



*LICC / Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale
Node primario del circuito VILLAGE / Virtual Italian Laboratory for Large-scale Applications
in a Geographically distributed Environment*

LICC : Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Il LICC è un laboratorio del DiSC laboratory dedicato alla chimica computazionale, aperto ai ricercatori chimici dell'Università di Padova.. Informazioni reperibili presso il sito web <http://www.chimica.unipd.it/licc>

Hardware

- **Cluster- α** (26 nodi / 54 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- β** (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 m², termostatazione, gruppi di continuità 2 ×40 KWH + 20 KWH).