

La simulazione avanzata nella scienza nell'ingegneria

Autor(en): **Bettelini, Marco / Giuffreda, Maria Grazia**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Archi : rivista svizzera di architettura, ingegneria e urbanistica = Swiss review of architecture, engineering and urban planning**

Band (Jahr): - **(2009)**

Heft 3

PDF erstellt am: **28.06.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-134269>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

La simulazione avanzata nella scienza e nell'ingegneria

Marco Bettelini *
Maria Grazia Giuffreda **

I primi supercalcolatori sono apparsi agli inizi degli anni '40, mentre il termine «supercomputer» ha un'origine molto più recente. Ma è solo negli anni '60 che la soluzione di problemi di natura fisica ed ingegneristica, sempre più complessi, ha determinato lo sviluppo vertiginoso dei supercalcolatori. Inizialmente dominio di pochi esperti, il calcolo scientifico è divenuto il terzo pilastro delle scienze, accanto alla teoria ed alla sperimentazione. I supercalcolatori di nuova generazione sono strumenti di ricerca rivoluzionari, che spingono ai limiti estremi le tecniche di miniaturizzazione e di integrazione. La loro potenza di calcolo, capace di raggiungere un milione di miliardi di operazioni matematiche al secondo, permette di accedere ad un livello di conoscenza della realtà sinora inaccessibile.

Oggi, grazie allo sviluppo di modelli teorici sempre più complessi ed al calcolo numerico, si è in grado di studiare fenomeni e problemi fino ad ora ritenuti irrisolvibili. Ad esempio, attraverso l'uso dei supercalcolatori si possono studiare il cosmo, la formazione dei pianeti e delle galassie, i buchi neri e l'antimateria, e può essere spiegato con chiarezza il processo evolutivo così come esso si è svolto in miliardi di anni. Il ripiegamento delle proteine (protein folding), vale a dire il meccanismo con cui le proteine si ripiegano fino a raggiungere la loro struttura tridimensionale, processo impossibile da tracciare con gli strumenti e con i metodi sperimentali conosciuti al momento, è diventato accessibile grazie allo sviluppo di modelli teorici e all'aumento della potenza di calcolo. In questo modo si sono aperte nuove strade per comprendere la comparsa e l'evoluzione di malattie come, per citarne solo alcune, l'HIV, l'Alzheimer e la malaria e quindi studiarne i possibili metodi di cura. I modelli climatici e, conseguentemente, le simulazioni dell'evoluzione del nostro clima permettono di analizzare l'influenza e l'impatto delle attività umane su di esso. Le previsioni meteorologiche, basate su simulazioni condotte su supercalcolatori, sono in grado di prevedere con un certo margine di ac-

curatezza maltempo e catastrofi naturali come cicloni, inondazioni e tempeste. Il calcolo scientifico permette, attraverso la simulazione, di perfezionare protesi destinate ad essere impiantate nel corpo umano prima dell'impianto stesso e consente di valutarne correttamente impatto ed effetti. Infine grazie all'uso dei supercalcolatori si possono: analizzare e ottimizzare il flusso d'acqua in una turbina prima di costruirla; ridurre le turbolenze create da un aereo nella fase di atterraggio modificando la forma delle ali; simulare gli effetti di un terremoto sulle strutture, in modo da poter pianificare costruzioni resistenti a tali eventi.

Fino ad oggi, le enormi potenzialità del supercalcolo sono state applicate soprattutto alle scienze naturali e alla tecnica ed hanno consentito importanti progressi e scoperte. Si prevede però già nel prossimo futuro un'applicazione di notevole peso nei campi delle scienze economiche e sociali.

Il calcolo scientifico, inizialmente altamente specializzato e limitato perciò solo ad alcune discipline, è divenuto nell'arco dell'ultimo ventennio equiparabile alla teoria ed alla sperimentazione. È solo combinando in modo opportuno ed adeguato le conoscenze e le esperienze fornite da questi tre pilastri della scienza che si possono ottenere risultati inimmaginabili fino ad oggi.

