

2013 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)

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—香槟分校贝克曼研究所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、NVIDIA 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 & VMD 讲习班。

NAMD (NAnoscale Molecular Dynamics) and VMD (Visual 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套广为应用的并行分子动力学模拟软件，是主要用来研究大分子体系的高性能分子模拟软件。分子动力学通过对经典运动方程进行数值积分,以获得有限粒子体系的运动轨迹。VMD 主要用于搭建初始原子模型和分子动力学模拟的后期分析；NAMD 主要用于实现生物体系的分子动力学模拟，可以在高端服务器的几十万个处理器上进行高性能并行计算，并行效率高，适用于处理大分子体系。

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。我们特邀来自美国伊利诺伊大学厄巴纳—香槟分校 NAMD 软件团队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 14~17 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；

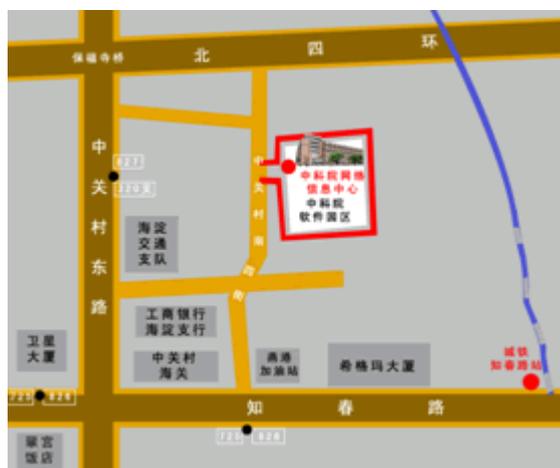
企业单位学员：¥3000 元/人。

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，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：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:**2013 年 10 月 14 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；已电汇培训费的学员请出示电汇凭证（告知电汇单编号或者提供电汇单原件/照片/扫描件等）。

- **拟定培训内容:**

- 分子模拟理论知识
- 分子模拟软件 NAMD&VMD 使用方法
- NAMD&VMD 软件安装和上机实践
- NAMD&VMD 软件科研应用实例
- 中国科学院超级计算环境使用介绍

- **培训课程安排:**

日期	时间	课程内容	主讲人
10 月 14 日 星期一	8: 00—9: 00	Registration	
	9: 00—9: 20	Opening Remarks and Program Overview	金钟
	9: 20—10: 00	Structure and Sequence Analysis with VMD	刘彦欣
	10: 00—10: 30	Group Photo and coffee break	
	10: 30—12: 00	VMD tutorial (1)	助教
	12: 00—13: 30	Lunch	
	13: 30—14: 00	Introduction of Supercomputing Environment of CAS	曹荣强
	14: 00—14: 30	Introduction of Linux operating system	刘飞
	14: 30—16: 30	VMD tutorial (2)	助教
	16: 30—17: 00	Visit DeepComp 7000	
10 月 15 日 星期二	9: 00—10: 00	Introduction to Molecular Dynamics Simulation with NAMD	刘彦欣
	10: 00—10: 20	Coffee break	
	10: 20—12: 00	NAMD tutorial	助教

		- Installation and tutorials (1)	
	12: 00—13: 30	Lunch	
	13: 30—15: 00	GPU Acceleration of Molecular Modeling Applications	NVIDIA
	15: 00—15: 20	Coffee break	
	15: 20—17: 00	NAMD tutorial (2)	助教
10月16日 星期三	9: 00—10: 30	Applications of VMD / NAMD in Modern Research	刘彦欣
	10: 30—10: 50	Coffee break	
	10: 50—12: 00	Simulating membrane protein	刘彦欣
	12: 00—13: 30	Lunch	
	13: 30—15: 00	Membrane protein tutorial	助教
	15: 00—15: 20	Coffee break	
	15: 20—17: 00	Membrane protein tutorial	助教
10月17日 星期四	9: 00—10: 30	Molecular Dynamics Flexible Fitting	刘彦欣
	10: 30—10: 50	Coffee break	
	10: 50—12: 00	Molecular Dynamics Flexible Fitting tutorial	助教
	12: 00—13: 30	Lunch	
	13: 30—17: 00	Finish the tutorials: - VMD Tutorial - NAMD Tutorial - Membrane Protein Tutorial - Molecular Dynamics Flexible Fitting Tutorial	助教

培训课程内容可能基于报名人员的背景进行调整，请以培训时发放的最终版本为准。

● **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 或 619 到海淀交通支队站下车；
- 2、北京西客站乘车线路：乘坐 319 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，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