

Dipartimento di Fisica

Sezione A - Risorse

1. Hardware

1.1 Tipo di architettura disponibile (macchina SMP, macchine interconnesse, GRID) e di uso (Macchina Dedicata, Condivisa, Di uso generale)

macchine interconnesse.....

1.2 Numero di box, numero di cores totali, tipo di processore (clock, produttore)

15 BOX + 38 CPU (INTEL Xeon - 2 GHz).....

1.3 Memoria per box, memoria totale (GB), spazio disco (GB)

4 GB/box, memoria totale: 60 GB, spazio disco totale :.1.TB.....

1.4 Tecnologia di interconnessione (bus interno, bus esterno, Infiniband, Myrinet, Ethernet, IP) e Banda verso il GARR (bottleneck) Mbps

Gigabit Ethernet.....

1.5 Tipo di architettura prevista a medio termine (macchina SMP, macchine interconnesse, GRID)

macchine interconnesse.....

1.6 Numero di box, numero di cores totali, tipo di processore (clock, produttore)

2 BOX, 2x4 CORE, XEON 2.5 GHz (marca:.HP).....

1.7. Memoria per box, memoria totale (GB), spazio disco (GB)

8 GB, totale: 16 GB, spazio disco : 600.GB.....

1.8. Tecnologia di interconnessione (bus interno, bus esterno, Infiniband, Myrinet, Ethernet, IP) e Banda verso il GARR (bottleneck) Mbps

Gigabit Ethernet.....

2. Software

Indicare, per ogni categoria, quali software vengono correntemente utilizzati

2.1.1. Compilers Technologies

2.1.1 Compilers **INTEL icc, ifort, gcc**.....

2.1.2 Debuggers **gprof, gdb**.....

2.2. Applications and Libraries

2.2.2 Bioinformatics Software

2.2.2.2 **Bioinformatics Databases**.....

2.2.2.3 **Data Acquisition & Analysis**.....

2.2.2.4 **Data Mining**

2.2.3 Chemistry Software

2.2.3.4 **Chemical Structure Analysis**.....

2.2.3.9 **Molecular Modeling**.....

2.2.7 Engineering Software

2.2.7.1 **Calculation and Math Libraries**.....

2.2.9.1 Curve Fitting.....
 2.2.9.3 Equation Solvers.....
 2.2.9.6 Numerical Analysis.....

Chemistry and Chemical Engineering Software:

CPMD, Quantum Espresso, RasMol

Engineering and Mathematics Software:

Maple, Mathematica

Visualization Software:

gnuplot, IDL, ImageMagick, Maple, Mathematica

2.3. Programming Libraries.....
Automatically Tuned Linear Algebra Software (ATLAS), Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS), FFTW, Intel Math Kernel Library (MKL), LAPACK, ScaLAPACK,

2.4. Parallel and Distributed Computing (Middleware).....
MPI (MPICH2)

Sezione B - Caratterizzazione di dettaglio delle Applicazioni

- 3.1. nome e tipologia dell'applicazione (free) **software scientifico di varia natura. .**
- 3.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i) **UNIX e LINUX.....**
- 3.3. è utilizzabile in ambiente GRID ? **NON SI SA.....**
- 3.4. il codice sorgente è pubblicamente disponibile ? **SI.....**
- 3.5. consumo di CPU per un run tipico (in secondi, stima) **24 ore.....**
- 3.6. può beneficiare di un cluster di CPU ? **SI.....**
 - 3.6.2 in connessione parallela (a la HPC).....
- 3.7. tipo di storage usato (file, DB) **FILE.....**
 - 3.7.1 stima della quantità (GB) utilizzata **10 GB.....**
- 3.8. stima dell'utilizzo della rete locale e geografica (Mbps) **Gigabit Ethernet.....**
- 3.9. è richiesto un accesso interattivo (con visualizzazione) ? **NO.....**
- 3.10. è richiesto un accesso batch ? **SI.....**
 - 3.10.1 se si: indicare il sistema batch utilizzato **PBS.....**

4. Applicazioni in uso nel futuro (da ripetere, ricopiando, per ogni applicazione)

Simili a al punto 3.

Sezione C - Caratterizzazione degli Obiettivi a Lungo Termine

5. Dreams' Book (se sono previsti più esperimenti ripetere, ricopiando)

- 5. tipologia di esperimento
 - Simulazioni su larga scala di materia condensata e sistemi biologici.....**
- 5.1. tipologia di architettura desiderata **Parallelismo massivo.....**

- 5.4. si presta al GRID computing ? **NO**.....
- 5.5. il codice sorgente è pubblicamente disponibile ? **SI**.....
- 5.6. consumi prevedibili (stima)
 - 5.6.1 numero di CPUs **100**.....
 - 5.6.2 memoria totale (GB) **10GB/nodo**.....
 - 5.6.3 spazio disco (storage, GB) **10 TB**.....
 - 5.6.4 tipo di connessione **Myrinet o Infiniband**.....
 - 5.6.5 uso della rete locale/geografica (Mbps) **Gigabit Ethernet**.....
 - 5.6.6 serve accesso interattivo ? **NO**.....

Sezione D - Possibile Valore Aggiunto

7. Occasioni di collaborazione con le realtà locali

Esistono occasioni di collaborazione con realtà locali extra-Ateneo (enti *non-profit* o *profit*) la cui riuscita dipenda in maniera critica o significativa da applicazioni di calcolo scientifico ?

CINECA.....

In caso di risposta affermativa alla domanda precedente, quali possibili sinergie (*partnership* tecnico-scientifica, scambio di *know-how*, reciproco rafforzamento) si intravedono tra tali realtà locali ed il futuro Laboratorio di Calcolo Scientifico nel Veneto ?

Know-how scientifico. Metodi numerici.....