

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

Sezione A - Risorse

1. Hardware

lab00.math.unipd.it

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

1.2 Numero di box, numero di cores totali, tipo di processore (clock, produttore)
1 box, 8 cores, bi-processore quad-core Intel(R) Xeon(R) CPU E5345 @ 2.33GHz.....
.....

1.3 Memoria per box, memoria totale (GB), spazio disco (GB)
16 Gb, 16 Gb, 300 Gb.....
.....

1.4 Tecnologia di interconnessione (bus interno, bus esterno, Infiniband, Myrinet, Ethernet, IP) e Banda verso il GARR (bottleneck) Mbps
bus interno, la macchina è inserita in un complesso di Dipartimenti che condividono una banda di 30 Mbps verso la rete di Ateneo.....
.....

1.5 Tipo di architettura prevista a medio termine (macchina SMP, macchine interconnesse, GRID)
un cluster di macchine SMP interconnesse, per un totale di 80 core = ((4 x 2) x 10) e sviluppo di un network Boinc
.....

1.6 Numero di box, numero di cores totali, tipo di processore (clock, produttore)
10 box, 80 core, bi-processore quad-core (Intel/AMD).....
.....

1.7. Memoria per box, memoria totale (GB), spazio disco (GB)
8 Gb, 80 Gb totali, 500 Gb.....
.....

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

lab01/lab16.math.unipd.it

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

1.2 Numero di box, numero di cores totali, tipo di processore (clock, produttore)
16 box, 32 cores, processore dual-core AMD Athlon(tm) 64 X2 Dual Core Processor 3800+ (2GHz, AMD).....
.....

1.3 Memoria per box, memoria totale (GB), spazio disco (GB)
1 Gb, 16 Gb, (120Gb x 16).....
.....

1.4 Tecnologia di interconnessione (bus interno, bus esterno, Infiniband, Myrinet, Ethernet, IP) e Banda verso il GARR (bottleneck) Mbps
bus interno, la macchina è inserita in un complesso di Dipartimenti che condividono una banda di 30 Mbps verso la rete di Ateneo. Le macchine sono collegate tra loro in Ethernet
.....

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

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

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

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

Fisica Matematica @ **math.unipd.it**

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

1.2 Numero di box, numero di cores totali, tipo di processore (clock, produttore)
3 box, 10 cores: 2 macchine con 2 processori Xeon a 32 bit (precedenti alla tecnologia dual core); 1 macchina recente con 2 processori Xeon Quad Core 64 bit CPU E5345@2.33GHz
.....

1.3 Memoria per box, memoria totale (GB), spazio disco (GB)
16 Gb di Ram totale.....
.....

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

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

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

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

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

2. Software

Indicare, per ogni categoria, quali software vengono correntemente utilizzati

Per ulteriori dettagli, consultare la pagina web del NumLab: <http://numlab.math.unipd.it/>

2.1.1. Compilers Technologies

- 2.1.1 CompilersGNU gcc, g++, cc, gfortran, ifort
- 2.1.2 DebuggersGNU gdb, xgdb, ld, gprof, gcov
- 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 90/Fortran 77

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, grof
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.....SVMLight
2.2.1.5 Other.....SOM-SD, ANN

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

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.....
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.....	modeFRONTIER

2.2.8 Image Analysis / Image Processing Software.....

2.2.9 Mathematical Software

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.....	Math Kernel Library, Mathematica
2.2.9.6	Numerical Analysis.....	Matlab/Octave, NumPy, PyTrilinos
2.2.9.7	Symbolic Languages.....	MAGMA
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.....	R
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

RVisualization 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[BLAS/ATLAS](#)

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)[MPI, OpenMP, OpenMPI](#)

Esempi:

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

2.5. Grid and Services Technologies

2.5.1 Web servers.....	Apache, Tomcat
2.5.2 Application servers.....	J2EE
2.5.3 Content management systems.....	DRUPAL
2.5.4 Service-oriented Architectures.....	ESB, JBOSS
2.5.5 Grid and Global Computing.....	Boinc
2.5.5 Other.....	

Esempi:

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

2.6. Workflow Management.....	Visual Studio TIBCO, OpenWFM
-------------------------------	------------------------------

Esempi:

 Pipeline Pilot, Kepler

Sezione B - Caratterizzazione di dettaglio delle Applicazioni

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

3.1. nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?)
 Libreria software per metodi di estrapolazione (software in Fortran 77) Non e' in rete, ma e' in un dischetto allegato al mio libro. E' di libera distribuzione.

3.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i).....
 Michela Redivo Zaglia

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.....

3.1. nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?)
 smt is a Matlab toolbox for structured matrix computation. It has been designed with the idea is to extend Matlab with a computational framework for structured matrices which is easy to use, transparent for the user, easily extensible and highly optimized for what concerns storage and complexity. Gia' in rete (beta version) all'indirizzo <http://bugs.unica.it/smt/>

3.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i).....
 Michela Redivo Zaglia

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.....	
3.1.	nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?).....	Software CAA (approssimazione multivariata e cubatura numerica)
3.2.	nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i).....	Marco Vianello, Alvisè Sommariva et al.
3.3.	è utilizzabile in ambiente GRID ?.....	
3.4.	il codice sorgente è pubblicamente disponibile ?.....	Sì, http://www.math.unipd.it/~marcov/CAAssoft.html
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.....	
3.1.	nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?).....	Calcolo delle costanti di Mertens nelle progressioni aritmetiche
3.2.	nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i).....	Alessandro Languasco
3.3.	è utilizzabile in ambiente GRID ?.....	
3.4.	il codice sorgente è pubblicamente disponibile ?.....	Sì, http://www.math.unipd.it/~languasc/MCcomput.html
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.....

- 3.1. nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?).....
[programmi per la soluzione di problemi inversi su modelli FEM \(non "pacchettizzati"\)](#)
- 3.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i).....
[Fabio Marcuzzi et al.](#)
- 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).....[30-120 minuti](#)
- 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.).....[Si](#)
- 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) ?.....[Si](#)
- 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 ?)..4.1. nome e tipologia dell'applicazione (free ? a pagamento ? per parallelizzazione? per visualizzazione ?)
[pacchetto matlab per elaborazioni sul calcolo dell'autovalore massimo di matrici stocastiche \(utilizzato per il calcolo del Pagerank di Google, ma e' un problema che interessa anche altri campi di ricerca\).](#)
- 4.2. nome dello sviluppatore e sistema(i) operativo(i).....
[Michela redivo Zaglia](#)
- 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:.....
 soluzione di problemi inversi su modelli FEM di grandi dimensioni
- 5.1. tipologia di architettura desiderata.....
 cluster di macchine SMP interconnesse
- 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	1	è in fase di realizzazione un'infrastruttura BOINC
Web services	2	applicazioni distribuite in ambiente J2EE (JBOSS) per simulazioni aeroportuali
Service Oriented Applications		
Services for parallel programming e MPI	1	è in fase di realizzazione un cluster di PC basato su 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 ?

Sì, con altre Università italiane e straniere (Univ. Cagliari - Dipartimento di Matematica, USTL - Laboratoire LMPA in Francia, RICAM Linz in Austria, ecc.) e con aziende private del triveneto.

.....
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 ?

scambio di know-how nella soluzione i problemi reali mediante il calcolo scientifico.

.....
.....
.....

Suggerimento: creare un portale in cui queste info possano essere aggiornate al bisogno; al limite agganciarsi ad uno esistente, es. UNI2B.