Un settore in rapidissima evoluzione

Forse qualcuno ricorda ancora i primi calcolatori – schede perforate, dischetti, nastri ecc. L'uso dei primi circuiti integrati risale a metà degli anni '60 mentre il primo vero PC risale al 1977 (Apple II), ed il primo PC IBM al 1981. La velocità di calcolo si può valutare in termini di FLOPS (= Floating Point Operations per Second), cioè di numero di operazioni matematiche al secondo. Il primo supercalcolatore installato al Centro Svizzero di Calcolo Scientifico di Manno raggiungeva i 5 GFLOPS (gigaflops = 10^9 FLOPS), mentre la potenza di calcolo attualmente installata raggiunge i 26.5 TFLOPS (teraflops = 10^{12} FLOPS). I sistemi più avanzati nel

mondo si avvicinano attualmente al PFLOPS (petaflops = 10^{15} FLOPS). Queste prestazioni vengono raggiunte utilizzando calcolatori massicciamente parallelizzati, vale a dire capaci di utilizzare contemporaneamente migliaia di processori di tipo relativamente convenzionale. È chiaro che per utilizzare queste «supermacchine» sono necessari sforzi notevoli anche a livello di software, cioè di sviluppo di algoritmi sempre più performanti e scalabili. Ma più importanti della pura potenza di calcolo sono, soprattutto nel campo dell'ingegneria, i costi. Se il costo per GFLOPS era dell'ordine di 15 milioni US\$ nel 1984 (Cray X-MP) e di 1000 US\$ nel 2000, attualmente è sceso a meno di 0.50 US\$. Un'evoluzione tale da aprire enormi possibilità.

Le tecnologie informatiche sono ormai da tempo parte integrante della nostra vita sia privata che professionale. Un evento determinante è sicuramente stata la diffusione, a partire dalla fine degli anni '80, dei programmi CAD per disegno e costruzione. Come regola generale si calcolava che un buon operatore CAD potesse compiere il lavoro di 3-5 tecnici, con risultati in genere nettamente migliori. L'uso è ormai generalizzato nel settore automobilistico, della costruzione di navi e battelli, aerospaziale, della progettazione industriale e architettonica ecc. Da tempo si va diffondendo l'integrazione del processo di costruzione con tecniche avanzate di produzione (CAM, Computer Aided Manufacturing). Anche tecniche più avanzate, come la produzione di animazioni tecniche e commerciali, si stanno sviluppando rapidamente.

Per le applicazioni specifiche nel settore dell'ingegneria si utilizza spesso la denominazione generica computer-aided engineering, che comprende svariate applicazioni informatiche sviluppate per tutte le principali attività ingegneristiche, particolarmente analisi, simulazione, progettazione, ottimizzazione, produzione, pianificazione, diagnostica e riparazioni. Particolarmente importanti sono oggi le applicazioni nei settori:

- analisi strutturale statica e dinamica;
- analisi di correnti (CFD), trasferimenti di calore e sollecitazioni termiche;
- analisi dinamiche e cinematiche;
- analisi di processi particolari quali fusione, stampaggio, forgiatura, estrusione ecc.;
- ottimizzazione di prodotti o processi.

Queste tecniche vengono integrate in modo crescente nel quadro dei processi di controllo integrale del ciclo di vita di un prodotto: concezione, progettazione, realizzazione e servizio.

Applicazioni particolarmente importanti sono state realizzate nel settore automobilistico, dove tecniche avanzate di progettazione e di costruzione hanno consentito di ridurre tempi e costi, migliorando nel contempo in modo significativo i prodotti, particolarmente dal punto di vista della sicurezza, del comfort e dell'affidabilità. La verifica dei prototipi viene ormai in buona parte eseguita per mezzo di simulazioni al computer, mentre le prove fisiche tendono ad essere ridotte alla verifica di singole componenti particolarmente critiche.

I compiti di progettazione e di ottimizzazione in ambito ingegneristico tendono sempre più spesso ad assumere carattere multidisciplinare. Dalla capacità di affrontare con successo questo tipo particolarmente complesso di sfide dipende spesso in modo critico il successo in taluni settori tecnologici: pensiamo ad esempio al settore automobilistico, alla progettazione navale, all'elettronica e allo sviluppo di nuovi calcolatori. Ma le applicazioni più avanzate sono probabilmente ancora quelle legate all'ingegneria aerospaziale, con esigenze estremamente spinte per quanto riguarda l'aerodinamica esterna, la propulsione, l'analisi strutturale, le tecnologie di controllo, la fabbricazione, i tempi e i costi.

