

Вниманию участников семинара *GROMACS: Введение в атомистическое компьютерное моделирование наносистем в науке о материалах*

Для участия в практических занятиях необходимо иметь ноутбук.

Ноутбук должен быть оборудован встроенным Wi-Fi адаптером, поскольку выход в интернет и на многопроцессорный вычислительный кластер будет осуществляться ТОЛЬКО по беспроводной сети Wi-Fi. Убедительная просьба заранее протестировать работоспособность встроенного модуля Wi-Fi.

Для выполнения практических упражнений необходимо, чтобы на ваших компьютерах было установлено следующее программное обеспечение:

Для операционной системы Windows:

PuTTY – клиент для удаленного доступа к компьютерным системам по протоколу SSH (можно скачать со страницы <http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/download.html>; ссылка `putty-0.61-installer.exe`);

WinSCP – клиент для обмена файлами с удаленными компьютерными системами (<http://winscp.net/eng/download.php>; ссылка `Installation package`);

VMD – программный пакет для визуализации конфигурации молекулярных систем и траекторий моделирования (<http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>; ссылка `Windows OpenGL`, необходима регистрация);

MS Office (альтернатива – **OpenOffice** или **LibreOffice**) – табличный редактор будет использоваться для построения графиков (OpenOffice: <http://download.openoffice.org/>; ссылка `Download OpenOffice.org 3.3.0` LibreOffice: <http://www.libreoffice.org/download/>; необходимо выбрать в выпадающем списке опцию `Windows`; ссылка `LibO_3.4.4_Win_x86_install_multi.exe`).

Для операционных систем GNU/Linux:

openssh – набор программ для работы с удаленными компьютерными системами по протоколу ssh (обычно доступен для установки через пакетный менеджер системы, конкретный способ установки зависит от дистрибутива системы);

VMD – программный пакет для визуализации конфигурации систем и траекторий моделирования (<http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>; ссылка `Linux OpenGL` для версии 1.8.6, необходима регистрация);

OpenOffice или **LibreOffice** - табличный редактор будет использоваться для построения графиков (обычно доступен для установки через пакетный менеджер системы, конкретный способ установки зависит от дистрибутива системы).