello isotopico. E' possibile effettuare anche delle simulazioni in funzione del tempo (cinetiche). Sul sistema CRESCO, il codice è stato compilato impiegando il compilatore fortran90 della Portland (PGF90). L'oggetto ottenuto è stato link-editato con la versione Open-MPI1.2.5. Sono state eseguite con successo compilazioni a 32 e 64 bit, ma nella fase di produzione si è preferito impiegare la versione a 32 bit che, nella nostra esperienza, risulta essere più stabile. Sempre nelle nostre aree dati del file system AFS sono state installate le librerie di dati nucleari (ENDF e JEFF) necessarie al funzionamento del codice. I job sono stati sottomessi tramite l'uso del gestore di code LSF.

SIMULAZIONI NEUTRONICHE E PROGETTAZIONE SET-UP TAPIRO PER INTERFACCIA CORE-RIFLETTORE VHTR - Accordo di programma ENEA-MSE (5.2.5.8)

Il reattore TAPIRO (*figura 4.1*), situato nel Centro Ricerche della Casaccia presso Roma, è una “facility” di irraggiamento caratterizzata da uno spettro a neutroni veloci. Sin dal 1971, TAPIRO è stato impiegato per esperimenti di dimensionamento degli schermaggi di reattori veloci, test di resistenza a radiazioni di componenti elettronici, e studi sugli effetti biologici dei neutroni veloci. La sua potenza nominale è di 5 kW termici e il flusso neutronico al centro del nocciolo è di $4 \times 10^{12} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

Argomento del progetto è la misura dell'andamento dei flussi neutronici durante la diffusione attraverso vari materiali a partire da uno spettro rappresentativo di un sistema molto studiato nell'ambito dei reattori innovativi : l'High Temperature Gas-cooled Reactor (HTGR).

I sistemi HTGR sono dei buoni candidati per la nuova generazione (Generation 4) di reattori nucleari di potenza. La loro sicurezza intrinseca deriva dall'alto grado di dispersione del fissile in matrici di materiali compositi a base di Carbonio, che sotto forma di sfere o prismi viene impilato nel nocciolo.

La bassa capacità di proliferazione è assicurata dal fatto che ci vogliono tecnologie complesse e costi elevati per l'estrazione a fini militari del fissile finemente disperso nella matrice di materiale composito che inoltre, trattiene i tutti i prodotti di fissione rendendo molto bassa la possibilità di rilascio in atmosfera di quelli volatili. A causa dell'elevato grado di eterogeneità di strutture e combustibile i codici analitici che tradizionalmente si impiegano nella progettazione incontrano difficoltà nella simulazione di tali macchine. I vari BENCHMARK [13] lanciati sulla base dei risultati ottenuti dall'attività sperimentali dei prototipi HTTR e HTR-10 [14-15] hanno evidenziato delle discrepanze la cui origine non può essere identificata con certezza a causa del grado di complessità dei sistemi simulati.

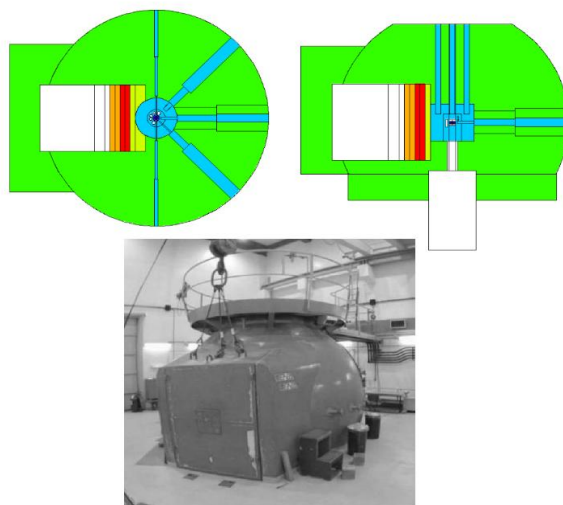


Figura 4.1: Viste piana e laterale del modello MCNPX del Reattore TAPIRO a confronto con il sistema reale

Nella prima fase del progetto sono state eseguite dal consorzio inter-universitario CIRTEN delle simulazioni necessarie a dimensionare un dispositivo che fosse in grado di moderare lo spettro di fissione del TAPIRO per renderne la distribuzione energetica rappresentativa delle varie versioni HTGR proposte a livello mondiale [16-17]. Le geometrie implementate, sebbene eterogenee, sono volutamente semplici in modo da poter essere riprodotte con facilità anche dai codici deterministici nell'ambito di un benchmark che verrà definito sulla base dei dati ottenuti nella fase sperimentale. Nel suo lavoro CIRTEN ha implementato un modello semplificato del reattore TAPIRO definendo anche i materiali del nocciolo, degli strutturali e dello schermo biologico. Sulla base di questi dati è preparato un file di input MCNPX con cui si è simulato il funzionamento del sistema ottenendo una reazione a catena di fissione stabile (criticità) e compatibile con i posizionamenti reali delle barre di controllo (*Vedi tabella 1*). Anche i valori della riserva di reattività sono compatibili con quelli del sistema reale.

Tabella 1. Stima del “rod worth” sul modello di TAPIRO a nocciolo freddo e pulito.

Posizione barre	K_{eff}	Incertezza	$(K_{eff} - 1)$ [pcm]
Barre tutte estratte	0.98757	± 0.00019	-1243.0
Barre di sicurezza completamente inserite	0.99880	± 0.00020	-120
Barre di sicurezza e di controllo completamente inserite	1.00919	± 0.00022	+919

Nel report finale CIRTEN è stato evidenziato come gli spettri neutronici tipici dell'HTGR sono ottenibili “filtrando” lo spettro di tapiro con spessori variabili di grafite, e sono state stimate le variazioni di flusso e distribuzione energetica all'interfaccia tra materiali rappresentativi degli strutturali (Ferro), del Nocciolo (Uranio naturale) e del riflettore (Grafite). Nella seconda parte del progetto, una volta realizzata la facility, tali spettri neutronici verranno misurati mediante tecniche di “unfolding” [18-19]. La maggior parte dei calcoli di progetto sono stati eseguiti da CIRTEN su una macchina biprocessore XEON. Nelle fase di verifica delle varie soluzioni proposte da CIRTEN abbiamo deciso di accelerare i calcoli di controllo ricorrendo al sistema CRESCO64. Le stime riportate nel rapporto CIRTEN si sono rivelate corrette entro l'errore relativo (< 1%) e la bontà delle valutazioni riportate è stata confermata. Ai fini di questo rapporto risulta interessante vedere quanto i nostri calcoli siano stati accelerati rispetto a quelli eseguiti su una macchina del CIRTEN.

Tabella 2 Confronto dei di calcolo tra il sistema CRESCO e una macchina CIRTEN.

Descrizione del Problema	Tipo e Numero processori	Tempo di Calcolo effettivo
Calcolo di criticità	2 XEON	360 minuti
	64 CRESCO	17 minuti
Determinazione Flusso in vano colonna termica	2 XEON	2880 minuti
	64 CRESCO	135 minuti
Determinazione tasso di reazione a soglia energetica per metalli in foglie sottili (20 micrometri)	2 XEON	5760 minuti
	64 CRESCO	270 minuti

Dall'esame dei tempi di calcolo si vede come la scalabilità sia affetta da un 50% di tempo aggiuntivo sul sistema CRESCO. Tale effetto è facilmente spiegabile data la natura del tipo di routine di calcolo impiegata che richiede molti rendez-vous di controllo (modalità kcode) con scrittura sul file di output di valori di K_{eff} .

Malgrado che la frequente scrittura di dati sui file di output sia penalizzante, soprattutto sul file system AFS, il margine di guadagno in termini assoluti è notevole. Ovviamente in classi di problemi (detti a sorgente statica) in cui i rendez-vous e le scritture su disco sono meno frequenti ci si aspetta una latenza minore ed una maggiore scalabilità.

SIMULAZIONI DI ATTIVATORE NEUTRONICO PER PRODUZIONE DI RADIOISOTOPI AD USO MEDICO

Il concetto di Adiabatic Resonance Crossing (ARC) è stato proposto per la prima volta dal premio Nobel Carlo Rubia per la trasmutazione di scorie radioattive e per la produzione di radioisotopi ad uso medico. L'effetto ARC è basato sulle capacità unica del Piombo di diffondere i neutroni ad alta energia (come quelli prodotti dalle reazioni di spallazione dei protoni sui metalli) riducendone quasi con continuità la velocità (e quindi l'energia) attraverso molti urti (100-200 per neutrone) un tasso di cattura molto basso. Questo fenomeno dovrebbe permettere una amplificazione della probabilità di cattura da parte di isotopi di metalli dispersi nel Pb che hanno dei picchi di assorbimento neutronico ad energie dell'ordine dei KeV (risonanze).

Questo fenomeno è stato misurato durante l'esperimento TARC (Transmutation by Adiabatic Resonance Crossing) al CERN con l'ausilio di un flusso di neutroni di spallazione ottenuto con un fascio di protoni da 3.5 GeV incidente su un target metallico.

Attraverso la diffusione in un blocco di Piombo ad elevata purezza [20-24] il flusso neutronico ha modulato la sua distribuzione energetica in accordo con le previsioni basate sull'effetto ARC.

Nell'ambito di un progetto EUREKA [25] è stato sviluppato un prototipo di attivatore ottimizzato per la produzione di isotopi radioattivi di Ho e Re per applicazioni brachiterapiche [26] basato anche su questo principio.

Essenzialmente si tratta di una macchina pilotata da un acceleratore di protoni da 16-70 MeV con un target di Berillio raffreddato ad acqua.

Il sistema è stato progettato con un uso estensivo di codici Monte Carlo come FLUKA ed MCNPX in maniera da ottimizzare il flusso neutronico per la resa delle reazioni di cattura di interesse medico.

Il prototipo, realizzato presso il centro europeo JRC di Ispra, è stato qualificato tramite misure neutroniche. Attraverso un accordo informale con Advanced Accelerator Application [27] società di spin-off del CERN che ha seguito lo sviluppo del prototipo, ci sono stati forniti tutti i risultati della campagna sperimentale che noi abbiamo riprodotto in simulazioni MC mediante il codice MCNPX sul sistema CRESCO.

Tale attività ci ha permesso di calibrare il sistema MCNPX per l'uso con protoni di bassa energia e neutroni di energia superiore a quelle ottenibili con spettro di fissione.

Il sistema finale è costituito da un target (vedi *fig.4.2*) di Berillio metallico innestato su la linea del fascio protonico, i protoni generano neutroni attraverso l'interazione con il Berillio.

L'acqua che circonda il target ha il duplice scopo di rimuovere il calore deposto dai protoni nel target di conversione e moderare i neutroni generati.

Il successivo buffer di Piombo permette una diffusione dei neutroni (anche di energia elevata) su percorsi non rettilinei mentre un successivo riflettore di grafite ne diminuisce le fughe. I materiali da attivare vengono posti nei canali di irraggiamento del Buffer di piombo.

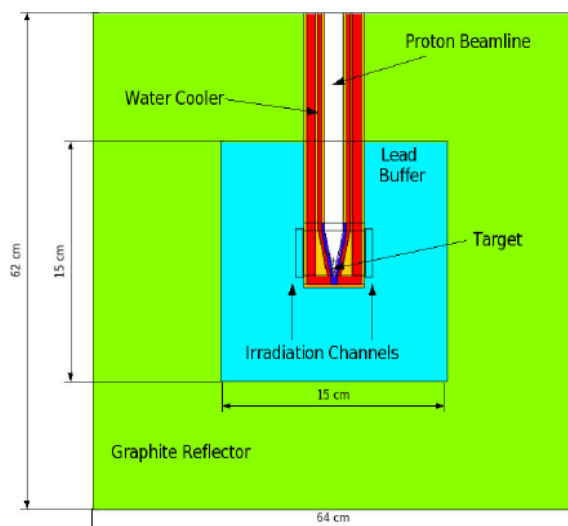


Figura 4.2: Schema del attivatore

Nell'ambito della campagna sperimentale sono state eseguiti ben 25 run dell'attivatore con tempi di irraggiamento che vanno dalle 2 alle 4-5 ore ininterrotte. Durante questi esperimenti sono stati attivati metalli come Au, Ni, Mo, Ag, Al, Fe, Ho, Re ed alcuni composti di interesse medico a base di Ho e Re. Noi abbiamo simulato mediante un modello MCNPX ciascuno di questi run ottenendo nella maggior parte dei casi un ottimo accordo finale con i risultati sperimentali. In questo processo di verifica abbiamo potuto selezionare i dati nucleari che meglio si adattavano alle misure, scartando alcune elaborazioni che si sono rivelate, in tutto o in parte, errate. Inoltre, molti di questi metalli erano in forma di lamine molto sottili (20-125 micron di spessore) per cui malgrado la potenza di calcolo di CRESCO è stato necessario ricorrere a tecniche di biasing statistico per accelerare la convergenza dei risultati. In tutti i casi è usato un campione statistico di 1 miliardo di protoni con dei tempi di calcolo che su una media di 128 processori sono stati di 4-10 ore effettive. Il know how acquisito potrà essere senz'altro trasferito ad altri progetti di interesse ENEA. La tabella riporta di seguito il confronto tra le simulazioni e il valore misurato per i tipici livelli di attivazione ottenuti sperimentalmente con un fascio di protoni da 34 MeV e corrente pari a 10 microA.

Tabella 3. Confronto attività sperimentali e stime MCNPX per l'attivazione neutronica nei canali di irraggiamento del prototipo.

Reazione di attivazione neutronica considerata	Attività Specifica di saturazione Misurata [Bq/g/uA]	Attività Specifica di saturazione stimata con MCNPX2.5.0 [Bq/g/uA]
$^{165}\text{Ho}(n, \gamma)^{166}\text{Ho}$	$9.88 \cdot 10^7$	$6.31 \cdot 10^7$ (2.6%)
$^{185}\text{Re}(n, \gamma)^{186}\text{Re}$	$4.98 \cdot 10^7$	$3.30 \cdot 10^7$ (2.7%)
$^{187}\text{Re}(n, \gamma)^{188}\text{Re}$	$5.26 \cdot 10^7$	$2.61 \cdot 10^7$ (2.1%)
$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$	$8.60 \cdot 10^7$	$5.25 \cdot 10^7$ (2.2%)
$^{197}\text{Au}(n, 2n)^{196}\text{Au}$	$4.44 \cdot 10^5$	$2.91 \cdot 10^5$ (2.3%)
$^{98}\text{Mo}(n, \gamma)^{99}\text{Mo}$	$5.79 \cdot 10^5$	$4.10 \cdot 10^5$ (18.6%)

Mediante l'uso delle tecniche di unfolding [19] sono stati ricostruiti gli spettri neutronici nei canali di irraggiamento, la figure 3 riporta, in forma differenziale, il confronto tra lo spettro misurato e quello stimato da MCNPX, anche in questo caso l'accordo è ottimo.

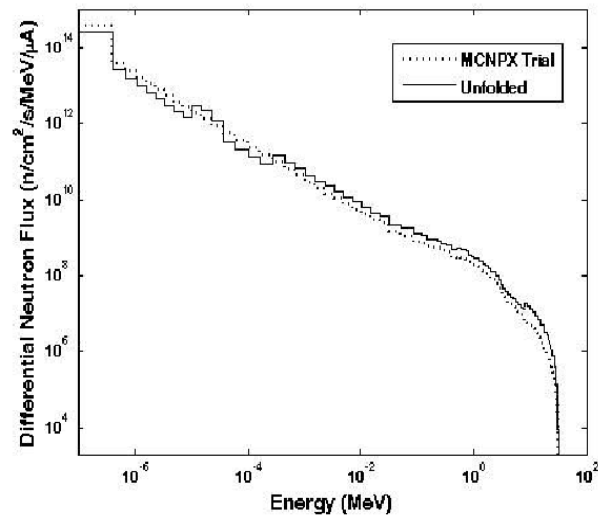


Figura 4.3: Confronto della Distribuzione energetica del flusso neutronico misurato e calcolato da MCNPX in un canale di irraggiamento del prototipo di attivatore neutronico.

BIBLIOGRAFIA

1. G. Compte de Buffon, "Essai d'arithmetique morale," Supplement a la Naturelle, Vol. 4, 1777.
2. A Hall, "On an Experimental Determination of Pi," Messeng. Math., 2, 113-114 (1873).
3. Marquis Pierre-Simon de Laplace, Theorie Analytique des Probabilities, Livre 2 pp. 356-366 contained in Oeuvres Completes de Laplace, de L'Academie des Sciences, Paris, Vol. 7, part 2, 1786.
4. Lord Kelvin, "Nineteenth Century Clouds Over the Dynamical Theory of Heat and Light," Philosophical Magazine, series 6, 2, 1 (1901).
5. W. W. Wood, "Early History of Computer Simulations in Statistical Mechanics and Molecular Dynamics," International School of Physics "Enrico Fermi," Varenna, Italy, 1985, Molecular-Dynamics Simulation of Statistical Mechanical Systems, XCVII Corso (Soc. Italiana di Fisica, Bologna) (1986).
6. Necia Grant Cooper, Ed., From Cardinals to Chaos — Reflections on the Life and Legacy of Stanislaw Ulam, Cambridge University Press, New York (1989).
7. "Fermi Invention Rediscovered at LASL," The Atom, Los Alamos Scientific Laboratory (October 1966).
8. N. Metropolis and S. Ulam, "The Monte Carlo Method," J. Amer. Stat. Assoc., 44, 335 (1949).
9. Denise B. Pelowitz, editor, "MCNPX USER'S MANUAL, Version 2.5.0" April 2005.
10. A. Ferrari, P.R. Sala, A. Fasso', and J. Ranft, "FLUKA: a multi-particle transport code", CERN 2005-10 (2005), INFN/TC_05/11, SLAC-R-773
11. G. Battistoni, S. Muraro, P.R. Sala, F. Cerutti, A. Ferrari, S. Roesler, A. Fasso', J. Ranft "The FLUKA code: Description and benchmarking", Proceedings of the Hadronic Shower Simulation Workshop 2006, Fermilab 6-8 September 2006, M. Albrow, R. Raja eds., AIP Conference Proceeding 896, 31-49, (2007)
12. The Geant4 Collaboration "Geant4 simulation toolkit" Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment Volume 506, Issue 3, 1 July 2003, Pages 250-303.
13. R. Plukiene, D. Ridikas "Modelling of HTRs with Monte Carlo: from a homogeneous to an exact heterogeneous core with microparticles" Annals of Nuclear Energy 30 (2003) 1573-1585.
14. S.Shiozawa et al. "Overview of HTTR design features" Nuclear Engineering and Design 233 (2004) 11-21.
15. Z. Zhang, S. Yu "Future Developments in China after the criticality of HTR-10" Nuclear Engineering and Design 218 (2002) 249-257.
16. E. Mulder, E. Teuchert "Characteristics of different fuel cycle in a PBMR-400 for burning reactor grade plutonium" Nuclear Engineering and Design 238 (2008) 2893-2897.
17. Talamo "A novel concept of QUADRISO particles – Part III: Applications to the Plutonium-Thorium fuel cycle" Progress in Nuclear Energy.
18. G. A. F. Seber and C. J. Wild, Nonlinear Regression, Wiley – Interscience.
19. M. Matzke, Unfolding Procedures, Radiation Protection Dosimetry Vol. 107, Nos 1-3, pp. 155-175 (2003).

20. The European Technical Working Group on ADS, A European Road map for Developing Accelerator Driven Systems (ADS) for Nuclear Waste Incineration, April 2001, ENEA, ISBN-88-8286-008-6.
21. N. Watanabe, Rep. Prog. Phys. 66 (2003) 339.
22. A. Abanades, et al., Nucl. Instr. and Meth. A 463 (2001) 586.
23. A. Abanades, et al., Nucl. Instr. and Meth. A 478 (2002) 577.
24. Y. Kadi, A. Herrera-Martinez, Nucl. Instr. and Meth. A 562 (2006) 573.
25. Innovative Nanosphere Brachytherapy with Adiabatic Resonance Crossing using Accelerators, Eureka Project 3525.
26. S. Buono, N. Burgio, M. Hamoudeh, H. Fessi, E. Hiltbrand, L. Maciocco, S. Mehier-Humbert, Anti-Cancer Agents Med. Chem. 7 (2007) 411.
27. www.adcap.com

5. STOCCAGGIO DI IDROGENO IN MATRICI MgH_2 : STUDIO DI UN'INTERFACCIA Mg-MgH_2 UTILIZZANDO UN CODICE DI DINAMICA MOLECOLARE Car-Parrinello SULLA RISORSA DI CALCOLO DELL'ENEA CRESCO.

Simone Giusepponi e Massimo Celino

ENEA-FIM-MATCOMP
C.R. Casaccia, Frascati

INTRODUZIONE

La considerevole capacità del magnesio di immagazzinare rilevanti quantità di idrogeno, ha alimentato negli ultimi anni un'intensa attività di ricerca finalizzata ad utilizzare questo materiale per la realizzazione di dispositivi di stoccaggio dell'idrogeno caratterizzati da portabilità, sicurezza e leggerezza.

Il magnesio, elemento relativamente leggero e con bassi costi di produzione, può immagazzinare reversibilmente idrogeno fino a circa il 7.7% del suo peso. Tuttavia, sono necessari ancora ricerche di tipo fondamentale perché il magnesio ha un'alta temperatura di desorbimento e una cinetica di assorbimento lenta, che ne impedisce per il momento l'utilizzo nelle applicazioni. Per tali ragioni, allo scopo di caratterizzare la dinamica di desorbimento dell'idrogeno all'interfaccia, è stato compiuto uno studio dettagliato dell'interfaccia tra magnesio (Mg) e idruro di magnesio (MgH_2).

In questa attività di studio, che fa riferimento al progetto TEPSI, abbiamo caratterizzato e confrontato alcune interfacce Mg-MgH_2 , che si suppone giochino un ruolo fondamentale nella diffusione dell'idrogeno durante i cicli di assorbimento e desorbimento. Dal punto di vista sperimentale non c'è una chiara evidenza su quali siano le interfacce coinvolte nella diffusione dell'idrogeno e quale sia la dinamica atomica nelle interfacce. Grazie ad accurate simulazioni di dinamica molecolare da primi principi, basate sulla teoria del funzionale densità con pseudopotenziali a norma conservata ed espansione in onde piane (codice CPMD), è stata riprodotta e studiata un'interfaccia Mg-MgH_2 in funzione della temperatura di desorbimento. L'analisi dettagliata della struttura elettronica e della configurazione atomica, ha permesso di caratterizzare le proprietà di equilibrio e il comportamento delle superfici in termini dell'energia totale e della diffusione atomica.

Installazione ed ottimizzazione di CPMD in ambiente CRESCO

Il codice CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics) è un codice di simulazione di dinamica molecolare da primi principi, basato sulla teoria del funzionale densità con pseudopotenziali a norma conservata ed espansione in onde piane. Abbiamo provveduto all'installazione del codice di dinamica molecolare CPMD sulla struttura di calcolo dell'ENEA chiamata CRESCO (Centro computazionale di RicErca sui Sistemi COMplessi). Abbiamo utilizzato il compilatore Intel ifort (Intel Fortran Compiler, versione 10.1) e librerie scientifiche Intel mkl (Math Kernel Library, versione 10.1), inoltre abbiamo utilizzato le librerie MPI openmpi_intel-1.2.5 compilate anche esse con ifort.

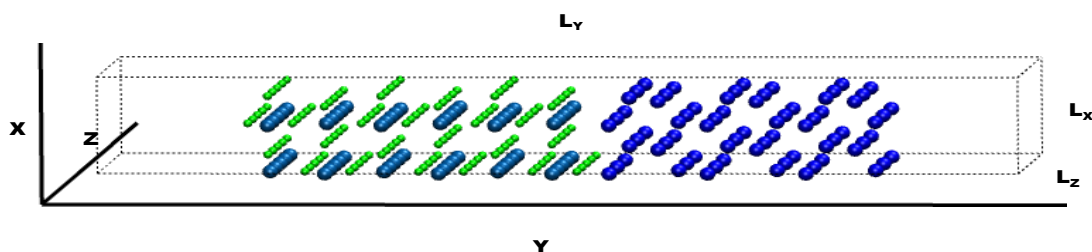


Figura 5.1: Interfaccia Idruro di Magnesio – Magnesio. Gli atomi di idrogeno sono rappresentati in colore verde mentre quelli di magnesio sono rappresentati in due tonalità di blu.

In questa sezione presentiamo i risultati dello studio di scalabilità del codice al variare con il numero di *core* impiegati nelle simulazioni. Consideriamo il sistema costituito da un'interfaccia Idruro di Magnesio (MgH_2) – Magnesio (Mg), così come mostrato nella figura 5.1. Questa scelta è condizionata dal fatto che questo tipo di problematica è oggetto di interesse nella scienza dei materiali per lo stoccaggio di idrogeno.

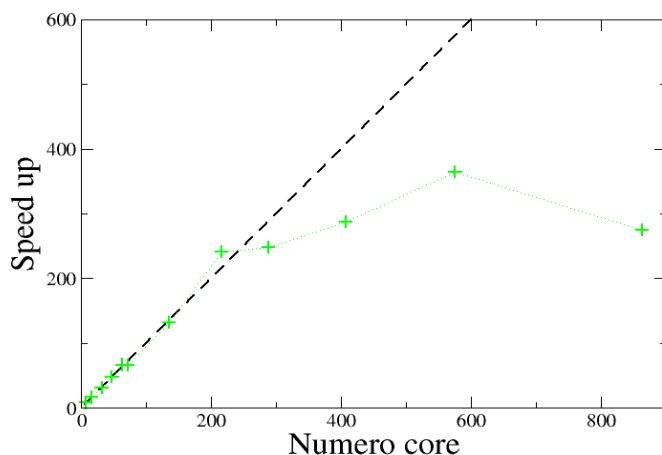
Tale sistema è costituito da 132 atomi di magnesio e 120 atomi di idrogeno, le dimensioni della cella di simulazione sono: $L_x = 50.3 \text{ \AA}$, $L_y = 15.1 \text{ \AA}$ e $L_z = 6.21 \text{ \AA}$. Utilizzando CPMD per una serie di studi preliminari su questo sistema, abbiamo visto che il codice sceglie per il calcolo delle trasformate di Fourier 3D, una *mesh* con indici $576 \times 180 \times 72$, ripartendo il carico di lavoro tra i vari processi seguendo il primo indice. Si hanno così miglioramenti nelle *performance* di calcolo, con riduzione dei tempi di esecuzione, fino a che il numero di *core* è pari al primo indice della *mesh* (nel nostro caso 576). Operando ulteriormente sia sulle opzioni del codice CPMD, sia sfruttando le potenzialità della struttura di supercalcolo CRESCO, è possibile ridurre ancora i tempi di esecuzione delle simulazioni. In particolare, utilizzando l'opzione di CPMD: REAL SPACE WFN KEEP, che mantiene i valori delle trasformate di Fourier dirette in memoria (avendo a disposizione memoria RAM sufficiente), si riesce ad abbassare il tempo di esecuzione di ciascun passo di dinamica molecolare in quanto non bisogna ricalcolarsi di volta in volta. Inoltre, l'altro aspetto che ci ha permesso di ridurre notevolmente i tempi di esecuzione delle simulazioni, ed in particolare quelli relativi alla scrittura e lettura su file, è stata la possibilità di poter utilizzare il *filesystem* parallelo PFS che è disponibile su CRESCO. Poiché la simulazione richiede la scrittura e lettura di file piuttosto grandi, come ad esempio i file di RESTART che raggiungono 1.2 Giga, poter utilizzare PFS al posto di AFS, permette la riduzione dei tempi di esecuzione di molte decine di minuti.

Nella tabella 5.1 riportiamo, al variare del numero di *core* impiegati, i tempi medi (in secondi s) di esecuzione relativi a 300 passi di dinamica molecolare con *timestep* = 2 a.u. e *cutoff* = 80 a.u.

Numero core	Time step medio
8	93.8460
16	45.8003
32	24.2258
48	15.8122
64	11.2554
72	11.3713
128	5.7081
144	7.6195
216	3.1129
272	3.2422
288	3.0272
432	2.6108
576	2.0608
864	2.7275

Tabella 5.1: Tempi medi di esecuzione di un passo di dinamica molecolare per il sistema di Figura 1 al variare del numero di core.

Poiché la sezione di CRESCO dedicata a codici ad alto parallelismo come CPMD è strutturata in nodi da due processori *quad-core*, per impiegare nodi interi, abbiamo scelto come numero di *core*, inizialmente multipli di 8 (8, 16, 32, 48, 64, 128), ed in seguito numeri che continuino ad essere multipli di 8 ma contemporaneamente sottomultipli di 576 (72, 144, 216, 288, 432, 576).



