

Scienze computazionali: nuove opportunità

Accanto alle tradizionali discipline teoriche e sperimentali, è nato recentemente un nuovo modo di fare scienza: le simulazioni numeriche effettuate al computer sostituiscono gli esperimenti in laboratorio se questi sono costosi, impossibili da realizzare oppure di difficile interpretazione. Grazie alle scienze computazionali, che implicano l'impiego di computer sempre più veloci e potenti, è possibile infatti sviluppare algoritmi, modelli e software in grado di studiare fenomeni complessi. Il gruppo di ricerca in scienze computazionali del Prof. Michele Parrinello, attivo sul Campus dell'USI dal 2001, simula al computer fenomeni fisici e chimici con un elevato grado di complessità e sviluppa metodi di calcolo innovativi utilizzati in tutto il mondo. Si occupa inoltre di studiare diversi fenomeni biologici e le proprietà di alcuni materiali.

Grazie al progresso tecnologico, in pochi anni le prestazioni dei computer sono cresciute in modo esponenziale: oggi, infatti, i supercalcolatori (le cosiddette macchine petaflops) sono in grado di effettuare un elevato numero di operazioni matematiche al secondo. Con simili potenze di calcolo, questi computer di nuova generazione possono risolvere, mediante sofisticati metodi di modellizzazione e simulazione numerica, problemi molto complessi, ritenuti intrattabili fino a qualche anno fa.

Il gruppo di ricerca in scienze computazionali del Politecnico federale di Zurigo (ETHZ), ospite sul campus dell'USI di Lugano dal 2001, si occupa di studiare al computer fenomeni fisici e chimici con un elevato grado di complessità, utilizzando metodi di sperimentazione e simulazione numerica propri delle scienze computazionali. Come spiega il Prof. Michele Parrinello, che dirige il gruppo di ricerca: *"La simulazione numerica è un metodo di fare scienza nato negli ultimi decenni. I motivi per cui si scelgono le simulazioni sono sia di natura pratica, poiché permettono di condurre esperimenti che non potrebbero essere realizzati in laboratorio (in quanto troppo costosi o pericolosi), sia di natura concettuale, poiché l'esperimento misura alcuni parametri ma occorre anche capire cosa*



Il gruppo di ricerca in scienze computazionali diretto dal Prof. Parrinello.

succede al sistema nel suo complesso".

Il Prof. Parrinello è autore, assieme al Prof. Roberto Car, del metodo Car-Parrinello, che combina le simulazioni di dinamica molecolare con le teorie elettroniche, allo scopo di vedere cosa accade agli atomi quando si muovono e reagiscono tra di loro. Questo metodo si è evoluto negli anni, diventando sempre più sofisticato, e oggi trova applicazioni in moltissimi campi, tra cui la fisica, la biologia molecolare, la chimica e la geologia.

L'approccio legato alle simulazioni di dinamica molecolare permette ad esempio di migliorare i processi catalitici che favoriscono le reazioni chimiche, al fine di risparmiare sui costi industriali della produzione di materie plastiche, quali il polietilene o il polipropilene; oppure aiuta a predire catastrofi naturali come i terremoti, tramite lo studio del comportamento di alcuni elementi che si trovano all'interno della terra, a diverse temperature e pressioni.

Vi sono tuttavia alcuni limiti legati ai costi delle simulazioni: in particolare la dimensione del sistema (un numero massimo di atomi o molecole che si possono trattare) e la scala di tempo (la durata massima dei fenomeni fisici che si possono simulare).

Le scienze computazionali all'USI

Le scienze computazionali offrono all'USI la possibilità di studiare problemi di grande complessità che spaziano dalle scienze esatte e naturali alle scienze economiche e sociali, passando per le scienze biomediche, ambientali, fino alle scienze dei materiali e dell'ingegnere. Allo scopo di promuovere e coordinare le attività di ricerca e formazione su temi il cui studio richiede strumenti di calcolo di grande potenza, è stato fondato nel settembre del 2008 l'Istituto di scienze computazionali (ICS) in seno alla Facoltà di scienze informatiche dell'USI. L'idea di creare l'ICS si basa sull'originalità e la sostenibilità dell'iniziativa, come anche sulla presenza nel tessuto accademico e scientifico del Cantone di partner di ricerca quali il Centro svizzero di calcolo scientifico (CSCS), l'Istituto di ricerca in biomedicina (IRB), l'Istituto oncologico della Svizzera italiana (IOSI), il Dipartimento tecnologie innovative della SUPSI ed il gruppo di scienze computazionali del Politecnico federale di Zurigo (ETHZ), ospite sul Campus USI e diretto dal Prof. Parrinello.

