

2011 年中国科学院超级计算中心分子模拟软件讲习班通知

为普及和推广高性能计算化学软件使用、培养高性能计算化学专业人才，中国科学院计算机网络信息中心将于 2011 年 11 月 28~30 日在北京举办 2011 年中国科学院超级计算中心分子模拟软件 CHARMM 和 GROMACS 讲习班。

CHARMM 是一个被广泛承认并应用的分子动力学模拟程序，用于生物大分子的模拟，包括能量最小化，分子动力学和蒙特卡罗模拟等。程序采用由哈佛大学的 Martin Karplus 教授建立的 CHARMM 力场，可以为用户提供处理各种小分子、大分子（包括蛋白质、核酸和糖）的经验化能量计算，包括：相互作用能及构象能量、局域最小化、旋转势垒、与时间相关的动力学行为、振动频率等。模拟过程提供了有关分子结构、相互作用、能量等信息。CHARMM 包含具有专家特点的标准最小化和分子动力学方法，包括正则模式计算、相关性分析、量子力学与分子力学相结合的方法等。

GROMACS 是用于研究生物分子体系的分子动力学程序包。它可以用分子动力学、随机动力学或者路径积分方法模拟溶液或晶体中的任意分子，进行分子能量的最小化，分析构象等。它的模拟程序包包含 GROMACS 力场(蛋白质、核苷酸、糖等)，研究的范围可以包括玻璃和液晶、到聚合物、晶体和生物分子溶液。GROMACS 是一个功能强大的分子动力学的模拟软件，其在模拟大量分子系统的牛顿运动方面具有极大的优势。

本次培训将面向 CHARMM 和 GROMACS 软件使用、本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”目的，利用中国科学院超级计算中心高性能计算机系统“深腾 7000”所提供的一流高性能计算机软硬件环境，为广大学员带来高性能计算化学的深度体验。我们特邀中国科学院大连化学物理研究所生物计算专家李国辉研究员和清华大学材料计算专家李启楷教授担任主讲教师，同时兼顾计算化学、计算生物和材料计算前沿研究的热点科学问题。在培训期间，我们将为广大学员提供上机实践的机会。

- **培训对象：**

深腾 7000 用户，从事计算化学、计算生物和计算材料研究的科研院所

收款单位全称：中国科学院计算机网络信息中心

开户行名称：中国工商银行海淀支行营业部

账号：0200049609200016431

现场付款：签到当天可以直接用现金或支票付款，并开具发票

拟定培训内容（详见课程安排，如有变更，请以实际培训为准）：

中国科学院超级计算环境及 GridMol

分子模拟理论

CHARMM、GROMACS 软件理论知识和软件使用方法

上机实践

SCE 网络使用环境介绍

中国科学院超级计算环境使用介绍

CHARMM、GROMACS 软件安装编译

软件应用实例

● **市内乘车路线：**

1、机场乘车线路：乘坐民航班车（首都机场—中关村）终点（即四环保福寺桥）下车，换乘 641 或 619 到海淀交通支队站下车；

2、北京西客站乘车线路：乘坐 319 到海淀交通支队站下车；

3、北京站乘车线路：乘坐地铁 2 号线到西直门站，换乘城铁 13 号线到知春路站下车。

附近公交站：海淀交通支队、知春里东，具体公交线路请查询：

<http://www.bjbus.com/index.htm>

● **住宿推荐:**

旅馆名称	联系电话	位置说明	备注
物科宾馆	010-82649482	中关村南三街8号 (中国科学院物理所园区内)	需提前预订; 步行时间15分钟。
天创宾馆	010-51192000	中关村南一条甲1号	需提前预订; 步行时间10分钟。
康拓宾馆	010-68378288 010-62634975	中关村南一条甲4号	需提前预订; 步行时间10分钟。
中国科学院空 间会议中心	010-62582916	中关村南二条甲1号 (青年公寓南)	需提前预订; 步行时间8分钟。
青年公寓2号楼 招待所	010-82680799	中关村东路80号(中 国科学院研究生院 青年公寓)	需提前预订, 步行时间12分钟。

*以实际报价为准

报 名 回 执 表

姓名	性别	职务/职称	单位	联系电话 (办公电话&手机)	E-mail	开发票单位名称	备注

注: 各个字段都是必填项, 请正确填写, 谢谢!