



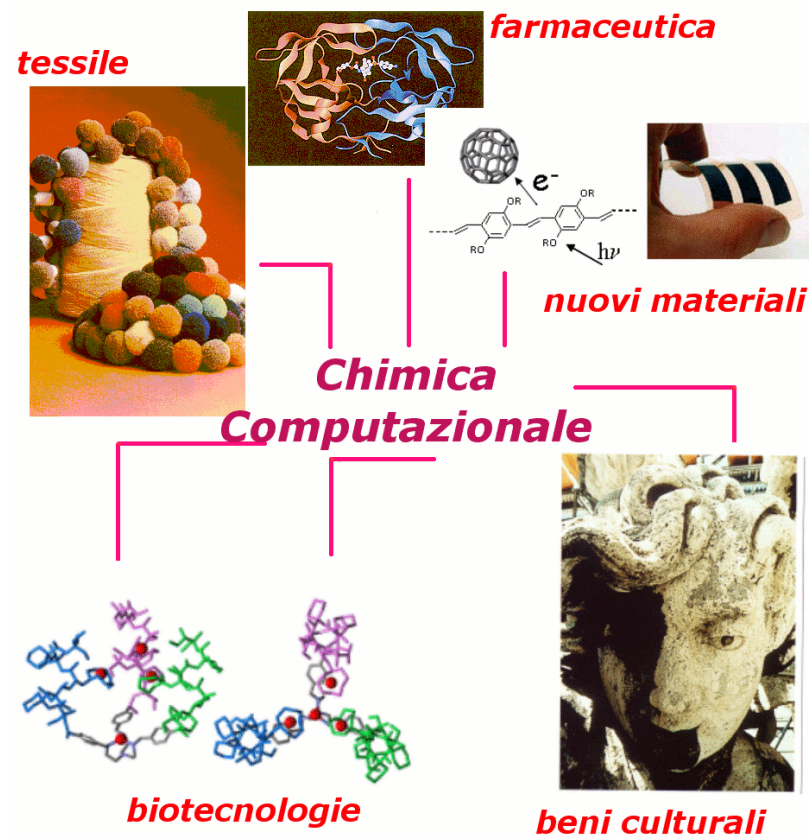
# Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Dipartimento di Scienze Chimiche  
Università degli Studi di Padova

*Antonino Polimeno*

# Chimica Computazionale

- Materiali funzionalizzati
- Biotecnologie
- Chimica farmaceutica
- Tessile
- Beni culturali
- Microfluidica
- Nanomedicina
- Chemiometria
- Chimica verde

