

# SIMULAZIONI DI REALTÀ VIRTUALE MOLECOLARE SU GRIGLIE DI COMPUTER: DALLA RICERCA UNIVERSITARIA ALLE APPLICAZIONI PRODUTTIVE

## PREMESSA

Lo spinoff universitario MASTER-UP [1,2] (insieme con ESEBEL [1] e PROLABIN&TEFARM [1] spinoff dell'area di Scienze dell'Università di Perugia) è impegnato nel trasferimento al mondo della produzione di tecnologie innovative sviluppate all'interno dell'Ateneo (Dipartimento di chimica [3], Centro di eccellenza CEMIN [4], Dipartimento di Matematica e Informatica [5]) e basate su elaborazioni di realtà virtuale effettuate su griglie di computer. In particolare esso supporta con proprie competenze ed elaboratori il coordinamento delle griglie di calcolo (Grid) di COMPCHEM [6] l'Organizzazione virtuale europea che gestisce il calcolo molecolare distribuito del progetto europeo EGEE [7]. Obiettivi concreti di tali calcoli sono la produzione di celle a combustibile [8], lo studio delle condizioni di cattura dei gas in un particolare ghiaccio d'acqua (clatrati idrati) [9], lo sviluppo di strumenti per la ricerca e l'insegnamento Universitari [10].

## GEMINI GRID

Nell'autunno 2008 la Regione Umbria a valere sui fondi del Programma Regionale di Azioni Innovative FESR 2006-2007 (Azione 1.1, Programma SITEMA) "Valorizzare le attività di ricerca e promozione di spinoff industriali basati su tecnologie innovative e ICT" ha acquistato un cluster di 51 processori quadricore che ha affidato in comodato d'uso al Dipartimento di Chimica a supporto delle attività di alcuni spinoff impegnati nel trasferimento tecnologico. Il cluster è stato corredato del software di base e del middleware di EGEE ed ha aggiunto le sue due torri (da cui il nome Gemini Grid) a quella già esistente formata da altri 17 processori. Fa parte del progetto anche il pianificato acquisto di un laboratorio immersivo di realtà virtuale e di uno storage con funzione di deposito di unità didattiche di scienze molecolari che per ora non è stato possibile finanziare ma che si spera diventi quanto prima realtà.

## L'entrata in produzione

Ci è voluto quasi un anno per completare, sui fondi del progetto di ricerca europeo EGEE (di cui il Prof. Laganà è titolare), la sistemazione logistica (adattamento dei locali, condizionamento delle stanze, rafforzamento dei dispositivi anti-intrusione, adeguamento dell'alimentazione elettrica, etc.) e passare al collaudo della piattaforma di calcolo complessiva. La sezione locale della piattaforma di calcolo è già in funzione e si stanno ultimando i collegamenti per trasferire ad essa la gestione della Organizzazione virtuale COMPCHEM. Sono pertanto operativi tutti i progetti di ricerca mirati al trasferimento tecnologico innovativo relativi alla modellistica molecolare su Grid dei materiali per la produzione di celle a combustibile, per la formazione di clatrati idrati, per la progettazione di "learning object" con cui alimentare un deposito di unità didattiche di scienze molecolari.

## Un progetto industriale di immagazzinamento chimico dell'energia

Particolarmente promettente ai fini dei risvolti produttivi è l'attività relativa alla formazione di clatrati idrati condotta dal Prof. Savelli (Presidente del CEMIN) e dai suoi collaboratori e che è argomento di studi di dinamica molecolare da parte del Prof. Laganà in collaborazione con la Prof.ssa Alberti dell'Università di Barcellona. Tale ricerca è stata fatta oggetto di un sostanzioso investimento da parte di Master-up (nell'ambito del programma regionale FESR per start-up e spin-off) che ha consentito la realizzazione di un apparato sperimentale prototipo per lo studio delle condizioni ottimali nell'uso dei clatrati. Su questo tema, grazie ad un forte interessamento di privati e dell'ENEA, si è passati alla creazione di una start-up mirata a progettare ed assemblare impianti industriali di opportuna taglia che utilizzino l'energia elettrica prodotta da impianti eolici e fotovoltaici nei periodi di bassa domanda per generare idrogeno e metano da immagazzinare e riutilizzare per generare energia nei periodi di massima domanda.

## Riferimenti

- [1] <http://spinoff.unipg.it/>
- [2] [http://www.netval.it/pagine/pagina.aspx?ID=Master\\_up001&L=IT](http://www.netval.it/pagine/pagina.aspx?ID=Master_up001&L=IT)
- [3] <http://www.chm.unipg.it/>
- [4] <http://www.google.it/search?q=CEMIN+unipg.it&ie=utf-8&oe=utf-8&aq=t&rls=org.mozilla:en-US:official&client=firefox-a>
- [5] <http://www.dmi.unipg.it/>
- [6] <http://compchem.unipg.it/>
- [7] <http://www.eu-egee.org/>
- [8] M. Porrini, A. Laganà, *A Molecular Dynamics study of Zirconium phosphate membranes* *Lecture Notes in Computer Science* 4075, 295-304 (2007)
- [9] M. Alberti, A. Aguilar, M. Bartolomei, D. Cappelletti, A. Lagana', J.M. Lucas, F. Pirani, *A study to improve the van der Waals component of the interaction in water clusters*, *Physica Scripta*, 78 (5), 58108-58115 (2008)
- [10] A. Laganà, S. Crocchianti, N. Faginas Lago, A. Riganelli, C. Manuali, S. Schanze, *From Computer Assisted to Grid Empowered Teaching and Learning Activities in Higher Chemistry Education in Innovative Methods in Teaching and Learning Chemistry in Higher Education*, I. Eilks and B. Byers Eds, RSC Publishing (2009),