Per evidenziare con più chiarezza la scalabilità di CPMD, nella figura 5.2 viene riportato lo *speed up* (croci di colore verde) del codice calcolato sulla base dei valori di Tabella 1. Inoltre viene anche confrontato con il caso ideale rappresentato dalla linea tratteggiata nera. Da tale figura si vede come sfruttato le potenzialità sia di CPMD, sia di CRESCO, si abbia uno *speed up* soddisfacente fino ad alcune centinaia di *core*.

Figura 5.2: *Speed up* (croci verdi) del codice CPMD in funzione del numero di *core* per il sistema di Figura 1 rispetto a quello ideale (linea tratteggiata nera).

Studio della diffusione dell'idrogeno su un'interfaccia Mg-MgH₂ e ruolo del Ferro come catalizzatore

Sulla base di studi preliminari, nei quali abbiamo analizzato le strutture cristalline del magnesio e dell'idruro di magnesio, che ci hanno permesso di definire i parametri reticolari che meglio simulano il sistema fisico reale, abbiamo costruito l'interfaccia Mg-MgH₂, dove si affacciano il piano (100) del magnesio a quello (010) dell'idruro di magnesio così come mostrato in figura 5.3. Eseguendo calcoli di energia totale, una volta trovata la distanza tra le superfici energeticamente più favorevole, abbiamo provveduto al rilassamento ionico mantenendo fissa la posizione degli atomi di magnesio nei due strati più esterni. Questo ci ha permesso di calcolare lavoro di adesione che è pari a 605.05 mJ/m².

Vogliamo ora studiare la mobilità degli atomi di idrogeno, in particolare siamo interessati a comprendere la dinamica, a livello atomico, della diffusione dell'idrogeno sull'interfaccia al variare della temperatura del sistema. Per far ciò abbiamo eseguito delle simulazioni di dinamica molecolare (MD) a volume e

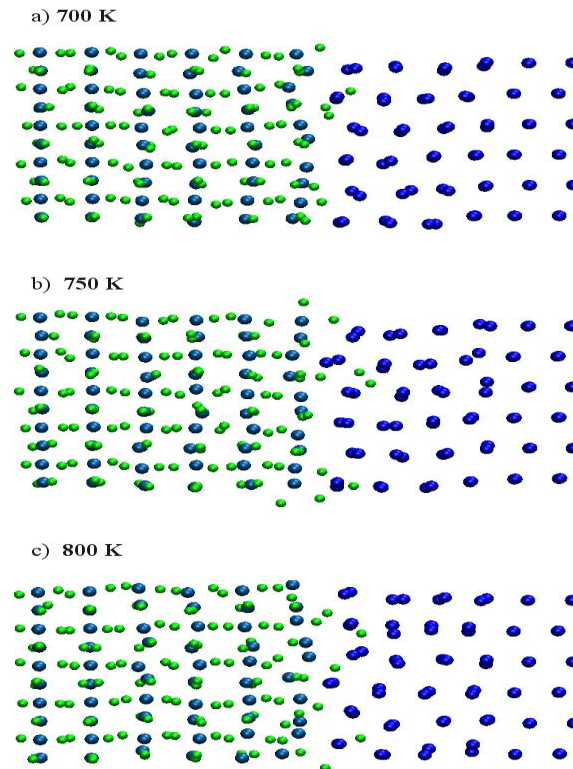


Figura 5.3: Snapshot dell'interfaccia Mg-MgH₂ per le temperature 700 K, 750 K e 800 K.

temperatura costanti, partendo dalla temperatura ambiente, $T = 300\text{ K}$ e arrivando a $T = 900\text{ K}$ con incrementi di 100 K (abbiamo considerato anche 750 K per avvicinarci alla temperatura di desorbimento sperimentale). In questo intervallo di temperatura, sperimentalmente si osserva la transizione di fase dall'idruro di magnesio (MgH_2) agli elementi separati ($\text{Mg} + \text{H}_2$), accompagnata dal desorbimento dell'idrogeno.

Dalle simulazioni di MD a diverse temperature si osserva che fino a $T = 600\text{ K}$ non c'è diffusione degli atomi di idrogeno, questa, inizia a manifestarsi per $T = 700\text{ K}$ (*figura 5.3a*). A questa temperatura c'è una chiara tendenza degli atomi di idrogeno a spostarsi verso l'interfaccia. La dinamica di questi spostamenti, che avvengono in prossimità dell'interfaccia, è caratterizzata da salti degli atomi di idrogeno tra posizioni reticolari vicine. Questo fenomeno è particolarmente evidente per $T = 750\text{ K}$ (*figura 5.3b*). Infine, alle temperature più alte, $T = 800\text{ K}$ (*figura 5.3c*) e $T = 900\text{ K}$, gli atomi di idrogeno si muovono verso la superficie di magnesio abbandonando le loro posizioni reticolari. Questi risultati sono in buon accordo con quelli sperimentali, nei quali, nel caso in cui l'idruro di magnesio non sia stato sottoposto a processi di milling e non siano presenti catalizzatori, si inizia ad osservare il desorbimento dell'idrogeno nell' MgH_2 a $T = 780\text{ K}$. A questa temperatura, nelle simulazioni MD è chiaramente visibile la diffusione dell'idrogeno sull'interfaccia, sottolineando comunque che gli atomi di idrogeno non diffondono all'interno del reticolo cristallino del magnesio. Si osserva inoltre che gli atomi di idrogeno che diffondono sono quelli in prossimità dell'interfaccia, invece gli atomi più interni hanno una mobilità minore rispetto a quelli prossimi all'interfaccia, ed inoltre, tale differenza risulta più eclatante alle alte temperature.

Per investigare il ruolo giocato dagli elementi di transizione utilizzati come catalizzatori per il processo di desorbimento dell'idrogeno da parte dell'idruro di magnesio, abbiamo sostituito un atomo di magnesio nel MgH_2 con un atomo di ferro. Abbiamo considerato tre posizioni equivalenti nel reticolo che hanno differenti distanze dall'interfaccia (si veda *figura 5.4*). Nel primo caso (POS1) sostituiamo un atomo di magnesio posto sull'interfaccia, nel secondo (POS2) un atomo che sta sulla prima fila interna e, nell'ultimo caso (POS3), un atomo che appartiene ad una fila ancora più distante dall'interfaccia.

Dopo aver caratterizzato l'interfaccia in queste nuove configurazioni calcolando l'energia totale prima e dopo il rilassamento ionico, che ci ha anche permesso di calcolare lavoro di adesione, abbiamo eseguito delle simulazioni di dinamica molecolare a volume e temperatura costanti. I valori del lavoro di adesione per queste tre configurazioni vale: $W = 776.06\text{ mJ/m}^2$ per la configurazione POS1, $W = 614.14\text{ mJ/m}^2$ per la

configurazione POS2 e $W = 606.11\text{ mJ/m}^2$ per la configurazione POS3. In analogia a quanto fatto in precedenza siamo partiti dalla temperatura ambiente, $T = 300\text{ K}$ e siamo arrivati a $T = 900\text{ K}$, incrementando la temperatura di 100 K ad ogni passo.

Dalle simulazioni risulta che alla temperatura di 500 K la diffusione dell'idrogeno è già iniziata (in *figura 5.4* sono rappresentate le configurazioni iniziali e finali delle interfacce a questa temperatura). Questo abbassamento della temperatura di desorbimento da parte dell'idruro in presenza del ferro è stata verificata anche sperimentalmente. In particolare, si osserva che la presenza del ferro modifica la coordinazione con gli atomi di idrogeno e quelli di magnesio. Nel cristallo di MgH_2 ciascun atomo di magnesio ha due idrogeni a 1.888 Å e quattro idrogeni a 1.939 Å . Nel caso in cui l'atomo di magnesio viene sostituito con quello di ferro, dalle simulazioni si osserva che questi atomi di idrogeno si avvicinano all'atomo di ferro portandosi ad una distanza media di circa 1.60 Å . L'avvicinamento degli idrogeni crea dello spazio vuoto che viene in parte occupato dagli atomi di magnesio primi vicini dell'atomo di ferro, modificando la coordinazione che passa da 2 a 4. Pensiamo che questa distorsione del reticolo cristallino sia responsabile dell'abbassamento della temperatura di desorbimento dell'idrogeno da parte dell'idruro, anche se ulteriori studi sono necessari per comprendere con più chiarezza i meccanismi alla base di questo processo.

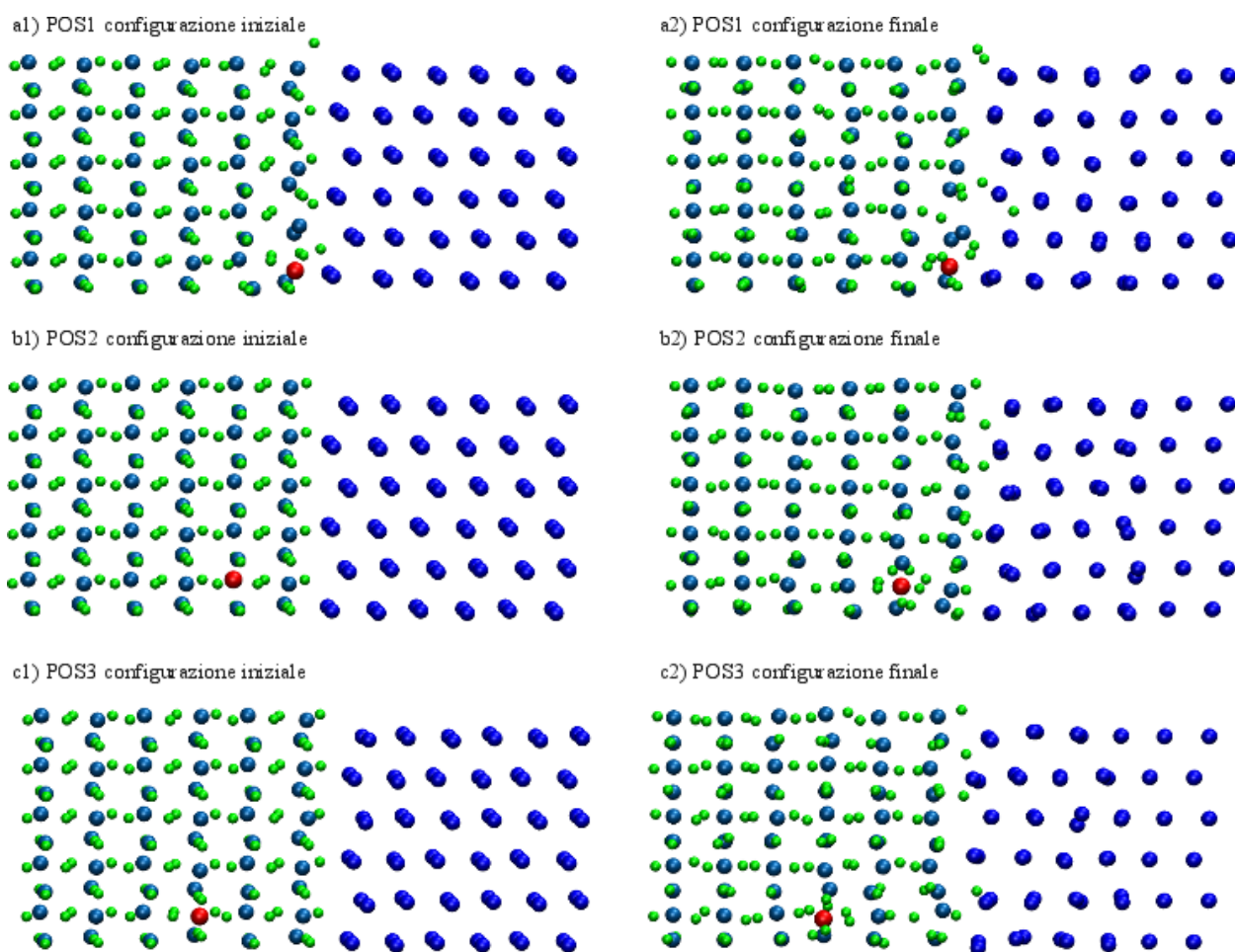


Figura 5.4: Snapshot dell'interfaccia Mg-MgH₂ nella quale un atomo di magnesio è sostituito con uno di ferro (atomo rosso) in differenti posizioni alla temperatura di 500 K. Configurazioni iniziali a sinistra e configurazioni finali a destra.

6. MODELLISTICA E SIMULAZIONE DELLA COMBUSTIONE

Eugenio Giacomazzi e Franca Rita Picchia

ENEA-TER-ENEIMP

C.R. Casaccia

DESCRIZIONE

Oggi nel settore energetico è evidente la necessità di una sinergia tra chi si occupa delle applicazioni e chi ne studia la fisica di base. La Computational Fluid Dynamics (CFD) ha raggiunto uno sviluppo tale da fornire informazioni molto dettagliate sui processi fluidodinamici, irraggiungibili per via sperimentale. In particolare, la Large Eddy Simulation (LES) è in grado di catturare le non stazionarietà di un flusso, l'interazione di larga scala tra turbolenza, combustione ed acustica, e così aprire nuove strade per il controllo dei processi energetici ed il miglioramento della loro efficienza.

La maggior parte dei problemi fluidodinamici di interesse sono caratterizzati dalla coesistenza di più “scale” caratteristiche e da una complessità fenomenologica che non permette, ancora oggi, di ottenere la soluzione diretta delle equazioni di Navier-Stokes che regolano il moto di un fluido, in tempi rapidi. L'esistenza di più scale è dovuto principalmente alla presenza della turbolenza; quando poi il problema è di tipo reattivo la complessità aumenta in quanto si aggiunge un ulteriore spettro di scale, quello chimico.

In linea di principio, non c'è nessuna difficoltà nel risolvere numericamente le equazioni di Navier-Stokes; le discretizziamo nello spazio e nel tempo, e le risolviamo ricorrendo ad uno dei vari metodi numerici disponibili (differenze finite, volumi finiti, metodi spettrali, elementi finiti). Questo procedimento è noto come “simulazione numerica diretta”, o DNS (Direct Numerical Simulation). Non c'è modellistica a nessun livello, e quindi si devono risolvere direttamente tutte le scale del problema, sia quelle spaziali che quelle temporali; gli unici errori che si introducono sono quelli di approssimazione numerica. È senza dubbio il modo più diretto ed accurato per lo studio della turbolenza, ma è anche il più oneroso in termini di tempi di calcolo e di memoria richiesta: questo perché tutti i vortici tridimensionali devono essere catturati sia nello spazio che nel tempo, in modo da riprodurre tutta la dinamica del sistema in esame. Il tempo di CPU necessario è, grosso modo, proporzionale al numero di Reynolds elevato ad una certa potenza, $Re_L^{11/4}$. Questo è valido per flussi liberi; se intervengono pareti il costo sale, perché in prossimità della parete i vortici vengono schiacciati. In combustione, intervengono altri gradi di libertà oltre a quelli puramente fluidodinamici, dati dallo spettro dei tempi chimici. Anche queste nuove scale devono essere risolte, nello spazio (fronte di fiamma) e nel tempo (tempi di ignizione). Il set di equazioni da risolvere diventa più grande, e di conseguenza l'onere computazionale aumenta con il crescere del numero di specie trasportate nel campo fluidodinamico. Il numero minimo di specie da considerare dipende dalla complessità del combustibile; ad esempio, per cogliere in modo accurato l'accensione dell'idrogeno occorrono meno specie chimiche rispetto agli idrocarburi. La conclusione è che l'approccio DNS è al momento improponibile per applicazioni industriali caratterizzate da elevati numeri di Reynolds, ma molto utile per capire meglio la complessa dinamica della turbolenza. Per poter dunque simulare flussi di interesse applicativo è necessario ridurre la qualità del risultato mediante la modellazione di alcuni fenomeni.

Per risolvere flussi turbolenti caratterizzati da numeri di Reynolds di interesse applicativo è necessario ricorrere alla modellazione; questo perché non è possibile risolvere in tempi ragionevoli tutte le scale spaziali e temporali coinvolte. Esistono due principali tipologie di approcci per modellare le equazioni di Navier-Stokes: la RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) e la LES (Large Eddy Simulation).

Nell'approccio RANS, le variabili sono decomposte in una parte media ed una fluttuante e le equazioni vengono mediate nel tempo (media di Reynolds). In particolare, dall'operazione di media applicata al termine non lineare delle equazioni di Navier-Stokes nascono termini incogniti, talvolta difficilmente interpretabili fisicamente. La modellazione di questi termini è nota come problema della “chiusura” turbolenta. Si capisce quindi che avendo a che fare con equazioni medie, lo spettro di scale della turbolenza non è risolto, perché tutte le scale turbolente sono state ridotte ad un'unica scala, quella media. Il modello di turbolenza introdotto per la “chiusura” deve rappresentare gli effetti dell'intero range di scale del problema in esame. In questo risiede la debolezza dei metodi RANS, perché le grandi e le piccole scale turbolente, che hanno caratteristiche diverse, non sono fisicamente distinte nel modello. Le piccole scale dipendono dalla viscosità in un modo quasi “universale”, nel senso che questa dipendenza è la stessa in molti flussi; al contrario, le grandi scale sono fortemente dipendenti dalle condizioni iniziali ed al contorno. Di conseguenza è impossibile rappresentare l'effetto delle grandi scale in problemi diversi con lo stesso modello; sulla base di misure sperimentali, sono possibili degli “aggiustamenti” opportuni di certe costanti, caratteristiche del particolare modello adottato e del problema considerato. Una volta tarato su una classe di problemi, un modello RANS può fornire buoni risultati in termini di valori medi delle principali grandezze fluidodinamiche.

Nell'approccio LES, basandosi sul fatto che l'energia di un vortice di larga scala è molto più grande di quella di uno piccolo, vengono eliminate le piccole scale mediante un'operazione di filtraggio spaziale delle equazioni di Navier-Stokes, previa decomposizione delle variabili in una parte filtrata (o risolta) ed una di sottogriglia (o non risolta). Conseguenza del filtraggio spaziale è che solo le grandi scale sono risolte. Come nell'approccio RANS, anche in questo caso nascono termini aggiuntivi, relativi alle piccole scale; questi effetti di sottogriglia devono essere modellati. Il modello usato per la “chiusura” viene chiamato SGS (da “SubGrid Scale”), ed il suo scopo è quello di riprodurre il trasferimento di energia dalle grandi alle piccole scale in modo accurato, almeno in senso statistico, senza produrre accumuli alla frequenza di taglio. Per risolvere la maggior parte dell'energia cinetica turbolenta e limitare gli effetti del modello di sottogriglia, la scala del filtro viene scelta il più possibile vicino al range dissipativo, caratteristico delle scale più piccole. Va osservato che poiché la turbolenza è un fenomeno tridimensionale, la LES impone un calcolo tridimensionale. In conclusione, la LES fornisce una soluzione tridimensionale, non stazionaria, delle equazioni di Navier-Stokes, proprio come la DNS.

Specifiche competenze ENEA

Presso il Centro di Ricerca ENEA di Casaccia l'unità TER-ENE-IMP del Dipartimento Energia si occupa dello sviluppo di tecnologie impiantistiche e di processo innovative per la produzione di energia elettrica ad alta efficienza ed a ridotto impatto ambientale. Nel corso di questi ultimi anni, la modellistica e la simulazione numerica hanno assunto un ruolo sempre più importante nella progettazione e nello studio delle tecnologie energetiche; anche l'industria investe sempre di più negli strumenti di simulazione, grazie alla rapida evoluzione tecnologia nel settore del calcolo avanzato che rende disponibili, a costi sempre più bassi, le potenze di calcolo necessarie ad eseguire studi e calcoli in tempi compatibili con le sue esigenze produttive. La simulazione numerica viene utilizzata per lo studio di cicli di processo, per la progettazione di componenti e l'analisi delle prestazioni degli stessi in termini di rendimento, di emissioni e comportamento, per la predizione delle concentrazioni degli inquinanti e dei fenomeni non stazionari. In particolare, la predizione di fenomeni non stazionari e lo studio di transitori è un tema di

grande interesse industriale, in quanto tali fenomeni possono condurre a rotture di componenti, alla perdita di efficienza del processo ed alla produzione di inquinanti.

Negli ultimi anni anche il Dipartimento Energia, ed in generale l'ENEA, ha investito molto sulla CFD, sia in termini di risorse umane e di hardware, che in termini di collaborazioni, realizzando un'importante rete a livello di università (le più attive nel settore). Nell'ambito dello studio e dello sviluppo di tecnologie di combustione, vengono utilizzati principalmente due strumenti CFD: un codice commerciale (FLUENT), che consente di simulare sistemi di combustione con geometrie molto complesse e problemi di vario tipo, dall'altro un codice proprietario (HeaRT, acronimo di Heat Release and Turbulence), che consente di simulare combustione in fase gas e anche multi-fase in geometrie relativamente più semplici, ma che è dotato di una modellistica (sia numerica che fisica) più avanzata ed accurata.

Sono condotte simulazioni di tipo RANS, per problemi e/o geometrie molto complessi, e di tipo LES, soprattutto per lo studio delle instabilità di combustione e dei meccanismi di ancoraggio ed estinzione. Ambedue i codici sono paralleli e sono installati sulla piattaforma di HPC CRESCO disponibile sulla GRID ENEA.

Grossi sforzi sono concentrati sul codice HeaRT, sviluppato internamente all'unità IMP (riferimenti: E. Giacomazzi e F.R. Picchia), per condurre simulazioni LES. Gli sforzi sono di varia natura:

- numerica: sono introdotti nuovi schemi numerici per aumentare la robustezza ed accuratezza del codice;
- modellistica: si sviluppano nuovi modelli per migliorare la descrizione della fisica coinvolta;
- implementazione: il codice è ottimizzato per aumentarne l'efficienza;
- post-processing: sono sviluppati tools per l'analisi della grande mole di dati offerti dalle simulazioni LES.

Alcuni dei temi attuali di ricerca della sezione sulla combustione, che vengono affrontati sia attraverso la sperimentazione che mediante la simulazione numerica, sono:

- la 'MILD combustion': è una nuova tecnologia di combustione, caratterizzata dall'assenza di un fronte fiamma, molto utile per l'abbattimento di inquinanti, tipo NOx.
- la combustione di idrogeno e combustibili sintetici: oggi l'interesse su questi combustibili è molto forte. Molto spesso i bruciatori tradizionali usati per gas naturale non possono essere usati. Studi vengono condotti per una loro modifica o per lo sviluppo di nuovi bruciatori.
- la gassificazione del carbone: tema molto attuale su cui l'unità IMP è particolarmente attiva. Da notare che la gassificazione porta alla produzione di combustibili che possono avere un alto contenuto di idrogeno, e che vanno bruciati opportunamente.
- la combustione di slurry di carbone: anche questo è un tema molto attuale su cui si sta lavorando molto, anche grazie a nuovi progetti in partenza ed al coinvolgimento dell'industria.

Esempi di simulazioni condotte sul sistema CRESCO

Grazie al sistema CRESCO il tempo richiesto dalle simulazioni per ottenere il risultato si è ridotto considerevolmente. Nonostante cio' i tempi sono ancora alti rispetto a quelli di altri centri di ricerca sia Europei che extra-Europei, in particolare Americani ed Asiatici. Questo per sottolineare la necessità di continuare a potenziare il sistema nel corso degli anni per mantenere un livello competitivo con gli altri paesi. Sul sistema CRESCO sono state condotte diverse simulazioni relative alla combustione

premiscelata e non, e coinvolgendo diversi tipi di combustibili, dal puro idrogeno a miscele di sintesi con vario contenuto di idrogeno, al gas naturale. L'attenzione è stata concentrata sull'interazione tra turbolenza e combustione in classici regimi ed anche in nuovi regimi, come quello MILD (combustione senza fiamma). Sono stati condotti anche studi sull'interazione di fiamme con onde acustiche, in vista di una possibile applicazione in sistemi di controllo. Ultimamente un grosso sforzo è stato dedicato allo sviluppo di modellistica multi-fase. Le simulazioni relative ai processi con più fasi sono estremamente onerose e coinvolgono una mole di dati ancor maggiore delle precedenti. I risultati numerici sono tipicamente oggetto di confronto con misure sperimentali e di analisi delle fenomenologie coinvolte. Di seguito, a titolo esemplificativo, sono riportate alcune figure delle attività svolte.

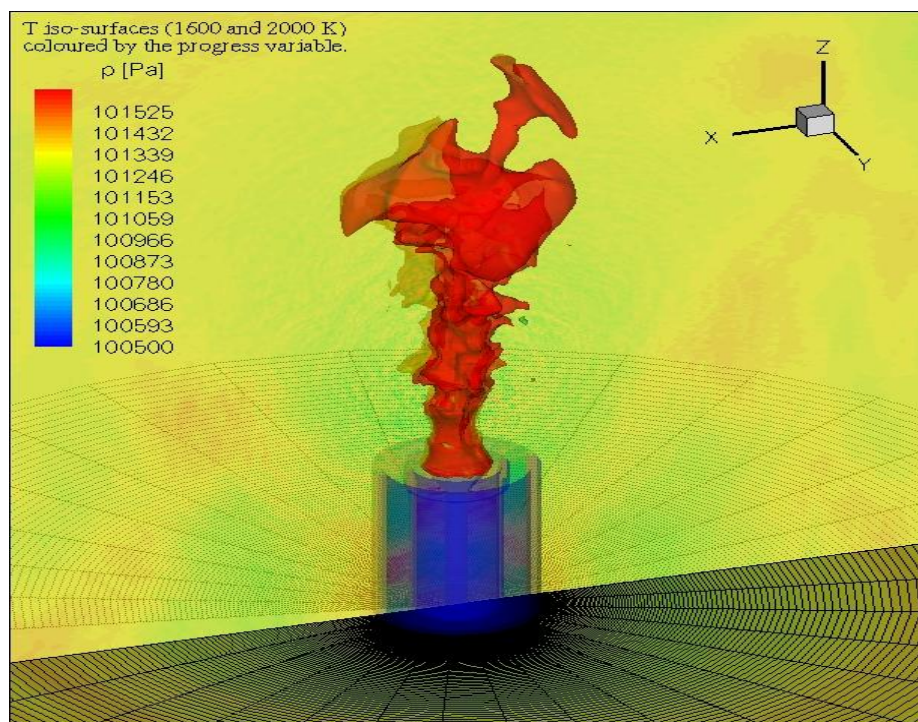


Figura 6.1: Visualizzazione di una fiamma premiscelata di metano e aria mediante iso-superficie di temperatura. La fiamma è stabilizzata dalla zona di ricircolo prodotta dal particolare bruciatore adottato. Il piano trasversale rappresenta la distribuzione del campo di pressione.

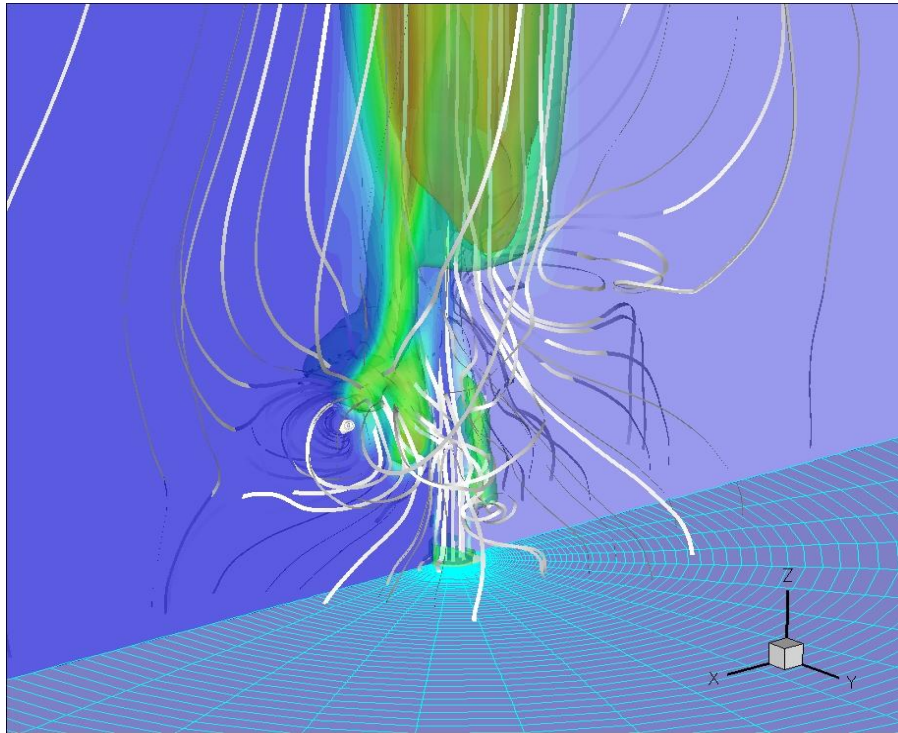


Figura 6.2: Visualizzazione di una fiamma non premiscelata di syngas e aria mediante iso-superficie di temperatura. Si notano le estinzioni localizzate prodotte da vortici (rappresentati con linee di corrente) rilasciati in prossimità dell'iniettore.

