

La rete GARR a supporto dei Laboratori Virtuali ENEA: Scienza dei Materiali e Fluidodinamica da remoto



Aurelio Mauri, Davide Erbetta, Niccolò Castellani
MICRON, via Olivetti 2, Agrate Brianza (MI), Italy



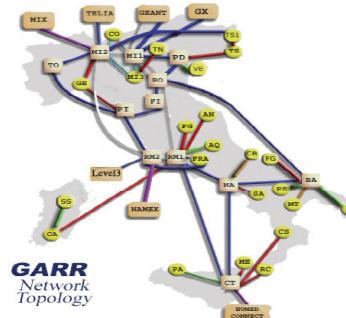
Massimo Celino, Salvatore Raia, Silvio Migliori
ENEA, Roma, Italia

Fiorenzo Ambrosino, Agostino Funel, Guido Guarneri
ENEA, Portici (NA), Italia

Abstract

Il Consortium GARR fornisce ai centri di calcolo ENEA che costituiscono l'ENEA GRID una serie di strumenti di rete e servizi avanzati con i quali l'Agenzia permette ai ricercatori e partner accademici e industriali di accedere alle risorse ICT in maniera semplice efficiente e robusta. I vari centri dispongono di una buona velocità di banda, ad esempio nel caso di Portici si hanno 2 link da 1000 Mbps. L'ENEA GRID dispone di 6 centri di calcolo distribuiti sul territorio nazionale che nel loro insieme rendono fruibili all'utenza più di 400 host di calcolo per un totale di oltre 4000 core computazionali, un file system distribuito AFS e un sistema di storage veloce che per il solo centro di Portici è costituito da 160 TB di spazio disco, macchine dedicate a svolgere applicazioni di diverso tipo che vanno, ad esempio, dalla grafica spinta alle schede programmabile FPGA. Inoltre, l'ambiente software dispone di diversi applicativi seriali e paralleli inerenti diverse discipline scientifiche tra cui la scienza dei materiali e la fluidodinamica computazionale (CFD). Allo scopo di rendere fruibile in maniera semplice il sistema descritto sono stati creati i laboratori virtuali CMAST e NEPTUNIUS dedicati il primo alle applicazioni inerenti lo studio della scienza dei materiali, ed il secondo alla fluidodinamica computazionale (CFD) e le interazioni fluido-struttura (FSI).

Sede	Punto di attestazione	Tipo di circuito	Capacità (Gbps)
ENEA (sede di Palermo)	PoP Palermo-Science	CDN 2Mbps	2048
ENEA (sede di Pisa)	PoP Pisa-S.Maria	CDN 2Mbps	2048
ENEA - Centro Ricerche Bologna	PoP Bologna-Morassutti	CDN SDH 3.4Mbps ATM	30720
ENEA - Centro Ricerche Brindisi	PoP Bari-Amendola	CDN SDH 1.59Mbps POS	159000
	PoP Roma-Tizii	CDN SDH 100Mbps FE	100000
	PoP Roma-Tizii	CDN SDH 100Mbps FE	100000
	PoP Roma-Tizii	CDN SDH 100Mbps FE	100000
	PoP Roma-Tizii	CDN SDH 100Mbps FE	100000
ENEA - Centro Ricerche Frascati	PoP Frascati-Fermi	DF MAN 1.55Mbps ATM	135000
	PoP Roma-Tizii	Lambda-GARR 1Gbps GE	1000000
ENEA - Centro Ricerche Portici	PoP Napoli-M.S.Angelo	CDN SDH 1Gbps GE	1000000
	PoP Napoli-M.S.Angelo	Lambda-GARR 1Gbps GE	1000000
ENEA - Centro Ricerche Portici	UNI-Napoli Federico II	CDN SDH 1Gbps GE	1000000
ENEA - Centro Ricerche Trisala	PoP Bari-Amendola	CDN SDH 34Mbps Seriale	34000
ENEA - Manfredonia	ENEA - Portici (NA)	L3	
ENEA - Sede centrale Roma	PoP Roma-Sapienza	CDN SDH 34Mbps ATM	30720

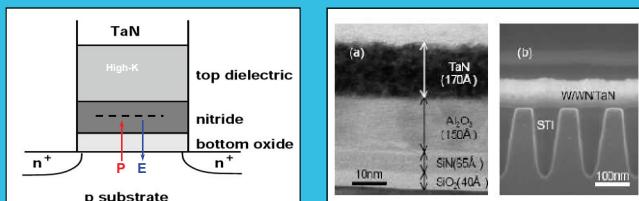


L'ENEA gestisce le reti locali (LAN) su tutti i centri mentre la connettività fra i centri è garantita dal Consortium GARR.

