

Presentazione di Michele Parrinello

Vincitore del Premio Marcel Benoist 2011 e professore di scienze computazionali
Università della Svizzera italiana e Politecnico federale di Zurigo



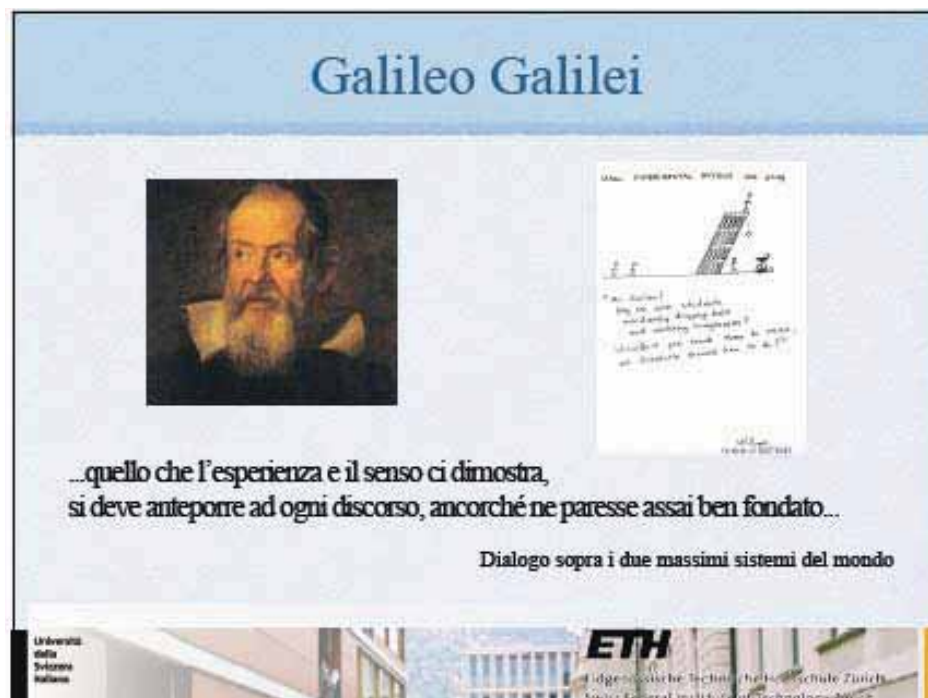
ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Cosa sono ed a che servono le scienze computazionali



Michele Parrinello

Department of Chemistry and Applied Biosciences ETH, Zurich
Institute of Computational Science, USI, Lugano
Switzerland

Università
della
Svizzera
Italiana



Galileo Galilei



...quello che l'esperienza e il senso ci dimostra,
si deve anteporre ad ogni discorso, ancorché ne paresse assai ben fondato...

Dialogo sopra i due massimi sistemi del mondo

ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Università
della
Svizzera
Italiana

Saggezza Galileana

Il buon insegnamento è per un quarto preparazione e tre quarti teatro.

Tutte le verità sono facili da capire una volta che sono state rivelate. Il difficile è scoprirle.

Dietro ogni problema c'è un'opportunità.

La natura è un libro scritto in caratteri matematici

Le equazioni di Newton



$$M_i \ddot{R}_i = -\nabla U(R_1, R_2, \dots, R_N)$$

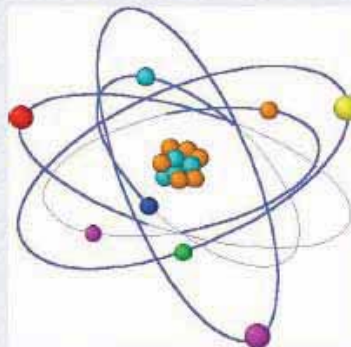
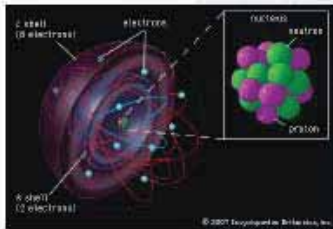
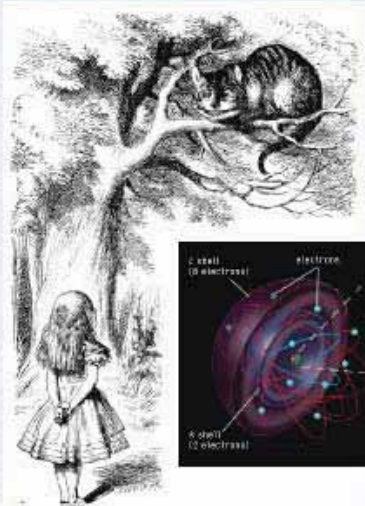
Massa x Accelerazione = Forza



