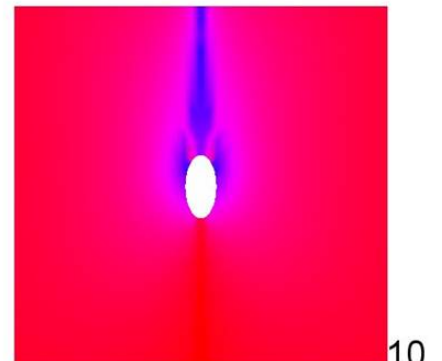
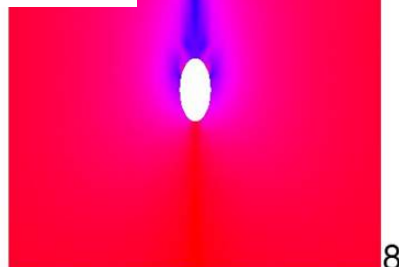
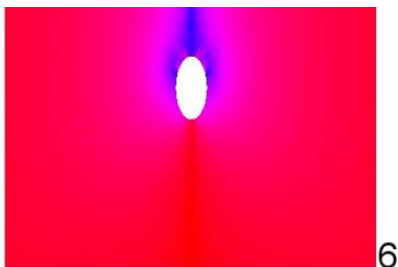
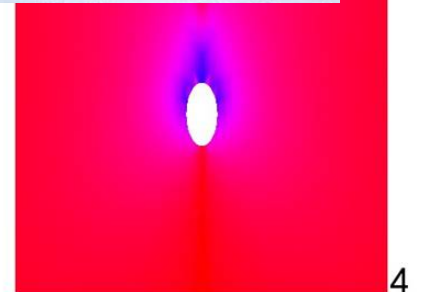
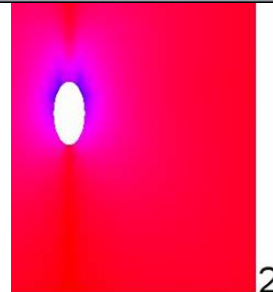
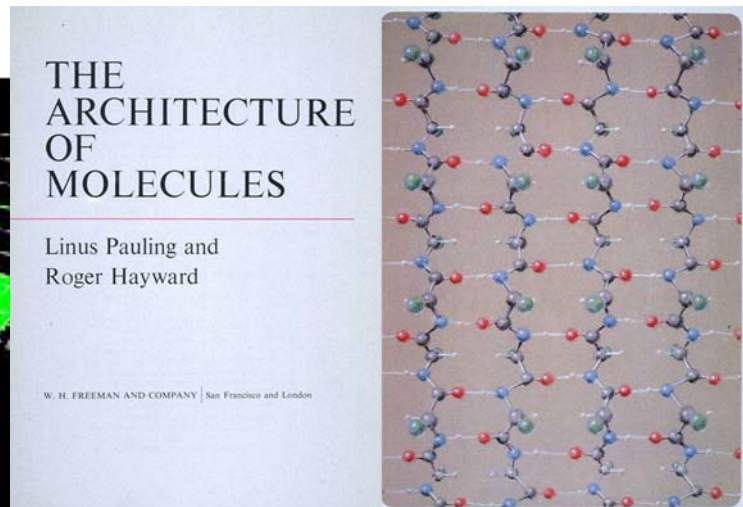
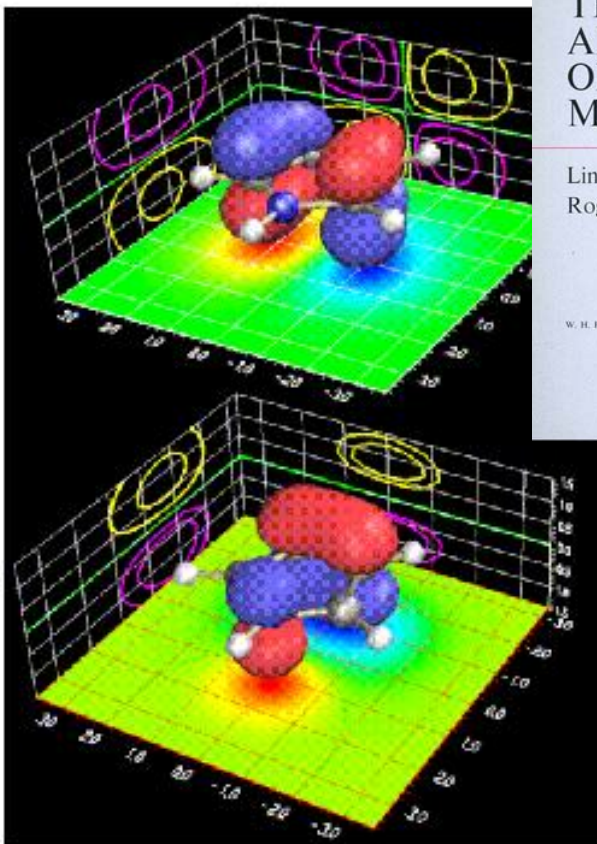