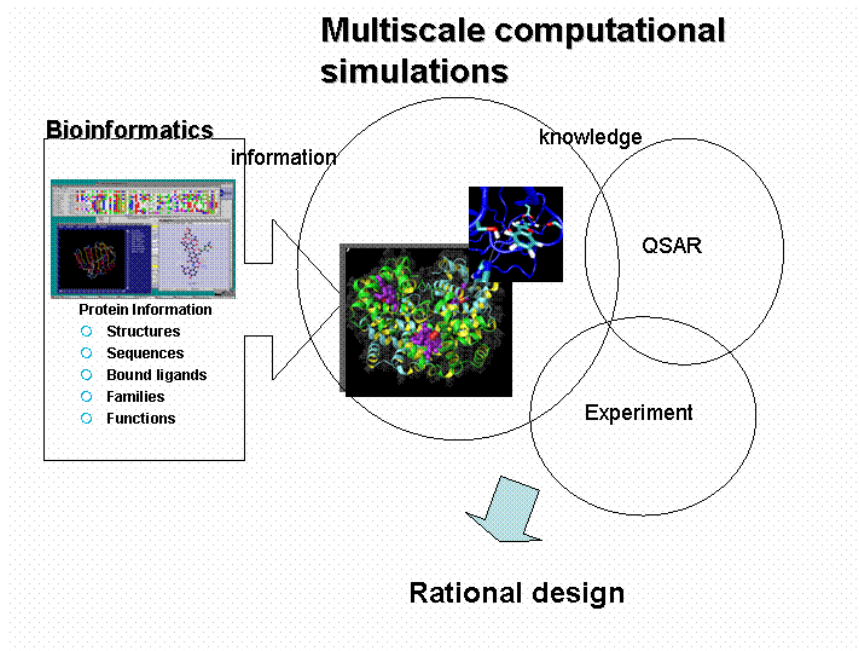


# Aree di competenza / 1

- **Metodi ab initio multiscala** (teoria del funzionale della densità)
- **Metodi misti** meccanica molecolare + meccanica quantistica
- **Funzioni localizzate** (PBC e NPBC)
- Simulazioni **Monte Carlo** e **dinamica molecolare**
- **Modelli continui** per lo studio di effetti di campo medio dell'intorno
- **Modelli di materiali** funzionalizzati, superfici solide ed interfacce
- **Approcci stocastici** per lo studio di processi cinetici
- **Simulazioni coarse-grained** per nano e microscala
- **Approcci statistici** per integrazione e razionalizzazione di dati (QSAR)
- **Calcolo di proprietà** ottiche, elettroniche di sistemi isolati e periodici

# Are di competenzaa / 2

- Sviluppo di tecnologie di grid computing in ambito chimico
- Metodi 'misti' QM/MM, coarse-grained
- Nuove metodologie per il calcolo multiscala





# Risorse / 1

## *Hardware*

- **Cluster- $\alpha$**  (20 nodi / 39 cpu) - **Arrhenius**: 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 nodes 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; OS Linux Red Hat
- **Cluster- $\beta$**  (71 nodi / 284 cpu) - **Avogadro**: 71 nodi (blade) Intel Woodcrest Dual Core, 4 cpu, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 72 Gb; Infiniband; OS Linux Red Hat

## *Software*

- **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
- **Software QM, MD**
- I cluster sono situati al pianterreno del DiSC, in un'area apposita (60 m<sup>2</sup>, termostatazione, gruppi di continuit  2  $\times$  40 KWH + 20 KWH).



## Risorse / 2

- **Area:** chimica teorica e computazionale / modeling di materiali / biosistemi
- **Persone:** Antonino Polimeno, Maurizio Casarin, Alessandro Bagno, Andrea Vittadini, Giacomo Saielli, Stefano Moro, Giorgio Moro, Diego Frezzato, Alberta Ferrarini
- **Sede:** Dipartimento di Scienze Chimiche, Via Marzolo 1, 35131 Padova
- **Web:** <http://www.chimica.unipd.it/licc>

# Prospettive e *desiderata* / 1

- Iniziative campus-grid
- Condivisione di competenze gestionali
- Ingegnerizzazione software
- Sviluppo ed ottimizzazione di codici di calcolo per nuove piattaforme computazionali
- Partecipazione ad iniziative nazionali per la costituzione di network dedicati al calcolo chimico e per le scienze dei materiali
  - Il LICC è uno dei nodi del **Virtual Italian Laboratory for Large-scale Applications in a Geographically distributed Environment (VILLAGE) - INSTM**
  - Il LICC partecipa a vari progetti di ricerca in ambito chimico (e.g. INSTM-CNR PROMO)





# Prospettive e *desiderata* / 2

- Un laboratorio dedicato permette:
  1. un più **agile impiego di risorse** per problemi di medie dimensioni, rispetto alla difficoltà di gestione in remoto delle risorse, più estese ma condivise, di un centro di calcolo
  2. la possibilità di avviare **esperienze formative** in loco per studenti, dottorandi e ricercatori, e quindi di costituire pool locali di esperti in chimica computazionale
  3. la possibilità di un **impiego razionale di risorse** di calcolo altrimenti disperse, mediante soluzioni basate sui sistemi grid
  4. l'avvio di **esperienze di integrazione** di competenze e risorse con altre componenti presenti in Ateneo



