

RISPOSTE INNOVATIVE ED INTEGRATE A PROBLEMI COMPLESSI: L'ESPERIENZA DEI NETWORK DEDICATI ALLA CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE

Vincenzo Barone

Scuola Normale Superiore di Pisa

La varietà, le dimensioni e le diverse scale temporali che caratterizzano i sistemi e i processi di interesse in settori quali le scienze dei materiali, le scienze della vita o i beni culturali ed ambientali pongono alla modellistica computazionale problemi sempre più complessi che richiedono l'integrazione su larga scala sia delle risorse computazionali che di competenze multidisciplinari. Da un punto di vista scientifico, lo sviluppo di metodi multiscala spaziali e temporali offre una possibile risposta in quanto permette di integrare in modo efficace modelli ed algoritmi ottimizzati per specifici settori. Tuttavia, il 'confine' tra diverse regioni e/o scale temporali deve essere ben definito e trattato in maniera appropriata coniugando ed accoppiando nel modo più appropriato ed efficace trattazioni e competenze anche molto diverse. Allo stesso tempo, la costituzione e l'utilizzazione efficace di network computazionali che implementino i nuovi paradigmi del grid e cloud computing non sono privi di difficoltà quando i problemi computazionali da affrontare non siano lineari e facilmente parallelizzabili. Partendo da queste considerazioni si cercherà di fornire un quadro degli sviluppi più recenti nel campo specifico della chimica computazionale facendo ricorso anche ad alcuni esempi concreti tratti dall'esperienza diretta del relatore.