LICC / Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale
Nodo primario del circuito VILLAGE / Virtual Italian Laboratory for Large-scale Applications
in a Geographically distributed Environment

LABORATORIO INTERDIPARTIMENTALE DI CHIMICA COMPUTAZIONALE





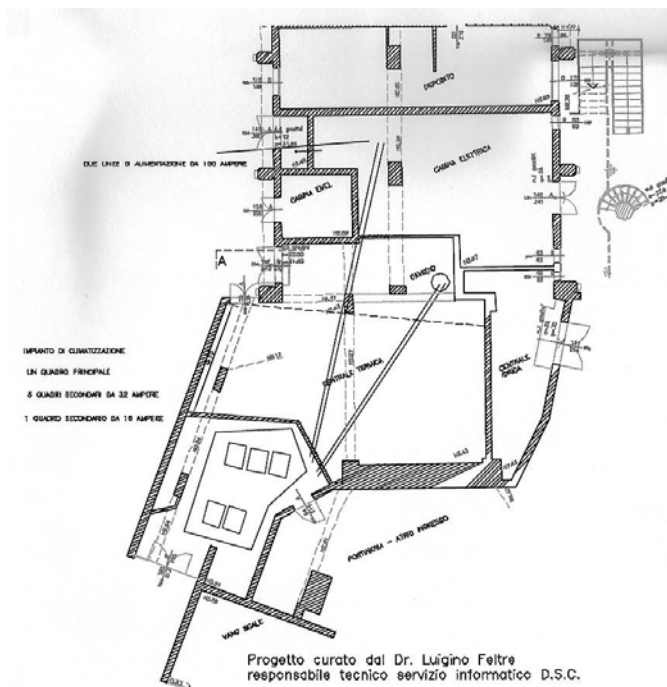
1. Risorse

1.1 Hardware

- **Cluster- α** (26 nodi / 54 cpu): 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 nodi 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; interconnessione Infiniband; OS Linux Red Hat
- **Cluster- β** (71 nodi / 284 cpu): 71 nodi (blade) Intel Woodcrest Dual Core, 4 cpu, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 72 Gb; interconnessione Infiniband; OS Linux Red Hat

1.2 Software

- **SO base:** Linux RedHat 3.0
- **Compilatori** (64bit): Intel C++ Compiler per Linux, Intel Fortran Compiler per Linux, Portland Fortran; gnu cc
- **Librerie scientifiche:** LAPACK, ScaLAPACK, BLAS, CBLAS, CLAPACK, ATLAS, GNU Library, FFTW, //Ellpack, PETSc
- **Software QM:** applicativi vari
- **Software MD:** applicativi vari



I cluster sono allocati presso una sala al pianterreno del DISC (Dipartimento di Scienze Chimiche): superficie 60 m², pavimento flottante, impianto di condizionamento, 2 gruppi di continuità da 40 KWH + 1 gruppo di continuità da 20 KWH. I cluster possono complessivamente fornire un monte ore di CPU stimabile in circa 3×10^6 ore cpu all'anno.