Fra le stelle con Newton



Dal macroscopico al microscopico



Le equazioni quantistiche



$$H\psi = E_0\psi$$

L'equazione di Schrödinger



$$E_0 = E[\rho_0(\mathbf{r})]$$

La teoria del funzionale densità

Troppo difficile?



P. A. M. Dirac
Proc. Roy. Soc.
Ser. A, 123, 714 (1929)

“Le leggi fisiche necessarie per la teoria matematica di una larga parte della fisica e di tutta la chimica sono ormai completamente conosciute. La difficoltà è però che l'applicazione rigorosa di queste leggi conduce ad equazioni che sono troppo difficili per essere risolubili.”

Durante la guerra a Los Alamos

John Von Neumann



ENIAC

Enrico Fermi



Il progresso tecnologico

Cray T3D at
EPFL



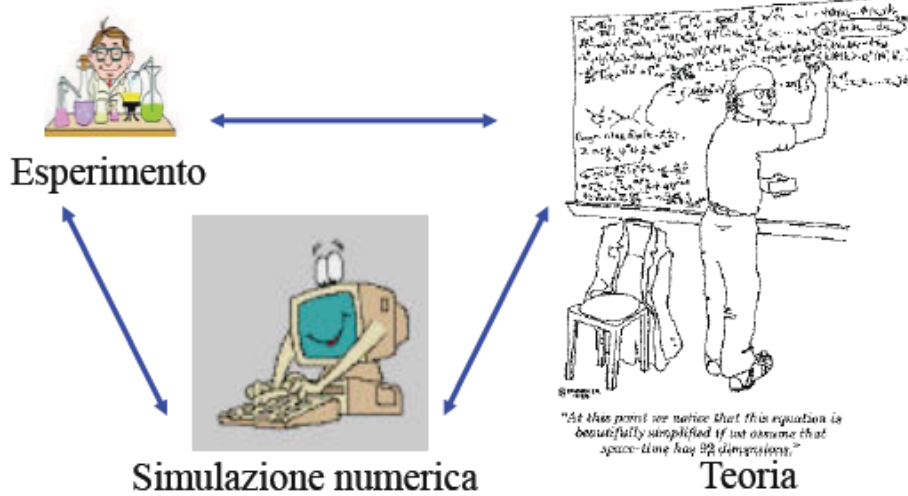
1 Teraflop = un milione di milioni di operazioni al secondo

1 Petaflop = 1000 Teraflops

I campioni di ieri sono i PC di oggi



Il triangolo della scienza



Nel mezzo di una rivoluzione

I due classici approcci alla scienza, quello empirico/sperimentale e quello teorico/analitico sono stati supplementati dalla simulazione e dalla modellizzazione numerica

La crescita esponenziale consente di simulare fenomeni sempre più complessi.

I supercomputer sono ora accessibile ad una sempre più vasta platea di scienziati in molti campi: clima e meteorologia, fisica biologia, chimica, scienze sociali, finanza, medicina, scienza dei materiali, nanotecnologia, etc.

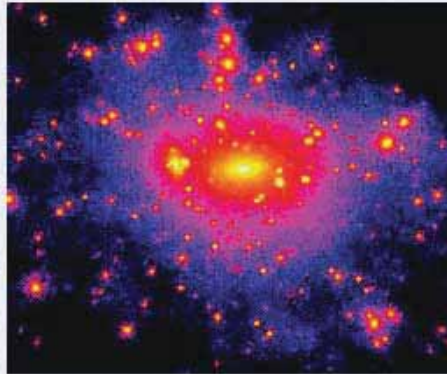
Le nuove opportunità

La connessione a banda larga consente di connettere in modo veloce i diversi centri di calcolo.

