

COMITATO PROMOTORE PER IL CALCOLO SCIENTIFICO NEL VENETO
RICOGNIZIONE SISTEMATICA SULLO STATO DELL'ARTE

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)

3 sistemi di calcolo cluster:

- avogadro: 71 nodi di calcolo di tipo blade della Hewlett-Packard, 2 nodi master in configurazione mirror ad alta affidabilita', 1 storage di rete ad alta capacita'

- arrhenius: 4 nodi di calcolo ed 1 nodo master della IBM

- arrhenius32: 20 nodi di calcolo ed 1 nodo master della IBM

I cluster sono posizionati in un'area apposita di 60 m2, con termostatazione, sistemi di allarme e gruppi di continuita 2 x40 KWH + 20 KWH con connessione di rete per lo spegnimento del sistema in caso di black-out prolungato

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

Avogadro: 74 box, 296 cores, Intel Woodcrest Dual Core 2.6GHz (4 CPU per nodo)

Arrhenius: 5 box, 10 cores, AMD Opteron Processor 246 2Ghz (c CPU per nodo)

Arrhenius32: 26 box, 44 cores, 6 nodi Intel Xeon 2.00GHz (2 CPU per nodo), 8 nodi Intel Pentium III 1.2GHz (2 CPU per nodo), 6 nodi Intel Xeon CPU 2.4GHz (2 CPU per nodo), 1 nodo AMD Opteron Processor 852, 2.4 GHz (4 CPU per nodo)

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

Avogadro: 4-8Gb, 456Gb, 21Tb

Arrhenius: 4Gb, 20Gb, 400Gb

Arrhenius32: 1-8Gb, 32Gb, 594Gb

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

Avogadro: 1 interconnessione ethernet ad 1Gb, 1 interconnessione infiniband a 20Gb, 1 interconnessione di management (HP ILO2)

Arrhenius: 2 interconnessioni ethernet ad 1Gb

Arrhenius32: 2 interconnessioni ethernet ad 1 Gb

Connessione a 100Mb fino al router DiSC

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

Espansione dei nodi del cluster avogadro, acquisto di un sistema GPU di calcolo ad alta parallelizzazione di NVIDIA Tesla S870, connessione GRID

.....
.....

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

Avogadro: 64 box, 256 cores, Intel Woodcrest Dual Core 2.6GHz (4 CPU per nodo)

Nvidia s870: 2 box, 8 GPU, 1024 processori multi-threaded

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

Avogadro: 8Gb, 512Gb, 8,96Tb

Nvidia s870: 12 Gb

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

Avogadro: 1 interconnessione ethernet ad 1Gb, 1 interconnessione infiniband a 20Gb, 1 interconnessione di management (HP ILO2)

Nvidia s870: PCI-express 8X

2. Software

Indicare, per ogni categoria, quali software vengono correntemente utilizzati

2.1.1. Compilers Technologies

2.1.1 Compilers

C/C++

Intel icc, icpc

Scali mpicc, mpic++

Portland Group pgCC, pgcc

GNU gcc, g++, cc, cmake
Fortran 90/Fortran 77
Intel ifort, ifc, ifc90
Scali mpif90, mpf77
Portland Group pgf90, pgf77
GNU gfortran

2.1.2 Debuggers GNU dbc

2.1.3 Other.....

Esempi:

C/C++

Intel icc, icpc (forces C++); mpiCC, mpicc
PathScale pathCC, pathcc; mpiCC, mpicc
Portland Group pgCC, pgcc; mpiCC, mpicc
GNU gcc, g++, cc

Fortran

Intel ifort, ifc, ifc90; mpif90, mpf77
PathScale pathf90, pathf95; mpif90
Portland Group pgf90, pgf77; mpif90, mpf77
NAG f95
GNU gfortran

Other Commands

Intel idb, ld, gprof
PathScale pathdb, ld, pathprof
Portland Group xpgdbg, ld, gprof
NAG gdb, ld, gprof
GNU gdb, xgdb, ld, gprof, gcov

TotalView Debugger

2.2. Applications and Libraries

2.2.1 Artificial Intelligence

2.2.1.1 Expert Systems.....
2.2.1.2 Genetic Algorithms.....
2.2.1.3 Neural Networks.....
2.2.1.4 Support Vector Machines.....
2.2.1.5 Other.....

2.2.2 Bioinformatics Software

2.2.2.1 Bioinformatics.....
2.2.2.2 Bioinformatics Databases.....
2.2.2.3 Data Acquisition & Analysis.....
2.2.2.4 Data Mining.....
2.2.2.5 Drug Discovery.....
2.2.2.6 Genomics.....
2.2.2.7 Molecular Biology.....
2.2.2.8 Proteomics.....
2.2.2.9 Sequencing Software.....
2.2.2.10 Other.....

