

Внимание участников семинара «Введение в атомистическое компьютерное моделирование биомолекулярных систем»

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-0.62-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);

MSOffice (альтернатива – **OpenOffice** или **LibreOffice**) – табличный редактор будет использоваться для построения графиков (**OpenOffice**: <http://www.openoffice.org/download/>; ссылка Download OpenOffice.org 3.4.1 **LibreOffice**: <http://www.libreoffice.org/download/>; ссылки Main Installer и LibreOffice built-in help).

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 1.9.1, необходима регистрация);

Xmgrace – программный пакет для построения графиков (<http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>)

OpenOffice или **LibreOffice** - табличный редактор может быть использован для построения графиков вместо Xmgrace (обычно доступен для установки через пакетный менеджер системы, конкретный способ установки зависит от дистрибутива системы).