La crescita del potere computazionale ed lo sviluppo di **nuovi algoritmi** consentono di risolvere problemi precedentemente ritenuti insolubili.

La visualizzazione ha fatto grandi progressi.

Dal grandissimo ...



... all'infinitamente piccolo



la simulazione dei quarks

Il perchè delle simulazioni atomistiche

Per complementare gli esperimenti.

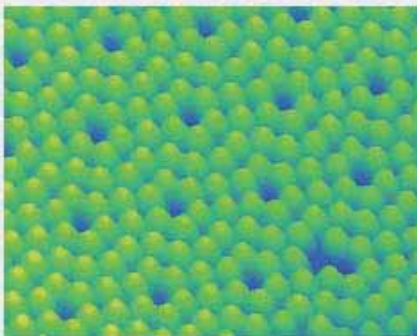
Per migliorare la comprensione dei sistemi.

Per rimpiazzare esperimenti difficili o
pericolosi.

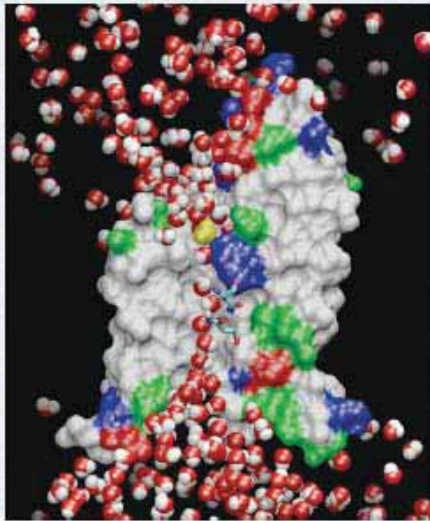
Per predire nuovi fenomeni.

E' una forma di microscopia virtuale.

Gli atomi come palline interagenti

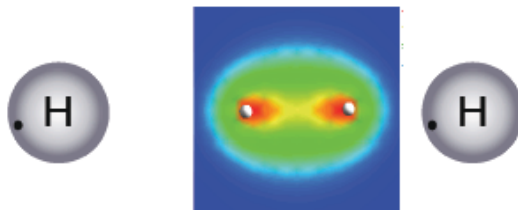
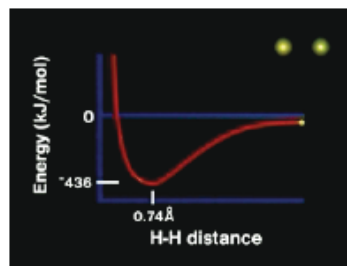
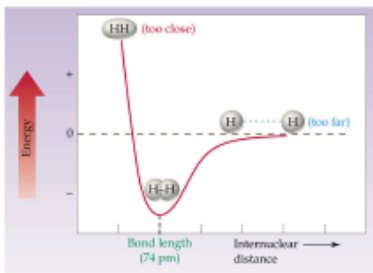


La dinamica molecolare



L'acquaporina regola il flusso dell'acqua attraverso la membrana cellulare ma non fa passare gli ioni ed i protoni? Il film e' scaricato dal sito del premio Nobel, dedicato a P. Agre. La simulazione e' di K. Shulten

H₂ Bond Formation



Tener conto degli elettroni

Ab-initio MD = MD+struttura elettronica

- ◆ Accuratezza e capacità predittiva
- ◆ Proprietà che dipendono dagli elettroni: IR, Raman, NMR, ESR, spettri ottici, etc.
- ◆ Chimica complessa



Alcune applicazioni applicative fatte da altri

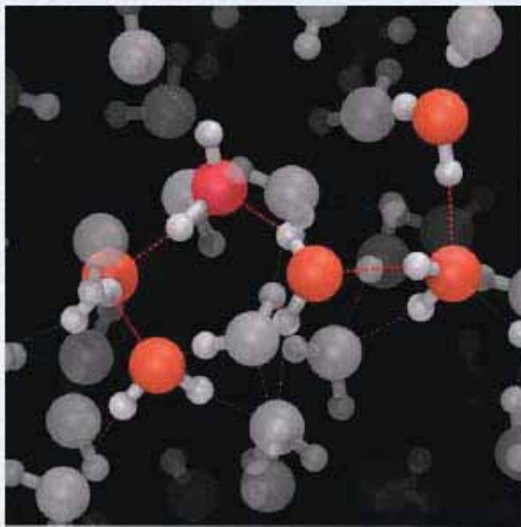
Farmaci per curare l'influenza

Batterie più potenti e leggere

La formazione degli idrocarburi

L'aroma del caffè

La dissociazione dell'acqua



Berkeley
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

Qual'è la rilevanza?