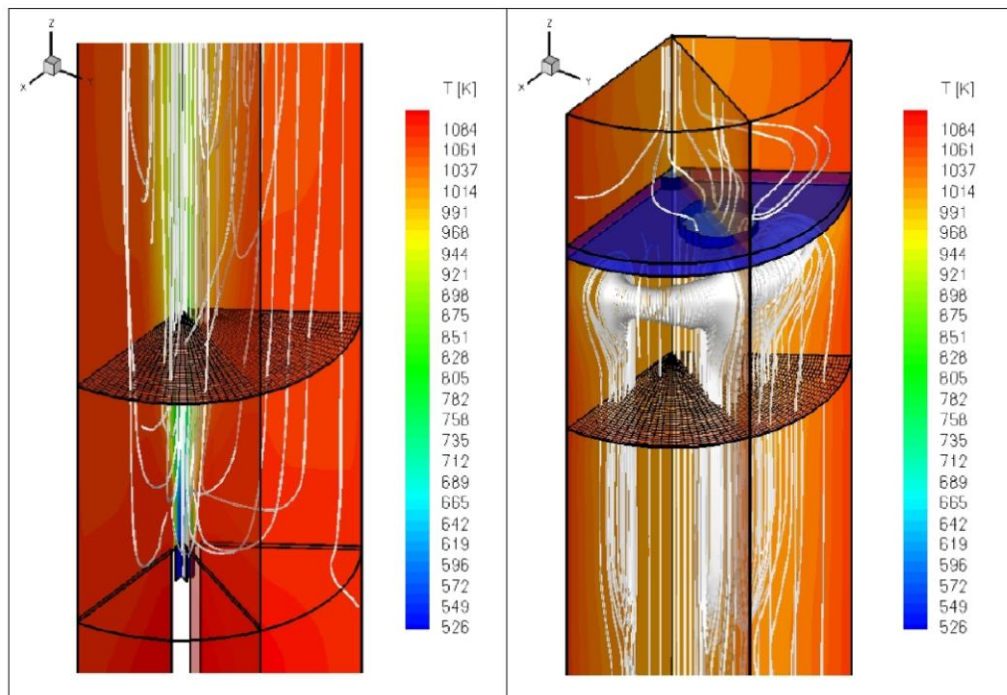


Figura 6.3: Visualizzazione del campo di temperatura in un combustore operante in modalità MILD. Si osserva l'assenza di un fronte di fiamma tipico della combustione tradizionale e l'omogeneità del campo di temperatura.

7. RAPPORTO IN MERITO ALL'UTILIZZO DELL'INFRASTRUTTURA CRESCO PER L'ESECUZIONE DI CALCOLI DI NEUTRONICA A SOSTEGNO DELLA PROGETTAZIONE DI ELSY – European Lead-cooled System

Giacomo Grasso

ENEA – FPN-FISNUC
C.R. Bologna

Introduzione

Nell'ambito delle attività di ricerca promosse dal 6° Programma Quadro della Comunità Europea, l'ENEA ha partecipato, tra gli altri, al progetto ELSY (European Lead-cooled SYstem): una collaborazione fra i principali enti di ricerca d'Europa per lo studio e la progettazione concettuale di un reattore nucleare – raffreddato a Piombo liquido – che rispondesse alle specifiche dei sistemi nucleari di IV Generazione.

L'ENEA, che nell'ambito della collaborazione ha assunto – tra le altre posizioni – quella di responsabile della progettazione neutronica, si è incaricato anche di sviluppare una configurazione di nocciolo, poi divenuta riferimento per l'intero progetto.

Nel corso del presente anno, giunta a conclusione la fase di concettualizzazione del nocciolo di ELSY, si è quindi reso necessario intraprendere una campagna di simulazione per la definizione della configurazione finale dello stesso a partire dalle indicazioni generali precedentemente evidenziate.

Lo strumento di calcolo utilizzato a tale scopo è MCNPX-v.2.6.0, un codice Monte Carlo di trasporto di particelle (nello specifico, neutroni e fotoni) in domini geometrici qualsivoglia definiti. Quest'ultima peculiarità del codice, che lo distingue per flessibilità ed accuratezza, ne definisce anche il maggior svantaggio: stante la logica stocastica delle simulazioni Monte Carlo, in domini a geometrie estremamente complesse per ottenere una stima dei risultati con un intervallo di confidenza accettabile si richiedono tempi di simulazione elevati, spesso inaccettabili (da qualche giorno a qualche settimana).

I codici Monte Carlo simulano infatti il comportamento fisico di un sistema a molte particelle (*N-body*) all'interno di un dominio riproducendo la vita di un numero ridotto – ma rappresentativo – di particelle campione, selezionate dal sistema originario: dallo studio del comportamento delle particelle campione è possibile estrapolare tutte le proprietà fisiche dell'intero sistema. È però chiaro che, data la variabilità fisica dei fenomeni di interazione delle particelle con la materia e la natura statistica dei metodi Monte Carlo, la validità dei risultati di una simulazione dipende strettamente dalla rappresentatività del campione di particelle studiate: si rende così necessario l'uso di un numero elevato di particelle campione per una adeguata riproducibilità stocastica dell'intero sistema.

Sotto l'assunzione generale che le interazioni di una particella col dominio non modifichino le proprietà di quest'ultimo nella definizione delle specifiche di interazione di tutte le particelle rimanenti, nei codici Monte Carlo la simulazione delle particelle campione può essere quindi effettuata in parallelo, incrementando le prestazioni del codice senza inficiare la validità dei risultati. Al contempo, la riduzione dei tempi di simulazione, così come la ripartizione della mole di calcolo e dei dati connessi su più processori, permettono all'utente di incrementare il numero di particelle campione, potendo così affinare ulteriormente la precisione statistica dei risultati.

L'installazione del suddetto codice sulla piattaforma CRESCO, fortemente parallela, ha permesso l'utilizzo estensivo dello strumento di calcolo per l'esecuzione di tutte le simulazioni necessarie alla completa caratterizzazione fisica della configurazione di nocciolo in esame.

Analisi di performance

L'esecuzione di una simulazione Monte Carlo viene effettuata secondo cicli successivi, per ciascuno dei quali un numero di particelle di simulazione, definito dall'utente, è campionato e studiato dalla sua generazione alla rimozione dal dominio (per cattura o fuga dal sistema). Durante la sua vita, ciascuna particella interagisce con i mezzi di cui il dominio è composto, modificando il proprio stato. Le molteplicità relative di ciascuna tipologia di interazione pertanto definiscono univocamente lo stato dell'intero sistema. Questa informazione è raccolta dal codice mediante un conteggio di tutti gli eventi (*score*) occorsi: al termine di ciascun ciclo, gli *score* di simulazione vengono raccolti e dedotte le stime dei fenomeni fisici ad essi associati (*osservabili*). Al termine di una simulazione, le stime degli osservabili registrate ad ogni ciclo sono prese in considerazione, per la definizione di una popolazione statistica (teorema del limite centrale) di stime da cui ricavare i valori medi e le deviazioni statistiche dei risultati.

Nella parallelizzazione di un calcolo Monte Carlo è necessario pertanto considerare che, per quanto all'interno di un ciclo le particelle di simulazione possano essere ripartite fra tutti i processori invocati dall'utente, nella direzione dell'auspicata riduzione dei tempi di calcolo, il controllo dell'elaborazione viene restituito sistematicamente, alla fine di ogni ciclo, al processo *master* per la somma degli *score* parziali registrati dai processori e la valutazione complessiva delle stime per gli osservabili. Questa fase di sincronizzazione risente pesantemente dei tempi di comunicazione fra nodi di calcolo, traducendosi in periodi di *idle* per tutti i processi *slave* inizializzati col calcolo.

Una volta decisa la precisione statistica desiderata per i risultati del calcolo, discende subito il numero necessario di storie per la simulazione. Tale numero deve quindi essere ripartito ragionevolmente fra numero di cicli e numero di particelle per ciclo: un numero troppo basso di particelle per ciclo (quindi un numero elevato di cicli) comporta elevati tempi morti, dunque tempi di simulazione ancora perfezionabili; un numero di cicli troppo basso (quindi un numero elevato di particelle per ciclo) al contrario penalizza il numero di stime effettuate dal codice, dunque l'affidabilità statistica dei risultati finali della simulazione.

La ripartizione delle storie tra cicli e particelle per ciclo dipende anche dal numero di nodi di calcolo a disposizione dell'utente. Per la campagna di simulazione di cui all'introduzione, inizialmente sono stati ripetuti i calcoli effettuati su workstation locali bi-processore a memoria condivisa, per i quali si era scelto di utilizzare 4 milioni di storie ripartite in 100 cicli. Utilizzando 32÷64 processori, i tempi di calcolo si sono ridotti da circa una settimana a mai più di 10 ore.

L'enorme guadagno di tempo nell'effettuare questa prima tranches di simulazioni ha permesso di forzare il numero di storie per ottenere precisioni statistiche particolarmente elevate: si è così passati a simulare 30 milioni di storie, ripartite in 100÷150 cicli, su 256 processori. È stato così possibile incrementare la precisione del calcolo, passando da deviazioni standard dell'ordine di 60 pcm (*per cento mila*) a 8 pcm, senza stravolgere i tempi di elaborazione, rimasti comunque accettabili (circa 20 ore).

Risultati

I risultati principali ottenuti dalle simulazioni hanno permesso di definire la ripartizione degli elementi di combustibile di ELSY secondo tre zone ad arricchimenti differenti di combustibile, e di valutare la posizione ottimale degli elementi attivi per tutti e tre i sistemi indipendenti di controllo del reattore. In particolare, la suddivisione del nocciolo in zone ad arricchimento differente è una soluzione diffusa per la stringente richiesta di appiattimento della potenza prodotta da ciascun elemento di combustibile, al fine di massimizzare l'efficienza del sistema: è infatti noto che, dovendo i picchi di potenza sottostare a criteri di sicurezza che ne limitano il valore assoluto, quanto più omogenea è la distribuzione delle potenze per elemento, tanto maggiore risulta la temperatura media del refrigerante in uscita dal nocciolo. L'aumento della concentrazione di materiale fissile nel combustibile via via più lontano dal centro del reattore permette di incrementare il tasso di fissione pur se ad opera di un flusso neutronico inferiore. L'obiettivo di contenere i picchi di potenza entro il 20% in più del valor medio sull'intero nocciolo è stato ottenuto ripartendo gli elementi di combustibile in tre zone pseudo-cilindriche concentriche, secondo lo schema presentato in *figura 7.1*.

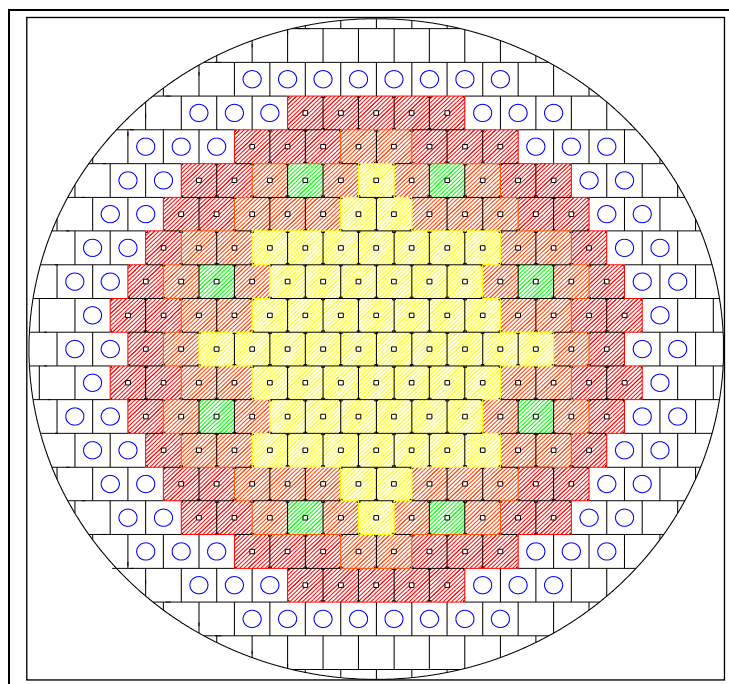


Figura 7.1: Schema di ripartizione degli elementi di combustibile di ELSY per zone di arricchimento: elementi di zona interna (giallo), intermedia (arancione) ed esterna (rosso). Le posizioni in verde e blu

si riferiscono, rispettivamente, alle barre di controllo tradizionali e agli elementi di schermaggio.

La mappa dei fattori di distribuzione della potenza locale rapportata al valore medio sul nocciolo ottenuta da tale configurazione è presentata in figura 7.2.

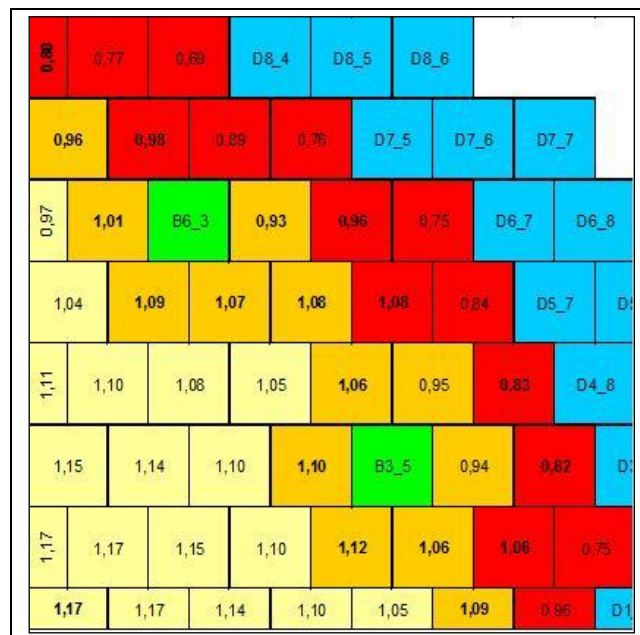


Figura 7.2. Schema di ripartizione degli elementi di combustibile di ELSY per zone di arricchimento.

Alla definizione delle zone di arricchimento del nocciolo è seguita la fase di allocazione degli elementi di controllo del reattore, ripartiti secondo tre sistemi distinti e ridondanti. Due dei tre sistemi sono costituiti da sottili barre di assorbitori che penetrano nel centro di un insieme selezionato di elementi (di seguito indicati come *assorbitori a dito* o Finger Absorber Rods, FAR). Il primo di questi due sistemi innovativi di assorbitori, dotato di un sistema motorizzato di movimentazione e sfruttando la modesta antireattività associata a ciascun singolo assorbitore, espleta tre funzioni:

- regolazione della criticità durante l'esercizio, compensando la perdita di reattività conseguente al bruciamento (circa 900 pcm) e ulteriormente raffinando localmente la distribuzione di potenza per inserzione parziale di un sottoinsieme di elementi in posizioni critiche;
- spegnimento controllato del reattore per inserzione motorizzata di tutti gli assorbitori;
- *scram* del sistema per inserzione passiva (gravità) mediante il rilascio delle interconnessioni elettromagnetiche che sostengono gli assorbitori.

Il secondo sistema di FAR è invece dedicato – per la ridondanza dei sistemi di sicurezza – al solo *scram* del reattore, non essendo dotato di motori di movimentazione.

A questi due sistemi innovativi di controllo, ne è stato aggiunto in via cautelativa un terzo, di concezione tradizionale: una serie di fasci di barre assorbitorie occupano alcune intere posizioni nel reticolo degli elementi di combustibile.

Il numero di FAR e la dislocazione di questi sulla mappa del nocciolo sono stati definiti a seguito di verifiche di efficacia e di occupazione delle posizioni critiche. Le analisi condotte hanno permesso di

evidenziare come 38 e 32 elementi di combustibile (sui 162 totali), rispettivamente, debbano essere dotati del primo e del secondo sistema di FAR per garantire la rispondenza ai criteri di sicurezza.

Il primo sistema risulta più numeroso perché, oltre a compensare l’escursione di reattività sul ciclo, deve garantire un eccesso di reattività sufficiente per lo scram del reattore, che è invece l’unica richiesta per il secondo insieme. Il risultato della caratterizzazione del sistema, insieme alla mappa delle posizioni efficaci per i due insiemi di FAR, sono presentati in *tabella 7.I* e *figura 7.3*, rispettivamente.

Tabella 7.I. Efficacia dei sistemi di controllo a FAR.

Configurazione	k_{eff}	σ	Δk_{eff} [pcm]
Riferimento	1.00924	0.00008	
Inserzione completa dei 38 FAR – I sistema	0.97435	0.00007	- 3489
Inserzione completa dei 32 FAR – II sistema	0.98028	0.00007	- 2896
Inserzione completa di 8 FAR – I sistema	0.99943	0.00008	- 981
Inserzione parziale (30 cm) dei 38 FAR – I sistema	0.99900	0.00008	-1024

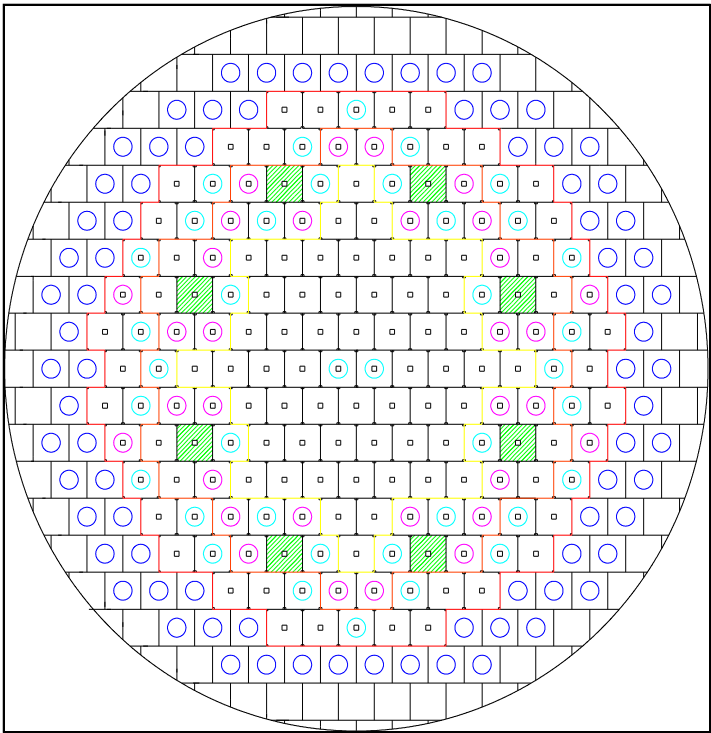


Figura 7.3: Localizzazione dei FAR nelle posizioni di reticolo del nocciolo: I sistema (cerchi ciano) e II sistema (cerchi magenta).

8. BRUCIAMENTO CON METODI MONTECARLO APPLICATO AL REATTORE A PIOMBO (ELSY)

C.Petrovich

ENEA-FPN-FISNUC

C.R. Bologna

La IV generazione di reattori nucleari si propone di raggiungere 4 obiettivi rispetto alla produzione di energia [1]:

- Sostenibilità delle risorse e riduzione considerevole delle scorie (soprattutto quelle a lungo termine);
- Economicità di produzione considerando l'intero ciclo di vita;
- Sicurezza e affidabilità;
- Resistenza alla proliferazione (sistemi molto difficilmente utilizzabili a fini non pacifici).

Diversi sistemi sono stati proposti a livello internazionale e 6 tipi di reattore sono stati selezionati per sviluppi ulteriori. Tra questi, oltre al reattore a sodio, che possiede una tecnologia più matura rispetto agli altri sistemi e che quindi rimane la configurazione principale per molti paesi (es. Francia, Stati Uniti, Giappone), l'Unione Europea ha supportato finanziariamente anche studi che riguardano il reattore veloce refrigerato a piombo. L'ENEA ha partecipato al VI Programma Quadro nel design del nocciolo per il progetto ELSY (European Lead cooled SYstem) [2] e ha già sottomesso una proposta di progetto assieme agli altri partners europei (CEA, ANSALDO, FZK e altri) per il VII Programma Quadro.

Come alternativa alla scelta di affidare tutto il combustibile irraggiato al deposito geologico, diverse strategie e scenari sono possibili per minimizzare la quantità (in massa, volume e radiotossicità) delle scorie a lunga vita. Tra queste strategie, una delle più efficaci (sotto il profilo di analisi costi/benefici) è quella del continuo riprocessamento del combustibile attraverso reattori veloci [3]: il plutonio, l'americio, il nettunio ed il curio vengono separati e riutilizzati per formare del nuovo combustibile e fissionati all'interno del reattore, ricavandone ulteriore energia.

Per valutare questi processi è necessario stimare l'evoluzione nel tempo della composizione isotopica del combustibile nucleare (uranio, plutonio, ecc.).

A questo fine solitamente vengono utilizzati dei codici deterministici che forniscono il flusso neutronico ai codici di evoluzione (es. ORIGEN). Con la continua crescita della potenza dei calcolatori, anche codici Monte Carlo hanno cominciato ad essere usati per questo tipo di calcolo [4, 5]. Infatti i codici Monte Carlo permettono di modellare più accuratamente geometrie tridimensionali complesse e di simulare il processo fisico con sezioni d'urto in modo continuo. I codici deterministici invece sono costretti a discretizzare le variabili (energia, spazio e angolo) e quindi introducono un'approssimazione, il cui impatto non risulta a priori quantificabile.

Per questo i codici Monte Carlo in neutronica permettono una descrizione meno approssimata (ad esempio nella descrizione delle risonanze) e possono essere utilizzati come strumento di benchmark per altri codici.

D'altra parte i codici Monte Carlo richiedono tempi di calcolo a volte molto alti e quindi, quando si tratta di eseguire una gran quantità di calcoli ai fini di un design di progetto (soprattutto nel campo industriale), i codici deterministici mantengono il loro primato. I codici Monte Carlo attualmente rimangono quindi complementari ai codici deterministici.

Anche in ENEA il codice di riferimento per il bruciamento nei reattori veloci è finora stato un codice deterministico (ERANOS), ma, con i nuovi sviluppi del codice MCNPX [5] e con lo sviluppo della piattaforma di calcolo in parallelo CRESCO, anche i codici Monte Carlo hanno cominciato ad essere impiegati per calcoli di evoluzione (sempre in maniera complementare a quelli deterministici).

Sono stati usati fino a 400 CPU, con una discreta scalabilità. Il codice MCNPX non consente di utilizzare un numero di CPU maggiore di 512 e comunque, poiché il codice costringe le CPU ad un *rendezvous* per ogni ciclo di calcolo (per la stima del k_{eff}), i tempi non sembrano migliorare con un numero di CPU maggiore.

Figura 8.1 mostra l'andamento del k_{eff} in funzione del tempo per la configurazione di riferimento del reattore ELSY (1500 MW_{th}) ed il confronto tra il codice deterministico ERANOS ed il codice Monte Carlo MCNPX. Le discrepanze (dell'ordine di 1000-2000 pcm) sono anche dovute alle diverse librerie di sezioni d'urto usate.

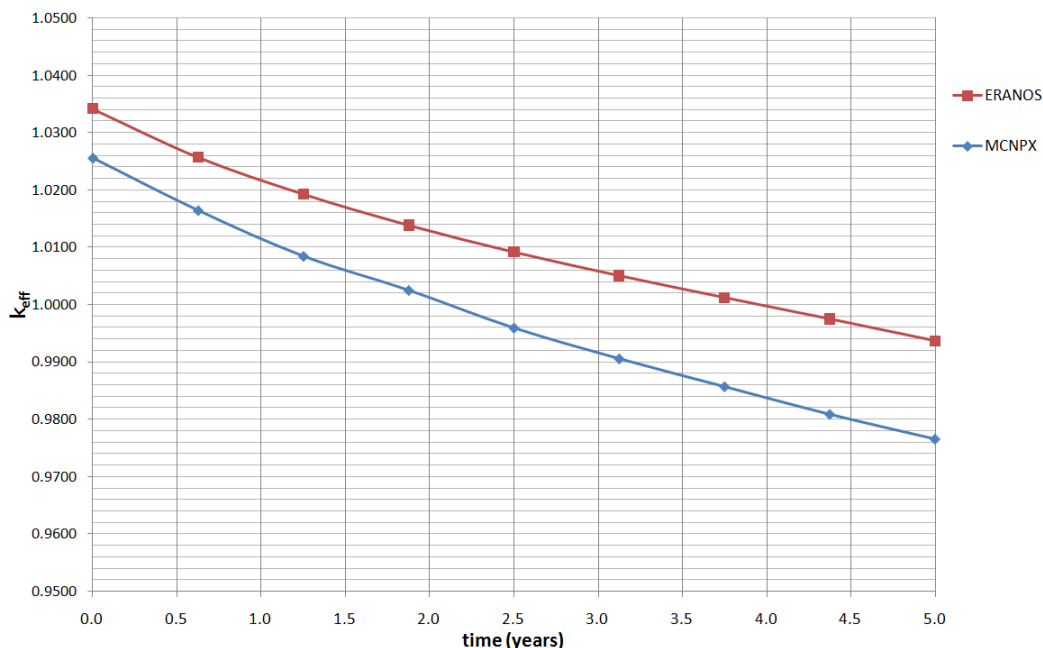


Figura 8.1: Confronto del valore di criticità tra MCNPX e ERANOS.

L'evoluzione nel tempo di alcuni isotopi (^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{241}Am) sono mostrati a titolo di esempio in *figura 8.2*. Questi risultati sono stati anche usati come sorgente per un'analisi di incidente severo [6].

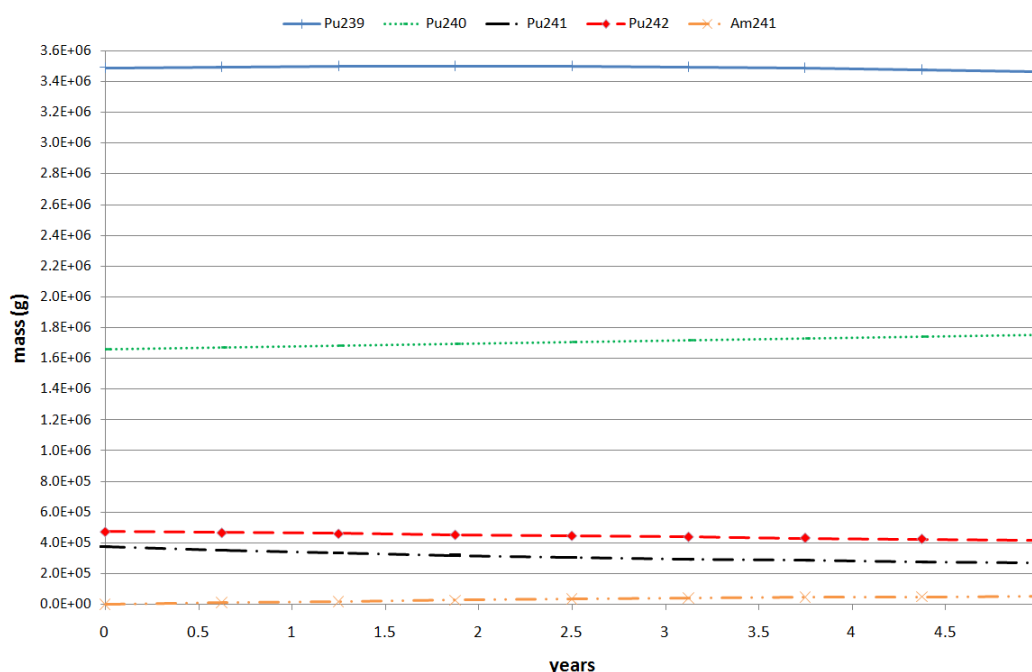


Figura 8.2: Evoluzione nel tempo di alcuni isotopi.

