



IL POLITECNICO DI TORINO METTE IL TURBO AI CALCOLI ATOMISTICI

Uno studio dell'Ateneo permetterà di svolgere in poche ore calcoli al computer che prima richiedevano mesi, aprendo prospettive incoraggianti per molti settori della ricerca biologica e ingegneristica

Torino, 6 settembre 2017 - I moderni computer sono macchine estremamente veloci e precise in grado di effettuare un numero elevatissimo di operazioni logico-matematiche in una frazione di secondo. Grazie a questa caratteristica, sono diventati strumenti insostituibili in moltissime applicazioni della vita comune, dai videogiochi fino alla diagnostica medica. Anche nell'ambito della ricerca scientifica e ingegneristica, i calcoli al computer hanno sempre più **un impatto rivoluzionario sul modo di investigare nuovi fenomeni, calcolare e progettare**: è difficile anche solo immaginare oggi un qualsiasi campo della conoscenza dove i computer non giochino un ruolo chiave.

Una presenza così pervasiva spesso induce a credere che un qualsiasi fenomeno fisico o problema ingegneristico possa essere velocemente affrontato con accurate simulazioni numeriche affidate a calcolatori elettronici sufficientemente veloci. Purtroppo, però, esistono diversi esempi di grande interesse caratterizzati da una complessità tale che nemmeno i cosiddetti super-calcolatori o super-computer (ovvero cluster di centinaia o migliaia di processori elettronici in parallelo) sono in grado di affrontare efficacemente. Ne consegue che, quando possibile, sono richiesti tempi di elaborazione di diversi mesi o addirittura più lunghi per portare a termine un singolo calcolo (o, come è spesso definito in gergo, "simulazione numerica").

Tra i diversi ambiti scientifici dove oggi il problema dell'eccessivo onere computazionale è particolarmente limitante, c'è senza dubbio quello delle **simulazioni atomistiche**, spesso anche chiamate **simulazioni di dinamica molecolare**. Nell'ingegneria moderna, tra le altre cose, tali simulazioni consentono la progettazione di materiali innovativi manipolati su scala atomica e dotati di prestazioni straordinarie. Questo problema di calcolo rende talvolta impraticabile la progettazione dettagliata al computer dove sarebbero richieste decine o centinaia di simulazioni per progettare un singolo materiale o nano-componente sotto molteplici condizioni di funzionamento.

L'ingegneria non è l'unica disciplina dove i calcoli atomistici rappresentano un prezioso strumento di indagine e progettazione. Nelle **scienze biologiche** è in corso da anni una rivoluzione che sta trasformando la nostra conoscenza da descrittiva a quantitativa. Una rivoluzione nella quale le simulazioni di dinamica molecolare hanno avuto (e avranno sempre più) un peso importante nel far luce sul ruolo e i meccanismi fisici di funzionamento di molte biomolecole alla base della nostra stessa vita, come ad esempio le proteine. Da un lato, una conoscenza approfondita e quantitativa è fondamentale per il progresso della bioingegneria e nella ricerca di cure mediche sempre più efficaci. Dall'altro, la complessità dei sistemi di interesse biologico è tale che i tempi computazionali sono troppo lunghi e rappresentano una drammatica limitazione al progresso scientifico.

Una soluzione a questa criticità può arrivare da uno studio pubblicato sulla prestigiosa [rivista americana PNAS](#), frutto di una collaborazione internazionale pluriennale tra il Politecnico di Torino, la Princeton University, il Max Planck Institute e la Yale University. Durante questo studio, è stato messo a punto un metodo di calcolo rivoluzionario in grado di **accelerare in modo significativo le simulazioni atomistiche al computer e quindi le scoperte scientifiche.**

Il metodo è stato applicato con successo ad un sistema di rilevanza biologica, ovvero ad un sensore di saturazione lipidica della membrana cellulare studiato da alcuni ricercatori del Max Planck Institute di Francoforte nel 2016. Il sensore può essere immaginato come una macchina di dimensioni molecolari presente nelle cellule del nostro corpo: lo spostamento delle parti di cui è costituita tale macchina molecolare ne determina la configurazione. Stabilire correttamente la configurazione del sensore è cruciale in quanto questa regola la produzione di acidi grassi, contribuendo al corretto funzionamento e allo stato di salute delle cellule. Nel precedente lavoro del 2016, dopo sofisticati esperimenti e mesi di tradizionali calcoli al computer, i ricercatori avevano osservato e descritto le modalità di funzionamento (le “configurazioni”) del suddetto sensore. Utilizzando però il nuovo approccio a cui ha lavorato il Politecnico di Torino, poche ore di calcolo sono state sufficienti per evidenziare non solo le configurazioni del sensore già note ma, soprattutto, per scoprire ulteriori modalità di funzionamento del sensore che erano rimaste ad oggi sconosciute a causa dell’eccessivo onere computazionale.

Grazie ai risultati incoraggianti, i ricercatori contano di poter applicare ora il nuovo metodo a sistemi sempre più complessi e poter così accelerare il progresso scientifico in campo biofisico ed ingegneristico.

Lo studio è pubblicato al link:

<http://www.pnas.org/content/114/28/E5494.abstract>