Qual'è il rapporto fra la conduzione protonica
e l'influenza... ?

Il virus dell'influenza necessita di un
ambiente acido per potersi replicare e per
propagare il ciclo infettivo.

Proton Conduction and the Flu

It's that time of the year ..

So its good to be thinking about the Flu

So, for the next few minutes I will focus on
Influenza A virus ...

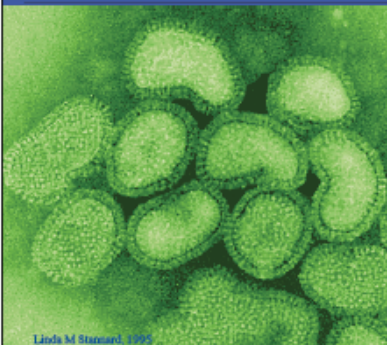
Check out the CDC website



Bill DeGrado, Larry Pinto, Bob
Lamb & Mike Klein

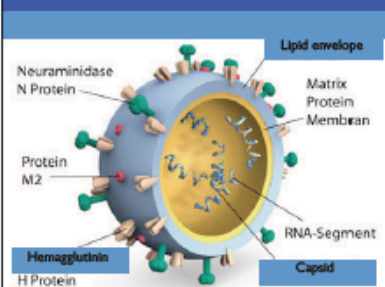


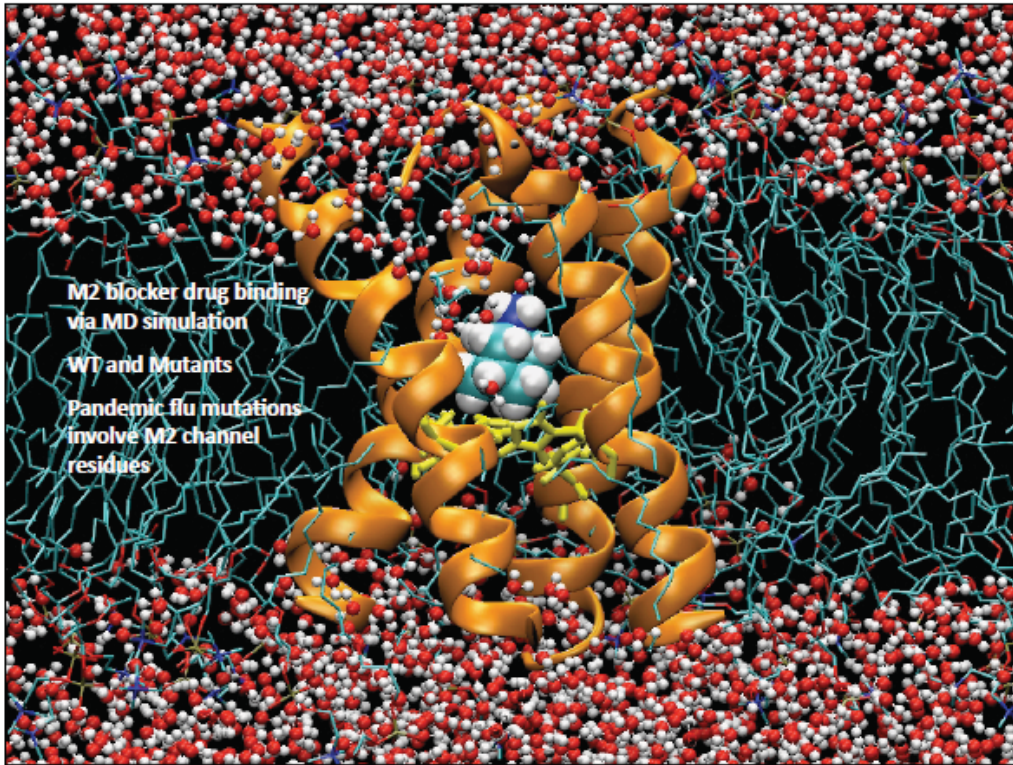
Influenza Virus A - Generalities



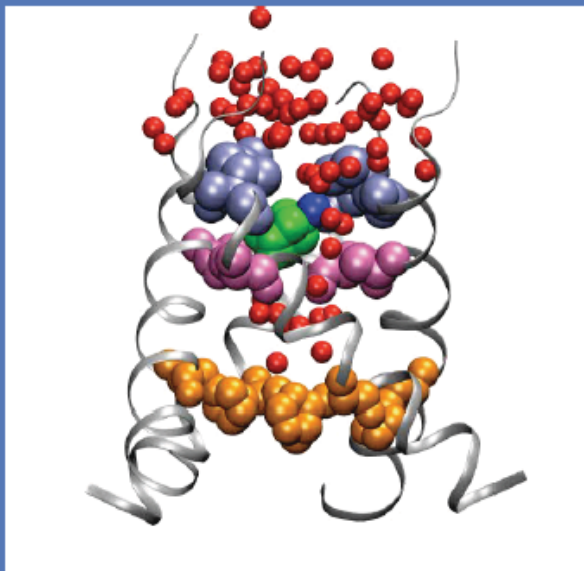
Linda M Steward, 1995

- 8 RNA segments encode for 11 proteins
- Hemagglutinin (HA or H) and Neuraminidase (NA or N). The responses of antibodies are used to classify the different serotypes of Influenza A viruses, e.g.
 - H1N1 caused "Spanish Flu" (1918-20)
 - H2N2 caused "Asian Flu" (1957-58)
 - H3N2 caused "Hong Kong Flu" (1968-69)
- The most virulent among A, B and C types
