

Supercomputer e metodi Montecarlo in alcuni casi di studio al Lawrence Livermore National Laboratory

Leonardo Colletti

abstract :

L'equazione fondamentale che descrive la materia a livello microscopico è nota da almeno settant'anni, ma il suo livello di complessità è tale da renderla di assai ardua soluzione. All'estremo opposto della scala dimensionale, le proprietà dei materiali possono essere studiate approssimando la materia al continuo. Riuscire a collegare le proprietà macroscopiche di un materiale alle interazioni quantistiche dei suoi costituenti elementari rappresenta un'impresa scientifica entusiasmante e ricca di possibili ricadute tecnologiche. Il ricorso ai calcolatori e il succedersi di efficaci metodi di approssimazione ha consentito nella seconda metà del secolo scorso una modellizzazione via via sempre più accurata di varie proprietà della materia, ma pur sempre limitata allo studio di sistemi di poche particelle o a metodi in cui parametri arbitrari e incontrollabili giocavano un ruolo fondamentale. Oggi, grazie agli sviluppi più recenti del metodo Monte Carlo Quantistico e dell'utilizzo di potenti macchine di calcolo parallelo, si è in grado di risolvere in modo esatto alcuni sistemi fisici composti da centinaia di particelle, innestando così la scala nanometrica su quella atomica, permettendo quindi la predizione di caratteristiche della materia altrimenti escluse dagli approcci approssimati.

Grazie ad ASCI White, il secondo calcolatore più potente del mondo, al Lawrence Livermore National Laboratory si aprono le porte alla possibilità di sperimentare nuovi metodi computazionali, come una versione del metodo Monte Carlo priva di arbitrarietà per lo studio di sistemi fermionici, o di affrontare, sempre a partire dai principi primi, insoluti problemi di modellizzazione di materiali sulla scala nanometrica, come il tempo di vita dei positroni negli isolanti, o, ancora, di tentare di seguire un sistema nella sua evoluzione su diverse scale dimensionali e temporali nonché di simulare condizioni estreme in modo da indirizzare successivamente la sperimentazione verso le regioni più interessanti.



Leonardo Colletti

l'intervento è disponibile nei formati:

