

# High Performance Molecular Dynamics

13-15 Settembre 2017 - CINECA – Bologna

**Docenti: Andrew Emerson, Giovanni Chillemi, Neva Besker, Alessandro Grottesi**

## Agenda

### 13 Settembre

9.30 – 10.00	Registrazione
10.00 – 11.00	Introduzione alle architetture HPC I
11.00 – 11.30	Coffe break
11.30 – 12.30	Introduzione alla Dinamica Molecolare classica
12.30 – 14.00	Lunch break
14.00 – 15.10	MD: Performance, Parallelism and Parallel algorithms
15.10 – 15.30	Coffe break
15.30 – 17.30	Tutorial 1: Ambiente HPC @ CINECA: moduli, job script, PBS

### 14 Settembre

9.30 – 10.15	MD su architetture HPC: GPU(Kepler-Pascal) Intel Xeon KNL, Intel Skylake
10.15 – 11.00	Tutorial 2: MD @ CINECA, scripts e benchmarks
11.00 – 11.30	Coffee break
11.30 – 12.30	Tutorial 3: test di scalabilità per sistemi biologici
12.30 – 14.00	Lunch break
14.00 – 15.00	Tutorial 4: Running e analisi traiettorie con GROMACS e NAMD su cluster HPC
15.00 – 15.30	Coffee break
15.30 – 17.30	Tutorial 5: Analisi delle traiettorie MD

## 15 Settembre

10.00 – 11.00	Benchmarks and Performance di codici MD
11.00 – 11.30	Coffee
11.30 – 12.30	Tutorial 6: Dinamica Essenziale delle proteine
12.30 – 14.00	Lunch Break
14.00 – 14.30	Accesso a risorse HPC @ CINECA
14.30 -	Free