2.2.3 Chemistry Software

Amber, Babel, GAMESS, Gaussian, GaussView, ADF, Comsol, Gfs, Gfsview, gmsh, gts, lamps,
GROMACS, Meep, Mpb, Opse, Openflow, OpenFoam, orca, protomol, PLANTS, Dalton, ddscat,
Quantum, openeye, NAMD

2.2.3.1 Chemical Drawing.....
2.2.3.2 Chemical Engineering.....
2.2.3.3 Chemical Information Management.....
2.2.3.4 Chemical Structure Analysis.....
2.2.3.5 Cheminformatics.....
2.2.3.6 Chemometrics.....
2.2.3.7 Combinatorial Chemistry.....
2.2.3.8 Computational Chemistry.....
2.2.3.9 Molecular Modeling.....
2.2.3.10 Other.....

2.2.4	Chromatography Data Systems Software	
2.2.4.1	Chromatography Data Systems
2.2.4.2	Other
2.2.5	Data Acquisition Software	
2.2.5.1	Data Acquisition Systems, Real-Time	Labview
2.2.5.2	Data Acquisition / Control
2.2.5.3	Other
2.2.6	Data Analysis Software
2.2.7	Engineering Software	
2.2.7.1	Calculation and Math Libraries
2.2.7.2	Computational Fluid Dynamics
2.2.7.3	Finite Element Analysis
2.2.7.4	Physics
2.2.7.5	Plotting
2.2.7.6	Rendering
2.2.7.7	Simulation
2.2.7.8	Structural Analysis
2.2.7.9	Other
2.2.8	Image Analysis / Image Processing Software
2.2.9	Mathematical Software	
	Mathematica, Matlab, origin	
2.2.9.1	Curve-Fitting
2.2.9.2	Equation Editors
2.2.9.3	Equation Solvers
2.2.9.4	Graphics
2.2.9.5	Mathematics, General
2.2.9.6	Numerical Analysis
2.2.9.7	Symbolic Languages
2.2.9.8	Other
2.2.10	Scientific Data Management Software	
2.2.10.1	Database Management
2.2.10.2	Enterprise Resource Management
2.2.10.3	Knowledge Management
2.2.10.4	Other
2.2.11	Spectroscopy Software
2.2.12	Statistical Software	
2.2.12.1	Design of Experiments
2.2.12.2	General Statistics
2.2.13.3	Quality Control / Quality Assurance
2.2.13.4	Other
2.2.13	Visualization Software

Esempi:

Chemistry and Chemical Engineering Software:

Amber, Babel, CP2K, CPMD, GAMESS, Gaussian, GaussView, GRACE, GROMACS, Jmol, Molden, Molpro, NAMD, NWChem, Q-Chem, Quantum Espresso, RasMol, XMD

Engineering and Mathematics Software:

ABAQUS, Maple, Mathematica, Matlab, R, Tecplot

Visualization Software:

GaussView, gnuplot, IDL, ImageMagick, Jmol, Maple, Mathematica, Matlab, NCAR NCL and PyNGL, Netpbm, OpenDX, ParaView, POV-Ray, R, RasMol, Tecplot

2.3. Programming Libraries [LAPACK](#), [ScaLAPACK](#), [BLAS](#), [CBLAS](#), [CLAPACK](#), [ATLAS](#), [GNU Library](#), [FFTW](#), [HDF5](#)

Esempi:

ARPACK, Automatically Tuned Linear Algebra Software (ATLAS), Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS), Boost C++ Libraries, FFTW, GNU Scientific Library (GLS), HDF(4) and HDF5 (Hierarchical Data Format), Intel Math Kernel Library (MKL), LAPACK, netCDF, OpenMotif, ROOT, ScaLAPACK,

2.4. Parallel and Distributed Computing (Middleware) [Infiniband](#), [OpenMPI](#), [OpenPBS](#), [Maui](#), [Scali](#)

Esempi:

MPI (Ethernet: MPICH1, MPICH2; InfiniBand: MVAPICH1, MVAPICH2; Myrinet: Myricom), PVM, IOS, Xcat, Clustermatic, Warewulf, Oscar, Rocks

2.5. Grid and Services Technologies

2.5.1 Web servers [Apache](#)
2.5.2 Application servers [Tomcat](#)
2.5.3 Content management systems
2.5.4 Service-oriented Architectures [interfaccia web per l'esecuzione da remoto di job paralleli \(PBSWeb\) in ambiente PBS e la gestione del proprio account \(myPBS\)](#)
2.5.5 Grid and Global Computing [Globus](#)
2.5.5 Other [software sviluppato in ambiente linux basato su interfaccia java e servlet per l'esecuzione di calcoli paralleli da remoto per interpretazione spettroscopie EPR e NMR in biomolecole](#)

Esempi:

