

2011 年中国科学院超级计算中心分子模拟软件讲习班通知

(第二轮通知)

各位学员，您好！

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。

- **培训时间：**2011 年 11 月 28 日—11 月 30 日
- **培训地点：**中科院计算机网络信息中心 2 号楼 514 教室
- **培训费用：**包括教材费、午餐费、场地费

● 乘车路线:

1. **首都机场:** 机场巴士(首都机场—中关村)终点(即四环保福寺桥)下车, 换乘公交 641、619 路到海淀交通支队站下车; 或乘机场快线轻轨到三元桥站, 换乘地铁 10 号线西行到知春路站下车;
2. **北京西站:** 公交 319 路到海淀交通支队站下车;
3. **北京站:** 地铁 2 号线到西直门站, 换乘城铁 13 号线到知春路站下车。
4. **北京南站:** 地铁 4 号线到海淀黄庄站, 换乘 10 号线东行到知春路站下车。

附近公交站点: 海淀交通支队、知春里东边

地铁站点: 知春路站

具体路线请查询: <http://www.bjbus.com/index.htm>

● 培训日程安排:

日期	时间	课程内容	主讲人
11 月 28 日 星期一	8: 00—9: 00	注册, 发放培训教材	
	9: 00—9: 10	开幕式	
	9: 10—9: 40	中国科学院超级计算环境及 GridMol	金钟
	9: 40—10: 10	分子模拟理论介绍(一)	李国辉
	10: 10—10: 40	合影、茶歇	
	10: 40—12: 00	分子模拟理论介绍(二)	李国辉
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—14: 30	CHARMM 解析与使用(一)	李国辉
	14: 30—15: 00	中国科学院超级计算环境使用介绍	刘飞
	15: 00—15: 15	茶歇	
	15: 15—17: 00	CHARMM 上机实践	沈虎峻
11 月 29 日 星期二	9: 00—10: 00	CHARMM 解析与使用(二)	李国辉
	10: 00—10: 30	CHARMM 程序编译	李国辉
	10: 30—10: 45	茶歇	
	10: 45—12: 00	CHARMM 上机实践	沈虎峻
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—15: 00	Molecular Simulations By Using Gromacs - Principles and Application(一)	李启楷
	15: 00—15: 15	茶歇	
15: 15—17: 00	Molecular Simulations By Using Gromacs - Principles and Application(二)	李启楷	

11月30日 星期三	9: 00—10: 30	Molecular Simulations By Using Gromacs - Installation, hacking, and tutorials (一)	李启楷
	10: 30—10: 45	茶歇	
	10: 45—12: 00	Molecular Simulations By Using Gromacs - Installation, hacking, and tutorials (二)	清华/超算
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—15: 00	Gromacs 应用实例介绍	李敬源
	15: 00—15: 15	茶歇	
	15: 15—16: 00	SCE 网格使用环境介绍	曹荣强
	16: 00—17: 00	Gromacs 上机实践	清华/超算