I calcoli con MCNPX hanno consentito anche un'accurata stima delle sezioni d'urto ad un gruppo (principalmente per i processi di fissione e di cattura), che sono state usate per una valutazione delle incertezze dei risultati dovute alle differenti librerie usate [7] e per il calcolo della composizione del combustibile all'equilibrio. Con questo si intende la composizione "asintotica" del combustibile che si ottiene riprocessando e riutilizzando il plutonio e gli attinidi minori in un ciclo chiuso, finché le composizioni rimangono costanti (il tasso di "produzione" degli isotopi equivale a quello di "distruzione"). In questo modo, come si accennava prima, si può ridurre di qualche ordine di grandezza la quantità di scorie a lunga vita da affidare al deposito geologico (rimangono comunque le inevitabili perdite di riprocessamento). Il risultato finale è che questo scenario sembra essere, almeno dal punto di vista della neutronica, realizzabile: nella configurazione all'equilibrio il contenuto di attinidi minori risulta infatti inferiore dell'1%, e questa bassa quantità non sembra modificare i parametri cinetici e quindi la sicurezza del sistema (un'alta percentuale di attinidi minori invece avrebbe degradato la sicurezza a causa della bassa frazione di neutroni ritardati).

BIBLIOGRAFIA

1. GEN IV International ForumSM - 2007 Annual Report, OECD-NEA.
2. C. Artioli, G. Grasso, M. Sarotto, J. Krepel, *ELSY Neutronic Analysis by deterministic and Monte Carlo methods: an innovative concept for the control rod systems*, ICAPP '09, Tokyo (Japan), 2009.
3. *Advanced Nuclear Fuel Cycles and Radioactive Waste Management*, NEA No. 5990, OECD 2006.
4. J. Cetnar, W. Gudowski and J. Wallenius, *MCB: A continuous energy Monte Carlo Burnup simulation code*, In "Actinide and Fission Product Partitioning and Transmutation", EUR 18898 EN, OECD/NEA (1999) 523.
5. M. Fensin, J. Hendricks, S. Anghaie, *MCNPX 2.6 depletion method enhancements and testing*, PHYSOR 2008, Interlaken (Switzerland), 2008.
6. F. De Rosa, *Specification of the Containment System*, FPN-P9IX-007, ENEA, 2009.
7. G. Glinatsis, D. Gugiu, G. Grasso, C. Petrovich, *Nuclear Data Impact on the Core Neutron Design*, Nuclear 2009, Pitesti (Romania).

9. METODI DI SIMULAZIONE PREDITTIVI PER SISTEMI DI COMBUSTIONE TURBOLENTA

Donato Cecere

Rapporto Attività Cresco

Attività svolta dal Dr. Donato Cecere:

In anni recenti la crescita delle risorse computazionali ed il bisogno di metodi di simulazione predittivi per sistemi di combustione turbolenta hanno portato ad incrementare l'interesse verso tecniche di simulazione

Tipo Large Eddy Simulation. E' infatti necessario sviluppare tecniche di simulazione in grado di poter fornire risultati quantitativi indipendenti da qualsiasi tipo di costanti empiriche che possono entrare nella definizione di modelli.

Tali tecniche sono state applicate alla simulazione di fiamme turbolente di cui sono a disposizione risultati sperimentali disponibili per il confronto e la validazione dei modelli utilizzati. Una delle simulazioni effettuate attraverso l'utilizzo della piattaforma CRESCO è stata quella di una fiamma premiscelata di Metano/Aria intorno ad un corpo solido bluff-body attraverso un modello variabile di progresso, Flame Surface density.

In questa simulazione sono state risolte le equazioni di Navier-Stokes che comprendono le equazioni della quantità di moto insieme ad una equazione ellittica per la risoluzione del campo di pressione, le equazioni della variabile di progresso e della sua varianza e dell'entalpia per tenere in conto delle perdite di energia che possono verificarsi nella fiamma a causa di fenomeni di conduzione.

Sono state effettuate simulazioni su diverse griglie di discretizzazione per valutare l'indipendenza dei risultati dalla dimensione del filtro utilizzato nella simulazione Large Eddy Simulation.

Le dimensioni delle griglie utilizzate sono dell'ordine di milioni di punti, ed è per questo che si necessita dell'utilizzo di grandi risorse computazionali.

Il programma utilizzato è scritto in Fortran 90 ed utilizza per la parallelizzazione il paradigma MPI. Il codice è discretizzato alle differenze finite su griglia cilindrica, al secondo ordine nello spazio e terzo ordine nel tempo. Il codice è semiimplicito. Le geometrie complesse relative al bluff-body sono state trattate con la tecnica delle immersed boundary.

Si riportano di seguito alcuni risultati relativi alla simulazione di Metano/Aria, tale esperimento presenta un numero di Reynolds di 8100 ed un rapporto di equivalenza di 1.12.

La simulazione ha girato con un numero massimo di 800 processori presentando un tempo di calcolo per time-step di 7 s. La griglia utilizzata presentava 2400000 punti di calcolo.

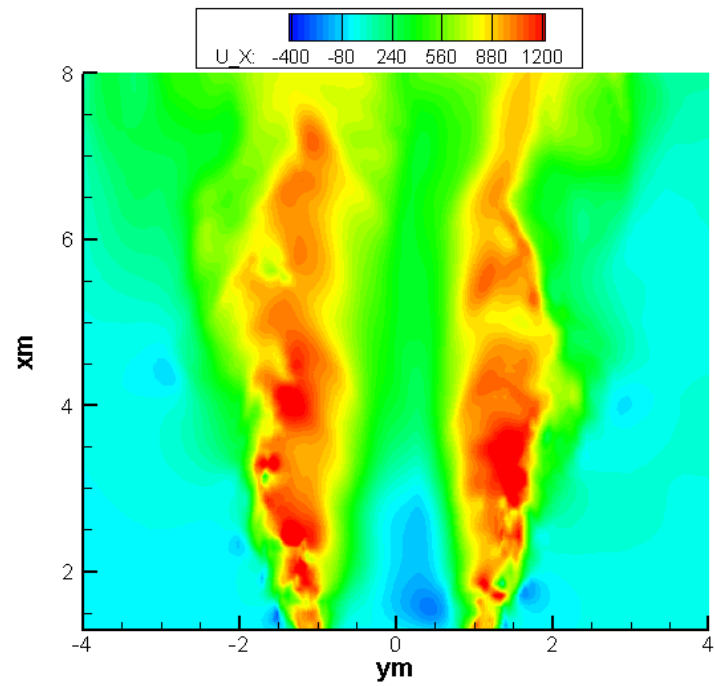
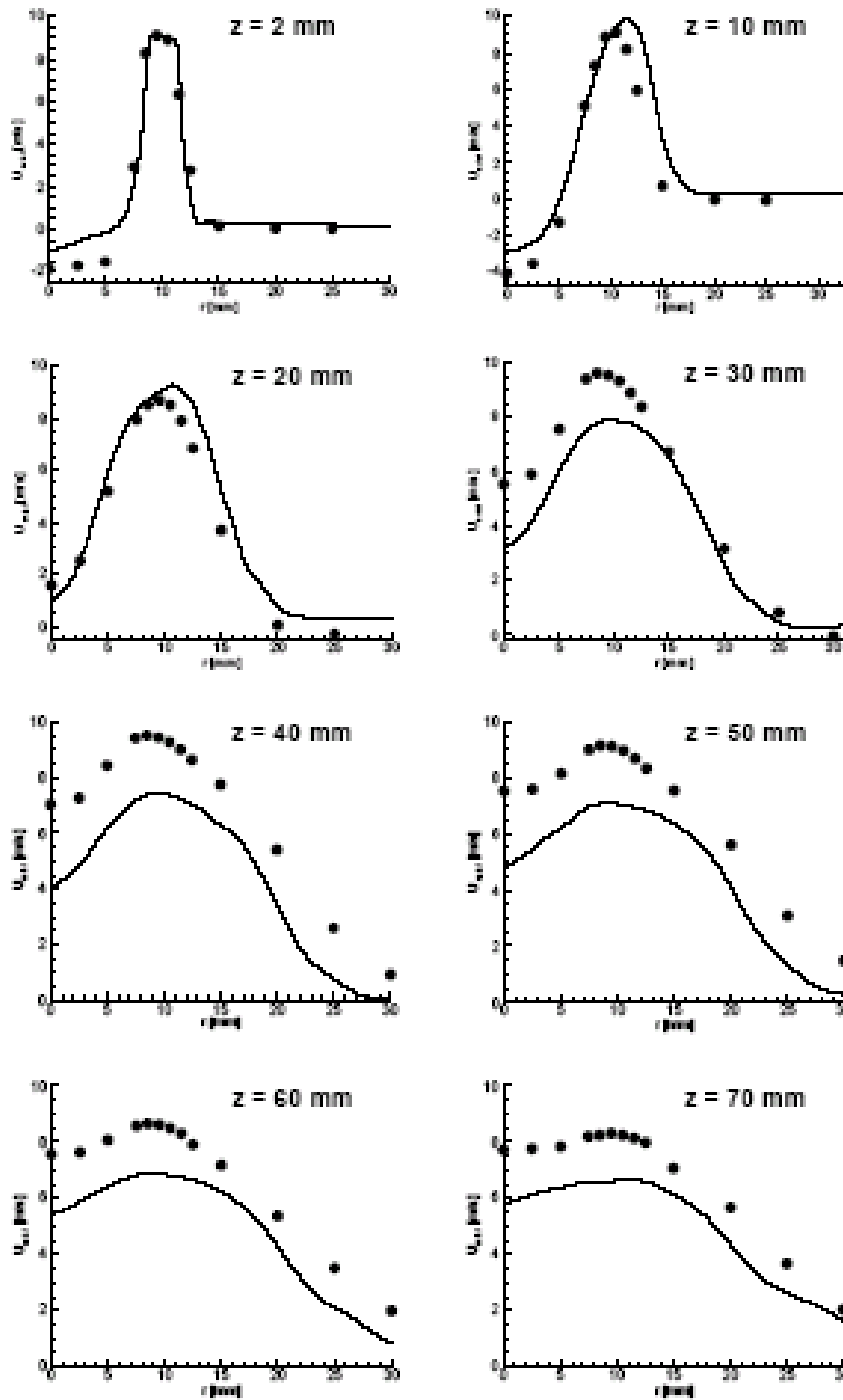


Figura.9.1: Campo di velocità assiali a valle del bluff-body (cm/s)

Di seguito invece si riportano i confronti delle velocità assiali a valle del bluff-body con i risultati sperimentali:



10. STUDIO TEORICO E LA MODELLAZIONE DI MEMBRANE METALLICHE PER LA SEPARAZIONE DI IDROGENO

Roberto Grena

ENEA- TER-SOLTERMSVIL

C.R. Casaccia

Introduzione

L'attività svolta con le risorse di calcolo di CRESCO riguarda lo studio teorico e la modellazione di membrane metalliche per la separazione di idrogeno, nell'ambito del progetto TEPSI. Il lavoro è in collaborazione con l'ing. Pietro Tarquini (responsabile del progetto TEPSI) e con Massimo Celino.

Il programma di calcolo usato su CRESCO è CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics), un programma per il calcolo di strutture elettroniche e dinamica molecolare, basato su DFT (Density Functional Theory) e dinamica molecolare nello schema di Car-Parrinello. Il programma permette di trovare configurazioni elettroniche di stato fondamentale ad atomi fissi (usando la DFT), ottimizzare la geometria di molecole e reticoli cristallini, e fare simulazioni di dinamica molecolare (Car-Parrinello).

Descrizione del problema

Lo studio di alcuni cicli termochimici per la produzione di idrogeno (in particolare lo Zolfo-Iodio) presenta reazioni che producono idrogeno in ambienti fortemente acidi e ad alta temperatura. Per aumentare la resa sarebbe opportuno separare l'idrogeno prodotto dalla miscela reagente, attraverso membrane. Purtroppo le membrane usate in genere per la separazione (basate sul Palladio) non resistono all'ambiente fortemente corrosivo in cui avviene la reazione. Per questo, è stato intrapreso lo studio di nuovi materiali per la realizzazione delle membrane. Lo studio teorico che stiamo svolgendo ha come scopo simulare il comportamento di questi materiali in presenza di idrogeno, per avere indicazioni su possibili buoni candidati prima di intraprendere prove sperimentali. Uno di questi materiali è il Tantalio, su cui finora si sono concentrati gli studi. Scopo del lavoro è però fornire uno schema generale di calcolo applicabile a tutti i metalli e leghe candidati.

Calcoli svolti

1) Calcoli preliminari

Il Tantalio ha una struttura cristallina BCC (Body-Centered Cubic). I primi calcoli avevano come scopo l'analisi di un reticolo di Tantalio, la selezione di pseudopotenziali adatti ai calcoli da svolgere e la determinazione del passo reticolare a temperatura $T = 0$ K. Il passo reticolare si trova calcolando l'energia di stato fondamentale di una porzione di reticolo (DFT) e cercando il minimo di questa energia in funzione del passo reticolare.

Due pseudopotenziali sono stati inizialmente selezionati, uno con 13 elettroni come gradi di libertà e uno con 5 elettroni. Poiché i risultati erano simili, lo pseudopotenziale con 5 elettroni liberi è stato adottato per risparmiare tempo di calcolo.

Con questo pseudopotenziale, il passo reticolare (lato del cubo del BCC) è risultato 6.187 ua (1 ua = 0.5292 Å), misura in accordo con i dati di letteratura (riferiti però in genere a temperatura ambiente).

2) Inserimento di un atomo di idrogeno

In seguito, l'inserimento di un atomo di idrogeno in una porzione di reticolo di 54 atomi (un cubo con 3 celle cubiche per lato) è stato simulato (la struttura ottenuta è $\text{TaH}_{1/54}$). Il reticolo BCC ha due tipi di siti interstiziali privilegiati, classificati come tetraedrici e ottaedrici. I siti al centro di ciascuna faccia del cubo (e, quindi, anche al punto medio di ciascun lato) sono detti ottaedrici perché i 2 PV (primi vicini) e i 4 secondi vicini formano un ottaedro irregolare. I siti tetraedrici sono posti lungo la linea che unisce due siti ottaedrici adiacenti, nel punto medio. I 4 PV formano un tetraedro irregolare. La terminologia è presa dai siti interstiziali dei reticoli FCC; tuttavia, nei BCC i tetraedri e gli ottaedri sono irregolari e non disgiunti.

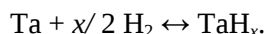
In letteratura si trovano prove che, in reticoli BCC, atomi piccoli tendono a preferire siti interstiziali tetraedrici, mentre atomi grandi risiedono di preferenza in siti ottaedrici. Quindi, i siti tetraedrici sono i candidati migliori ad ospitare gli atomi di idrogeno.

Una mappatura preliminare del potenziale efficace avvertito dall'idrogeno all'interno della cella è stata fatta, tenendo fisse le posizioni degli atomi di Tantalio. La mappatura è stata fatta calcolando l'energia di stato fondamentale (con la DFT) per ogni posizione dell'idrogeno su una griglia abbastanza fitta all'interno di una cella cubica. Questi calcoli indicano che i siti tetraedrici hanno energia minima. Tuttavia, la presenza dell'idrogeno potrebbe deformare il reticolo alterando le energie; perciò, per confermare questi risultati, è necessaria un'ottimizzazione geometrica.

L'ottimizzazione avviene lasciando gli atomi liberi di muoversi, calcolando le forze efficaci ad ogni passo dell'ottimizzazione e muovendo gli atomi finché queste forze non sono prossime a 0. È necessario fare numerose prove con diverse posizioni di partenza dell'idrogeno, poiché la configurazione potrebbe dipendere da esse nel caso vi siano minimi locali.

L'ottimizzazione conferma che i siti tetraedrici sono quelli di minima energia; tuttavia, se l'idrogeno ha una posizione di partenza nelle vicinanze di un sito ottaedrico tende a convergere verso di esso. Quindi, anche i siti ottaedrici sono minimi locali, che potrebbero venire occupati a temperature diverse da 0 o a concentrazioni più alte di idrogeno.

Uno degli scopi di questi calcoli è trovare l'entalpia di formazione della struttura TaH_x . Per fare questo, va considerata la reazione



L'entalpia di formazione per atomo di Tantalio, se i calcoli sono svolti su una porzione di reticolo con n atomi (nel caso visto $n = 54$), è data da

$$\Delta H = E(\text{TaH}_x)/n - E(\text{Ta})/n - x/2 E(\text{H}_2),$$

dove $E(\text{TaH}_x)$ è l'energia del sistema con nx atomi di idrogeno inseriti, $E(\text{Ta})$ è l'energia della porzione di reticolo di Ta senza idrogeni, e $E(\text{H}_2)$ è l'energia di una molecola di idrogeno isolata.

Un ulteriore calcolo svolto è quello delle deformazioni indotte nel reticolo dalla presenza dell'idrogeno. Una misura della deformazione può essere data dalla differenza tra la distanza tra un atomo di Tantalio e quello di idrogeno nella configurazione finale (dopo l'ottimizzazione geometrica), e la distanza tra lo stesso atomo e il corrispondente sito interstiziale in un reticolo perfetto. Questa differenza sarà funzione della distanza. Questa funzione è stata costruita per i siti tetraedrici, mostrando un incremento del 7% nella distanza dei primi vicini all'atomo di idrogeno.

Tutti i calcoli svolti sono stati fatti mantenendo fissa la dimensione della porzione di reticolo su cui si fa il calcolo (replicata poi in modo periodico dal programma di calcolo); ciò significa escludere la possibilità di dilatazioni globali del sistema. Ulteriori calcoli vanno fatti variando anche le dimensioni della porzione di reticolo, anche se è probabile che dilatazioni con concentrazioni così basse di idrogeno siano poco significative; nel caso di più atomi inseriti, però, anche le dimensioni del reticolo vanno ottimizzate.

3) Inserimento di due atomi di idrogeno

Diverse prove sono poi state fatte inserendo due atomi di idrogeno nel reticolo, ma i risultati sono ancora preliminari e di difficile interpretazione. I siti finali degli atomi dipendono dalle posizioni di partenza: a volte (quando le posizioni sono abbastanza distanti) i siti scelti sono tetraedrici o in qualche caso ottaedrici, ma quando gli atomi di idrogeno sono vicini spesso si sistemano in posizioni apparentemente casuali nella cella, fuori dai siti consueti.

Quando le posizioni iniziali distano meno di 2 ua, gli atomi di idrogeno sembrano respingersi; le distanze finali nei calcoli svolti risultano sempre maggiori di 3 ua. I due idrogeni non sembrano formare alcun legame tra loro all'interno del reticolo. Un test è stato fatto mettendo un idrogeno in un sito tetraedrico e un altro nel sito ottaedrico vicino, che hanno distanza simile al legame H–H nella molecola di idrogeno; tuttavia, anche in questo caso i due atomi si allontanano dai siti iniziali fino ad avere una distanza reciproca molto maggiore.

Ulteriore lavoro è necessario per ottenere un quadro più sistematico del comportamento di due atomi di idrogeno nel reticolo, considerando anche dilatazioni globali del sistema. In seguito, concentrazioni di idrogeno più alte saranno considerate.

11. COMPILAZIONE E TEST DI CODICI UTILIZZATI PER IL CALCOLO DELLA STRUTTURA ELETTRONICA, IL RILASSAMENTO DELLA STRUTTURA ATOMICA, LA DINAMICA MOLECOLARE

Michele Gusso

ENEA- FIM-MATCOMP

C.R. Brindisi

Introduzione

La prima fase dell' utilizzo della macchina CRESCO è consistita nella compilazione e test di alcuni codici usati nel campo della scienza dei materiali per il calcolo della struttura elettronica, il rilassamento della struttura atomica, la dinamica molecolare (ab-initio e classica).

I codici installati sono:

- SIESTA
- OpenMX
- ABINIT
- CPMD
- CP2K
- CASINO (Quantum Monte Carlo).

L' attività è quindi proseguita studiando, tramite CPMD (e negli ultimi mesi anche con cp2k), il seguente sistema materiale.

Interazione di un peptide con una superficie di grafene

I lavori pionieristici di Brown e Belcher e collaboratori hanno mostrato che è possibile sperimentalmente selezionare da miliardi di possibilità, sequenze di peptidi che si legano ad una particolare superficie di materiale inorganico. Si è così aperta la possibilità, da un parte di utilizzare sequenze di peptidi per riconoscere materiali inorganici, dall' altra di usare molecole biologiche come mattoni in applicazioni tecnologiche come la fotonica, l' elettronica, la catalisi, i sensori e l' immagazzinamento dell' energia.

Per spiegare i dati sperimentali e comprendere il tipo di interazione che si stabilisce tra materiale inorganico e molecola organica, sono necessari strumenti teorici e computazionali. Benché la modellizzazione delle strutture atomiche con potenziali classici permetta di selezionare un piccolo insieme di configurazioni più stabili, solo calcoli di struttura elettronica con metodi ab-initio possono fornire una informazione qualitativa e, a volte, quantitativa delle proprietà chimiche e fisiche del sistema materiale oggetto di studio.

Il peptide che si è studiato presenta la sequenza di aminoacidi HWSAWWIRSNQS per un totale di 209 atomi. La superficie di grafene e' rappresentata in una cella di dimensioni di $25 \times 25 \text{ \AA}$. Il numero totale di atomi del sistema da studiare è di 473 in una cella di dimensioni $25 \times 25 \times 17 \text{ \AA}$.

Considerazioni e Risultati

Una prima analisi è stata effettuata con potenziali tipo 'force fields' rilassando solo il peptide isolato. In seguito tramite il codice AutoDock (usando algoritmi genetici) si è proceduto ad individuare la conformazione di equilibrio del sistema peptide+grafene (vedi figura 11. 1).

Gli atomi del peptide più vicini al grafene sono atomi di idrogeno con distanze comprese tra 2.24 Å e 3.1 Å. Come detto in precedenza, per avere una conoscenza accurata delle caratteristiche chimiche-fisiche del sistema materiale che si sta studiando è necessario far ricorso a calcoli ab-initio di struttura elettronica e dinamica molecolare. A tal fine si è utilizzato il codice CPMD.

Un primo set di simulazioni (spesso eseguite con una struttura più piccola, ad esempio prendendo solo l' aminoacido triptofano) è stato necessario per scegliere il funzionale di correlazione-scambio più appropriato. Ci si è orientati verso i funzionali PBE. Analogamente con un altro set di simulazioni si è determinato un valore adeguato del parametro di cutoff della base di onde piane.

E' quindi stato eseguito il calcolo della densità elettronica, dell' energia totale e dello spettro dei livelli di Kohn-Sham dei seguenti sistemi: 1) grafene isolato; 2) peptide isolato; 3) sistema grafene con peptide come ottenute dalle simulazione effettuate con AutoDock.

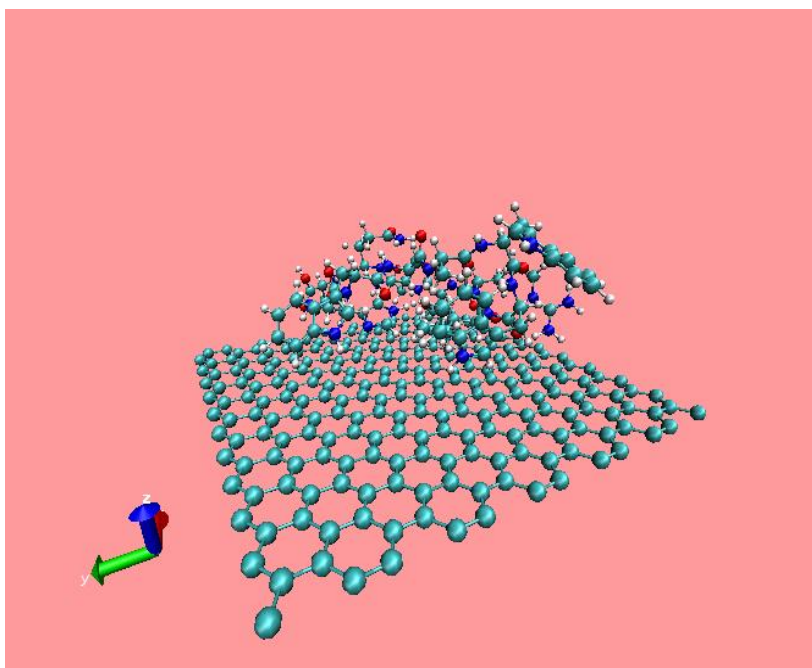


Figura 11.1: Conformazione di equilibrio del sistema peptide+grafene (usando algoritmi genetici).

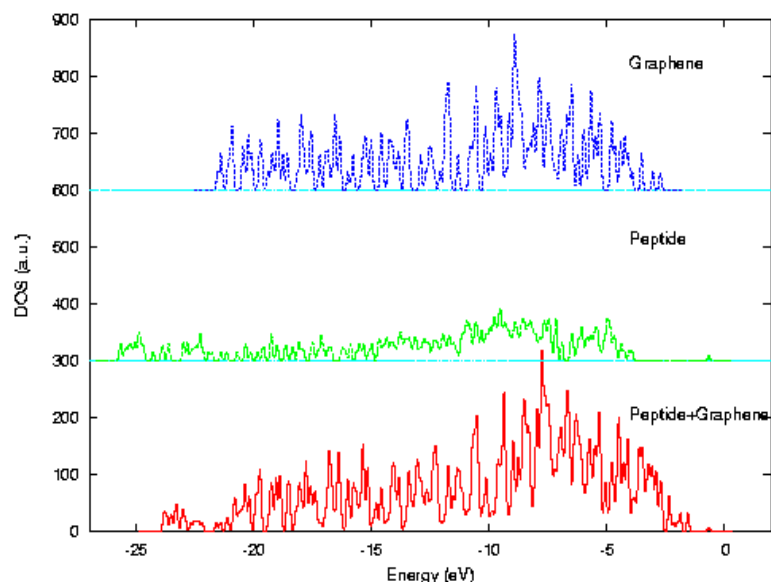


Figura 11.2: Spetto dei livelli occupati per il foglio di grafene ed il peptide isolati e per il sistema composto da grafene e peptide in adesione.

Si è ottenuto che l' energia totale di formazione della struttura è

$$E(\text{peptide+grafene})-(E(\text{peptide})+E(\text{grafene}))=-1.94\text{eV}$$

La figura 11.2 mostra lo spettro dei livelli occupati di Kohn-Sham (DOS) per il foglio di grafene ed il peptide considerati isolatamente e per il sistema composto dal peptide in adesione con il grafene. Confrontando questi spettri si osserva subito che il sistema peptide+grafene presenta una DOS molto diversa da quella che si ottiene sommando gli spettri dei due sistemi isolati. Questa differenza significativa, insieme al valore ottenuto per l' energia di adesione della molecola di peptide sul grafene, è una indicazione del fatto che probabilmente l' interazione tra la molecola organica ed il substrato inorganico non è costituito solo da forze di van der Waals.

L' analisi di Mulliken per il calcolo della distribuzione di carica elettronica negli atomi ha messo in evidenza uno spostamento di carica dal peptide verso il grafene pari a circa 0.4e.

Le figure 11.3 e 11.4 mostrano le isosuperfici di due stati di Kohn-Sham che sono delocalizzati sia sul peptide che sul grafene. Esistono circa un centinaio di stati che si estendono contemporaneamente sulla parte organica e inorganica del sistema.

