



AGENZIA NAZIONALE PER LE NUOVE TECNOLOGIE,  
L'ENERGIA E LO SVILUPPO ECONOMICO SOSTENIBILE



Istituto Nazionale di Metrologia delle  
Radiazioni Ionizzanti  
Il Responsabile

Roma, 28/02/2014

Prot. ENEA/2014/13256/METR

alla c.a.: Ing. Silvio Migliori  
Responsabile UTICT

p.c.

---

**Oggetto:** Richiesta di utilizzo di CRESCO-4

---

La nuova facility CRESCO-4 presenta caratteristiche e potenzialità computazionali di elevato interesse per le applicazioni che sfruttano il calcolo parallelo, categoria in cui rientra la maggior parte dei codici di calcolo estensivamente utilizzati nelle attività di ricerca e sviluppo in cui l'UT METR risulta impegnata.

Entrando più nello specifico, molti dei codici utilizzati all'interno di METR sono codici Monte Carlo (MC) per simulare il tracciamento e l'interazione della radiazione direttamente e non direttamente ionizzante con la materia. Di seguito se ne riporta la lista completa:

1. MCNP6/MCNPX
2. FLUKA
3. GEANT4
4. EGSnrc
5. PENELOPE

Come noto, l'accuratezza dei risultati di simulazioni MC dipende dalla statistica delle storie processate, ragion per cui la possibilità di lanciare il calcolo in parallelo su un elevato numero di nodi permetterebbe di ridurre notevolmente i tempi di calcolo (a parità di accuratezza del risultato che ci si prefiggere di raggiungere) rispetto a quelli ottenibili sulle altre facility CRESCO (1-2-3). Sulla base di quanto esposto, ne consegue che, grazie a CRESCO-4, la nostra unità potrebbe beneficiare di un sostanziale aumento della produttività scientifica. In aggiunta a ciò, nella maggioranza dei casi di nostro interesse, l'utilizzo di CRESCO-4 consentirebbe un miglioramento significativo della qualità dei lavori, grazie alla concreta possibilità di effettuare molteplici analisi parametriche comparate, in un ragionevole lasso di tempo.

Oltre ai codici MC, è previsto anche l'utilizzo di codici di calcolo agli elementi finiti quali ANSYS e COMSOL Multiphysics, sebbene in minor misura rispetto alle applicazioni precedentemente

elencate. Avere a disposizione le potenzialità di CRESCO-4, per lo studio e la simulazione di transitori termici, d'interesse in più aree applicative all'interno della nostra unità, permetterebbe di fare analisi più accurate anche per quelle tipologie di scenari di calcolo con lenta convergenza numerica.

A fronte di quanto sopra premesso, di seguito si riporta una lista delle finalità scientifiche di alcune delle attività previste, che trarrebbero notevole vantaggio dall'utilizzo di CRESCO-4:

- Dimensionamento di una pila termica per la realizzazione, all'interno del Laboratorio di Metrologia Neutronica, di una facility di taratura con un flusso di neutroni termici sufficientemente elevato ( $106 \text{ n/cm}^2/\text{s}$  all'interno di una colonna di almeno 0.5 m di diametro). Questa attività prevede sia l'utilizzo di MCNPX/FLUKA/GEANT4 che l'utilizzo di ANSYS per analisi termico-strutturali.
- Calcoli di foto-produzione di particelle pesanti con elettroni di elevata energia su target di materiali ad alto numero atomico. Questi calcoli sono "time consuming", richiedendo l'osservazione di fenomeni fisici a bassa sezione d'urto. Questa attività prevede l'utilizzo comparato dei codici MCNPX/FLUKA/GEANT4 per propositi di benchmarking e rientra negli accordi di collaborazione fra UT METR (in qualità di Istituto Nazionale di Metrologia delle radiazioni Ionizzanti) ed altri enti di ricerca nazionali (INFN, CNR), nel quadro del progetto bandiera dell'INFN "IRIDE".
- Calcoli MC per la caratterizzazione della radiazione neutronica diffusa dalle pareti di calcestruzzo della sala sperimentale del Laboratorio di Metrologia Neutronica, in un ben definito punto di misura all'interno della stessa. Per questa attività si prevede l'uso dei codici MCNP6 e FLUKA.
- Stima dei fattori correttivi per misure di dose di radiazioni ionizzanti in acqua, in grafite, e per misure di kerma in aria con il codice PENELOPE2011.
- Simulazioni nell'ambito della metrologia dei radionuclidi per misure ad elevata precisione di attività di gamma, beta e alpha emettitori. Potenziali applicazioni in ambito di progetti europei in cui l'UT METR è coinvolta in cui si richiede il supporto di calcolo Monte Carlo per complessi apparati sperimentali quali sistemi innovativi nel settore della spettrometria alpha, beta e gamma, nel campo dell'imaging quantitativo con radionuclidi gamma e beta di uso medico, nella simulazione di rivelatori a scintillazione (plastici e liquidi) per misure di attività in cui è richiesto il processamento ad alta statistica di fotoni ottici.
- Simulazione MC di fasci di fotoni ed elettroni impiegati nelle moderne tecniche di radioterapia quali radioterapia ad intensità modulata (IMRT), tomoterapia e stereotassia. Le simulazioni sono finalizzate allo sviluppo di procedure dosimetriche che assicurino, per tali tecniche, la riferibilità della dosimetria clinica ai campioni primari. Per questa attività si prevede l'uso del codice BEAMnrc, un applicativo del codice EGSnrc.
- Simulazione MC della risposta in termini di dose assorbita di vari tipi di rivelatori in fasci di radiazione di piccole dimensioni. Saranno oggetto delle simulazioni rivelatori con volume

sensibile inferiore a 0.01 cm<sup>3</sup> condizione che rende indispensabile l'utilizzo del calcolo parallelo. L'attività è finalizzata alla realizzazione di un campione secondario per la dosimetria in fasci di fotoni di dimensioni inferiori a 2 cm. Per questa attività si prevede l'uso del codice EGSnrc.

Per il compimento delle succitate attività l'UT METR stima di utilizzare, fino a fine anno, circa 3.000.000 ore\*core (corrispondenti, indicativamente, ad un 10% del totale di ore\*core che CRESCO-4 prevede di erogare nel 2014).

In un contesto collaborativo fra METR e UTICT, affinché i codici di calcolo di interesse della nostra unità possano essere tutti adeguatamente e correttamente compilati e/o installati sulla piattaforma CRESCO-4, si auspica una sinergica interazione con il personale informatico di UTICT. L'obiettivo congiunto è il conseguimento dei migliori risultati possibili, da quella che può, senza dubbio, essere definita una delle piattaforme pubbliche di supercalcolo tra le più promettenti a livello nazionale.

Infine, tutte le pubblicazioni scientifiche in cui è previsto riportare i risultati dei calcoli e dei lavori realizzati su tutte le piattaforme Cresco, e quindi nello specifico, anche su CRESCO-4, riporteranno, come d'accordo, negli "Acknowledgment" opportuna dicitura di ringraziamento a ENEA/UTICT (come indicato in <http://www.afs.enea.it/project/eneagrid/rules.html>) e referenza a documentazione ufficiale, come specificato sui siti <http://www.cresco.enea.it> e [www.eneagrid.enea.it](http://www.eneagrid.enea.it), rispettivamente.

Cordiali saluti,

Istituto Nazionale di Metrologia  
delle Radiazioni Ionizzanti  
Il Responsabile  
(Dott. P. De Felice)