Portale CMAST per la Scienza dei Materiali

www.afs.enea.it/project/cmast

Negli ultimi anni, nel settore delle memorie per la microelettronica, si stanno sperimentando nuovi materiali basati su tecnologie nanometriche per superare gli attuali limiti dei dispositivi elettronici. La carica elettrica è possibile intrappolarla in difetti del materiale progettati appositamente. Il materiale più promettente sembra essere il Si_3N_4 nella fase amorfa, di cui pochi nm vengono depositati per realizzare il dispositivo.

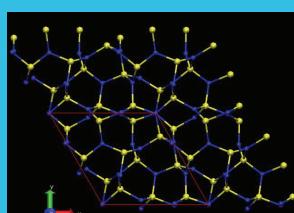


Simulazioni di Dinamica Molecolare ab-initio sono realizzate per caratterizzare strutturalmente ed elettronicamente le fasi cristalline ed amorfhe del Si_3N_4 .

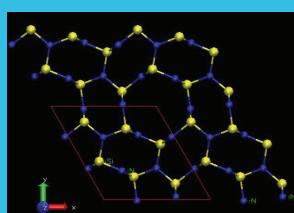
Il codice di calcolo CPMD code (www.cpmd.org) è utilizzato per studiare il materiale in condizioni termodinamiche di pressione e temperatura costante.

I risultati numerici sono in ottimo accordo con i risultati sperimentali e forniscono chiare indicazioni sui parametri di processo per la realizzazione del materiale.

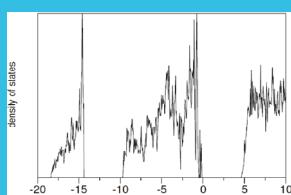
Hexagonal alpha phase



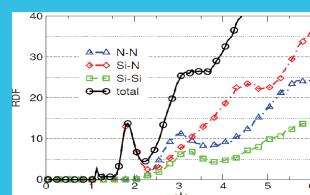
Hexagonal beta phase



Electronic properties



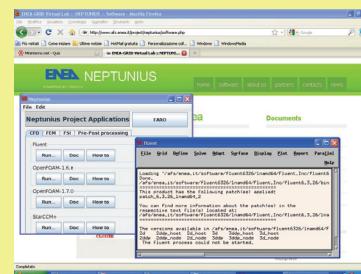
Structural properties



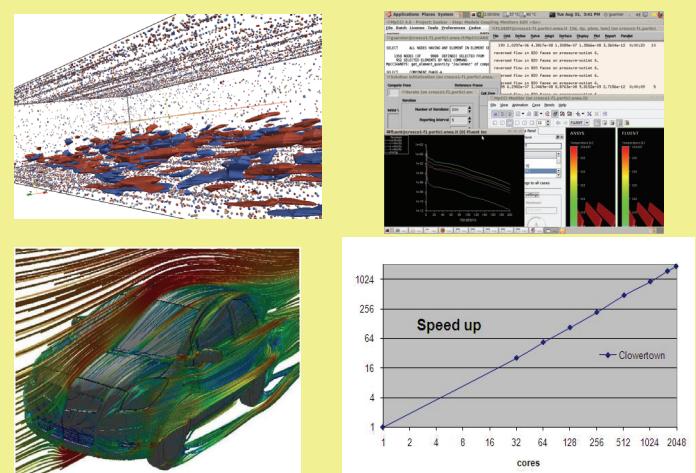
Portale NEPTUNIUS per la Fluidodinamica

www.afs.enea.it/project/neptunius

Il laboratorio dà la possibilità a diversi utenti del mondo della ricerca pubblica e privata di condividere esperienze e conoscenze, instaurare collaborazioni, accedere alle applicazioni (ANSYS Fluent, ANSYS, Abaqus, OpenFOAM, MpCCI, Paraview etc.), consultare la documentazione e le pubblicazioni, ottenere informazioni relative agli eventi più rilevanti organizzati.



Alcuni risultati



- Interazione tra flussi particellari e superfici confinanti.
- Interazione fluido-struttura: calcolo MpCCI di magneto-termica (busbar system).
- Aerodinamica esterna: post-processing da remoto con dati di grosse dimensioni.
- CFD sul sistema HPC CRESCO di ENEA GRID.