Le esigenze future in questi settori potranno essere soddisfatte solo attraverso un'integrazione crescente tra discipline tradizionalmente trattate in modo separato. Un esempio tipico nel settore aeronautico, nel quale recentemente sono stati registrati progressi notevolissimi, è quello dell'interazione tra carichi aerodinamici e deformazioni strutturali, che a loro volta modificano le caratteristiche aerodinamiche della struttura considerata. Queste analisi sono particolarmente importanti per condizioni eccezionali di impiego, quali manovre di aerei da combattimento in condizioni estreme, spesso decisive per le prestazioni globali del veicolo. Tecniche simili vengono oggi applicate ad esempio nello sviluppo di auto di Formula 1. Le esigenze future in questi settori potranno essere soddisfatte solo elaborando modelli fisici più avanzati, con risorse di calcolo più spinte e programmi integrati più potenti e di facile utilizzo.

Simulazione avanzata

L'Office of Advanced Scientific Computing Research (ASCR) del dipartimento statunitense dell'energia (DOE) pubblica periodicamente una lista delle maggiori conquiste nel campo della scienza e dell'ingegneria ottenute con le tecniche di calcolo più avanzate, finanziate anche attraverso i suoi

programmi. La lista relativa al 2007-2008 (ScidAC Review, Special Issue 2009, www.scidacreview.org) mostra sviluppi sorprendenti ed entusiasmanti, che illustrano bene i benefici derivanti dai massicci investimenti effettuati nel settore della simulazione avanzata. Citiamone qualche esempio:

- studio del meccanismo molecolare che porta alla degenerazione del sistema nervoso centrale nel morbo di Parkinson;
- scoperta di nuovi fenomeni fondamentali per la corretta comprensione del ciclo di vita delle stelle, incluso il collasso delle supernove, uno degli eventi più violenti conosciuti nell'universo;
- predizione della struttura molecolare delle proteine, con precisione a livello atomico, e creazione di nuovi enzimi;
- progressi nella comprensione dei meccanismi di stabilizzazione di fiamme turbolente in camere di combustione, che contribuiranno al miglioramento della combustione in applicazioni tecnicamente importanti come motori a scoppio e turbine a gas;
- studio delle perdite termiche nei tokamak utilizzati per la stabilizzazione del plasma (con temperature di circa 100 milioni di K) nel cuore del nuovo reattore a fusione nucleare ITER, attualmente in costruzione nel sud della Francia;
- approfondimenti del fenomeno della superconduttività ad alta temperatura, con l'obiettivo finale di utilizzare questa proprietà per ridurre le perdite in applicazioni pratiche come cavi elettrici, veicoli e macchine elettriche;
- studi per comprendere la «dark matter», cioè la materia invisibile che costituisce oltre l'80% della massa dell'universo;
- studio a livello molecolare del comportamento dell'acqua a contatto con altri materiali, in modo da poter rivelare i meccanismi biologici fondamentali coinvolti.

In questo contributo si vuole dare una visione d'insieme sulle svariate applicazioni e sulle opportunità offerte dal supercalcolo. L'accento verrà posto sulle applicazioni più esigenti e complesse, che probabilmente costituiranno entro pochi anni le applicazioni commerciali più avanzate e, in un futuro non lontano, saranno accessibili in modo generalizzato e a basso costo. Molte delle applicazioni presentate sono basate sulle esperienze maturate al CSCS di Manno, che ormai da anni fa da catalizzatore per le tecnologie avanzate in diversi settori del calcolo scientifico anche nel nostro cantone.