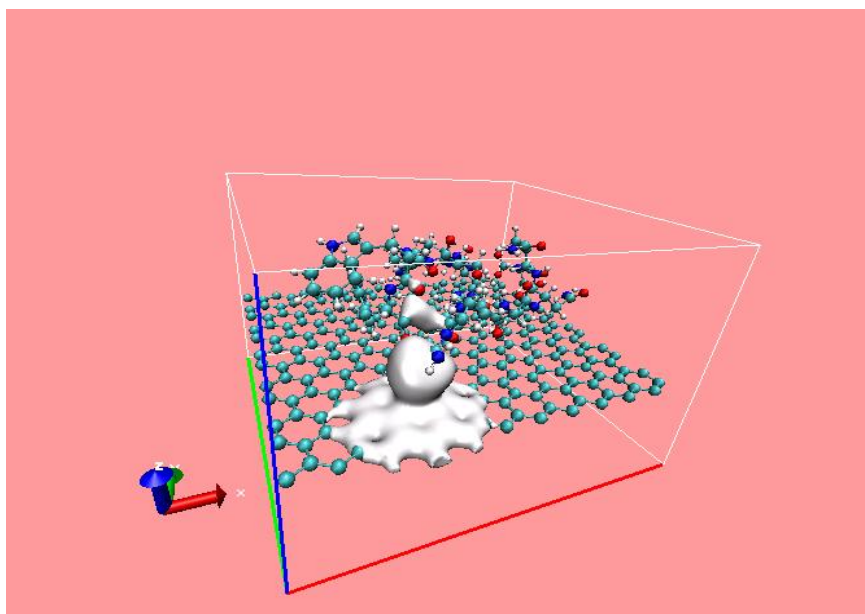


Figura 11.3

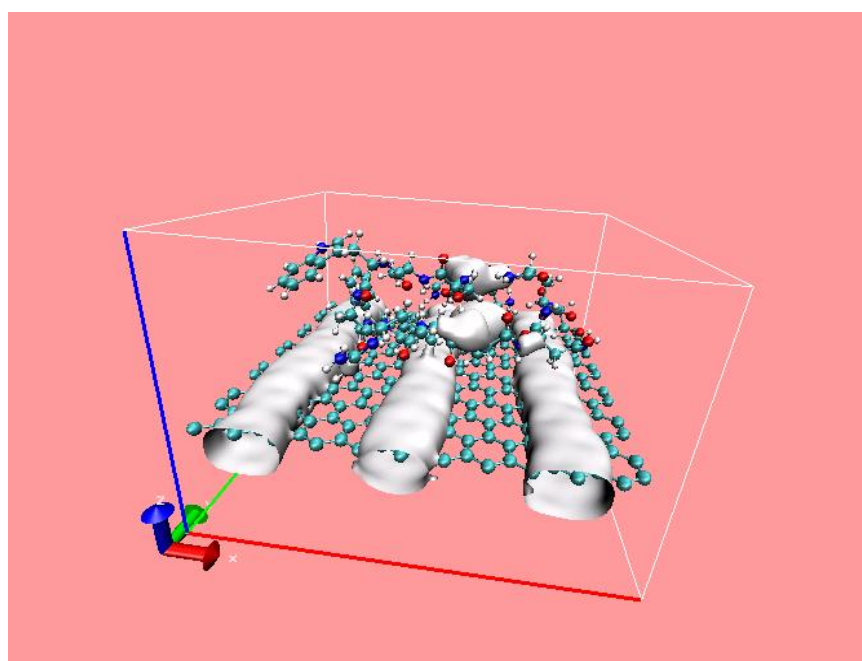


Figura 11.4

E' in corso un' analisi dei dati ottenuti per cercare di individuare il tipo di legame che si stabilisce tra le due strutture. Inoltre si sta studiando il sistema anche con il codice cp2k[4] in modo da rilassare ulteriormente la struttura e studiarne il comportamento in presenza di un solvente come l' acqua.

BIBLIGRAFIA

S. Brown, Nat. Biotechnol. **15**, 269 (1997).

S.R. Whalay, D.S. English, E. L. Hu, P.R. Barbara, and A.M. Belcher, Nature **405**, 665 (2000).

<http://www.cpmc.org>.

<http://cp2k.berlios.de>.

12. ANALYSIS OF LH LAUNCHER ARRAYS (LIKE THE ITER ONE) USING THE TOPLHA CODE ON CRESCO CLUSTER

Riccardo Maggiora

Politecnico di Torino (Dipartimento di Elettronica)

riccardo.maggiora@polito.it

TOPLHA: OBJECTIVES AND FORMULATION

The main objective for the development of TOPLHA (Torino Polytechnic Lower Hybrid Antenna) has been driven by the possibility to study, analyze and design realistic Lower Hybrid (LH) antenna geometries opening towards the curved toroidal chamber of the tokamak within a reasonable CPU time.

LH antennas are constituted of large arrays of open waveguides radiating toward plasma, which shape follows the tokamak first wall both poloidally and toroidally.

Our main concern has always been to include into the analysis the realistic 3D geometry of these antennas and an accurate plasma description.

TOPLHA is essentially based on the natural evolution of the approach adopted in TOPICA code. As done in TOPICA, the simulation environment is subdivided in two coupled region, namely a plasma region and a vacuum region.

In addition, observing that the various waveguides constituting the array are practically separated from each other and from the plasma, a new multi-cavity approach is introduced, leading to significant savings in terms of CPU and memory requirements.

In fact, by formally separating the structure's cavities with a number of mathematical surfaces called "apertures", the Method of Moments interaction matrix is block-wise sparse and, as a consequence, can be manipulated with a far higher numerical efficiency, by means of an out-of-core solution.

A considerable improvement respect to TOPICA is also the extension of the source description to the waveguide excitation, providing input parameters with respect to the dominant waveguide mode.

Finally, the plasma enters the formalism via a surface impedance matrix; presently, the adopted plasma model, i.e. the Finite Element Lower Hybrid Solver (FELHS), affords density and temperature profiles, and both the fast and slow wave contribution.

From the functional point of view, TOPLHA code is fully parallelized and clearly benefits from the possibility to run in huge parallel clusters, such as the CRESCO one.

In the last months we applied TOPLHA code to the analysis of a ITER relevant Passive-Active Multi-junction (PAM) antenna.

As previously mentioned, the entire study has been performed exploiting the computational resources of CRESCO cluster.

ITER-RELEVANT PAM ANTENNA

The reference ITER LH PAM antenna design described in consists in 4 identical blocks of 12 rows; each row contains 24 active waveguides, grouped into 3 modules independently fed. Each active waveguide is

58 mm by 9.25 mm, while passive waveguides are slightly smaller (58x7.25 mm); the working frequency is 5 GHz.

Permanent phase shifters determine a phase pitch of 270° between two adjacent active waveguides.

The analysis performed with TOPLHA code has been focused on a single module, i.e. on 8 active waveguides and 9 passive waveguides.

Besides, computations have been carried out for two plasma scenarios characterized by different density gradients (referred as λ), namely 2 mm and 2 cm.

We started our simulations with the reference flat design depicted in *figure 12.1A* the 8 active waveguides are shown in dark colors.

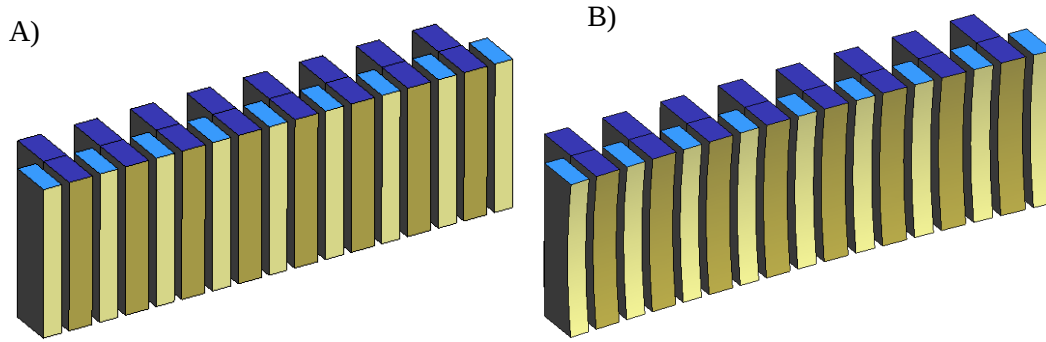


Figure 12.1: Reference (A) and curved (B) front part of the single module PAM antenna

A significant logical economy is achieved in using TOPLHA code only for the front part of the array, namely the region that comes into contact with plasma; the remaining portion of the PAM module (phase shifters, waveguide splitters, etc.), being entirely in vacuum, can be separately simulated, also with any commercial tool.

Eventually, the description of the two abovementioned halves, in terms of scattering parameters, is joined to compute the return loss at the beginning of the PAM module.

Figure 12.2 reports the return loss for a single PAM module, computed with different edge densities and the two density gradients introduced before.

Shows the related power spectra for $n_{\text{perp}}=0$ at the cut-off ($n_{\text{edge}}=3 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$) and for two additional edge density values, again for both density gradients. The power spectra are estimated assuming 20 MW of power delivered to the whole LH array, corresponding to approximately 139 kW to each PAM module.

After the preliminary analysis of the flat geometry, we then evaluated the influence of the curved shape of the antenna mouth on the input parameters.

We have considered both poloidal and toroidal curvature in order to accurately follow the ITER first wall profile, as depicted in Figure1B.

The return loss for a single PAM module (three geometries), evaluated with different edge densities and $\lambda=2 \text{ mm}$, is reported in figure, whence it can be observed that the effects of the curvature are generally more intense for higher edge density values, while they are mainly negligible at the cut-off.

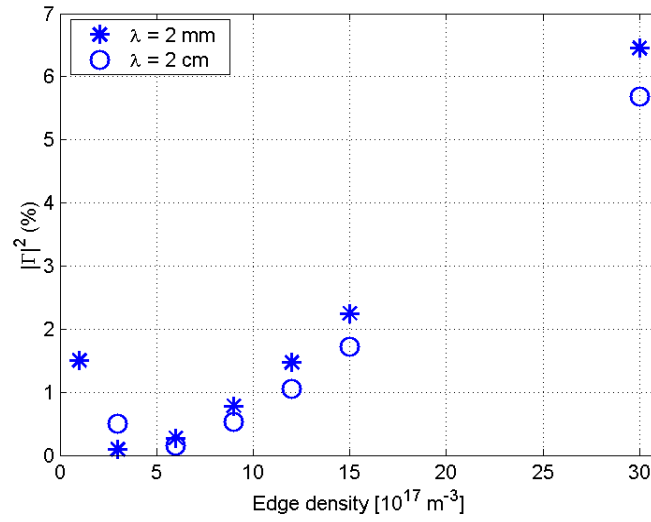


Figure 12.2: Return loss at the beginning of a PAM module, for $\lambda=2\text{mm}$ and $\lambda=2\text{cm}$.

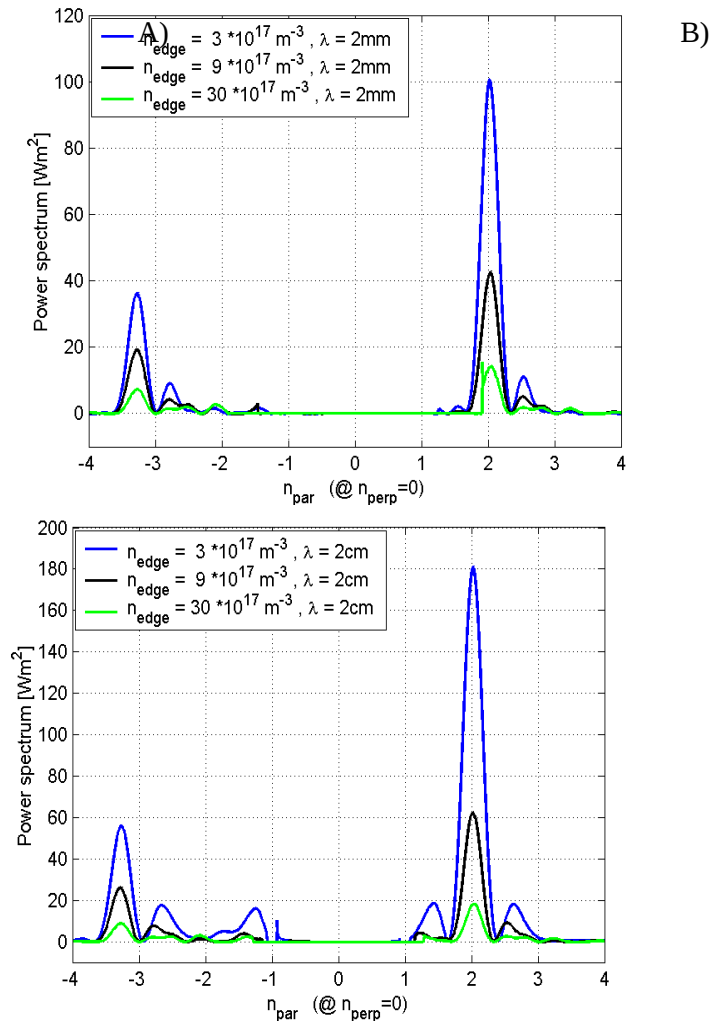


Figure 12.3: spectra for $\lambda=2\text{mm}$ (A) and $\lambda=2\text{cm}$ (B), with different edge densities.

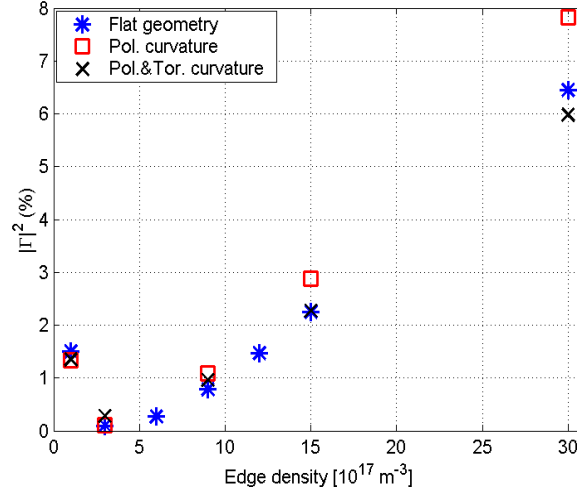


Figure 12.4: Return loss at the beginning of a PAM module, for $\lambda=2\text{mm}$, using different geometrical solutions for the front part of the antenna.

CONCLUSIONS

A detailed analysis of a single module of an ITER relevant PAM antenna has been carried out with TOPLHA code, demonstrating the capabilities of the code as a predictive tool for the design and operation of LH systems in fusion experiments.

In fact, provided plasma parameters variations, such as edge density or density gradient, TOPLHA is able to reliably predict antenna parameters variations.

The massive usage of CRESCO cluster resulted to be fruitful in speeding up the analysis work that, in absence of parallel computing resources, would have taken a much longer time.

Even though not reported here, TOPLHA can also compute the electric field distribution on the antenna mouth, in order to estimate hot spot locations and, consequently, suggest geometrical modifications to mitigate sheaths effects.

Additional work on this antenna is currently ongoing, i.e. the optimization of the passive waveguides dimensions, the modeling of arcs and the extension to several modules.

APPENDIX: ITER IC ANTENNA ANALYSIS

CRESCO parallel machine is the perfect candidate to host the design work on the ITER Ion Cyclotron (IC) antenna too, a challenging task that our research group will accomplish in the next years within the framework of the European Fusion Development Agreement.

As previously mentioned, the possibility to reliably simulate the detailed geometry of any antenna (LH or IC), given a realistic plasma description, and to obtain the actual antenna input parameters, is of paramount importance to evaluate and predict the system performances, and to assist in system operation.

Unfortunately, the first attempt to simulate the ITER IC antenna failed, essentially due to two factors: the large amount of contemporarily opened files and, second, their huge disk space requirement.

REFERENCES

- D. Milanesio et al., “TOPLHA: an accurate and efficient numerical tool for analysis and design of LH antennas”, AIP Conference Proceedings, 2007, vol. 933, pp. 301–304.
- O. Meneghini et al., “TOPLHA and ALOHA: comparison between Lower Hybrid wave coupling codes”, 50th Annual Meeting of APS-DPP, 2008.
- V. Lancellotti et al., *Nuclear Fusion* **46**, S476–S499 (2006).
- D. Milanesio et al., “A multi-cavity approach for enhanced efficiency in TOPICA”, submitted to *Nuclear Fusion*
- R. Bilato and M. Brambilla, “FELHS code for lower-hybrid launcher coupling and near fields”, 35th EPS Plasma Physics Conference, 2008, p.P5.094.
- www.cresco.enea.it
- F. Mirizzi, P. Bibet and S. Kuzikov, *Fusion Engineering and Design* **66-68**, 487–490 (2003).
- P. Bibet et al., “ITER LHCD Plans and Design”, 21st IEEE/NPS Symposium on Fusion Engineering, 2005.

13. SIMULAZIONI PER LO STUDIO DELLE PROPRIETÀ CONFORMAZIONALI DELL'ENZIMA GALATTOSIO-1-FOSFATO URIDILTRANSFERASI E DELLE VARIAZIONI CONFORMAZIONALI DI PEPTIDI DERIVATI DALL' α S2-CASEINA

Anna Marabotti

Laboratorio di Bioinformatica e Biologia Computazionale
Istituto di Scienze dell'Alimentazione (ISA)
CNR Avellino

ATTIVITÀ EFFETTUATE UTILIZZANDO CRESCO-ENEA

FINALITÀ DELLE RICERCHE IN CORSO:

Simulazioni di dinamica molecolare applicata allo studio di macromolecole biologiche (proteine e peptidi) di interesse medico/farmaceutico e collegate alle scienze degli alimenti.

Introduzione

Lo studio della variabilità conformazionale dei sistemi macromolecolari biologici quali proteine e peptidi è di grande interesse sia per conoscere le relazioni esistenti tra struttura, dinamica e funzione, sia per poter eventualmente predire come queste relazioni possono essere influenzate da variazioni a carico della struttura.

Tali variazioni possono avere un significato patologico, oppure essere appositamente introdotte per modificare le proprietà funzionali della molecola che si sta studiando.

L'importanza della comprensione a livello molecolare di questi fenomeni è enorme, in quanto da questi studi possono nascere ad es. molecole appositamente progettate tramite l'aiuto del computer e in grado di avere una rilevanza medico/farmaceutica o biotecnologica, riducendo la necessità di screening lunghi e costosi.

Nell'ambito degli interessi del Laboratorio di Bioinformatica dell'Istituto di Scienze dell'Alimentazione (ISA) del CNR di Avellino, le linee di ricerca che si sono giovate dell'accesso a CRESCO sono essenzialmente due, entrambe strettamente connesse sia all'ambito medico/biotecnologico, sia all'ambito

delle scienze dell'alimentazione: lo studio delle proprietà conformazionali dell'enzima galattosio-1-fosfato uridiltransferasi responsabile della malattia genetica metabolica galattosemia, e lo studio delle variazioni conformazionali di peptidi derivati dall' α S2-caseina ed aventi proprietà antimicrobiche.

In entrambi i casi, sono state effettuate simulazioni di dinamica molecolare, che richiedono elevate prestazioni di calcolo ed alto parallelismo, utilizzando il pacchetto di simulazioni GROMACS v. 3.3.1.

Questo programma consiste in un insieme di moduli che concorrono ad eseguire le simulazioni, ed è stato sviluppato prevalentemente per lo studio di sistemi biochimici come proteine e lipidi, ma può essere utilizzato anche per macromolecole non di natura biologica (es. polimeri).

Data la natura dei sistemi in studio, con centinaia di migliaia o addirittura milioni di atomi, GROMACS può essere usato per calcoli paralleli usando un protocollo MPI standard.

Dal 2001 l'intero pacchetto è distribuito sotto licenza GNU ed è liberamente scaricabile ed installabile su sistemi locali; un sito Web e una mailing list forniscono supporto agli utenti.

La versione attuale rilasciata dagli autori è la 4.0; per i calcoli qui descritti è stata usata la versione 3.3 presente su CRESCO.

Linea di ricerca 1

Studio delle proprietà conformazionali dell'enzima galattosio-1-fosfato uridiltransferasi responsabile della malattia genetica metabolica galattosemia.

L'enzima galattosio-1-fosfato uridiltransferasi è uno dei tre componenti della linea metabolica che si occupa della trasformazione dello zucchero galattosio in glucosio.

La perdita di attività di questo enzima dovuta a mutazioni presenti nel gene codificante e che si ripercuotono sulla struttura della proteina provoca una malattia genetica rara, la galattosemia classica, con conseguenze molto gravi sul corretto sviluppo dei neonati e con menomazioni che possono durare per l'intera loro esistenza.

Fino ad ora sono note più di 200 mutazioni di vario tipo, circa 150 delle quali responsabili della sostituzione di un residuo amminoacidico con un altro (mutazioni "missense") nella struttura dell'enzima.

Lo studio degli effetti strutturali di tali mutazioni è interessante sia per comprendere l'eziopatogenesi della malattia a livello molecolare, sia per ipotizzare eventuali strategie per contrastare tali effetti negativi e migliorare la salute e la qualità di vita delle persone affette da questa malattia.

Utilizzando GROMACS si è studiato il comportamento di questo enzima in solvente acquoso, allo scopo di verificare le variazioni conformazionali della proteina allo stato nativo. Utilizzando diverse tipologie di acqua per rappresentare al meglio il solvente e diversi protocolli di simulazione con diversi timescale, si è ottenuto il sistema di riferimento complessivo ottimale, che è formato da circa 77,000 atomi per un timescale di simulazione di 5 ns.

Con queste condizioni, le simulazioni vengono completate in circa 40 ore utilizzando 16 cores di CRESCO1 e inviando i job tramite il controllo della coda cresco_16h24. A titolo di paragone, la stessa simulazione effettuata su un cluster dual-core AMD Opteron (Gbit Ethernet) richiederebbe 10 giorni di calcolo e non può utilizzare più di due cores.

Gli sviluppi futuri di questa linea di ricerca riguardano la possibilità di simulare le variazioni conformazionali dei mutanti dell'enzima corrispondenti alle mutazioni più ricorrenti nei pazienti affetti da galattosemia classica, allo scopo di valutare se tali mutazioni possono in qualche modo alterare la dinamica della proteina e, quindi, la sua funzione o stabilità.

Linea di ricerca 2

Studio delle proprietà conformazionali di peptidi derivanti dall' α S2-caseina ed aventi proprietà antimicrobiche.

Un settore di grande interesse nella chimica degli alimenti, è l'identificazione, in matrici alimentari, di peptidi che mostrano attività biologica.

Questi peptidi sono nascosti ed inattivi all'interno della sequenza proteica, ma acquistano attività nel momento in cui vengono rilasciati in vivo durante la digestione o come conseguenza di processi proteolitici che hanno luogo durante la lavorazione degli alimenti.

Le proteine del latte, in particolare le caseine, rappresentano una fonte importante di sequenze funzionali di questo tipo: è noto che peptidi derivanti dall'idrolisi delle caseine possano esplicare un'azione diretta di inibizione nei confronti di microrganismi patogeni.

Lo scopo di questa linea di ricerca è quello di valutare le proprietà biologiche e strutturali di nuovi peptidi sintetici derivanti dalla α S2-caseina affiancando alle tecniche tradizionali anche simulazioni di dinamica molecolare per predire le relazioni struttura-dinamica-attività.

Tali simulazioni studieranno il comportamento dei peptidi naturali e modificati sia in sistemi acquosi, sia in doppio strato lipidico per mimare al meglio la membrana cellulare.

In questo modo, le caratteristiche di questi frammenti potranno essere valutate a livello molecolare e si potrà avere un quadro chiaro dell'effetto di ogni singola modifica sulla struttura, correlando quindi questo effetto con l'aumento o la diminuzione di attività biologica.

Le simulazioni finora effettuate su CRESCO sono state applicate al peptide nativo inserito in box di acqua.

Il sistema, molto più piccolo del precedente (circa 2,500 atomi complessivamente) è stato sottoposto a diverse simulazioni partendo da conformazioni molto diverse, per timescale molto più lunghe (fino a 40 ns), allo scopo di capire quali di queste stabilizzano meglio il peptide in soluzione. Utilizzando 8 cores Smp Intel Xeon, sono state necessarie 24 ore di calcolo per completare le simulazioni.

L'analisi dei risultati ha mostrato come la conformazione iniziale del peptide si mantenga nel corso delle simulazioni; di conseguenza l'adozione della corretta struttura del peptide è critica per comprenderne le funzioni.

Criticità e suggerimenti

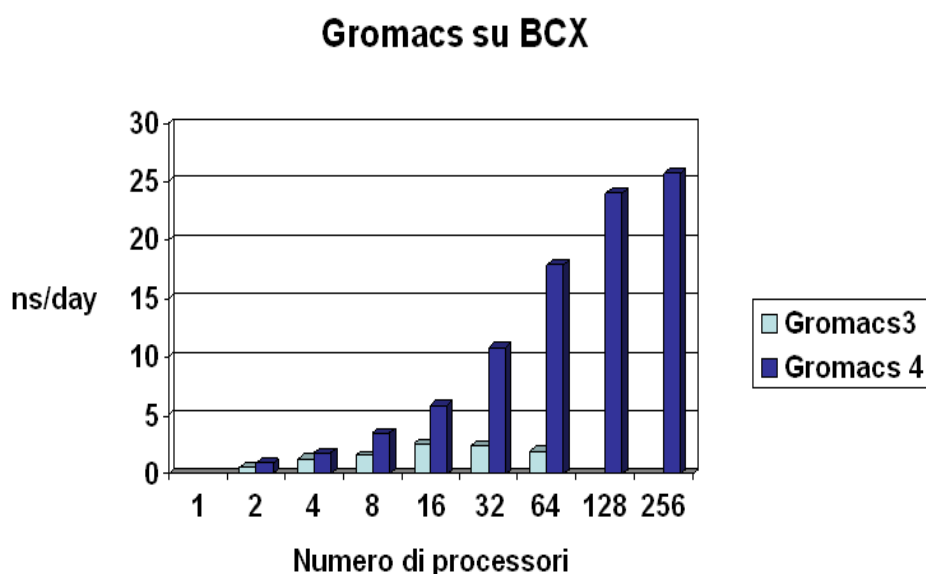
La versione 3.3 del programma GROMACS, per ammissione dei suoi stessi autori, non è perfettamente ottimizzata per applicazioni parallele.

Per questo motivo, recentemente è stata rilasciata una nuova versione stabile del programma (4.0) in cui l'algoritmo è stato completamente rivisitato allo scopo di migliorare le performances del programma su sistemi paralleli.

Tuttavia, su CRESCO tale nuova versione non è ancora disponibile. In effetti, alcune prove effettuate mostrano che la scalabilità della versione 3.3 su CRESCO è mediocre e non permette quindi di sfruttare al meglio le enormi potenzialità sia della macchina, sia della grid complessiva.

Prove effettuate sullo stesso sistema proteico (cfr. allegato) su macchine che hanno a disposizione sia la versione 3.3 sia la versione 4.0 mostrano gli enormi vantaggi dell'implementazione di GROMACS 4.0 in termini di scalabilità e performance.

Di conseguenza, sarebbe estremamente vantaggioso sostituire la vecchia versione di GROMACS 3.3 presente con la versione 4.0, per poter usufruire al meglio delle prestazioni della macchina e del software.



14. STUDIO AB INITIO DELLA DINAMICA ROTAZIONALE DELL'ACQUA SUPERCRITICA

Marco Masia

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

Via Vienna 2, 07100 Sassari

INTRODUZIONE

Durante il primo anno di attività di calcolo utilizzando l'infrastruttura HPC CRESCO, è stato portato avanti un progetto di ricerca riguardante la dinamica dell'acqua in condizioni supercritiche (SCW). Precedenti studi sulla SCW erano stati fatti per mezzo della Dinamica Molecolare classica, tecnica che ha permesso di approfondire molti aspetti sulle caratteristiche chimico-fisiche dell'acqua in queste condizioni termodinamiche. Il grande limite di questo approccio è che non si tiene conto della riorganizzazione istantanea della distribuzione elettronica delle molecole, dovuta alle interazioni tra le singole molecole. Simulazioni più raffinate richiedono l'uso di modelli classici in cui la polarizzazione dell'acqua viene considerata esplicitamente. Purtroppo, oggi, non esiste un modello di acqua che venga riconosciuto valido per le simulazioni di SCW. I limiti sono in particolare dovuti alla scarsa riproducibilità dei risultati sperimentali sulle proprietà dinamiche; per esempio nessun modello classico dell'acqua (polarizzabile e non polarizzabile) è in grado di riprodurre i dati sperimentali (NMR) sui tempi di rilassamento rotazionale della SCW a diverse densità. Mentre negli esperimenti si osserva un minimo nella dipendenza del tempo di rilassamento rispetto alla densità, le simulazioni classiche suggeriscono un andamento monotono crescente [Guardia et al., Phys. Rev. E 69, 011502 (2004)]. Il fallimento dei metodi classici di simulazione può essere causato da vari fattori, in primis dal fatto che i modelli classici sono generalmente ottenuti da un fit di parametri che garantisce buoni risultati dentro un range limitato di condizioni termodinamiche (in genere temperatura ambiente e densità 1 g/cm^3). Inoltre è stato dimostrato che i modelli polarizzabili dell'acqua spesso falliscono nel riprodurre caratteristiche essenziali come, per esempio, il tensore di polarizzabilità molecolare [Masia et al., J. Chem. Phys. 121, 7362 (2004)]. La polarizzazione dell'acqua può risentire dell'effetto della densità considerata. Infatti, nell'acqua supercritica, è possibile variare (è anche relativamente facile farlo sperimentalmente) la densità da 1 g/cm^3 a 0.01 g/cm^3 ; si passa da valori simili alla fase gas a valori tipici della fase condensata, dove potrebbe manifestarsi un damping delle interazioni di polarizzazione [Masia et al., J. Chem. Phys. 123, 164505 (2005)].