AJAX, Apache HTTP Server, Struts, Tomcat, Servlet, Zope, jAPS, J2EE, Mambo, JBOSS, Globus, Condor, Legion

2.6. Workflow Management.....

Esempi:

Pipeline Pilot, Kepler

Sezione B - Caratterizzazione di dettaglio delle Applicazioni

3. Applicazioni già in uso (da ripetere, ricopiando, per ogni applicazione)

[Amber gratuito](#)
[Babel gratuito](#)
[GAMESS gratuito, parallelo](#)
[Gaussian pagamento, parallelo](#)
[GaussView pagamento, iterattivo](#)
[ADF pagamento, parallelo](#)
[Comsol pagamento, parallelo, iterattivo](#)
[Gfs gratuito, parallelo](#)
[Gfsview gratuito, iterattivo](#)
[Gmsh gratuito](#)
[Gts gratuito](#)
[Lamps gratuito, parallelo](#)
[GROMACS gratuito, parallelo](#)
[Meep gratuito](#)
[Mpb gratuito](#)
[Oopse gratuito, parallelo](#)
[Openflow gratuito, parallelo](#)
[OpenFoam gratuito, parallelo, iterattivo](#)
[Orca gratuito](#)
[Protomol gratuito, parallelo](#)
[PLANTS gratuito](#)
[Dalton gratuito](#)
[Ddscat gratuito, parallelo](#)

Quantum gratuito
 Openeye gratuito
 NAMD gratuito, parallelo
 Apache gratuito
 Tomcat gratuito
 Globus gratuito
 (tutti i software precedenti girano in ambiente linux e PBS)
 Labview pagamento
 Matlab pagamento
 Mathematica pagamento
 Origin pagamento
 (tutti i software precedenti girano in ambiente windows)

- 3.1. nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?)
- 3.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i)
- 3.3. è utilizzabile in ambiente GRID ?
- 3.4. il codice sorgente è pubblicamente disponibile ?
- 3.5. consumo di CPU per un run tipico (in secondi, stima)
- 3.6. può beneficiare di un cluster di CPU ?
 - 3.6.1 se si: in connessione semplice (loosely coupled) ?
 - 3.6.2 se si: in connessione parallela (tightly coupled, a la HPC, ecc.)
- 3.7. tipo di storage usato (file, DB)
- 3.7.1 stima della quantità (GB) utilizzata
- 3.8. stima dell'utilizzo della rete locale e geografica (Mbps)
- 3.9. è richiesto un accesso interattivo (con visualizzazione) ?
- 3.10. è richiesto un accesso batch ?
- 3.10.1 se si: indicare il sistema batch utilizzato

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

- 4.1. nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?)
- 4.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i)
- 4.3. è utilizzabile in ambiente GRID ?
- 4.4. il codice sorgente è pubblicamente disponibile ?
- 4.5. consumo di CPU per un run tipico (stima)
- 4.6. può beneficiare di un cluster di CPU ?
 - 4.6.1 se si: in connessione semplice (loosely coupled) ?
 - 4.6.2 se si: in connessione parallela (tightly coupled, a la HPC, ecc.)
- 4.7. tipo di storage usato (file, DB)
- 4.7.1 stima della quantità (GB) utilizzata
- 4.8. stima dell'utilizzo della rete locale e geografica (Mbps)
- 4.9. è richiesto un accesso interattivo (con visualizzazione) ?
- 4.10. è richiesto un accesso batch ?
- 4.10.1 se si: indicare il sistema batch utilizzato

Sezione C - Caratterizzazione degli Obiettivi a Lungo Termine

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

- 5.2. tipologia di esperimento.....
- 5.1. tipologia di architettura desiderata.....
- 5.3. sistema operativo richiesto.....
- 5.4. si presta al GRID computing ?.....
- 5.5. il codice sorgente è pubblicamente disponibile ?.....
- 5.6. consumi prevedibili (stima)
 - 5.6.1 numero di CPUs.....
 - 5.6.2 memoria totale (GB).....
 - 5.6.3 spazio disco (storage, GB).....
 - 5.6.4 tipo di connessione.....
 - 5.6.5 uso della rete locale/geografica (Mbps).....
 - 5.6.6 serve accesso interattivo ?.....

Sezione D - Possibile Valore Aggiunto

6. Expertises

Esistono nel vostro Dipartimento/Ente competenze riguardo a strumenti e/o tecnologie che potrebbero essere rilevanti per la progettazione, l'implementazione e lo sfruttamento di servizi di calcolo condivisibili in ambito inter-dipartimentale (è importante, vista la genericità degli argomenti proposti, riempire la colonna "Specificazioni" dettagliando gli elementi di specifica competenza) ?

Argomento	Esperti	Specificazioni
GRID services		
Web services		
Service Oriented Applications		
Services for parallel programming e MPI		
Altro		

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 ?

.....

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 ?

.....