I settori principali di applicazione della simulazione più avanzata in Svizzera sono ben illustrati

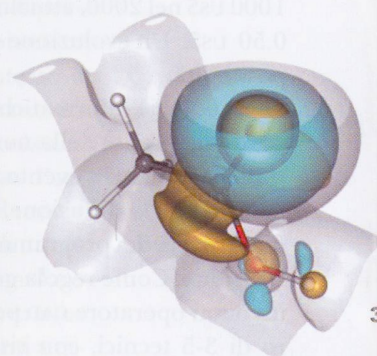
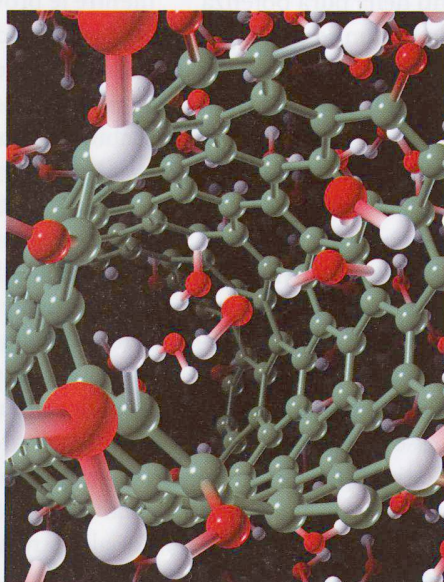
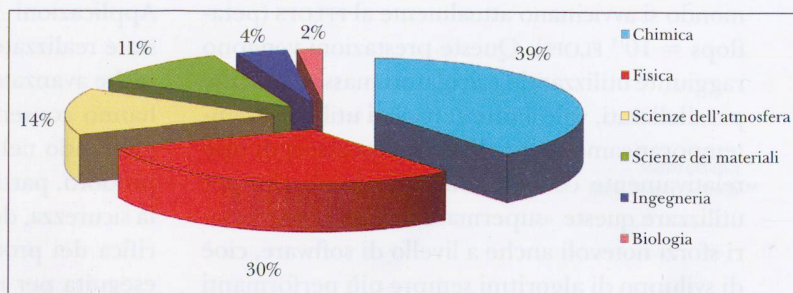


Fig. 1 - Ripartizione delle risorse del CSCS per l'anno 2007

Fig. 2 - Arricchimento delle pareti di un nanotubo di carbonio con gruppi OH. Le proprietà cambiano in presenza di acqua. Il nanotubo da idrofobico diventa idrofilico, consentendo ad una molecola di acqua di attraversarlo.

Fig. 3 - Molecola di acido acetico con orbitali e superficie nodale

dalla ripartizione delle risorse messe a disposizione dal CSCS, Fig. 1. È interessante osservare come le applicazioni nell'ambito dell'ingegneria non siano ancora rappresentate in modo adeguato.

Chimica

La chimica computazionale si occupa dello sviluppo e del miglioramento di modelli, basati sia sulla meccanica classica che sulla meccanica quantistica, in grado di descrivere sistemi molecolari, calcolandone le proprietà fisiche e chimiche. Nell'ultimo trentennio sono stati fatti grandi progressi nel settore, grazie soprattutto all'enorme sviluppo dei modelli teorici, stimolato dall'incredibile evoluzione dei calcolatori. Le simulazioni possono essere eseguite a svariati livelli di complessità:

- a livello della meccanica quantistica (calcoli «ab initio») si cerca di trovare la migliore approssimazione alla soluzione dell'equazione di Schrö-

dingher per descrivere le strutture elettroniche dei sistemi molecolari. L'aumento delle capacità computazionali ed il continuo sviluppo dei modelli hanno fatto sì che si possano studiare «ab initio», con grande accuratezza, sistemi che vanno da pochi atomi ad alcune centinaia. Questo approccio permette di predire la struttura molecolare, il tipo di legame, le reazioni chimiche e i dati spettroscopici.

- Modelli più approssimati operano su scala atomica o molecolare e sono basati sulla meccanica classica e su campi di forza determinati empiricamente. Essi permettono di analizzare sistemi comprendenti diverse migliaia di atomi e consentono di simulare la dinamica di tali sistemi e calcolarne conseguentemente le proprietà termodinamiche e di trasporto.

L'importanza della chimica computazionale va individuata nella sua capacità di offrire spiegazioni a risultati sperimentali di difficile comprensione ed analisi, aprendo così nuove strade e sfide alla ricerca.

