

Report sull'attività del nodo di Perugia

Accogliendo l'invito fatto dal coordinatore del network INSTM-CST di partecipare allo stesso, l'Unità INSTM di Perugia, gestore della Virtual Organization (VO) COMPCHEM della rete Grid europea, ha iniziato in questo anno la sua attività di promozione del calcolo distribuito (Grid e Cloud) all'interno del consorzio e del network CST in particolare. Tale attività è mirata a potenziare l'uso sinergico della Grid per la ricerca di strutture elettroniche, dinamica molecolare, proprietà strutturali e superficiali, cinetica e termodinamica dei materiali inorganici, biologici e polimerici a livello subnanometrico. L'attività è consistita in:

- 1) Potenziare in concerto con le VO COMPCHEM, GAUSSIAN, IBERGRID e il progetto MOSGrid, l'uso sinergistico delle competenze teorico-computazionali INSTM all'interno della comunità virtuale CMMST (Chemistry, Molecular & Materials Science and Technologies) utilizzando EGI (European Grid Infrastructure) e le sue NGI (National Grid Initiative) di cui si quantifica in tabella il supporto dato lo scorso anno.

Table - Normalised CPU time, in 1kSI2K hours.

DATE	NGI_FRANCE	NGI_GRNET	NGI_IBER GRID	NGI_IT	NGI_PL	NGI_UK	Total
Total	3,402,878	2,083,262	1,034,966	8,199,899	377,281	19,061	15,117,347
%	22.51%	13.78%	6.85%	54.24%	2.50%	0.13%	

- 2) Generalizzare l'uso del simulatore GEMS (Grid Empowered Molecular Simulator) in cui programmi e pacchetti per il calcolo di strutture elettroniche, dinamica dei nuclei e trattamenti di scala superiore (cinetica, fluido dinamica, statistica, etc.) sono concatenati insieme in opportuni workflow al fine di calcolare gli osservabili di sistemi realistici anche mediante il disegno di opportuni portali
- 3) Integrare il network INSTM-CST nel sistema EGI come piattaforma specializzata in servizi di rete nell'area CMMST tramite l'adozione di specifiche interfacce, middleware e portali nonché la costituzione di una "live grid library" di codici interoperabili, lo sviluppo di strumenti per la selezione di degli elementi computazionali HTC e HPC appropriati, il disegno di un sistema di crediti che remunererà il lavoro fatto per la comunità, l'adozione di standard di fatto per i dati di chimica quantistica e dinamica molecolare.
- 4) Sviluppare il collegamento della comunità INSTM con la XSEDE statunitense (l'erede del network TERAGRID dei supercomputer USA) e le analoghe iniziative attivate nell'area del sud-est asiatico consolidando anche il già esistente collegamento con PRACE.
- 5) Curare iniziative di training per l'uso della Grid e la relativa implementazione di applicazioni INSTM, come ad esempio il Training Workshop (http://www.instm.it/news/instm_organizza_training_workshop_per_il_calcolo_su_piattaforme_distribuite.aspx) organizzato in collaborazione con il FUS (Formazione e User Support) di IGI (Italian Grid Infrastructure) che si è tenuto presso il GARR a Roma nei giorni 20 e 21 Gennaio 2014.