

RISeT – Rete Informativa Scienza e Tecnologia

<i>Mittente</i>	IIC San Francisco - Ufficio Scientifico e Tecnologico
-----------------	---

<i>Titolo</i>	Nuovo supercalcolatore per problemi di chimica computazionale
<i>Parole chiave</i>	Supercalcolatore, chimica computazionale, NWChem
<i>Settori/sottosettori</i>	1-2-3-8-11-13-18
<i>Tipo di informazione</i>	Strumentazione scientifica

<i>Redazione</i>	Terenzio Scapolla/Federico Marchesi
<i>E-mail - Tel - Fax</i>	<a href="mailto:tscapolla@sfiic.org">tscapolla@sfiic.org</a> T 415 788 7142 F 415 788 6389

TESTO

Il [Pacific Northwest National Laboratory](#) (PNNL, Richland, Washington) ha installato un nuovo supercomputer, prodotto dalla [Hewlett Packard](#) (Palo Alto, California). Il nuovo calcolatore, chiamato [Chinook](#) e collocato presso l'[Environmental Molecular Sciences Laboratory](#) (EMSL), è in grado di compiere 160 trilioni di operazioni al secondo e si colloca tra i 40 calcolatori più veloci al mondo.

[Chinook](#), che ha richiesto un investimento di 21,4 milioni di dollari da parte, dell'Office of Biological and Environmental Research (Office of Science, DOE) sarà usato da PNNL e Department of Energy per condurre ricerche su energia, ambiente e sicurezza nazionale. L'elevatissima capacità di calcolo potrà permettere, ad esempio, di comprendere la funzione di ogni singola molecola all'interno di complessi processi biologici, chimici e fisici che caratterizzano problemi ambientali ed energetici.

Oltre che ai tradizionali parametri di potenza e velocità di calcolo, il supercomputer è stato progettato per soddisfare in modo specifico problemi di chimica computazionale. [Chinook](#) dispone di 4620 processori quad-core disposti su 2310 nodi. Ogni nodo può essere paragonato a quattro personal computer particolarmente potenti, in quanto i processori quad-core danno a ciascun nodo l'equivalente di otto processori e 32 gigabyte di memoria.

Il principale lavoro di [Chinook](#) sarà quello di impiegare [NWChem](#), un programma di chimica computazionale dedicato alla simulazione e alla predizione della chimica intra- e inter-molecolare. Altri problemi che saranno affrontati con l'impiego del supercomputer riguardano gas idrati (riserve di combustibile, come il metano, intrappolate nelle profondità oceaniche), trasformatori batterici (colonie di batteri in grado di ripulire sostanze tossiche in terreni contaminati), plastiche verdi (nuovi materiali catalizzatori per la

trasformazione di gas propano in plastica, generando solo acqua come prodotto residuale).

Sito Web	<a href="http://www.pnl.gov/news/release.asp?id=387">http://www.pnl.gov/news/release.asp?id=387</a>
Fonte	<a href="#">Pacific Northwest National Laboratory</a>
Data	5 Agosto 2009