

附件一：“GROMACS 分子动力学模拟入门与提高” 培训班日程安排

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