

Tipologia stage (specificare se sperimentale o di alternanza studio-lavoro)	Sperimentale
Titolo dello stage	Composizione e configurazione di un cluster di computer per calcolo scientifico. Uso di alcuni strumenti di chimica computazionale
Data presunta d'inizio e durata prevista (specificare se 2 o 3 settimane)	Inizio presunto il 18/06/2014, fine il 08/07/2014 per una durata prevista di 3 settimane
Numero di studenti coinvolti (specificare se 1 o 2)	1
Referente/i Area per lo stage e Istituto/i di appartenenza	Stefano Ottani – Istituto per la Sintesi Organica e la Fotoreattività (ISOF)
Breve descrizione attività proposta, finalità, eventuali obiettivi da raggiungere (5-10 righe)	Scopo di questo stage e' introdurre lo studente ai sistemi di calcolo ad alte prestazioni (HPC) e ad alcuni loro impieghi nella chimica computazionale. Verrà messo a disposizione un gruppo di computer (nodi) che lo studente installerà e configurerà in modo da costruire un cluster per calcoli paralleli in modalità multiprocessero e multinodo. Sul sistema si installerà un programma di meccanica e dinamica molecolare per studiare le interazioni fra un farmaco antitumorale e una molecola di trasporto (ciclodestrina).
Relazione finale o materiale che documenta il lavoro svolto (specificare se e cosa viene richiesto)	La relazione finale documenterà i vari stadi della procedura d'installazione del cluster e i risultati ottenuti nella simulazione di dinamica molecolare.
Eventuali competenze richieste ai candidati	Conoscenza di base del sistema operativo Linux. Tutto lo studio utilizzerà infatti programmi, pacchetti e sistemi operativi aperti (GPL) su piattaforma Linux. Nozioni di base di chimica e fisica. Capacità di leggere manuali in inglese.