2. Attività

Il LICC è un laboratorio del DISC dedicato alla chimica computazionale ed il suo utilizzo è aperto ai ricercatori dell'area chimica dell'Università di Padova e ad imprese o terzi interessati. Le attrezzature del LICC sono integrate nelle risorse informatiche del DISC.

- L'impiego delle risorse computazionali è aperto agli afferenti del Dipartimento di Scienze Chimiche e del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, nonché ad imprese ed enti di ricerca, secondo le modalità descritte nella Sezione 3 (Regolamento).

La facility computazionale è inoltre aperta a progetti di condivisione delle competenze scientifiche e della stessa attrezzatura di calcolo con altre aree scientifiche ed enti interni od esterni all'Università degli Studi di Padova. In particolare, sono incoraggiate le seguenti iniziative

- **Grid computing** e calcolo geograficamente distribuito nell'ambito del circuito nazionale VILLAGE (Virtual Italian Laboratory for Large-scale Applications in a Geographically distributed Environment) di cui il LICC costituisce uno dei nodi primari
- **Partecipazione a progetti universitari, nazionali ed europei** per il calcolo e la modellistica nell'ambito della chimica, scienza dei materiali e biosistemi; consulenze e sviluppo di progetti di calcolo applicato a problematiche chimiche
- **Creazione di pacchetti software e librerie dedicate** ad attività di ricerca ed applicative, derivanti dal patrimonio esistente dei vari gruppi di ricerca già attivi e dalla proficua collaborazione con ricercatori di altre aree; sviluppo di nuove metodologie, adatte alle piattaforme per l'integrazione di librerie commerciali
- **Iniziative di training per gli studenti** in Chimica, Chimica industriale e Scienze dei Materiali delle lauree di primo e secondo livello, nonché della Scuola di Dottorato in Scienze Molecolari.

Il LICC svolge varie attività secondarie generalmente dedicate alla diffusione della cultura chimica computazionale

- **Coordinamento delle attività del Servizio Informatico Chimico (SIC)** del DISC, secondo le modalità definite dal Consiglio di Dipartimento del DISC
- **Attività di consulenza per la soluzione di problemi di calcolo**, sviluppo di metodologie, interpretazione e visualizzazione di dati.
- **Organizzazione di cicli di seminari** annuali dedicati alla modellistica in ambito chimico computazionale
- **Contributo all'organizzazione di scuole** ed iniziative didattiche mediante fornitura di risorse computazionali per esercitazioni

Le attività del LICC sono documentate presso il sito web del DISC, all'indirizzo <http://www.chimica.unipd.it/licc>



3. Regolamento

L'utilizzazione delle risorse e l'organizzazione delle attività del LICC sono regolate secondo le seguenti modalità.

