

## 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	<ol style="list-style-type: none"> <li>Linux 系统基础与常用命令</li> <li>GROMACS 的安装与配置</li> <li>其他配套软件工具的安装与使用</li> </ol>
	下午	<ol style="list-style-type: none"> <li>分子动力学模拟的基本原理</li> <li>分子动力学模拟的应用讲解</li> </ol>
第二天 GROMACS 模拟基础入门	上午	<ol style="list-style-type: none"> <li>GROMACS 的基本命令</li> <li>GROMACS 的文件格式及参数</li> <li>GROMACS 进行 MD 模拟的基本流程</li> </ol>
	下午	<ol style="list-style-type: none"> <li>GROMACS 模拟简单体系示例</li> <li>GROMACS 参数文件的设置</li> <li>GROMACS 进行基本数据分析</li> </ol>
第三天 GROMACS 模拟进阶实战	上午	<ol style="list-style-type: none"> <li>复杂体系的 GROMACS 模拟示例</li> <li>GROMACS 高级数据分析（PCA、Landscape 分析等）</li> </ol>
	下午	<ol style="list-style-type: none"> <li>课后习题布置与讲解</li> <li>自由练习与分组讨论</li> <li>答疑</li> </ol>