

## 2012 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，中科院计算机网络信息中心、理论物理研究所、清华大学将于 2012 年 9 月 17~20 日在北京联合举办 2012 年分子模拟软件 LAMMPS & GROMACS 讲习班。

本次培训将面向 LAMMPS 和 GROMACS 软件使用、本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”目的，利用中科院超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。在培训期间，我们将为广大学员提供上机实践的机会。

LAMMPS 全称“大规模原子分子并行模拟器”，主要用于分子动力学相关的一些计算和模拟工作。它可支持包括气态，液态或者固态相形态下、各种系综下、百万级的原子分子体系，支持多种势函数并具有良好的并行扩展性。

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。

- **培训对象：**

深腾 7000 用户、从事计算化学、计算材料、计算生物等研究的科研院所和高校教师、研究生、科研工作人员及相关企业工程师。

- **培训时间：**

2012 年 9 月 17 日~20 日，报名截止时间：2012 年 9 月 5 日，名额有限，报名从速。

- **培训费用：**包括教材费、培训费、上机费、午餐费

科学院院内学员：¥800 元/人；

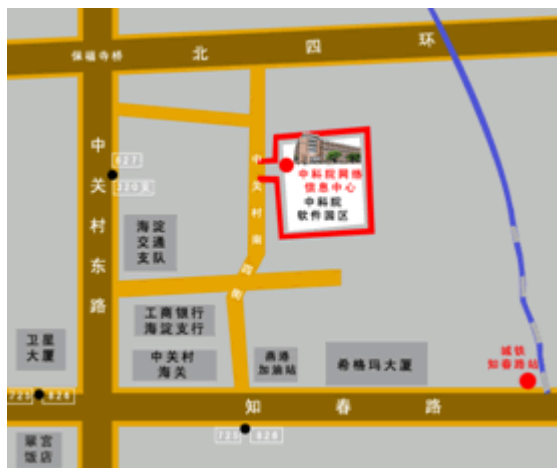
院外教育科研学员：¥1000 元/人；

企业单位学员：¥1200 元/人。

● **培训地点：**

中国科学院计算机网络信息中心 5 层 514 会议室

详细地址：北京市海淀区中关村南四街四号中科院软件园区 2 号楼



● **报名方式：**

按照报名回执表的要求填写各项内容，然后发邮件到 [liuqian@sccas.cn](mailto:liuqian@sccas.cn)，我们将在一个工作日之内给予回复。联系人：刘倩博士，联系电话：010-58812143。

● **付款信息：**

**电汇（推荐）：**截止日期 2012 年 9 月 10 日（含）。凭汇款单在签到时领取发票（发票项目：超算计算化学培训费），请在回执中填写正确的发票单位名称及超算计算化学培训。

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：**

■ LAMMPS

◆ LAMMPS 软件理论知识和软件使用方法

◆ LAMMPS 软件上机实践、软件安装编译