- Art. 1. Le risorse e le attività del LICC sono descritte rispettivamente nella Sezione 1 e 2 di questo documento e sono affidate alla responsabilità del **Comitato Scientifico (CS)** (vedi Art. 2)
- Art. 2. Il CS è formato da un rappresentante di ciascuna area (Chimica Organica/CO, Chimica Inorganica/CI, Chimica Fisica/CF e Chimica Farmaceutica/CFA) proveniente dai gruppi di ricerca responsabili delle quote di cofinanziamento, e da un rappresentante del personale CNR che opera presso il DISC.
- 2.1 Il CS è nominato per un periodo di tre anni dal Consiglio di Dipartimento di Scienze Chimiche (DiSC), ed è diretto da un Coordinatore eletto al suo interno.
- 2.2 Il CS elabora e presenta al Consiglio di Dipartimento del DISC il piano per l'amministrazione delle risorse del LICC, per il loro rinnovo ed ampliamento, nonché per lo svolgimento di attività didattiche e scientifiche. Propone inoltre la ripartizione delle spese di gestione e delle quote di impegno degli utenti
- 2.3 Tutte le decisioni del CS sono prese dalla maggioranza semplice dei presenti alle sue riunioni; in caso di parità, il voto del Coordinatore è decisivo.
- Art. 3. Il **Coordinatore** rappresenta il LICC nell'ambito di progetti ed iniziative nazionali ed europee (e.g. iniziative di ateneo, circuito nazionale VILLAGE ed in generale ogni progetto in cui il LICC partecipi *in toto*); propone al CS il prospetto delle spese di manutenzione ordinaria e straordinaria (vedi Art. 5) e della ripartizione delle quote di utenza; coordina lo svolgimento delle attività ordinarie del LICC e ne riferisce al DISC
- Art. 4. Un **utente** del LICC dispone di un **account** di calcolo, e può utilizzare tutte le risorse hardware e software del LICC, salve le limitazioni sottodescritte; un utente è il solo responsabile della gestione del suo account
- 4.1 Gli utenti del LICC sono suddivisi in **utenti interni** (personale docente dei Dipartimenti di Scienze Chimiche e Farmaceutiche) ed **utenti esterni** (personale docente di altri dipartimenti dell'Università di Padova e dipendenti autorizzati di enti di ricerca ed imprese private).
- 4.2 Gli utenti devono presentare una richiesta scritta al CS del LICC per ottenere un account. L'accettazione della richiesta da parte di un utente è assicurata dal CS del LICC, previa verifica delle risorse disponibili e versamento di un contributo alle spese, secondo la tipologia di account richiesta (vedi Art. 4.3).
- 4.3 **Gli account hanno validità triennale** e sono suddivisi in due diverse tipologie, corrispondenti a diverse allocazioni di risorse e con costi gestionali differenziati. Il costo gestionale è fissato a 50 € per l'apertura dell'account più una quota definita in base alla seguente tabella



Tipologia account	Allocazione richiesta iniziale minima in ore cpu per triennio	Allocazione richiesta iniziale massima in ore cpu per triennio	Costo in € per ora di cpu
Utenti interni			
Base	150	100,000	0.05
Avanzata	100,000	1,500,000	0.025
Utenti esterni			
Base	150	100,000	0.1
Avanzata	100,000	1,500,000	0.05

Gli utenti che abbiano esaurito la quota di ore cpu allocate possono disporre di risorse aggiuntive, previa approvazione del CS, con un contributo di gestione pari a 0.1 € per ogni ora di cpu aggiunta

4.4 La gestione delle risorse allocate agli utenti (tipo di processori, distribuzione temporale dei *jobs* etc.) è di competenza del CS

Art. 5. Le spese di amministrazione ordinaria e straordinaria del LICC sono regolate dalle seguenti norme

5.1 Il LICC dispone di un fondo spese che è gestito all'interno di un capitolo di spesa dell'amministrazione DISC

5.2 All'inizio di ogni anno solare il CS del LICC discute ed approva un bilancio preventivo annuale proposto dal Coordinatore, che gestisce nel corso dell'anno il fondo spese in base al bilancio approvato dal Consiglio di Dipartimento del DISC



4. Addendum

1. Per il triennio 2007-2009 il CS è formato da Antonino Polimeno (Coordinatore, Area CF), Alessandro Bagno (Area CO), Maurizio Casarin (Area CI), Stefano Moro (Area CFA), Andrea Vittadini (CNR) come già indicato dal Consiglio di Dipartimento del DiSC (2006), salvo successive integrazioni decise dal CS stesso.
2. Per il triennio 2007-2009 sono precostituiti i seguenti account:

Utente	Qualifica	Tipologia account	Ore cpu riservate
Gianfranco Scorrano	Interno / area CO	Avanzata	725,000
Alessandro Bagno	Interno / area CO	Avanzata	725,000
Marcella Bonchio	Interno / area CO- CNR-ITM	Base	50,000
Giuseppe Zanotti	Interno / area CO	Base	50,000
Maurizio Casarin	Interno / area CI	Avanzata	750,000
Andrea Vittadini	Interno / area CI- CNR-ISTM	Avanzata	750,000
Vito Di Noto	Interno / area CI	Base	50,000
Antonino Polimeno	Interno / area CF	Avanzata	750,000
Alberta Ferrarini	Interno / area CF	Avanzata	750,000
Giorgio Moro	Interno / area CF	Base	50,000
Stefano Moro	Interno / area CFA	Base	50,000