

ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI
CENTRO LINCEO INTERDISCIPLINARE «BENIAMINO SEGRE»
EUROPEAN SCIENCE FOUNDATION

ESF DRIVEN WORKSHOP ON

**EUROPEAN CYBERINFRASTRUCTURE FOR ATOMISTIC SIMULATIONS
OF HARD, SOFT, AND BIOLOGICAL MATTER**

12-13 LUGLIO 2005

PROGRAMMA - INVITO

COMITATO SCIENTIFICO ORGANIZZATIVO: Nicola CABIBBO (Università di Roma "La Sapienza"), Giovanni CICCOTTI (Università di Roma "La Sapienza"), Volker HEINE (University of Cambridge, UK), Berend SMIT (CECAM, Lyon), Rodolphe VUILLEUMIER (Università di Roma "La Sapienza")

Martedì 12 luglio

8.45 Indirizzi di saluto

Presiede: Volker HEINE

8.50 Neil WILLIAMS: Apertura dei lavori

1ª sessione: Strategic view from research organisations

9.00 Hugh PILCHER-CLAYTON (EPSRC, London): UK's high end computing strategy

9.40 Paul DURHAM (Daresbury Laboratory, UK): Titolo da definire

10.20 Intervallo

10.50 Patrick AERTS (e-IRG, Den Haag): The e-IRG roadmap for the European Science Grid Infrastructure

11.30 Arndt BODE (DFG, Germany): Steps toward a European cyberinfrastructure – the perspective from Germany

12.10 Intervallo

12.15 Interventi programmati

Presiede: Berend SMIT

2ª sessione: Point of view of scientists from the community of atomistic simulations

14.30 Michiel SPRIK (Department of Chemistry, Cambridge, UK): Getting hard numbers in computational physical chemistry of condensed molecular systems

15.10 Volker HEINE (Department of Physics, Cambridge, UK): Titolo da definire

15.50 Intervallo

16.20 Paolo GIANNOZZI (Scuola Normale Superiore, Pisa): Scientific software development at DEMOCRITOS

3^a sessione: Existing initiatives for high end computing

17.00 Sanzio BASSINI (CINECA, Bologna): Titolo da definire

17.40 Berend SMIT (CECAM, Lyon): Molecular simulations: from algorithms to infrastructure

Mercoledì 13 luglio

Presiede: Giovanni CICCOTTI

4^a sessione: Hardware developments

9.00 Giovanni ERBACCI (CINECA, Bologna): Titolo da definire

9.40 Nicola CABIBBO (APE Project, Roma): The APE project

10.20 Intervallo

5^a sessione: Software developments

10.50 Erik LINDAHL (GROMACS Program, University of Stockholm): Titolo da definire

11.30 Alessandro CURIONI (IBM, Zurich): Issues in the implementation and mapping of ab initio molecular dynamics on massively parallel computers

12.10 Intervallo

12.15 Interventi programmati

Presiede: Michel MARESCHAL

14.30 Interventi programmati

15.40 Intervallo

16.10 Discussione generale

18.30 Chiusura dei lavori

Segreteria: A. Anastasi, tel.: 06-68.02.72.76 - 06-68.33.131 - e-mail: anastasi@lincei.it - www.lincei.it

ROMA - PALAZZO CORSINI - VIA DELLA LUNGARA, 10