

**Dipartimento di Scienze Chimiche**  
**Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale (LICC)**

**Tipologia di calcolo scientifico**

Il LICC è un'iniziativa dedicata al calcolo applicato alle scienze molecolari del Dipartimento di Scienze Chimiche. Le linee di ricerca primarie del LICC sono

1. Sviluppo ed applicazioni di metodi ab initio (teoria del funzionale densità), metodi misti (meccanica molecolare + meccanica quantistica) per lo studio di proprietà molecolari
2. Simulazioni Monte Carlo e dinamica molecolare per lo studio di meccanismi di reazione, proprietà di solvatazione statiche e dinamiche
3. Sviluppo ed implementazione di approcci modellistici basati su equazioni stocastiche per lo studio di processi cinetici, interpretazione di spettroscopie magnetiche ed ottiche
4. Sviluppo ed implementazione di simulazioni coarse-grained per materiali in nano e microscala

Le metodologie di calcolo principale sono basate su discretizzazione di sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali (linee 1-4); soluzione iterativa di sistemi lineari e non lineari con matrici grandi sparse (linee 1,3), calcolo di autovalori/autovettori di matrici sparse (linee 1,3), metodi agli elementi finiti, volumi finiti, differenze finite generalizzate (4). Sono utilizzati codici commerciali (linee 1,2) e codici sviluppati in loco in Fortran, C, C++ (linee 3,4).

Il LICC partecipa al progetto VILLAGE (centro di riferimento INSTM per il calcolo distribuito applicato alla scienza e tecnologia dei materiali, <http://www.instm.it>) con il laboratorio informatico chimico LSDM dell'Università "Federico II" di Napoli ed il centro CNR – IPCF di Pisa. Informazioni aggiuntive sono reperibili presso il sito <http://www.chimica.unipd.it/licc>

**Attrezzature di calcolo attualmente a disposizione**

Il LICC dispone attualmente delle seguenti risorse hardware:

- **Arrhenius** (20 nodi / 39 cores/ acq. 2002-2006) 5 nodi AMD Opteron Processor 246, 2Ghz, 2 cpu, 4GB ram HD SATA 80GB; 6 nodi Intel Xeon CPU 2.00GHz, 2 cpu, 1GB ram HD SCSI 18GB; 8 nodi Intel Pentium III CPU family 1.2MHz, 2 cpu, 1GB ram HD SCSI 18GB; 6 nodi Intel Xeon CPU 2.4GHz, 2 cpu, 1GB ram HD SCSI 36GB; 1 nodo AMD Opteron Processor 852, 2.4 GHz, 4 cpu, 8Gb ram HD SCSI 140GB; Infiniband
- **Avogadro** (71 nodi / 284 cpu / acq. 2007) 71 nodi (blade) Intel Woodcrest Dual Core, 4 cpu, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 72 Gb; Infiniband; OS Linux Red Hat; 2 Tb sistema storage su disco

Le risorse software sono

- SO base: Linux RedHat 3.0; compilers (64bit): Intel C++ Compiler per Linux, Intel Fortran Compiler per Linux, Portland Fortran; gnu cc
- Libraries: LAPACK, ScaLAPACK, BLAS, CBLAS, CLAPACK, ATLAS, GNU Library, FFTW, //Ellpack, PETSc
- Applicativi vari QM, MD (Gaussian, ADF, ORCA, NAMD, GROMACS, Comsol)

I cluster sono situati al pianterreno del DiSC (60 m<sup>2</sup>, termostatazione, gruppi di continuità 2 x 40 KWH + 20 KWH). Sono in acquisizione (entro gennaio 2008): 1 nodo aggiuntivo (4 core), 8 Gb di RAM aggiuntiva per i nodi di Avogadro) e 10 Tb per storage su disco

**Percentuale attuale di utilizzo delle risorse**

La percentuale di utilizzo è di circa il 75 % con punte del 90 -100 %; la percentuale di impiego varia con l'impegno dei gruppi di ricerca coinvolti (vedi oltre)

**Attrezzature di calcolo di potenziale interesse**

L'architettura del cluster principale (Avogadro) è pensata per utenti con esigenze miste, con una prevalenza di utenti che impieghino codici in parallelo su numerosi processori, ad elevata velocità di interconnessione; il LICC dispone di software proprietari e competenze specifiche per il calcolo di proprietà molecolari e di materiali.

L'interesse principale del LICC è poter accedere a risorse computazionali estese in sistemi grid, nonché ad acquisire/condividere competenze dedicate all'ingegnerizzazione del software prodotto localmente ed alla gestione dei sistemi di calcolo.

### **Elenco Persone**

La tipologia di impiego è basata su un insieme di utenti primari (Antonino Polimeno, Maurizio Casarin, Alessandro Bagno, Andrea Vittadini, Alberta Ferrarini, Gianfranco Scorrano ) e circa una decina di utenti secondari afferenti al DISC e al DSF; Arrhenius è anche utilizzato dagli studenti della Scuola di Dottorato in Scienze Molecolari per dimostrazioni ed esercitazioni.

### **Tipologia di assistenza tecnica a supporto delle attrezzature**

L'assistenza tecnica è a cura dell'Ing. Gianpietro Sella e del Dott. Luigino Feltre, del personale informatico del DiSC. Avogadro è in garanzia triennale fino al 2009, con contratto di assistenza on site; Arrhenius è fuori garanzia.

### **Costi di gestione delle attrezzature**

I costi di gestione annuali sono stimati in circa 10 k€ per licenze software, 5k€ per contratti di manutenzione sito e riparazioni fuori garanzia a cui si aggiungono circa 10k€ per la corrente elettrica.