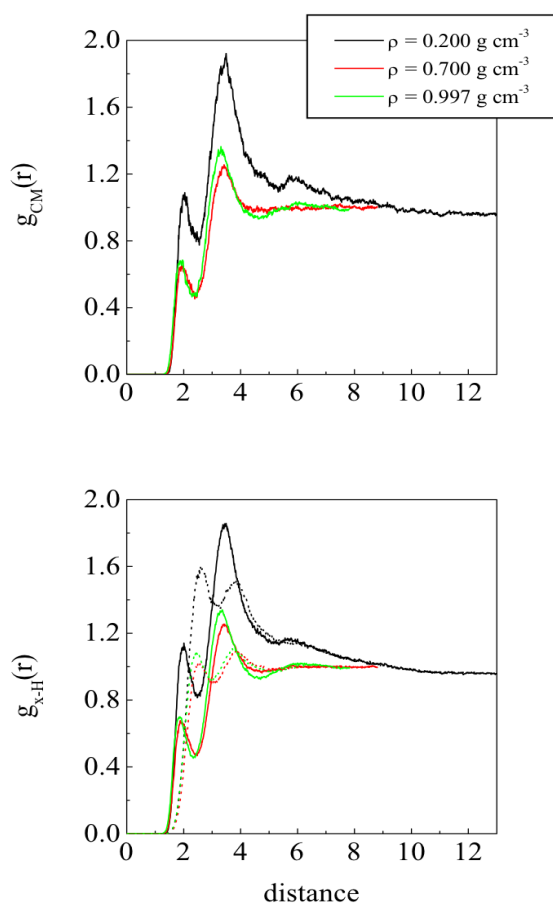
Esiste quindi il bisogno di chiarire quali sono gli effetti che causano il peculiare andamento dei tempi di rilassamento rotazionale nell'acqua supercritica. D'altra parte, è necessario lo sviluppo di

modelli classici dell'acqua che possano riprodurre le caratteristiche strutturali e dinamiche dell'acqua supercritica in un ampio spettro di densità. Mediante l'utilizzo di tecniche avanzate di Dinamica Molecolare *ab initio* col presente progetto ci proponiamo di perseguire i seguenti obiettivi:

1. studiare la dinamica dell'acqua supercritica alle temperature e densità studiate sperimentalmente;
2. tramite lo studio delle funzioni di Wannier [Masia, J. Chem. Phys. 128, 184107 (2008)], studiare il ruolo giocato dalla polarizzazione molecolare nella dinamica dell'acqua;
3. applicare il recente algoritmo del 'force matching' [Laio et al., Science 287, 1027 (2000); Izvekov et al., J. Chem. Phys. 120, 10896 (2004)] per parametrizzare un force field classico che meglio riproduca le caratteristiche dell'acqua supercritica.

RISULTATI

Per portare avanti il progetto di ricerca illustrato brevemente nell'introduzione, si è deciso di ricorrere al codice CP2k, che permette di fare simulazioni di Dinamica Molecolare *ab initio*. Grazie all'algoritmo QuickStep implementato nel codice è possibile fare simulazioni di dinamica



molecolare Born-Oppenheimer su sistemi relativamente grandi (ca 100-150 molecole di acqua) e scale di tempo che consentano di calcolare con un piccolo errore le proprietà dinamiche. Il vantaggio rispetto ad altri programmi di simulazioni *ab initio* è che i sistemi che si possono studiare sono abbastanza grandi. Lo svantaggio è che, trattandosi di un codice ancora in fase di sviluppo, questo è spesso instabile; per esempio si è visto che sul sistema CRESCO il 30% delle volte che è stato inviato un calcolo, i risultati non sono stati scritti sul disco; grazie alla collaborazione con i responsabili del sistema si è riusciti a risolvere questo problema dopo tre mesi di utilizzo. Sono stati fatti molti test variando la dimensione del sistema (numero di molecole di acqua) a densità 0.2, 0.7 e 0.997 g/cm³. Si è visto che il numero ottimale di processori è 32; nel caso di 128 molecole di acqua il codice impiega circa 400-500 secondi per ogni step di integrazione.

Figura 14.1: simulazioni di dinamica molecolare utilizzando CRESCO

Anche se può sembrare poco conveniente, test analoghi fatti su programmi che utilizzano l'algoritmo di Car-Parrinello per propagare il sistema (CPMD), hanno dato risultati molto peggiori, con tempi di calcolo che sono circa un ordine di grandezza più lenti rispetto a CP2k. Dopo i test dei primi mesi si è proceduto a studiare il sistema alle densità sopra citate. Fino ad ora sono stati raccolti circa 7 ps di dinamica per ogni sistema. Per studiare alcune proprietà dinamiche, le traiettorie dovrebbero essere propagate per almeno altri 8 ps. Nonostante ciò, risultati preliminari sulla struttura e sui tempi di riorientazione molecolare vengono mostrati: nella prima figura vengono riportate le funzioni di distribuzione radiale per i centri di massa, per O-H e H-H.

Di seguito vengono confrontati la distribuzione dei momenti dipolari ottenuti col metodo *ab initio* (tramite l'utilizzo delle funzioni di Wannier che permettono il calcolo del momento dipolare molecolare - informazione non accessibile dalla mera conoscenza della funzione d'onda del sistema) e col modello classico RPOL (sviluppato negli anni novanta da Dang e collaboratori e molto diffuso nella comunità delle simulazioni classiche). Il modello polarizzabile non è in grado di riprodurre il valore ottenuto col metodo *ab initio*, che genera distribuzioni più larghe e picchi più distanziati (figura 14.2).

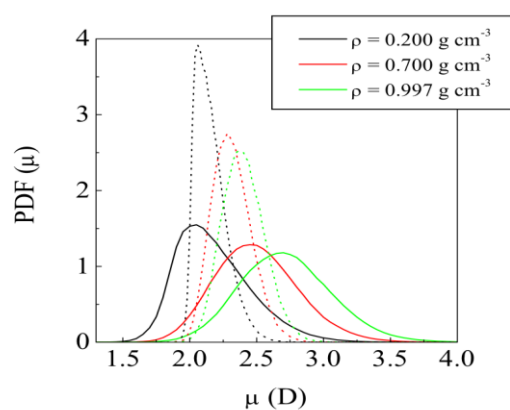


Figura 14.2

Questo supporta la necessità di sviluppare un modello classico polarizzabile che possa riprodurre le caratteristiche elettroniche (almeno per quanto riguarda la polarizzazione) ottenute col metodo *ab*

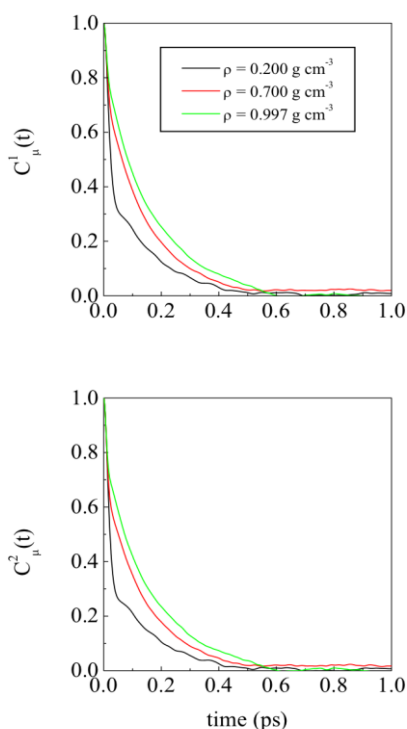


Figura 14.3

initio. In collaborazione con il Dr. Spangberg dell'Università di Uppsala abbiamo appena iniziato a studiare le traiettorie e fare un fit dei parametri usando l'algoritmo del force matching. Per poter avere maggior precisione e statistica, sarà necessario propagare la dinamica per tempi più lunghi. Infine vengono mostrati i risultati sulla dinamica rotazionale dell'acqua in condizioni supercritiche (figura 14.3). All'uopo sono state calcolate le funzioni di correlazione rotazionali (primo e secondo polinomio di Legendre) del vettore momento dipolare, e dei vettori O-H e H-H. Nella figura al lato vengono mostrati solo i risultati per il momento dipolare, quantità più facilmente accessibile sperimentalmente. Si può vedere che il tempo di rilassamento decresce con la densità. Una conclusione simile era stata trovata con i metodi classici ma non negli esperimenti.

Questo punto va approfondito: infatti il risultato si può spiegare solo con la presenza di errori o nelle simulazioni o nell'esperimento.

Anche in questo caso ci sarà bisogno di simulazioni più lunghe per ottenere una maggior statistica. Inoltre bisognerebbe esplorare il comportamento del sistema ad altre densità.

CONCLUSIONI E PROSPETTIVE FUTURE

In base a quanto esposto ed alla esperienza accumulata nell'uso del programma CP2k all'interno del sistema HPC CRESCO si prevede che lo studio completo del sistema SCW per il raggiungimento degli obiettivi esposti nell'introduzione richiederà almeno un altro anno di calcoli intensivi. In particolare si prevede di procedere come segue:

1. prolungare le dinamiche dei sistemi studiati fino ad almeno 15 ps: ciò consentirà di ottenere maggiori informazioni sulla dinamica del sistema (anche coefficienti di diffusione e spettri IR);
2. studiare sistemi ad altre densità intermedie (per almeno 15 ps): la parametrizzazione di un potenziale per l'acqua supercritica richiederà di effettuare il force matching a diversi valori di densità in modo da ottenere una equazione di stato per i parametri del potenziale.

Fino ad oggi son presenti pochissimi studi *ab initio* sulla SCW, e generalmente le scale di tempo sono molto più corte di quelle simulate nel presente studio. Questo è dovuto soprattutto al fatto che le tecniche di calcolo *ab initio* finora esistenti non permettevano lo studio di sistemi tanto grandi per scale di tempo nell'ordine della decina di picosecondi. Nonostante si richiedano ancora grosse risorse computazionali, il programma CP2k ha aperto le porte allo studio della SCW. Negli ultimi mesi sono state fatte delle modifiche all'algoritmo che risolve l'equazione di Schroedinger che permettono di accelerare ulteriormente i tempi di calcolo. A partire dal mese di luglio verrà aggiornato il codice in uso sul sistema CRESCO in modo da usufruire di questi vantaggi. Si prevede che, nel giro di un paio di anni, le simulazioni portate avanti all'interno di questo progetto di ricerca costituiscano un riferimento per la comunità teorica e sperimentale interessata alla SCW. E' inoltre di notevole importanza la possibilità di parametrizzare un nuovo potenziale per la SCW, cosa che, fino ad oggi, non è stata fatta nemmeno coi metodi tradizionali.

15. NUMERICAL CFD ACTIVITIES PERFORMED IN THE FRAME OF THE VEGA PROGRAM

F. Paglia

emanuele.lambiase@aviogroup.com

Different numerical CFD activities have been performed by AVIO using the GRID ENEA on the CRESCO platform during the last two years.

These activities have been performed in the frame of the VEGA program. VEGA is a European launch vehicle under development by the Prime Contractor ELV S.p.A. in the frame of an ESA Contract. It is a four stage launcher, dedicated to the scientific/commercial market of small satellites (300 ÷ 2500 kg) into Low Earth Orbits, with inclinations ranging from 5.2° up to Sun Synchronous Orbits and with altitude ranging from 300 to 1500 km.

The CFD activities have been focused on different and very challenging VEGA flight phases:

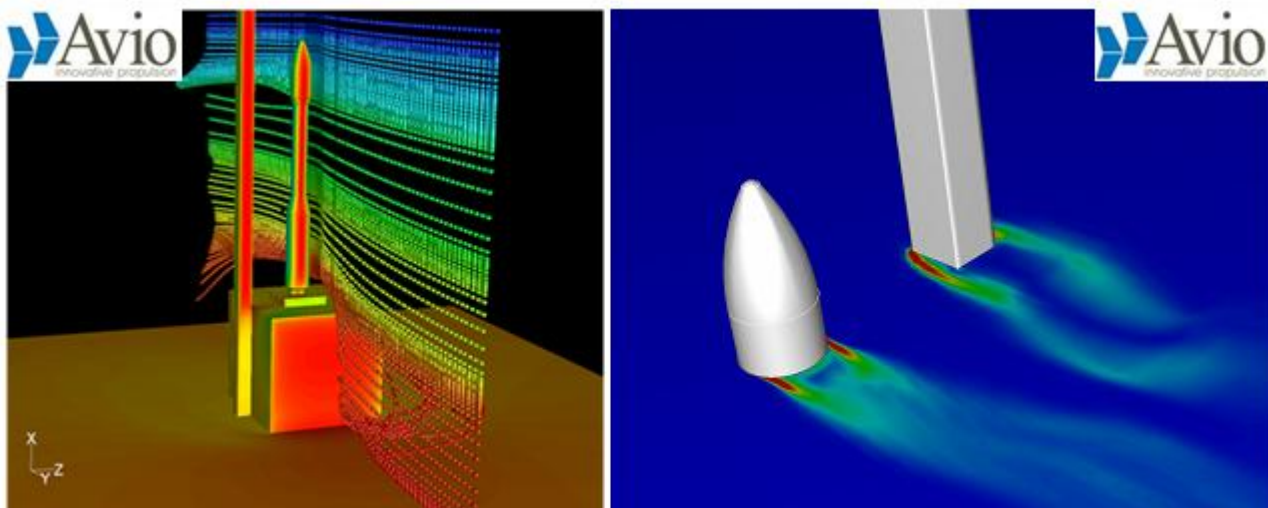
- Lift off
- Stage separation
- Motor radiative plume
- Motor internal fluid dynamic

In order to reach the appropriate numerical accuracy requested by these class of problems the computers available on the GRID ENEA (CRESCO) have been largely used.

Lift off phase

Activities performed in the frame of the lift off phase have been focused on the evaluation of the aerodynamic coefficients of the VEGA launcher during the standby on ground.

Taking into account that the fluid dynamic behavior in this phase is essentially unsteady, due to the presence of vortex shedding caused by the wind profile, it easy to understand how the CPU effort is very high.

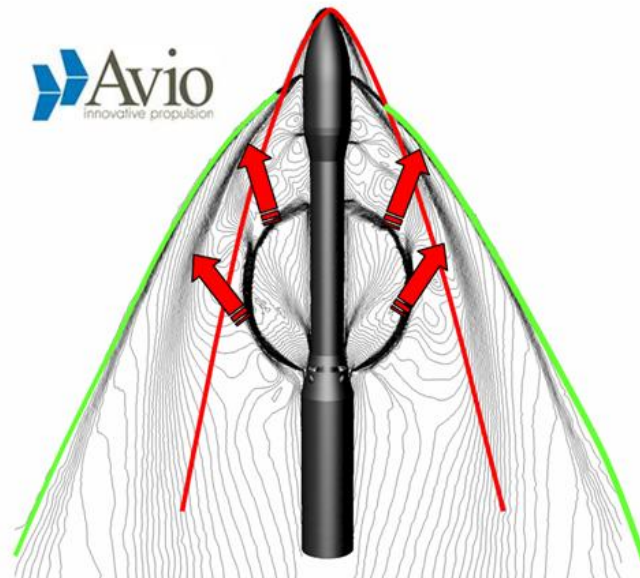


In order to study this phenomenon it has been adopted the GRID ENEA computing a set of viscous-unsteady CFD analysis halving the requested CPU time.

Computational cells	Benchmark hardware	ENEA hardware	Diff.
[-]	[gg]	[gg]	[%]
1800000	58	28	52%

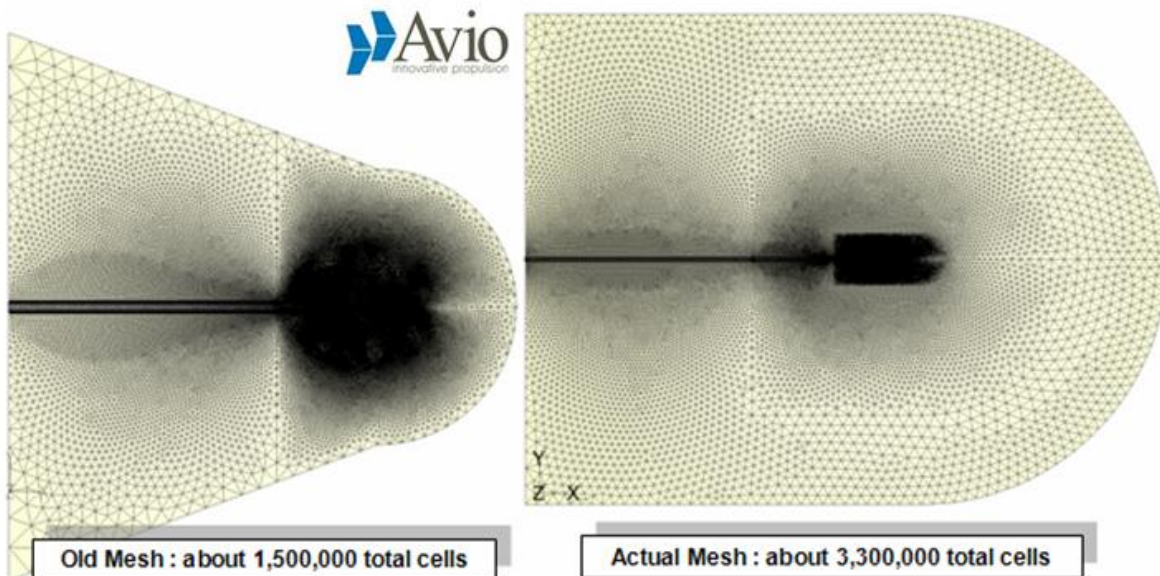
Stage separation

The external aerodynamics that develops around the launcher during the separation manoeuvre is outside the field of classical aerodynamics showing a completely different behaviour. This is due to the fact that the supersonic jet of the retro-rocket, flowing towards the opposite direction of the hypersonic mainstream strongly interacts with the external field generating a 3D shock wave which completely changes the aerodynamic of the two separating bodies.



Tanks to the use of GRID ENEA it has been possible to increase the grid size resolution obtaining a better evaluation of the flow filed around the launcher. The mesh has been doubled, computational domain has been largely increased maintaining a CPU time acceptable within the industrial constrains.

Using the CRESCO CPU resources it has been possible to obtain an advantage of about 45%.



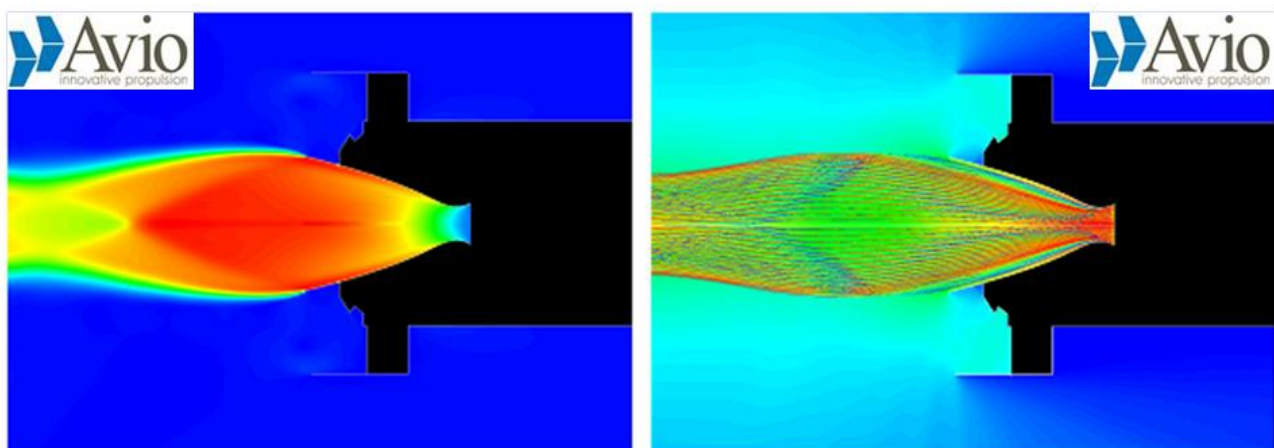
Computational cells	Benchmark hardware	ENEA hardware	Diff.
[-]	[gg]	[gg]	[%]
3300000	55	30	45%

Motor radiative plume

Solid rocket motor plumes are characterized by the presence of alumina particles dispersed in a gas continuous phase and for such reason particular attention has to be dedicated in the evaluation of the radiative heat fluxes.

The study of radiative plumes has been identified as dispersed flows, and this means that the continuous phase (gas) has to be studied using an eulerian approach based on the Navier Stokes equation while the computation of discrete particles (alumina) has to be based on applying Newton's 2nd law to a single particle in Lagrangian frame.

This class of problem is quite challenging and requires very performing computers in order to reach the appropriate numerical accuracy containing the CPU time, for such a reason numerical simulations have been performed using the grid ENEA.



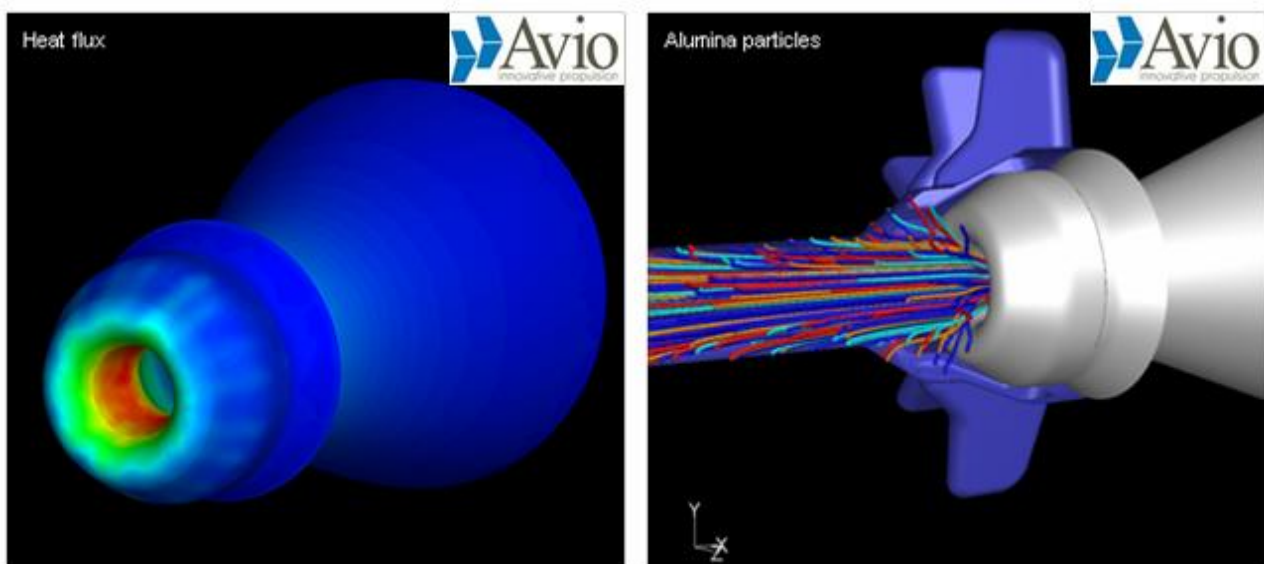
Computational cells	Benchmark hardware	ENEA hardware	Diff.
[-]	[gg]	[gg]	[%]
400000	15	7	53%

Internal fluid dynamic

An important aspects in the dimensioning of a Solid Rocket Motor is the evaluation of the internal heat fluxes acting on different parts of the motors and in particular on the nozzle.

Also in this case in order to correctly evaluate the thermal loads acting on the internal mechanical part of the Solid Rocket Motor a multiphase approach has been adopted in conjunction with the use of a fully 3D geometrical configuration of the Solid Rocket Motor.

Due to the use of a 3D geometrical configuration complicated by the physics of the problem only with the use of an appropriate computational platform (such as the one of CRESCO) is possible to respect the industrial and project constrains.



Computational cells	Benchmark hardware	ENEA hardware	Diff.
[-]	[gg]	[gg]	[%]
1500000	25	10	60%

16. SIMULAZIONE DI REAZIONI CHIMICHE CATALIZZATE DA METALLI DI TRANSIZIONE E DI DOCKING PROTEINA-PROTEINA

F. Ragone

Dipartimento di Chimica, Università di Salerno

Attività svolte dal gruppo del Prof. Cavallo

L'attività di ricerca effettuata dal gruppo di ricerca diretto dal Prof. Luigi Cavallo presso il Dipartimento di Chimica, Università di Salerno, si divide in due linee:

- 1) Simulazione di reazioni chimiche catalizzate da metalli di transizione;
- 2) Simulazioni di docking proteina-proteina.

1) Simulazione di reazioni chimiche catalizzate da metalli di transizione.

L'attività perseguita nell'ambito di questa linea è duplice. Inizialmente, sono stati effettuati calcoli statici tesi a caratterizzare dei complessi monometallici di idruri di Palladio neutri. Nello specifico, è attiva una collaborazione col gruppo di ricerca del Prof. Steven P. Nolan, University of St. Andrews, Scozia, che ha effettuato la prima sintesi di un complesso di questo tipo. Il complesso in questione, di formula generale $(\text{NHC})(\text{PR}_3)\text{Pd}(\text{H})_2$, dove NHC e PR_3 sono rispettivamente un ligando carbonico eterociclico e una fosfina aromatica. Complessi di questo tipo sono di estremo interesse per il potenziale utilizzo in catalisi di idrogenazione, e quindi è una tematica che riveste un'importanza sia da un punto di vista della ricerca di base che della ricerca con potenziali ricadute applicative. Tuttavia, la caratterizzazione di questo complesso da un punto di vista sperimentale è risultata estremamente difficile, in quanto non era possibile cristallizzare il complesso, e quindi non era possibile determinare se il complesso presentasse i due ligandi idrurici in posizione trans oppure cis. Calcoli quantomeccanici nell'ambito della teoria del funzionale della densità (DFT) effettuati dal gruppo del Prof. Cavallo, sfruttando la potenza di calcolo di CRESCO, hanno permesso di indicare chiaramente che non solo il complesso idrurico è stabile rispetto alla dissociazione di idrogeno molecolare, ma anche che la struttura migliore presenta i due ligandi idrurici in posizione cis. Successivi esperimenti effettuati dal gruppo del Prof. Nolan hanno effettivamente dimostrato la correttezza delle predizioni teoriche effettuate dal gruppo del Prof. Cavallo.

Il lavoro in questione è stato accettato per la pubblicazione nella rivista *Angewandte Chemie International Edition* (Activation of H₂ by Palladium(0): Formation of the Mononuclear Dihydride Complex trans-[Pd(H)₂(IPr)(PCy₃)], Fantasia, S.; Egbert, J.D.; Jurčík, V.; Cazin, C. S. J.; Jacobsen, H.; Cavallo, L.; Heinekey, D.M.; Nolan, S.P. *Angew. Chem. Int. Ed.* in stampa), ed ENEA ed il progetto CRESCO sono esplicitamente indicati nei ringraziamenti. Questo lavoro non ha richiesto tanto una grande potenza di calcolo, visto che il programma utilizzato girare efficacemente su massimo 8 cores, quanto la disponibilità pressoché continua di nodi di calcolo, in quanto l'interazione continua con il partner sperimentale richiedeva tempi brevi nella risposta. Si stima che tale attività ha richiesto circa 30,000 ore di calcolo.

Inoltre, sono stati effettuati studi di dinamica molecolare *ab initio* di reazioni di disattivazione di catalizzatori a base di Rutenio per la metatesi delle olefine. Questa è una reazione di enorme interesse sia nella ricerca accademica che in quella industriale. L'importanza di questa reazione è anche indicata dall'assegnazione del Premio Nobel per la Chimica ai Proff. Grubbs, Chauvin e Schrock nel 2005, proprio per la scoperta e lo sviluppo di questa reazione. Tuttavia, il potenziale di questa reazione non è stato ancora sfruttato in maniera adeguata, ed esistono notevoli margini di miglioramento sia in attività che stabilità dei catalizzatori. Proprio un aspetto di quest'ultimo problema è stato analizzato mediante l'utilizzo combinato di tecniche DFT statiche e dinamiche, lavoro svolto nell'ambito di un progetto finanziato dalla Comunità Europea nell'ambito del 7° Programma Quadro. In particolare, è stato investigato l'effetto disattivante del monossido di carbonio nei confronti dei catalizzatori di Grubbs di seconda generazione, di formula generica (NHC)(PR₃)Pd=CH₂. La caratterizzazione completa del meccanismo di disattivazione mediante calcoli di tipo statico, a partire dal precursore fino al prodotto di disattivazione, caratterizzato sperimentalmente, ha permesso di comprendere a livello molecolare i dettagli di questa reazione. Inoltre, viste le piccole barriere di attivazione in gioco, per tutti gli stadi della reazione, hanno suggerito di effettuare anche dei calcoli di dinamica molecolare *ab initio*, al fine di avere anche una caratterizzazione della dinamica del sistema. A questo fine sono state effettuate delle simulazioni di dinamica tipo Car-Parrinello, che richiedono l'esecuzione delle simulazioni su almeno 48 cores collegati tra loro da un network ad alte prestazioni. Queste simulazioni, che rappresentano lo stato dell'arte nel campo della simulazione della reattività chimica, sono state rese possibili grazie all'architettura di CRESCO, che unisce una enorme potenza di calcolo ad un network di connessione tra i vari servers estremamente performante, ad una grossa stabilità di tutta la piattaforma, in quanto il malfunzionamento di un solo nodo o di una sola connessione tra i vari nodi impedirebbe il funzionamento del programma utilizzato. In questo senso, la piattaforma CRESCO (intesa come hardware, software e gestione del tutto) si è dimostrata altamente performante, e tali simulazioni sono state condotte con successo. I risultati ottenuti sono stati riassunti in un lavoro accettato per la pubblicazione nella rivista *The Journal of the American Chemical Society* (Exploring the Reactivity of Ru-Based Metathesis Catalysts with a Π -Acid Ligand Trans to the Ru-ylidene Bond, Poater, A.; Correa, A.; Ragone, F.; Cavallo, L. *J. Am. Chem. Soc.* DOI: 10.1021/ja902552m).