 - H5N1 pandemic threat (2006-7 flu season)
- HA, NA and M2 channel are targets for antiviral drugs
- Fast mutation and re-assortment
 - antigenic drift (epidemic)
 - antigenic shift (pandemic)
- Remedies:
 - seasonal vaccines
 - neuraminidase inhibitors: oseltamivir (Tamiflu) and zanamivir (Relenza)
 - **M2 channel blockers adamantane drugs**





Grand Challenge: Design of new M2 blocker drugs against bird flu

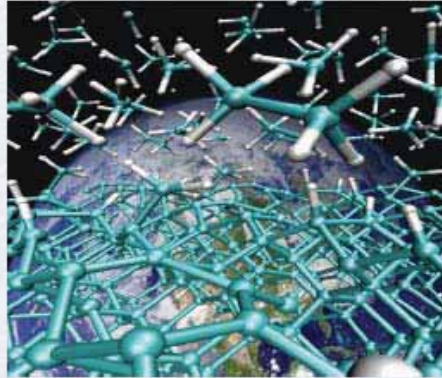
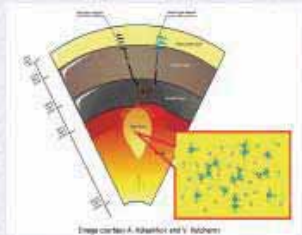


LONDON – Friday, August 8th
2008 UK

Pandemic flu, not terrorism,
is the most serious risk to
the U.K. public, says Britain's
first ever national threat
assessment.

Gating mechanism of membrane-bound M2 protein from influenza A virus: A new perspective from MD calculations Ekta Khurana, Matteo Dal Peraro, Russell DeVane, Satyavani Vemparala, William F. DeGrado, Michael L. Klein *PNAS* (2008)

Come si formano gli idrocarburi



UCDAVIS

LAWRENCE LIVERMORE NATIONAL LABORATORY
Science and Technology in the National Interest

