

2014 年中国科学院超级计算中心分子模拟软件讲习班通知

(第四轮)

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 19~21 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”以及网格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&元及网格用户、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 19 日~21 日，报名截止时间：2014 年 11 月 10 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

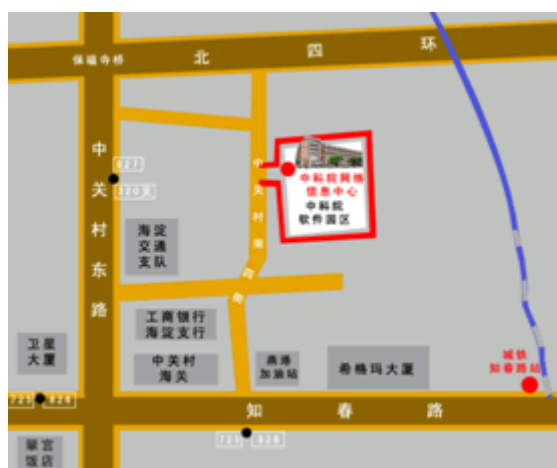
科研单位学员：¥1800 元/人；

企业单位学员：¥2500 元/人。

- **培训地点：**

中国科学院计算机网络信息中心 5 层 507 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 11 月 10 日（含）。汇款时请注明“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：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。

● **注册时间:**2014 年 11 月 19 日 8: 00 - 9: 00

● **注册地点:**中科院计算机网络信息中心 2 号楼五层大厅

● **食宿安排:**授课期间提供工作午餐，住宿自理

● **注意事项:**提供无线上网进行上机实践，请学员自备电脑

● **培训课程安排:**

日期	时间	课程内容	主讲人
11 月 19 日 星期三	8: 00—9: 00	注册，发放培训教材	
	9: 00—9: 30	开幕式	超算
	9: 30—10: 45	分子动力学模拟基本概念	李启楷

	10: 45—11: 10	合影、茶歇	
	11: 10—12: 00	Gromacs 基本使用介绍	李启楷
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—14: 00	中国科学院超级计算环境使用介绍 (一)	超算
	14: 00—14: 30	中国科学院超级计算环境使用介绍 (二)	超算
	14: 30—14: 50	茶歇	
	14: 50—17: 00	Gromacs 上机实践 (一) Gromacs 基本操作	清华/化学所/ 超算
11 月 20 日 星期四	9: 00—10: 20	Molecular Simulations By Using Gromacs - Principles and Application (一)	李启楷
	10: 20—10: 40	茶歇	
	10: 40—12: 00	Molecular Simulations By Using Gromacs - Principles and Application (二)	李启楷
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—14: 00	Gromacs 应用实例 (一)	化学所
	14: 00—15: 00	Gromacs 上机实践 (二) 碳纳米管模拟	清华/化学所/ 超算
	15: 00—15: 20	茶歇	
	15: 20—17: 00	Gromacs 上机实践 (三) 结果分析	清华/化学所/ 超算
11 月 21 日 星期五	9: 00—10: 20	Molecular Simulations By Using Gromacs - Installation, hacking, and tutorials (一)	李启楷
	10: 20—10: 40	茶歇	
	10: 40—12: 00	Molecular Simulations By Using Gromacs - Installation, hacking, and tutorials (二)	李启楷
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—14: 00	Gromacs 应用实例 (二)	化学所