Questo lavoro ha richiesto una notevole potenza di calcolo, sia in termini di disponibilità continua di nodi di calcolo per i numerosi calcoli di tipo statico (il programma utilizzato girare efficacemente su massimo 8 cores), sia in termini di numero di cores (tipicamente 48 per esecuzione) connessi da rete ad alte prestazioni, per le simulazioni di tipo dinamico. Si stima che tale attività ha richiesto circa 70,000 ore di calcolo.

2) Simulazioni di docking proteina-proteina.

L'attività svolta nell'ambito di questa linea di ricerca ha come obiettivo la caratterizzazione a livello molecolare dell'interazione proteina-proteina alla base della malattia celiaca. La celiachia è una intolleranza alimentare alla gliadina del grano ed a proteine ad essa correlate di notevole impatto socio-economico, basti pensare che in Europa colpisce circa l'1% della popolazione. Questo dato si traduce in Italia in una stima di circa 500.000 celiaci; di questi solo circa 50.000 risultano diagnosticati, a conferma che almeno l'80% è nell'attesa di diagnosi. Le maggiori cause delle mancate diagnosi sono da ricercare nella scarsa conoscenza della malattia e nella sua sintomatologia non sempre chiara ed evidente. La celiachia è classificata tra le malattie autoimmuni, in quanto caratterizzata da una cospicua risposta immune contro antigeni *self*. Il principale auto-antigene identificato è la transglutaminasi tissutale (tTG) presente nella mucosa intestinale.

La ricerca scientifica nel settore vede all'avanguardia mondiale l'Italia, e in particolare la Campania con l'istituzione di un master Universitario di II° livello su "La celiachia: dalla clinica al management", organizzato dalle Università Politecnica delle Marche e di Salerno, in collaborazione con l'Università del Maryland School of Medicine, Baltimore (USA), la Fondazione "Scuola Medica Salernitana" di Salerno e l'Associazione Italiana Celiachia. In questo ambito, i proponenti del presente progetto hanno avviato una collaborazione con il Prof. Daniele Sblattero (Università del Piemonte Orientale), il quale ha sequenziato e caratterizzano anticorpi anti-tTG isolati da pazienti celiaci. Nell'ambito di questa collaborazione sono state avviate simulazioni di docking proteina-proteina per arrivare ad una caratterizzazione a livello molecolare dell'epitopo alla base del riconoscimento, e quindi ad effettuare una caratterizzazione chimico-fisica dei residui chiave per l'interazione.

Sono state quindi avviate delle simulazioni di docking rigido tra modelli di anticorpi anti-tTG e strutture tTG al fine avere una prima indicazione su quali sono le zone dei due partners alla base del riconoscimento. Tali simulazioni sono estremamente costose da un punto di vista computazionale, in quanto una simulazione di docking tra due partners, senza informazioni di alcun tipo degli amminoacidi responsabile dell'interazione, richiede che venga esplorato in modo esaustivo lo spazio delle possibili conformazioni consistenti con detta interazione.

Queste simulazioni, che rappresentano lo stato dell'arte nel campo del docking proteina-proteina, sono state rese possibili grazie all'architettura di CRESCO e più in generale alla piattaforma ENEA-Grid. Infatti, per sua natura il problema è embarrassingly parallel, in quanto le singole prove di interazione, per un totale di circa un milione, possono essere effettuate in modo completamente indipendente l'una dall'altra. In questo senso, la piattaforma CRESCO e tutto il software di gestione delle code di sottomissione, si è rivelata uno strumento estremamente efficiente, che ha permesso di avviare in modo veloce simulazioni che altrimenti avrebbero richiesto tempi impraticabili.

I risultati ottenuti sono estremamente promettenti, ed hanno permesso di individuare la zona di interazione tra i due partners. Questo progetto è ancora da completare, e si prevede di passare ad un raffinamento dei modelli rigidi finora ottenuti mediante simulazioni nelle quali viene conferita flessibilità allo scheletro proteico dei due partners. Sebbene non ancora completato, questo progetto ha finora richiesto una potenza di calcolo decisamente notevole, stimabile in circa 90,000 ore di calcolo.

17. DISTRIBUTED COMPUTING ON THE ENEA GRID: APPLICATIONS IN ACOUSTICS AND IN NETWORK TRANSMISSION

M.C. Recchioni

Distributed computing on the ENEA Grid:
applications in acoustics and in network transmission

C.Dionisi, L.Fatone, F.Mariani, M.C.Recchioni, F.Zirilli

Three mathematical models concerning three different applications taken from science and engineering have been studied. These models have been solved using highly parallelizable numerical methods implemented on the ENEA Grid using distributed computing. In particular the HPC Cresco system has been used.

1. Acoustic obstacle scattering

We consider the following problems [1], [2], [3]:

Given an acoustic incoming plane wave, not necessarily time harmonic, propagating, with wave propagation velocity $c > 0$, in a homogeneous isotropic medium at equilibrium with no source terms present and an obstacle Ω compute the acoustic field scattered by the obstacle when hit by the incoming wave (passive obstacle).

Given an acoustic incoming plane wave, not necessarily time harmonic, propagating, with wave propagation velocity $c > 0$, in a homogeneous isotropic medium at equilibrium with no source terms present and an obstacle Ω , find a pressure current circulating on the boundary of Ω such that the acoustic field scattered by the obstacle when hit by the incoming wave is as small as possible (smart obstacle).

The obstacle Ω is assumed to be a bounded simply connected open set with locally Lipschitz boundary $\partial\Omega$ contained in the three dimensional real Euclidean space and to be characterized by a constant acoustic boundary impedance $\chi \geq 0$. The incoming wave $u^i(\underline{x}, t)$, $(\underline{x}, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$, is assumed to satisfy the wave equation (1) in $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$.

The obstacle $(\Omega; \chi)$ when hit by the incoming wave, generates a scattered wave $u^s(\underline{x}, t)$, $(\underline{x}, t) \in (\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}) \times \mathbb{R}$, solution of the following exterior problem for the wave equation:

$$\Delta u^s(\underline{x}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u^s}{\partial t^2}(\underline{x}, t) = 0, \quad (\underline{x}, t) \in (\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}) \times \mathbb{R}, \quad (1)$$

with the boundary condition:

$$-\frac{\partial u^s}{\partial t}(\underline{x}, t) + c\chi \frac{\partial u^s}{\partial \underline{n}(\underline{x})}(\underline{x}, t) = g(\underline{x}, t), \quad (\underline{x}, t) \in \partial\Omega \times \mathbb{R}, \quad (2)$$

where $g(\underline{x}, t)$ is given by:

$$g(\underline{x}, t) = \frac{\partial u^i}{\partial t}(\underline{x}, t) - c\chi \frac{\partial u^i}{\partial n(\underline{x})}(\underline{x}, t), \quad (\underline{x}, t) \in \partial\Omega \times \mathbf{R}, \quad (3)$$

the boundary condition at infinity:

$$u^s(\underline{x}, t) = O\left(\frac{1}{r}\right), \quad r \rightarrow +\infty, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (4)$$

and the radiation condition:

$$\frac{\partial u^s}{\partial r}(\underline{x}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial u^s}{\partial t}(\underline{x}, t) = o\left(\frac{1}{r}\right), \quad r \rightarrow +\infty, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (5)$$

where $\underline{x}=(x_1, x_2, x_3)^T \in \mathbf{R}^3$, the superscript T means transposed, $r=||\underline{x}||$ denotes the Euclidean norm of the vector $\underline{x}$, $\Delta = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ is the Laplace operator, $c>0$ is the wave propagation velocity and $O(\cdot)$ and $o(\cdot)$

are the Landau symbols. An obstacle $(\Omega; \chi)$ that when hit by the incoming wave u^i generates a scattered wave u^s solution of (1)-(5) is called passive obstacle. A passive obstacle is transformed in a smart obstacle changing the boundary condition (3), that is adding to (3) a new term representing the action of a suitable pressure current. The furtive obstacle scattering problem stated above can be reformulated as an optimal control problem for the wave equation. Under suitable assumptions, applying the Pontryagin maximum principle, the first order necessary optimality condition relative to the optimal control problem considered can be derived [2]. This necessary optimality condition is formulated as an exterior value problem for two coupled wave equations. Assuming that the incoming and the scattered fields and some auxiliary variables can be represented as superpositions of time harmonic waves, we reduce the solution of this exterior problem to the solution of a set of exterior problems for two coupled Helmholtz equations.

The algorithm proposed to solve (1)-(5) and its generalization used to solve the scattering problem for a smart obstacle is derived from a suitable reformulation of the “operator expansion method” developed in [1]. Specifically when we consider problem (1)-(5), the algorithm proposed assumes that the incoming wave and the scattered wave can be represented as a superposition of time harmonic plane waves and reduces the solution of the time dependent problem for the wave equation to the solution of a set of time harmonic scattering problems, that is to the solution of a set of exterior boundary value problems for the Helmholtz equation, one problem for each frequency in the spectrum of the incoming wave.

The solution of each exterior boundary value problem for the Helmholtz equation is approached representing the solution a single layer potential with a density (that must be determined) defined on the boundary of a suitable obstacle Ω_c contained in Ω . The algorithm determines the densities solving a set of integral equations defined on the boundaries of Ω_c and of a “reference” obstacle Ω_r .

The numerical difficulty of these exterior problems can be measured using the parameter RT defined as the ratio between the characteristic dimension of the obstacle and the wavelength of the time harmonic component of the acoustic incoming wave considered. The parameter RT is an a -dimensional quantity and large values of RT correspond to high frequency scattering, that is correspond to numerically difficult problems.

In the numerical experiments presented in [1], [2], [3], the ratios RT considered range in the interval $[3,100]$. This implies the use of high dimensional vector spaces to approximate satisfactorily the integral equations corresponding to the exterior problems for the Helmholtz equations. That is each integral equation after being discretized to be solved numerically becomes a large system of linear equations. Represented on a generic base the matrices that approximate the integral operators after the discretization will be dense matrices.

The solution of large dense linear systems adequate to discretize the scattering problems considered will become computationally (computing time and memory requirements) unaffordable even for moderate values of RT . To avoid this difficulty we represent the integral equations on a wavelet basis. After projecting on a finite dimensional subspace generated by a truncated wavelet basis the resulting linear system of equations can be approximated with a sparse linear system and can be solved numerically at an affordable cost.

The resulting numerical method has been implemented on the ENEA Grid [3], [4] and is able to deal with realistic acoustic scattering problems solving large (sparse) linear systems (up to approximately $5 \cdot 10^5$ (real)) unknowns and equations. These results shown in [1], [2], [3] are obtained using up to 1024 processors on the ENEA Grid. The computation of the elements of the coefficient matrices of the linear systems considered and several other aspects of the numerical algorithm proposed can be carried out as independent tasks allowing the development of an efficient solver for exterior boundary value problems for the Helmholtz equation, particularly well suited to be executed on a computing grid using distributed computing. The solution of the resulting sparse linear systems is done using parallel computing on the parallel machines present in the ENEA Grid. Several numerical experiments involving a simplified version of the NASA space shuttle have been performed (see [2], [3]). The reference surface $\partial\Omega_r$ and the internal surface $\partial\Omega_c$ have been obtained manipulating the 3D model of the NASA space shuttle.

2. Cascading blackouts in power transmission networks

In the last years the frequent and sometimes impressive electric current breaks registered around the world made urgent the problem of understanding the behaviour of the high voltage power transmission networks in critical conditions in order to characterize adequate operations to protect their functions. Unfortunately the structural complexity of the real power transmission networks, due to the high dependence between the components of the network, complicates the study of their behaviour and is the main cause of their vulnerability. In fact, due to this interdependence, local overloads of lines or local failures of components can generate cascades of (electric) current breaks that, in extreme cases, can cause the fall of the whole network. We name this phenomenon: "cascading blackout".

The blackout can be caused by inefficiency of the power transmission network or by excessive electric current demand from the loads that exceeds the network capacity. The cascading blackout is a sequence of events characterized by line failures and/or load sheds.

We represent a power transmission network as an undirected graph, that is as a set of nodes connected by branches (see [5], [6] for further details).

The nodes can be classified in three categories: generator nodes, representing wirings generating electricity, load nodes, constituting the load of the network, and junction nodes. The branches connecting the nodes represent the network transmission lines where the electric power flows. The lines have their own characteristic admittance, small values of the admittance correspond to small power flow through the lines.

Let N be the number of nodes in the network considered and for $k, m \in \{1, 2, \dots, N\}$ let (k, m) be the line connecting the node k to the node m , in order to describe the electric power flow in the network the following quantities are considered:

$y_{k,m} = g_{k,m} + ib_{k,m}$ the admittance associated to the line (k, m) , where i is the imaginary unit, $g_{k,m}$ and $b_{k,m}$ are, respectively, the conductance and the susceptance of the line (k, m) ,

P_k^G the upper limit of the real power generated at the node k ,

$P_k = P_k^G + P_k^L$ the active power injected into the node k , where P_k^G and P_k^L are, respectively, the real power generated and the real power demanded by the node k ,

$F_{k,m}$ the power flowing through the line (k, m) ,

$F_{k,m}$ the upper power flow limit of the line (k, m) ,

$PD = \sum_{k=1}^N P_k^L$ the total load power demand,

$PC = \sum_{k=1}^N P_k^G$ the total network capacity,

$V_k = |V_k|(\cos\theta_k + j\sin\theta_k)$ the complex voltage at node k .

Assuming assigned the network parameters mentioned above, in order to represent the power flow through the network, we solve the DC (Direct Current) optimal power flow problem, that consists in finding the vectors $PG = (P_1^G, P_2^G, \dots, P_N^G)$ and the corresponding voltage angles $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N)$ that minimize the following cost function:

$$\Phi(P_1^G, P_2^G, \dots, P_N^G) = \sum_{k=1}^N P_k^G - W \sum_{k=1}^N P_k^L \quad (6) \text{subject to the constraints:}$$

$$P_k^G - P_k^L = \sum_{m=1, m \neq k}^N F_{k,m}, \quad F_{k,m} = -b_{k,m}(\theta_k - \theta_m), \quad k, m = 1, 2, \dots, N, \quad (7)$$

$$|F_{k,m}| \leq F_{k,m}, \quad 0 \leq P_k^G \leq P_k^G, \quad \theta_1 = 0, \quad k, m = 1, 2, \dots, N, \quad (8)$$

where W is a real positive constant representing a cost associated to the load nodes (we choose $W=100$). The optimal DC power flow model, describes the network behaviour in steady state regime when the values of the parameters characterizing the model (the load power vector PL , the generators and the lines capacities, the modulus of the generators voltages and the lines admittances) are assigned.

Changes in the parameter values vary the network behaviour eventually causing blackouts. We simulate the cascading blackout dynamics resulting as a consequence of variations of the total load power demand PD assuming assigned the values of the remaining parameters.

As the total load power demand PD grows, the solution of the optimal DC power flow problem goes through some changes. The blackout happens when the DC optimal power flow problem (6)-(8) becomes unfeasible. In this case it is necessary to shed loads and/or to disconnect lines in the attempt of restoring feasibility of the model and in this way a new problem is formulated. If the new problem is also unfeasible, we continue to disconnect lines and/or to shed loads following some simple rules specified in [5] and [6], until we find a feasible problem and finally we solve the resulting feasible problem. This sequence of events simulates the blackout cascade and mathematically corresponds to the formulation and the solution of a sequence of constrained optimization DC problems. That is we simulate with a numerical scheme the sequence of events that generates a cascading blackout.

3. The traffic congestion phenomenon on complex networks

We study the congestion phenomenon for the traffic of data packets in transmission networks as a function of the topology and of the network load. In particular analogies with the phase transition phenomenon in statistical mechanics are studied. Two types of traffic are considered: homogeneous traffic, that is the case when one kind of data packets is moving on the network, and heterogeneous traffic, that is the case when more than one kind of data packets is moving on the network. The heterogeneous traffic case studied consists in the flow on the network of three kinds of data packets. We summarize only the results obtained in the heterogeneous traffic case. Similar and somehow simpler results are obtained and presented in [7] for the homogeneous traffic case. A capacity is associated to the branches (lines) of the network that is, the transmission network is modelled as a weighted graph. The networks considered have complex topologies. The traffic management rules are given. For traffic management rules we mean the set of rules that are used to determine the traffic flow at the nodes where more than one data packet is waiting to be directed. We devote our attention to transmission networks that have the small world property and to routing strategies that assign different priorities to the different kinds of data packets. The behaviour of these networks is compared to the behaviour of a simpler kind of networks called (modified) lattice networks. The source node and the destination node of the data packets travelling on the network are supposed to be distinct and are obtained sampling a random variable uniformly distributed on the set of the couples of (distinct) nodes of the graph representing the network. A data packet moves from a node to a node adjacent to the node where it is in a time unit. The number M_i of packets of kind i generated in the network in a time unit is supposed to be described by a Poisson random variable with mean λ_i , $i=1,2,3$. Note that $i=1,2,3$, corresponds to the heterogeneous traffic case considered (i.e.: there are three kinds of data packets travelling on the network), and that the case of homogeneous traffic corresponds to $i=1$ (i.e.: there is only one kind of data packets travelling on the network). For $i=1,2,3$, the mean load of kind i packets generated in the time unit, λ_i is chosen to be $\lambda_i = \beta_i \lambda$, where λ is a real positive parameter, $\beta_i \geq 0$ is a given constant and we assume that $\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 = 1$. The congestion phenomenon is studied in stationary conditions and is recognized through the behaviour of two quantities related to the traffic properties. That is, for $i=1,2,3$, the following quantities are considered: the mean travel time t_{Mi} of the data packets of kind i and the mean number N_{Li} of packets of kind i that have not reached their destination and are travelling on the network.

Note that when the traffic is not congested in stationary conditions for $i=1,2,3$, we have that the quantities time t_{Mi} and N_{Li} are independent of time and that they are increasing functions of the network loads λ_j , $j=1,2,3$.

Given the network topology, the traffic management rules and the constants β_j , $j=1,2,3$, the study of the quantities N_{Li} and t_{Mi} , as a function of λ , made through the use of numerical simulations shows that N_{Li} and t_{Mi} have a jump for a given value of λ , let us say $\lambda=\lambda^*_i$, $i=1,2,3$. Note that, when say $\lambda>\lambda^*_i$ strictly speaking N_{Li} and t_{Mi} do not have a stationary value (in time) anymore and that in this case they diverge when time increases, $i=1,2,3$. For $i=1,2,3$, the value λ^*_i is called critical value of the load for the traffic of kind i data packets, and it divides (for the traffic of kind i data packets) the zone of congested traffic ($\lambda_i=\beta_i\lambda>\beta_i\lambda^*_i$) from the zone of free traffic ($\lambda_i=\beta_i\lambda<\beta_i\lambda^*_i$).

1. Acoustic obstacle scattering

The HPC Cresco system has been widely used to compute the scattered field in high frequency and to study the parallel performance of the algorithm on test problems. An example of the “parallel” performance of the algorithm developed is shown in *Table 1*.

Number of processors	Execution time (in seconds)
128	3941.26
256	2056.03
512	1035.16
1024	536.52

Table 1 : Execution time versus number of processors

Several animations and virtual reality applications concerning the numerical experiments discussed here and in [3] are shown in the website www.econ.univpm.it/recchioni/scattering/w12/. A more general reference to the work of some of the authors and of their coauthors in numerical scattering is the website www.econ.univpm.it/recchioni/scattering.

2. Cascading blackouts in power transmission networks

The particular case of the Italian high voltage power transmission network has been studied and the simulations needed to approximate the blackout size probability density function have been obtained with a FORTRAN code running on the ENEA Grid. These simulations are run using distributed computing, that is running clusters of hundreds of independent jobs on the grid.

The Italian high voltage power transmission network is represented as an undirected graph constituted of $N=310$ nodes, with $N_G=97$ generator nodes, $N_L=163$ load nodes and $N_J=30$ junction nodes, and $L=361$ lines. Note that we consider junction nodes as load nodes with power load smaller than $10^{-6} MW$.

In this network there are 14 lines that are double lines (i.e. there are two lines joining the same two nodes). We substitute the double lines joining the corresponding nodes with a single line whose admittance is given by the sum of the admittances of the lines constituting the double line. Therefore the total number of lines in the network that we study is equal to $M=361-14=347$. The website <http://www.ceri.uniroma1.it/ceri/zirilli/w1> contains some auxiliary material including animations that helps the understanding of the phenomena studied.

3. The traffic congestion phenomenon on complex networks

Extensive traffic simulations (carried out using a parallel MPI-code on HPC Cresco system [7]) on the networks considered are used to study the behaviour of the critical values $\lambda=\lambda^*_i$, $i=1,2,3$, as a function of the topology and of the load of the network.

In particular we study the congestion phenomenon on two networks: Inet 3037 and a modified rectangular lattice. Inet 3037 is a network with 3037 nodes that is supposed to reproduce the topological properties observed experimentally in Internet and is generated using the software package Inet 3.0. Inet 3037 has the small world property. The modified rectangular lattice that we consider is a simple modification of a rectangular lattice, has the same number of nodes than Inet 3037 and does not have the small world property. Our analysis starts from the observation that the complex networks, that is the networks having the small world property, and the lattice networks behave very differently with respect to the congestion phenomenon. In fact let us consider, for a moment, homogeneous traffic on networks where all the lines have the same capacity it can be seen that a network having the small world property in the free traffic region is much more efficient than a lattice network of similar “size” when, for example, we use the travel time of data packets to measure efficiency.

However when the network load increases a network with the small world property reaches the congested regime for smaller values of the load than a lattice network of similar “size”. When we consider heterogeneous traffic and networks with lines of different capacities this fact becomes manifest in a more subtle way but it remains true. Having this in mind we define a transformation depending on a parameter $\alpha \in [0,1]$ that maps a network having the small world property ($\alpha=0$) into a (modified) lattice network of similar “size” ($\alpha=1$) having the same number of nodes. This map changes the weight of the branches of the graph having the small world property to avoid the congestion of some branches. Using this transformation we compare the behaviour of Inet 3037 ($\alpha=0$) to the behaviour of the modified rectangular lattice ($\alpha=1$) mentioned above. Given the constants β_j , $j=1,2,3$, we study the critical values of the parameter λ , that is the values λ^*_i , $i=1,2,3$, as a function of the parameter $\alpha \in [0,1]$. This study suggests how to change the network topology in order to alleviate the congestion phenomenon [7]. Some analogies between the congestion phenomenon and the phase transition phenomenon studied in statistical mechanics are studied.

Reference

- [1] M. C. Recchioni and F. Zirilli, The use of wavelets in the operator expansion method for time dependent acoustic obstacle scattering, *SIAM J. Sci. Comput.*, 25, (2003), pp. 1158-1186.
- [2] S. Migliori, G. Bracco, L. Fatone, M. C. Recchioni and F. Zirilli, A parallel code for time dependent acoustic scattering involving passive or smart obstacles to appear in *The International Journal of High Performance Parallel Computing and Applications*.
- [3] L. Fatone, G. Rao, M. C. Recchioni, F. Zirilli, High performance algorithms based on a new wavelet expansion for time dependent acoustic obstacle scattering, *Communications in Computational Physics*, 2(6), (2007), pp. 1139-1173.
- [4] S. Migliori, G. Bracco, C. Dionisi, F. Mariani, M. C. Recchioni, F. Zirilli, Parameter choice models for two codes running on the ENEA grid , Report ENEA, 2007
- [5] A. Farina, A. Graziano, F. Mariani, F. Zirilli, Probabilistic analysis of failures in power transmission networks and ``phase transitions": a study case of an high voltage power transmission network, *Journal of Optimization Theory and its Applications*, 139(1), (2008), pp. 171-199.
- [6] C. Dionisi, F. Mariani, M.C. Recchioni, F. Zirilli, Blackouts in power transmission networks due to spatially localized load anomalies, to appear in *Proceedings Critis'08, 3rd International Workshop on Critical Information Infrastructures Security*, Frascati, Roma, Italy, October 2008.
- [7] A. Farina, A. Graziano, F. Mariani, M.C. Recchioni, F. Zirilli, Homogeneous and heterogeneous traffic of data packets on complex networks: the traffic congestion phenomenon, in preparation.

18. IMPLEMENTAZIONE DELLA COMPONENTE OCEANICA DEL MODELLO CLIMATICO REGIONALE PROTHEUS

G. Sannino

ENEA- ACS-CLIMMOD

C.R. Casaccia

Implementazione della componente oceanica del modello climatico regionale Protheus

Recentemente l'unità di modellistica oceanografica del Dipartimento ambiente dell'Enea (CLIMMOD) ha sviluppato un modello climatico a scala regionale per la regione Mediterranea (*figura 18.1*). Il modello, che è stato chiamato Protheus, può essere considerato il primo strumento capace di prevedere, con sufficiente dettaglio spaziale e temporale, il clima sulla regione mediterranea.

Il nucleo principale del sistema predittivo Protheus è costituito da due modelli numerici: uno che simula la dinamica dell'atmosfera ed il suolo, ed uno che simula la dinamica del Mar Mediterraneo. I due modelli sono accoppiati dinamicamente per mezzo di un interpolatore capace di scambiare le necessarie informazioni tra i due modelli attraverso il protocollo MPI. I due modelli che compongono Protheus sono stati implementati separatamente. In particolare il modello del Mar Mediterraneo è stato interamente sviluppato e testato sul sistema di calcolo CRESCO presente all'Enea di Portici.

Il modello di circolazione del Mediterraneo (MedMIT), il cui dominio computazionale è mostrato in *figura 18.2*, è basato sul modello di circolazione generale MITgcm sviluppato presso il dipartimento di fisica terrestre del MIT di Boston.

MedMIT ha una risoluzione spaziale di $1/8^\circ \times 1/8^\circ$ e 42 livelli verticali. Il numero totale di punti di griglia è $400 \times 120 \times 42$. MedMIT è stato eseguito in parallelo, mediante il protocollo MPI, sul sistema CRESCO; in particolare il modello è stato decomposto in 200 sottodomini delle dimensioni 20×12 . La messa a punto del modello ha richiesto un lungo lavoro preliminare durante il quale il modello è stato eseguito in diverse configurazioni fisiche. Al termine di questa prima fase il modello è stato validato attraverso il confronto con i dati sperimentali (Sannino et al., 2009a) ed inserito nel modello climatico. La validazione del modello MedMIT è risultata sostanzialmente ottima. MedMIT ha mostrato di essere in grado di riprodurre accuratamente la circolazione termalina principale del Mediterraneo per il clima presente.

Al fine di ottenere una descrizione più dettagliata della dinamica dello Srtetto di Gibilterra e per dimostrare come questa abbia un'influenza sostanziale sulla circolazione termalina del Mediterraneo, la versione originaria MedMIT ha subito successivamente delle modifiche. A tale scopo è stato sviluppato per MedMIT un modulo per il "grid-refinement" a due vie (Sannino et al., 2009b).

In altri termini è stato sviluppato un driver capace di mettere in comunicazione due diversi modelli oceanografici: MedMIT ed uno specifico, a più alta risoluzione spaziale ($1/24^\circ \times 1/24^\circ$), per la regione dello stretto di Gibilterra (figura 18.3). Oltre a mettere in comunicazione i due modelli attraverso il protocollo MPI, il driver esegue anche tutte le necessarie interpolazioni spaziali e temporali dei campi dinamici dei due modelli. Il nuovo modello è stato utilizzato per simulare il clima presente ed i suoi risultati sono stati confrontati con quelli prodotti dalla prima versione. Dal confronto è emerso che la migliore descrizione della dinamica dello Stretto si è tradotta in una migliore rappresentazione dell'intera circolazione termoalina del Mediterraneo.

