

## 2013 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和分子模拟理论、培养分子模拟专业人才和软件开发人才，中国科学院超级计算中心、美国伊利诺伊大学厄巴纳—香槟分校物理系理论与计算生物物理学研究组、中国科学院生物物理研究所将于 2013 年 10 月 14~17 日在北京联合举办 2013 年分子模拟软件 NAMD 讲习班。

NAMD (NAnoscale Molecular Dynamics) 是由美国伊利诺伊大学厄巴纳—香槟分校理论与计算生物物理学研究组开发的一款并行分子动力学模拟计算代码，是主要用来研究大分子体系的高性能分子模拟软件。NAMD 根据经典的力场理论数值解离子的运动方程研究原子的运动轨迹。其中力场包括 Amber、CHARMM 和 Dreiding。Dreiding 力场的引入使用户不仅从 NAMD 的高性能计算中得到实惠，而且还通过分子动力学计算预测扩散系数、结合能等重要性质。NAMD 主要用来研究生物分子体系模拟，可以在高端服务器的上千个处理器上进行高性能并行计算，并行效率非常好，可以处理大分子体系。

本次培训将面向 NAMD 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。我们特邀来自著名分子模拟软件 NAMD 软件开发团队、美国伊利诺伊大学厄巴纳—香槟分校物理系理论与计算生物物理学研究组的刘彦欣博士担任主讲教师，同时兼顾计算化学、计算生物和蛋白质研究前沿研究的热点科学问题。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、蛋白质研究等研究领域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：**

2013 年 10 月 14 日~17 日，报名截止时间：2013 年 10 月 8 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

科研单位学员：¥2000 元/人；

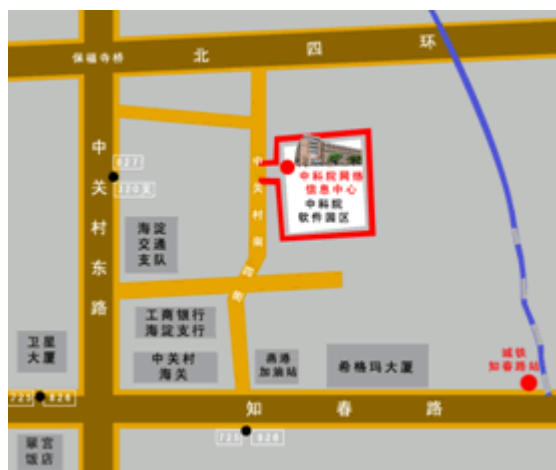
企业单位学员：¥3000 元/人。

**2013 年 9 月 30 日之前报名并汇款的学员，培训费用每人优惠 200 元。**

● **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 2013 年 10 月 10 日（含）。汇款时请注明“超算计算化学培训”，凭汇款单在签到时领取发票（发票项目：培训费）。

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：**

- 分子模拟理论知识