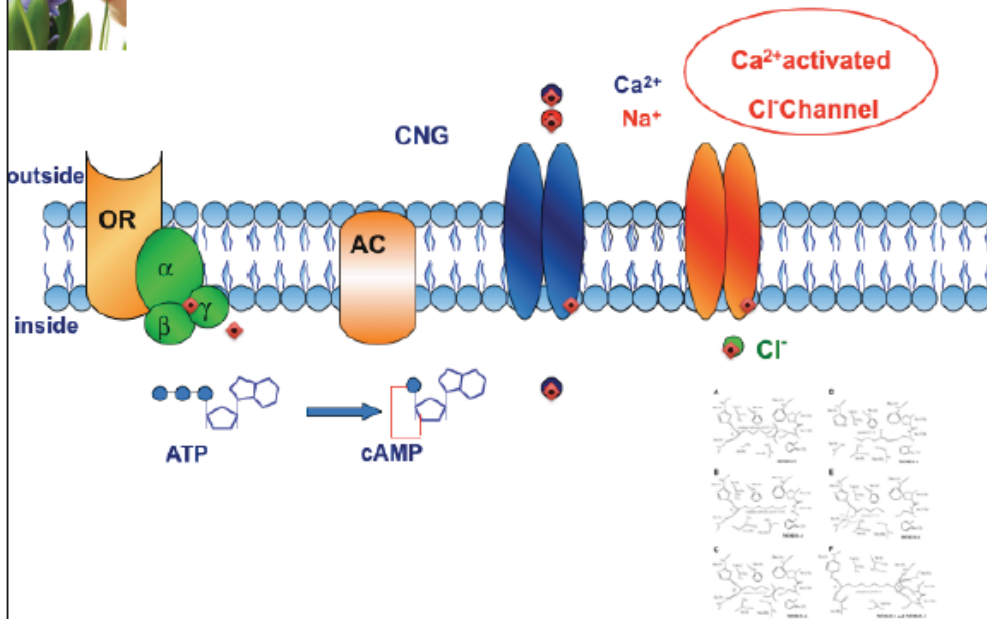
Una sorgente abiotica di idrocarburi

Università
della
Svizzera
italiana

ETH

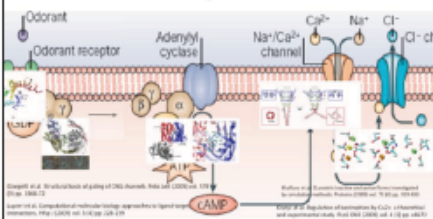
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology

What's that smell?: from odorant binding to electric current to the brain

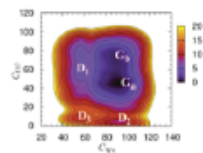


Molecular simulation of proteins involved in the smell process

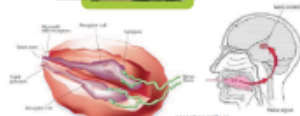
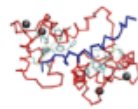
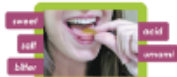
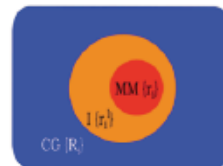
Structural predictions



Energetics By Metadynamics

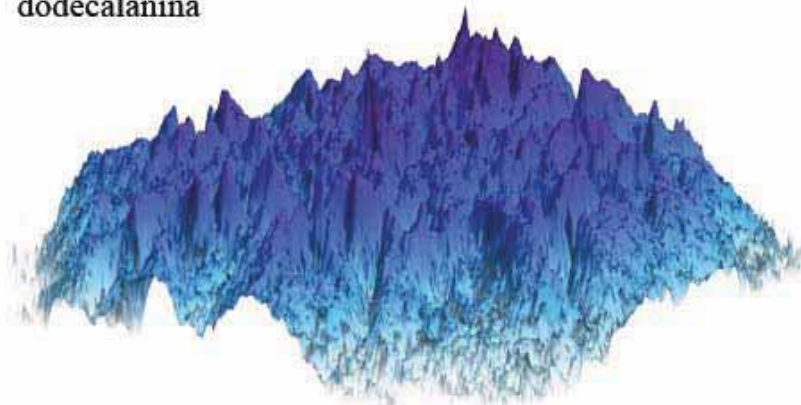


Ligand Binding by coarse-grained/MM



Similitudini

L'energia libera della dodecalanina



The most beautiful sea hasn't been crossed yet.
The most beautiful child hasn't grown up yet.
Our most beautiful days we haven't seen yet.
And the most beautiful words I wanted to tell you
I haven't said yet...

(Nazim Hikmet)