Le aree di ricerca: metadinamica e scienza dei materiali

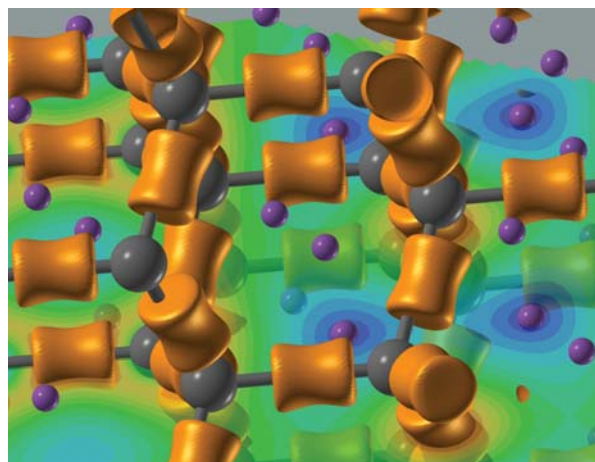
Una delle aree di ricerca del gruppo di scienze computazionali riguarda lo sviluppo di metodi per le simulazioni di sistemi sempre più grandi per tempi più lunghi, al fine di migliorare l'accuratezza dei calcoli ed ottenere risultati realistici.

Come spiega il Prof. Parrinello: *"Il contributo più importante del nostro gruppo di ricerca di Lugano è un metodo chiamato metadinamica, che permette di simulare e studiare fenomeni per tempi lunghi. Con questo metodo è infatti possibile ridurre la barriera temporale e studiare alcuni processi biologici, tra i quali il ripiegamento incorretto delle proteine, che è all'origine di alcune malattie neurodegenerative quali la mucca pazza, il morbo di Parkinson o l'Alzheimer, e l'interazione tra enzima e farmaco"*.

Nell'ambito dell'interazione tra enzima e farmaco, il team di ricerca del Prof. Parrinello collabora con il Prof. Ricardo A. Broglio della facoltà di fisica dell'Università di Milano ad uno studio che mira ad inibire il ripiegamento della protease, un enzima essenziale per la sopravvivenza del virus dell'HIV. Dato che il virus è in grado di mutare molto velocemente gli aminoacidi della protease, diminuendo l'affinità tra enzima e farmaco (ossia l'efficacia del farmaco), l'idea è quella di impedire il ripiegamento della protease nella struttura in cui questa proteina diventa attiva. In questo modo, si apre la strada alla produzione di nuovi farmaci in grado di bloccare l'attività dell'enzima.

Grazie alla metadinamica si possono inoltre studiare i movimenti molto complicati di alcune proteine: *"Stiamo analizzando una classe di proteine chiamate Cox, legate ai processi infettivi, al fine di disegnare farmaci specifici per le*

Michele Parrinello (nella foto) è attualmente professore di scienze computazionali presso il Politecnico federale di Zurigo ed è famoso per le sue numerose innovazioni tecniche nel campo delle simulazioni atomiche. Assieme a Roberto Car, ha ideato nel 1985 la dinamica molecolare *ab-initio*, conosciuta come "metodo Car-Parrinello", che ha segnato l'inizio di una nuova era sia nel campo del calcolo della struttura elettronica che in quello delle simulazioni di dinamica molecolare. È anche l'artefice del metodo Parrinello-Rahman che permette di studiare la transizione verso la fase cristallina attraverso la dinamica molecolare. Ha ricevuto molti premi e riconoscimenti per i suoi lavori ed è membro di prestigiose accademie, tra cui la *Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften*, la *British Royal Society* e l'Accademia Nazionale dei Lincei.



Un'immagine di una lega leggera formata da atomi di litio e di alluminio.

proteine legate all'infezione ma che non influenzino quelle utili. In questo modo, si potrebbe ad esempio produrre un'aspirina che non abbia controindicazioni", illustra Parrinello.

Un'altra importante area di ricerca è inerente alla scienza dei materiali. I progetti in questo ambito riguardano i materiali per la produzione di energia nella futura ipotesi di un'economia basata sull'idrogeno anziché sugli idrocarburi. Questo ipotetico scenario permetterebbe di superare i limiti legati all'utilizzo delle fonti energetiche non rinnovabili e di avere un sistema energetico sostenibile dal punto di vista ambientale. Si pone quindi il problema di trovare dei materiali leggeri per lo stoccaggio dell'idrogeno. A questo proposito, i ricercatori stanno cercando di produrre delle leghe leggere (come ad esempio quella formata da atomi di litio e di alluminio, vedi figura) da utilizzare come serbatoi dai quali poter estrarre facilmente l'idrogeno, evitando eccessive perdite di energia.

Informazioni:

Prof. Dr. Michele Parrinello
Computational Science
Department of Chemistry and Applied Biosciences, ETH Zurich
USI-Campus
Via G. Buffi 13
CH-6900 Lugano
Tel. +41 58 666 48 01
e-mail: parrinello@phys.chem.ethz.ch

Indirizzo web:

www.rgp.ethz.ch