

2014 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，中科院网络中心超级计算中心、清华大学将于 **2014 年 11 月 11~13 日** 在北京联合举办 2014 年分子模拟软件 GROMACS 讲习班。

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。

本次培训将面向 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&元”以及网络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。

- **培训对象：**

深腾 7000&元及网络用户、从事计算化学、计算材料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：**

2014 年 11 月 11 日~13 日，报名截止时间：2014 年 10 月 31 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：¥1800 元/人；

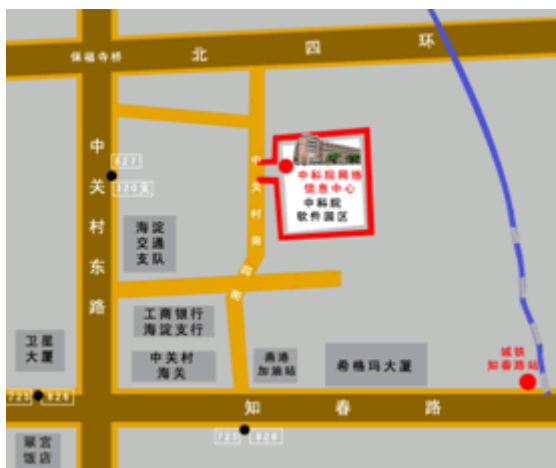
企业单位学员：¥2500 元/人。

2014 年 10 月 20 日之前报名并汇款的学员，培训费用每人优惠 300 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，我们将在一个工作日之内给予回复。联系人：刘老师，联系电话：010-58812143。

● **付款信息:**

电汇（推荐）：截止日期 2014 年 10 月 31 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：0200 0496 0920 0016 431

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:**

- GROMACS 软件理论知识和软件使用方法
- GROMACS 软件上机实践、软件安装编译
- 中国科学院超级计算环境使用
- GROMACS 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、86 或特 19 到海淀交通支队站下车；
- 2、北京西客站乘车线路：乘坐特 19 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、知春里东站，具体公交线路请查询：
<http://www.bjbus.com/index.htm>

报 名 回 执 表

注：各个字段都是必填项，请正确填写，谢谢！

| 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 |
|----|----|-------|----|-------------------|--------|---------|----|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |