

Ομάδα Υπολογιστικής Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών

Σεμινάριο: Εισαγωγή στις Μοριακές Προσομοιώσεις

Ημερομηνία: Τετάρτη 13 Μαΐου 2015, 10.45 – 14.30

Τοποθεσία: «Μικρό PC LAB», Σχολή Χημικών Μηχανικών, Ε.Μ.Π.

1. Χρήση υπολογιστικού περιβάλλοντος Linux Cluster (Ορέστης Ζιώγος)
+ Πρακτική εξάσκηση: πρόσβαση και εκτέλεση βασικών διαδικασιών σε απομακρυσμένο υπολογιστικό περιβάλλον Linux
 2. Εισαγωγή στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής (Γιώργος Βογιατζής)
+ Πρακτική εξάσκηση: πραγματοποίηση προσομοίωσης ρευστού Αργού με τη χρήση του λογισμικού ανοικτού κώδικα LAMMPS
 3. Υπολογισμός δομικών, δυναμικών και θερμοδυναμικών ιδιοτήτων από μοριακές προσομοιώσεις (Γιώργος Βογιατζής)
+ Πρακτική εξάσκηση: επεξεργασία τροχιάς Μοριακής Δυναμικής (π.χ. υπολογισμός συντελεστή αυτό-διάχυσης ρευστού Αργού)
 4. Εισαγωγή στον παράλληλο προγραμματισμό (Γιώργος Βογιατζής και Ορέστης Ζιώγος)
+ Πρακτική εξάσκηση: πρωτόκολλα MPI και openMP
-

Computational Materials Science and Engineering Group (CoMSE)

Crash Course on *Molecular Simulations*

Date: Wednesday, May 13, 2015, 10.45 – 14.30

Location: “Small PC LAB”, School of Chemical Engineering, NTUA

1. Introduction to using a Linux cluster environment (Orestis Ziogos)
+ *Hands-on session: accessing and conducting simple operations on a remote Linux machine*
2. Molecular Dynamics simulations in a nutshell (Georgios Vogiatzis)
+ *Hands-on session: conducting liquid Argon molecular dynamics simulations using LAMMPS open-source software*
3. Post-processing molecular simulation trajectories (Georgios Vogiatzis)
+ *Hands-on session: post-processing molecular dynamics trajectories (e.g. estimation of liquid Argon self-diffusion coefficient)*
4. Introduction to parallel programming (Georgios Vogiatzis and Orestis Ziogos)
+ *Hands-on session: MPI and openMP protocols*