Fisica

Anche nell'ambito della fisica le applicazioni sono molteplici e svariate. Nel settore dell'astrofisica uno degli obiettivi fondamentali è quello di risolvere le problematiche legate alla dark matter e dark energy. Altri settori di attività comprendono la Cromodinamica Quantistica (QCD) su modelli reticolari, per lo studio dell'interazione forte, la fisica nucleare e la fisica delle particelle. La fisica nucleare studia la composizione, la struttura e le proprietà dei nuclei atomici, fornendo informazioni sulla natura della materia e dell'energia. La fisica delle particelle studia particelle elementari, che sono i costituenti fondamentali della materia, e le forze che agiscono tra di loro. Uno degli obiettivi di questi studi è la comprensione dell'origine dell'universo.

Un'applicazione particolare, con forti implicazioni ingegneristiche e pratiche, è legata allo studio del comportamento del plasma in impianti per la fusione nucleare. Il plasma presente nel reattore è formato da elettroni, deuterio e trizio alla temperatura di 100 milioni di gradi. La stabilizzazione viene effettuata per mezzo di campi magnetici in un tokamak. Il primo impianto per lo sfruttamento energetico in grande scala (500 MW termici) della fusione nucleare è già in costruzione a Cadarache, nel sud della Francia, ma sforzi ulteriori sono in corso per acquisire la tecnologia necessaria a migliorare l'affidabilità del processo, per rendere interessante la fusione anche dal punto di vista economico.

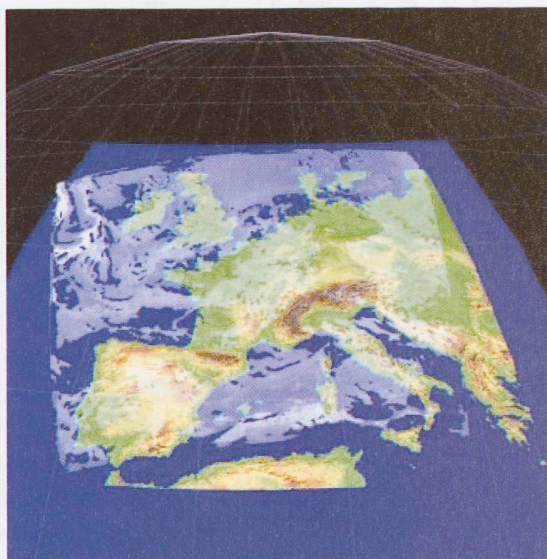


Fig. 4 – Copertura nuvolosa sopra l'Europa

Meteorologia ed evoluzione climatica

La meteorologia rappresenta sin dalle origini una delle discipline principali presenti nei centri avanzati di calcolo. Con il miglioramento delle capacità predittive aumentano anche le aspettative del pubblico, soprattutto in termini di affidabilità, di dettaglio e di durata delle previsioni. Queste nuove esigenze sono particolarmente importanti a causa dell'intensificarsi di fenomeni meteorologici estremi, che possono provocare catastrofi naturali, e alla particolare conformazione delle Alpi, che dà spesso origine a condizioni meteorologiche estremamente variabili localmente e temporalmente. L'Ufficio Federale di Meteorologia e Climatologia (MeteoSwiss) ha potuto quest'anno migliorare il suo servizio affinando la griglia di calcolo (2 km invece di 7 km di lato) e aumentando il numero di simulazioni quotidiane (8 invece di 2). Questa evoluzione è stata resa possibile grazie alla messa in servizio di un nuovo supercomputer, il Cray XT4 (denominato «Buin») installato presso il CSCS di Manno.

Se le simulazioni meteorologiche sono normalmente limitate ad una porzione relativamente ristretta della superficie terrestre (ad esempio l'Europa), le problematiche legate ai cambiamenti climatici devono necessariamente essere studiate a livello planetario.

Le simulazioni numeriche sono particolarmente importanti per poter valutare correttamente le conseguenze della continua immissione di sostanze chimiche nell'atmosfera, soprattutto a seguito dell'utilizzo di combustibili fossili. Ne conseguono cambiamenti climatici globali e duratu-

ri con notevolissimi effetti sull'ambiente, sull'economia e sulla società. I nuovi modelli in fase di sviluppo consentiranno di analizzare in modo globale le interazioni tra i processi fisici, chimici e biochimici climaticamente rilevanti.

