

# 邀请函



# GROMACS

FAST.  
FLEXIBLE.  
FREE.

## “GROMACS 分子动力学模拟入门与提高”研讨会

随着计算机技术的发展，分子模拟及其工程应用越来越受到人们的重视。分子模拟在现代科学技术研究开发中发挥着重要的作用，一方面，它能从本质上定量化探索机理和规律，另一方面，又能促进我们的研究开发工作向经济、高效和有预见性的方向发展。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。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，研究范围可以包括玻璃和液晶到聚合物、晶体和生物分子溶液。

为普及和推广高性能计算软件 GROMACS 的使用，培养高性能计算专业人才，应广大单位和科研院所要求，中大唯信科技有限公司特举办“分子动力学模拟软件包 GROMACS 入门与实用技术”研讨会。本次研讨会与华南理工大学、中山大学合办，将面向 GROMACS 软件使用，本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”的目的，采取深入浅出的方法，先以简单的案例引入分析模拟的基本原理，随后重点讲解多种常用单元的功能和特性，以及实用技术和处理方法，紧密结合应用实例，针对工作中存在的疑难问题进行分析讲解和专题讨论，有效提升学员解决复杂问题的能力。

详情请见 <http://www.wecomput.com/2015/10/17/training-gromacs/>。

### 【主办单位】

中大唯信科技有限公司

### 【时间地点】

2016 年 4 月 22-24 日

中山大学东校区——广州番禺大学城

## 【主讲专家】

我们邀请了中山大学和华南理工大学的资深分子模拟专家担任本次研讨会的讲师，他们拥有丰富的专业知识和科学研究经验，长期从事该领域重大项目研究，在相关领域发表了高水平论文，具有资深的技术底蕴和专业背景。

## 【研讨会方式】

(一) 课程讲座 (二) 专题小组研讨与案例讲解分析结合 (三) 上机操作 (四) 专家答疑  
(欢迎学员带着在工作中遇到的实际问题与老师和其他学员一起探讨)

## 【日程安排】

时间安排	授课内容
第一天 <b>Linux 系统和分子模拟基础知识</b>	上 1. Linux 系统基础与常用命令 午 2. GROMACS 的安装与配置 3. 其他配套软件工具的安装与使用
	下 1. 分子动力学模拟的基本原理 午 2. 分子动力学模拟的应用讲解
第二天 <b>GROMACS 模拟基础入门</b>	上 1. GROMACS 的基本命令 午 2. GROMACS 的文件格式及参数 3. GROMACS 进行 MD 模拟的基本流程
	下 1. GROMACS 模拟简单体系示例 午 2. GROMACS 参数文件的设置 3. GROMACS 进行基本数据分析
第三天 <b>GROMACS 模拟进阶实战</b>	上 1. 复杂体系的 GROMACS 模拟示例 午 2. GROMACS 高级数据分析 (PCA、Landscape 分析等)
	下 1. 课后习题布置与讲解 午 2. 自由练习与分组讨论 3. 答疑

## 【费用】

RMB: 3200 元/人 (学术), 4000 元/人 (企业)

含报名费、资料费、午餐费、茶歇费等，住宿自理。

### 【报名优惠政策】

1. 4月1日前付款成功，优惠300元/人。
2. 三人或以上团报，优惠200元/人。（可与优惠1叠加）

### 【付款方式】

现金、支票、银行转账、银行汇款。

账户名称：北京中大唯信科技有限公司

开户行：招商银行北京分行大运村支行

账号：110918972010401

请备注：“研讨会+姓名+单位”

### 【报名方式】

推荐[在线报名](#) 或下载[报名回执单](#)，填写发送至邮箱：[info@wecomput.com](mailto:info@wecomput.com)

报名后会务组将在三个工作日内以电话或邮件方式通知您付款，款到后发送确认通知。若您未收到通知，请电话咨询。

研讨会以收到学员费用为成功报名，座位按收到费用先后顺序安排，总名额50人，额满即止。

### 【联系方式】

中大唯信科技有限公司

电话：400-680-7960

网址：[www.wecomput.com](http://www.wecomput.com)

Email：[info@wecomput.com](mailto:info@wecomput.com)

企业QQ：194432588

地址：北京市海淀区农大南路1号院2号楼5层



欢迎关注官方微信二维码  
随时了解最新动态