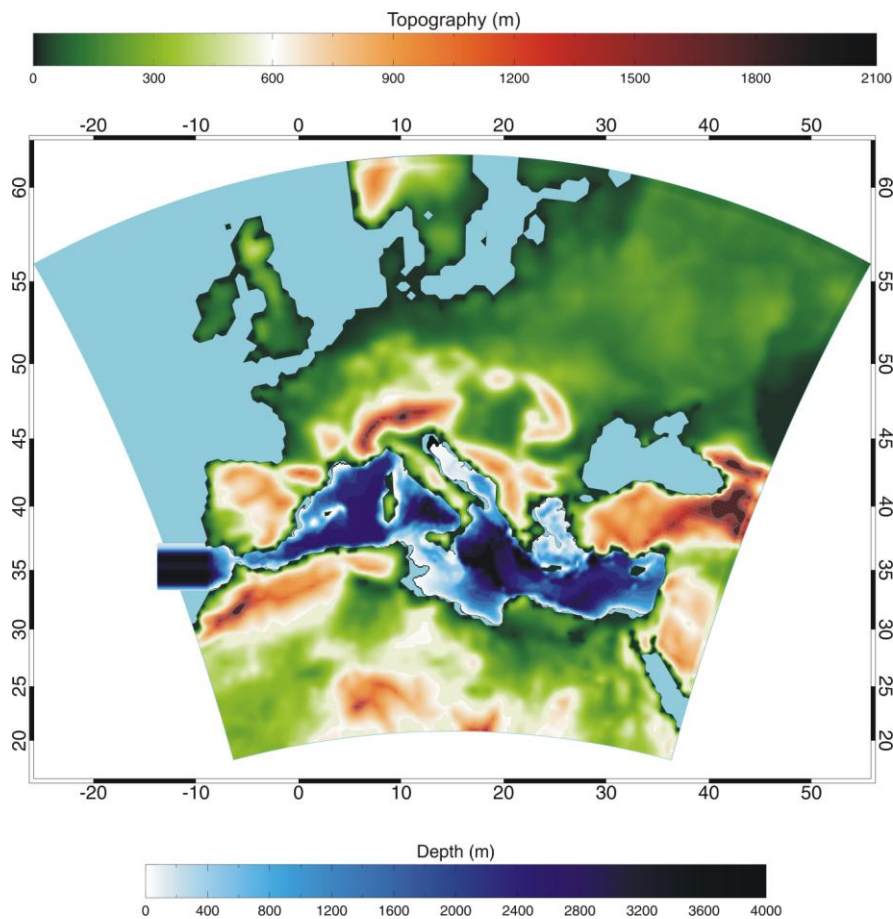


Figura 18.1. Dominio computazionale del modello climatico Protheus sviluppato dall'unità CLIMMOD

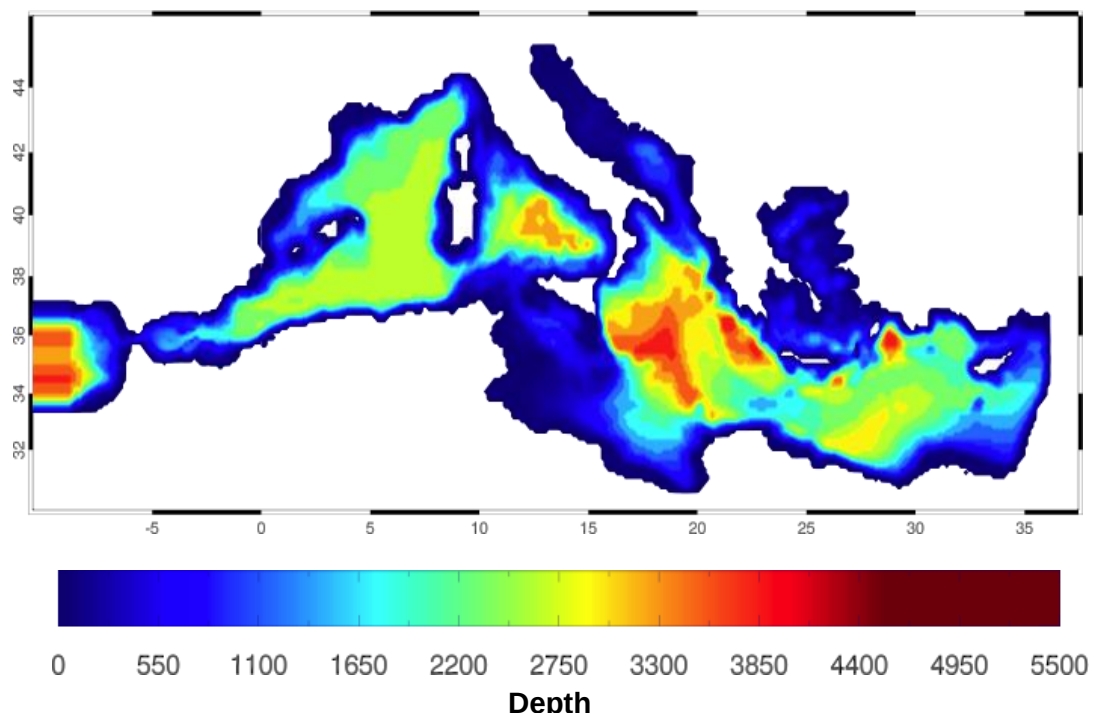


Figura 18.2. Batimetria del modello MedMIT.

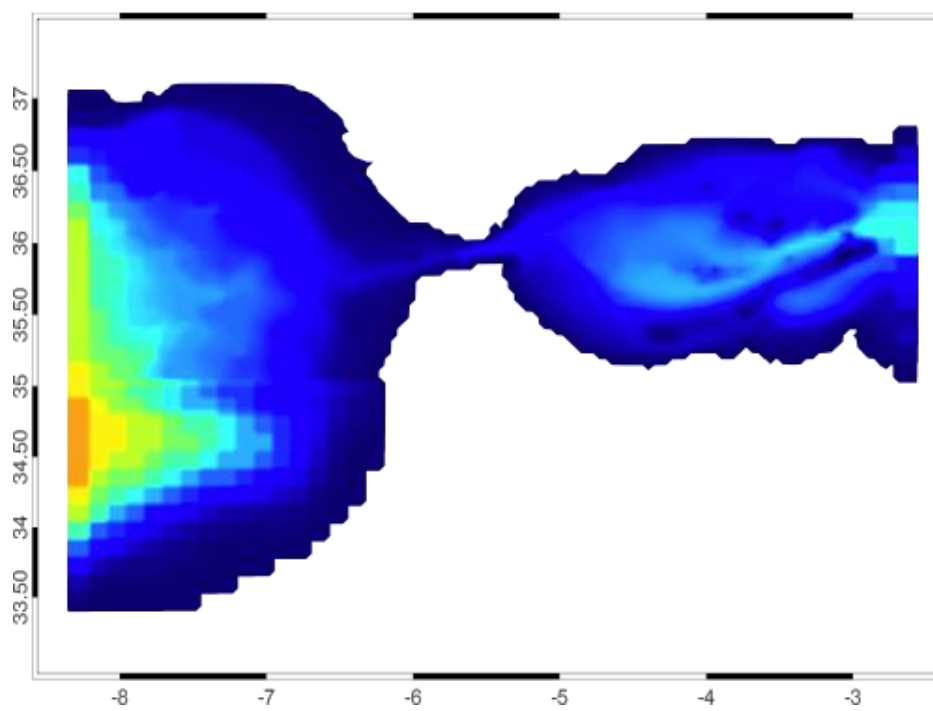


Figura 18.3. Batimetria del modello dello Stretto di Gibilterra.

Bibliografia

Sannino G., M. Herrmann, A. Carillo, V. Rupolo, V. Ruggiero, V. Artale, P. Heimbach. An eddy permitting model of the Mediterranean Sea with a two-way grid refinement at the Strait of Gibraltar. *Oceano Modelling*, 2009a, in press.

Sannino G., V. Ruggiero, A. Carillo, V. Artale. Implementation of a two-way grid refinement technique for the MITgcm: an application to the Mediterranean Sea. *Proceedings of the FINAL WORKSHOP OF GRID PROJECTS, "PON RICERCA 2000-2006, AVVISO 1575"*, Catania, 2009b.

19. CRESCO HPC SYSTEM INTEGRATED INTO ENEA-GRID ENVIRONMENT

G. Bracco, S. Podda, S. Migliori, P. D'Angelo, A. Quintiliani, D. Giammattei, M. De Rosa, S. Pierattini, G. Furini, R. Guadagni, F. Simoni, A. Perozziello, A. De Gaetano, S. Pecoraro, A. Santoro, C. Sci'ò, A. Rocchi, A. Funel, S. Raia, G. Aprea, U. Ferrara and G. Guarnieri

ENEA

C.R. Portici, Frascati, Casaccia, Bologna

INTRODUCTION

ENEA, the Italian agency for the energy, environment and new technologies, has a substantial experience [1] in GRID technologies and its multi-platform HPC resources are integrated in the ENEA-GRID infrastructure [2].

This paper describes the architecture of the High Performance Computing (HPC) system that has been installed to provide the required computing power to the CRESCO project applications and the dedicated activity required to integrate CRESCO HPC system into ENEAGRID infrastructure.

CRESCO (Computational Research Center for Complex Systems) [3] is an ENEA Project, co-funded by the Italian Ministry of University and Research (MUR). The project is functionally built around a HPC platform and 3 scientific thematic laboratories:

- the Computing Science Laboratory, hosting activities on Hardware and Software design, GRID technology and HPC platform management;
- the Computational Systems Biology Laboratory, with activities in the Life Science domain, ranging from the post-omic sciences (genomics, interactomics, metabolomics) to Systems Biology;
- the Complex Networks Systems Laboratory, hosting activities on complex technological infrastructures, for the analysis of Large National Critical Infrastructures.

CRESCO HPC SYSTEM

CRESCO HPC system has been designed with the aim of offering a general purpose facility based on the leading multi-core x86 64 technology.

The performance for the CRESCO HPC system [4] has ranked 125 in the June 2008 top500 list [5] with Rmax=17.1 TeraFlops in the HPL benchmark (rank 2 between the Italian HPC systems in the list). In order to provide the best environment for different types of applications the system consists of two main sections respectively oriented (1) for high memory request and moderate parallel scalability and (2) for limited memory and high scalability cases. Both sections are interconnected by a common InfiniBand 4X DDR network (IB) and can operate as a single large integrated system.

CRESCO Section 1, for Large memory application:

The first main section is composed by 42 fat nodes IBM x3850-M2 with 4 Xeon Quad-Core Tigerton E7330 processors (2.4GHz, 1066MHz, 6MB L2), 32 GB RAM (12 extra-fat nodes with 64 GB RAM).

The total number of cores in the first section is then equal to 672.

CRESCO Section 2, for high scalable applications:

The second main section is composed by 256 blades IBM HS21 each supporting dual Xeon Quad-Core Clovertown E5345 processors (2.33GHz, 1333MHz, 8MB L2), 16 GB RAM for total of 2048 cores. The blades are hosted by the 14 slots blade chassis for a total of 19 chassis and each blade has a dedicated IB connection. The larger system created by joining the two main sections has 2720 cores.

CRESCO Section 3, experimental resources:

A third experimental section consists of 3 subsections dedicated to special processor architectures: 4 blades IBM QS21 with 2 Cell BE Processors 3.2 GHz; 6 nodes IBM x3755, 4 sockets AMD Dualcore 8222 equipped with a FPGA VIRTEX5 LX330 card 4 node IBM x3755, 4 sockets AMD Dualcore 8222 with a NVIDIA Quadro FX 4500X2 (3 machines) and 4700X2 (1 machine) video card; the latter support CUDA while all of them support the GP-GPU development environment.

CRESCO network:

The IB network (4X DDR) is based on a set of CISCO IB switches, model SFS 7024 (288 ports), model SFS 7012 (144 ports) and 5 model SFS 7000 (24 ports for a total of 120n ports). A schematic of CRESCO IB network is shown in *figure 19.1*. The GigaEthernet network consists of one switch CISCO 4506 (240 ports), 3 switches CISCO 4948 (144 ports) and 3 switches CISCO 3750G (144 ports) providing both the basic network connection, the management LAN and a dedicated GigaEthernet network for parallel applications.

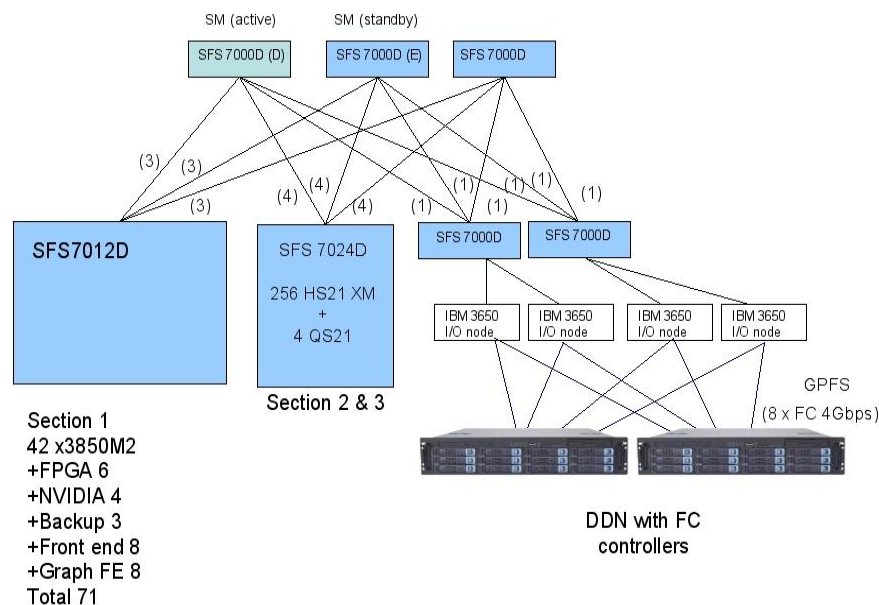


Figure 19.1: Schematic of the CRESCO InfiniBand (4X DDR) Network; the schema includes also the FC connection from the GPFS NSD servers to the DDN storage controllers.

CRESCO storage and backup:

The storage of CRESCO HPC system is provided by an IBM DCS9550 system, 160 TB raw space, based on 500 GB SATA Hard Disks; the data space is organized in a GPFS file system, with 4 NSD server connected to the storage by FC interfaces. The GPFS parallel file system is shared via InfiniBand between all the computing nodes of all the main section of the system. Two IBM DS4200 and DS3400 storages devices provide the AFS data space. An IBM Tape Library IBM TS3500 provides the backup facility.

CRESCO software:

The operating system is RedHat EL 5.1 and the usual set of GNU, Portland and Intel Compilers are available together with the standard OFED [6] MPI stacks (openmpi, mvapich, mvapich2). User homes are located in the OpenAFS file system, one of the base elements of the ENEA-GRID infrastructure.

CRESCO installation:

The three sections together with more than 70 service machines (front-end, controls, file-servers, installation servers, GRID interface machines,...) and storage and network components make use of a total of 20 standard racks (19 inch, 42 U). The power required to run the system has been estimated to 150 kw and a proper cooling system has been designed and installed. CRESCO computer room is shown in *figure 19.2*.



Figure 19. 2: CRESCO Computer Room computing and advanced 2D/3D graphical post processing. ENEA-GRID infrastructure permits to access to all these resources as a single

ENEA-GRID INFRASTRUCTURE

In the last decade ENEA has tried to ride the wave of the information technology explosion by the procurement of computational systems at the leading edge of the available technology, taking care of the development of a stable software infrastructure capable to provide ENEA researchers and their collaborators of an friendly and consistent access to the available resources [7].

In this framework GRID technologies have been adopted and powerful HPC (High Performance Computing) systems have been acquired, taking advantage also of the participation in national programs from the Italian Ministry of University and Research. The exploitation of these hardware resources follows the requests of ENEA researchers, that cover a wide spectra of applications in the domains of simulation, modelling, data analysis and 3D visualization.

In this context the choice of the computational system architecture has been very diversified over the years, so that ENEA has now a wide pool of different architectures and operating system (AIX, Linux, IRIX, MacOSX, Solaris) accessible through an integrated GRID-based software platform called ENEA-GRID CRESCO HPC system, located in Portici (Naples) ENEA research center, has been integrated into ENEA-GRID and at the moment is the most relevant computational resource of the infrastructure.

ENEA-GRID Architecture:

The GRID approach has permitted to integrate in a unified system all the high performance computational resources available in ENEA, distributed in many of its 12 research sites located in northern, central and southern Italy, see *figure 19.3*. Local computational facilities are managed in the computer centers in each of the main sites and include resources for serial and parallel computing and advanced 2D/3D graphical post processing. ENEA-GRID permits to access to all these resources as a single virtual system provided by multiplatform systems (AIX/IBM SP, Linux x86, x86 64, IA64, IRIX/SGI, MacOSX).

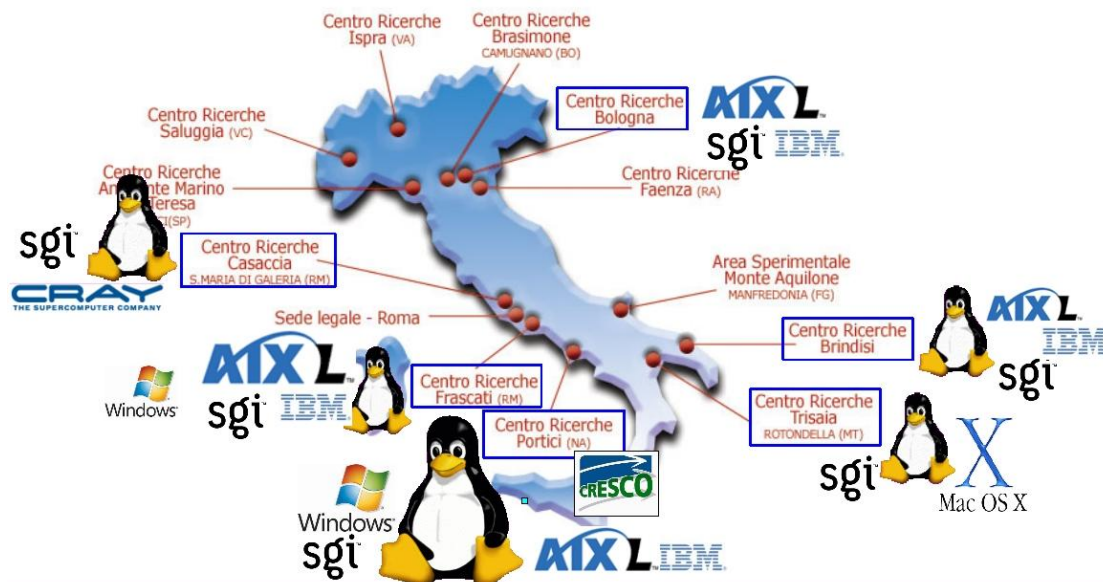


Figure 19. 3: Location of ENEA-GRID resources in Italy

ENEA-GRID components:

ENEA-GRID main components are (1) a GRID enabled resource manager, LSF (Load Sharing Facility) in its Multiclusterversion [8] and (2) a distributed file system, AFS (Andrew File System), presently an open source project with the name OpenAFS [9] and (3) a unified graphical user interface (based on Java and Citrix technologies [10]). All these components constitute the so-called Middleware of the ENEA-GRID infrastructure. ENEA GRID architecture has been based on mature middleware components,

both proprietary and open sources, in order to provide good performances and service reliability so that a production level quality can be attained.

This choice has permitted along the years to integrate in ENEAGRID infrastructure HPC resources at the state of the art performances, with minimal changes in the user environment. The ENEA-GRID graphical user interface, see *figure 19.4* has been integrated with a specific GUI dedicated to the access to CRESCO HPC resources, see *figure 19.5*. Recently a freenx [11] based desktop access has also been installed in CRESCO, providing an effective open source solution for the remote graphical user access, see *figure 19.6*. The management and the user services available in ENEA-GRID has been recently improved by a set of new utilities and tools, described in reference [13].

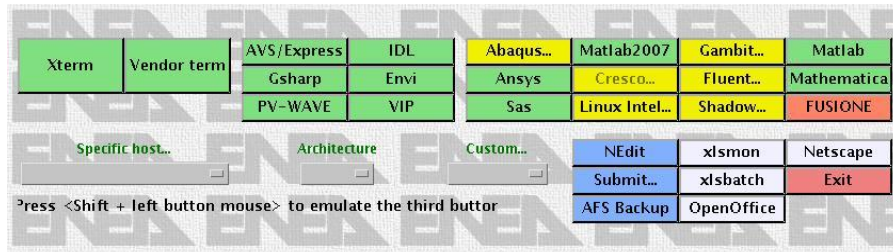


Figure 19.4: ENEA-GRID Graphical User Interface

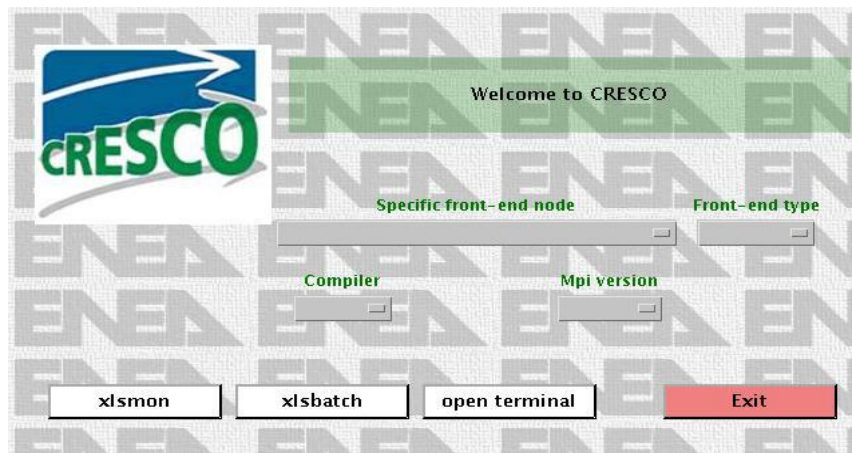


Figure 19.5: ENEA-GRID/CRESCO Graphical User Interface

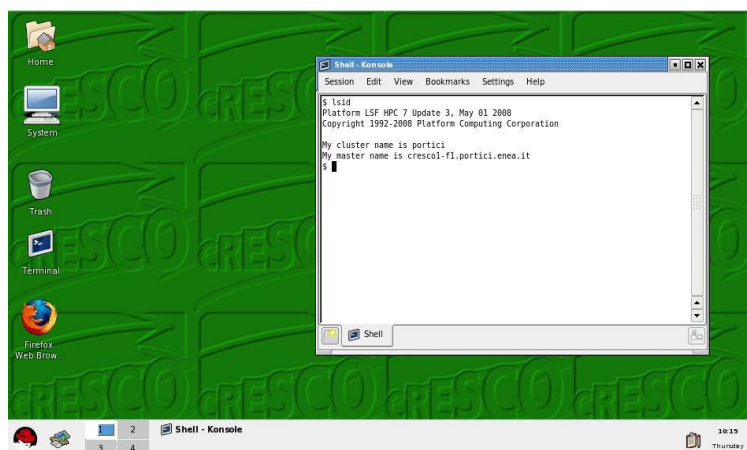


Figure 19.6: ENEA-GRID Freenx Desktop

ENEAGRID network connection:

The ENEA-GRID sites are connected by GARR, the Italian Academic and Research Network, see *figure 19.7*. The connection bandwidth provided by the GARR Network ranges from 2 Gbps of the Portici site, where CRESCO HPC system is located, to 1 Gbps for the Frascati site, hosting the main AIX/SP4/SP5 resources. Other sites are connected at lower bandwidth values (Casaccia, 200 Mbps, Brindisi 150 Mbps, Trisaia 18 Mbps, Bologna 30 Mbps)

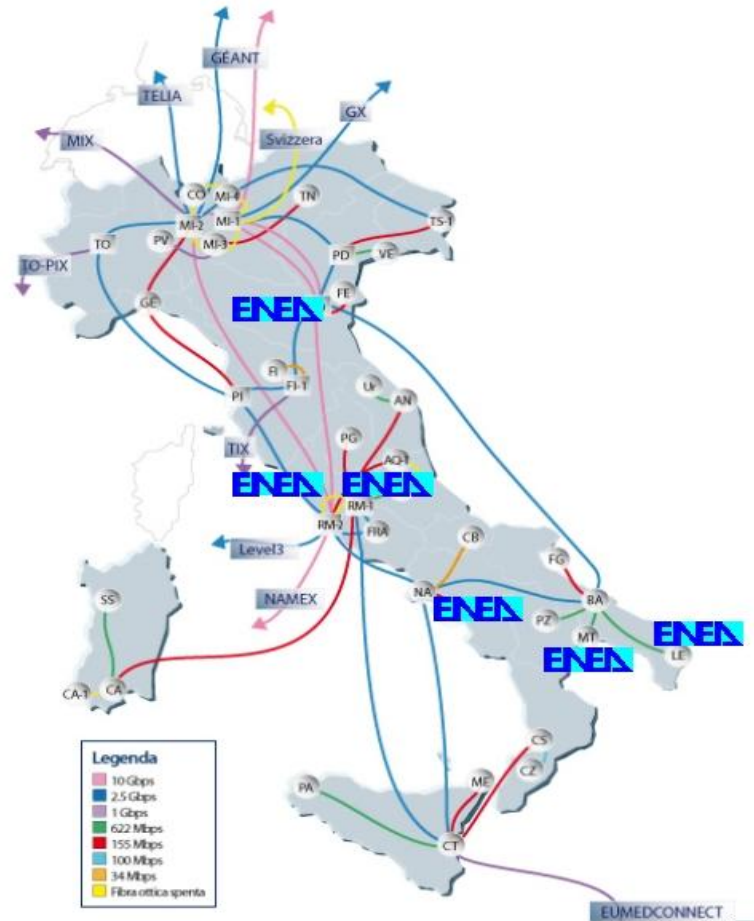


Figure 19.7: GARR Network and ENEA main computer sites

ENEAGRID interoperability with other GRID infrastructure:

ENEA has participated to many GRID projects focusing the participation in the interoperability with the other existing GRID infrastructures. To implement the interoperability ENEA has developed an original solution based on the SPAGO concept (Shared Proxy Approach for GRID Objects), see reference [12] in this conference. The utilization of SPAGO based gateway has enabled the interoperation between CRESCO HPC center and the GRID infrastructure born to include all the main computation resources available in the Southern Italy area, integrated in the GRISU activity [14].

CONCLUSION

CRESCO HPC system provides the computational resources for the applications of the thematic area of the CRESCO project. CRESCO HPC is one of the leading Italian HPC facility and is fully integrated into the ENEAGRID infrastructure, so that it can be used by ENEA researchers and their collaborators through the standard ENEA-GRID tools and interfaces, minimizing in this way the user effort for the access to the new computational facility.

REFERENCES

- [1] S. Migliori, et al. ENEA Computing Factory, Proceedings of the International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications, PDPTA 1999, June 28 July 1, 1999, Las Vegas, Nevada, USA. Vol.6, 3037-3040
- [2] <http://www.eneagrid.enea.it>.
- [3] <http://www.cresco.enea.it>.
- [4] International Supercomputing Conference, Dresden 17- 19/6/2008 "Architecture and performances of the CRESCO HPC system" S. Migliori, G. Bracco, P. D'Angelo, D. Giammattei, M. De Rosa, S. Pierattini, S. Podda, A. Quintiliani, S. Raia, A. Funel, G. Richelli, Research Poster#7
- [5] <http://www.top500.org>.
- [6] <http://www.openfabrics.org>.
- [7] Conferenza GARR 2005 "La rete daPERTutto", Pisa, 10 - 13/5/2005 "Larchitettura di ENEA-GRID, infrastruttura distribuita per la condivisione di risorse informatiche per il calcolo scientifico".
- [8] <http://www.platform.com>.
- [9] <http://www.openafs.org>.
- [10] <http://www.citrix.com>.
- [11] <http://freenx.berlios.de>
- [12] "ENEA-GRID and glite Interoperability: robustness of SPAGO approach" A. Santoro, C. Sci'ò, G. Bracco, S. Migliori, S. Podda, A. Quintiliani, This conference Paper #43
- [13] "New ENEA-GRID Integrated Support Services for CRESCO" A. Rocchi, A. Santoro, C. Sci'ò, G. Bracco, S. Migliori, S. Podda, A. Quintiliani, This conference Paper #49
- [14] <http://www.grisu-org.it>