Dinamica dei fluidi e combustione

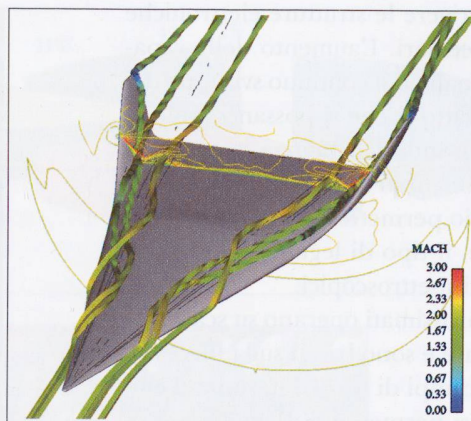
La dinamica dei fluidi costituisce una delle applicazioni che hanno determinato lo sviluppo dei supercalcolatori. Si tratta oggi di una disciplina matura, solidamente ancorata in molti settori industriali (aeronautico, automobilistico, energetico ecc.). Le esigenze in termini di capacità di calcolo restano tuttora straordinariamente elevate, anche a seguito dell'evoluzione delle esigenze qualitative e quantitative, entrambe spesso strettamente legate all'ottimizzazione di prodotti o di processi, che richiedono invariabilmente un numero molto elevato di simulazioni.

Le tecniche attuali di simulazione sono basate su molti modelli fisici in genere soddisfacenti ma non perfetti. Simulazioni dirette, basate sulla soluzione instazionaria delle equazioni di Navier-Stokes su griglie estremamente fini, senza ricorso a semplificazioni ingegneristiche, consentiranno nei prossimi anni di migliorare i modelli, con particolare riferimento a quelli per la turbolenza e per la combustione. Un ulteriore sviluppo sarà rappresentato, grazie ad ulteriori incrementi della capacità di calcolo, dalla possibilità di utilizzare le tecniche proprie della simulazione diretta di questi fenomeni caotici per la risoluzione di problemi ingegneristici avanzati.

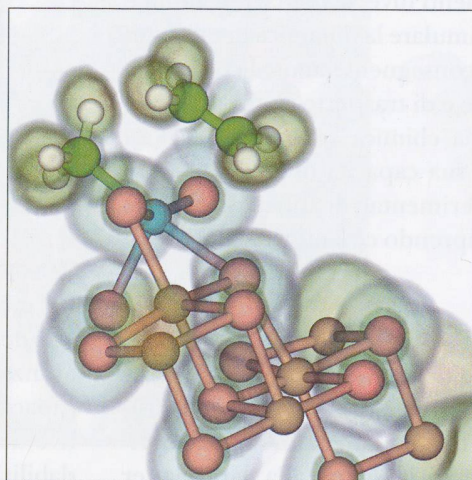
Visualizzazione

La visualizzazione scientifica costituisce un settore di attività particolarmente importante nell'ambito del supercalcolo: l'immensa quantità di dati risultante da simulazioni avanzate deve essere trattata in modo appropriato per poter comprendere e utilizzare i risultati. La visualizzazione ha esigenze molto particolari a causa della grande quantità di dati da trattare e della complessità dei fenomeni rappresentati. Le immagini che corredano il presente contributo, tutte elaborate al CSCS di Manno, illustrano bene i progressi conseguiti in questo settore chiave.

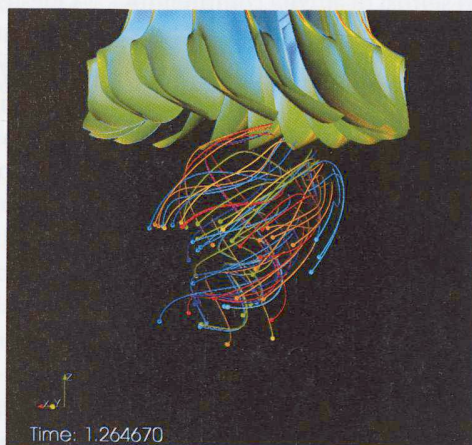
* Dr., Ing. meccanico, Manno
 ** Chimica, CSCS, Manno



5



6



7

Fig. 5 – Evoluzione del sistema vorticoso per un'ala a delta a numero di Mach elevato

Fig. 6 – Rappresentazione della densità in una molecola di etilene

Fig. 7 – Analisi della corrente instazionaria in una turbina idraulica