

Discovery Studio 課程資訊

課程簡介:

Discovery Studio(DS)為美商 Accelrys 公司針對生命科學領域，所開發的專業性研究軟體。DS 可讀取多種不同格式之檔案，並具客製化之功能，DS 使用介面提供使用者明瞭、易懂的操作環境，加速生命科學領域研究之發展。DS 主要功能有:

1. 比較蛋白質間之序列，並根據序列的相似程度，推測蛋白質之功能。
2. 建構和修改核酸、蛋白質以及多肽之結構，可計算分子表面之靜電力場和溶媒能。
3. 根據同源蛋白質之 3D 結構，自動、快速地進行目標蛋白質結構之建模。
4. 藉由同源蛋白之序列與結構訊息，了解目標蛋白質之功能與分類，並進一步製做樹狀圖，進行物種演化之分析。
5. 透過 CHARMM 進行古典力學與分子動力學之計算，研究大、小分子的能量與變化性。CHARMM 可與 DS 之其它模組搭配，完成各種模擬計算，例如: 蛋白質、小藥物對接程式 CDOCKER。
6. 利用小片段資料庫，配合蛋白質結構資訊，設計新的藥物或對已存在之藥物進行結構改造，篩選出具有潛力之藥物小分子後再進行合成。
7. 可將小藥物分子與受體的活性口袋進行對接，了解對接位向。搭配小分子資料庫與平行化計算技術，可進行藥物結合可能性之高速篩選(Virtual High-Throughput Screening)。
8. 預測小藥物分子的吸收、分佈、代謝路徑、分泌以及毒性。
9. 預測蛋白和蛋白結合位向。

本課程主要介紹 DS2.5 之最新功能並帶領以下內容之實機演練：

- 一、DS2.5 可處理各種大、小分子之理論模擬計算，並提供分子結構、交互作用、能量等資訊。
- 二、DS2.5 提供以分子結構為基礎之交互作用性預測功能，包含: Ligand-Protein Docking、Protein-Protein Docking。

課程大綱:

- 一、Discovery Studio 2.5 版本 (DS2.5) 之新功能介紹與進階功能操作教學 (實機演練)
- 二、實機演練
 - I、Ligand、Protein、DNA 建造 操作教學
 - II、Ligand-Protein Docking 操作教學
 - III、Protein-Protein Docking 操作教學

開課資訊:

總時數	上課日期/時間	上課地點 / 講師	費用 / 名額
6 小時	2010/2/5(星期五)上午 9:00 至 12:00 2010/2/5(星期五)下午 1:30 至 4:30	212/ 分子視算/林進中	500 元 / 45 人

*適合對象:生物資訊與結構生物學暨藥物結構設計之研究人員

Materials Studio 課程資訊

課程簡介:

MS 是美商 Accelrys 科學商智軟體公司為材料科學領域所專門設計開發之一套專業計算研究軟體。對於化學、材料、化工工業等所面臨的一系列重要問題，提出一套完整的解決方案。MS 包含以多種先進計算方法理論所發展出來之各式功能模組，使得 MS 成爲一個強而有力的模擬平台。本課程主要介紹 MS5.0 之最新功能並帶領以下模組之實機演練：

1. MS Visualizer：提供建造晶體、分子、表面以及高分子材料結構模型所需要之工具，包含分析結構模型，處理圖表、表格或文字等形式資料，並以統一之操作介面發動 MS 各模組之運算。

2. MS CASTEP：先進之量子力學程式，廣泛應用於陶瓷、半導體、金屬等多種材料，可研究晶體塊材（半導體、陶瓷、金屬、沸石等）、表面和表面重構之性質、表面化學、電子結構（能帶及態密度）、晶體的光學性質、點缺陷性質（如空位、間隙或取代摻雜）、擴展缺陷（晶粒間界、位錯）、三維電荷密度、拉曼光譜等。

3. MS Discover：先進之分子力學程式。使用分子力學和分子動力學方法，並透過數種仔細推導的力場作為基礎，可準確地計算出如最低能量構型、分子體系的結構和分子動力學軌跡等。分子動力學計算可了解不同時間點的狀態與連續動態過程。

4. MS VAMP：半經驗法量子計算程式，適用於有機與無機分子系統。MS VAMP 可快速計算分子（可達 1,000 顆原子）的多項物理及化學性質，類似常用的半經驗法量子計算程式 MOPAC 和 Zindo。其計算速度與精準度介於分子力學方法與量子力學（第一原理）方法之間。

課程大綱:

一、Materials Studio 5.0 版本 (MS5.0) 量子力學、分子力學功能模組介紹與操作教學 (實機演練)

二、實機演練

I、MS Visualizer: 晶體、化學分子、高分子建造 操作教學

II、MS CASTEP 新功能介紹與操作教學

III、MS Discover 新功能介紹與操作教學

IV、MS VAMP (*新購) 功能介紹與操作教學

(屬於 Materials Studio 進階課程)

開課資訊:

總時數	上課日期/時間	上課地點 / 講師	費用 / 名額
6 小時	2010/2/1(星期一)上午 9:00 至 12:00 2010/2/1(星期一)下午 1:30 至 4:30	212/ 分子視算/江定遠	500 元 / 45 人

*適合對象:適合有機、無機材料理論計算與材料分子結構設計之相關研究領域，並有使用 Materials Studio 軟體 (或其它材料模擬計算軟體) 經驗之人員。

報名步驟

1. 進入台大計中首頁: <http://www.cc.ntu.edu.tw/chinese/> -> **點選** "高效能運算" (首頁左下角)

e大學中心

- 授權軟體下載
- 壹大軟體銀行
- INFO資訊網

more...

資訊中心

- NTU Weblogs
- 壹大電子報
- 壹大Webmail

more...

網路中心

- VoIP網路電話
- Wi-Fi無線網路
- 校園IP管理

more...

計算中心

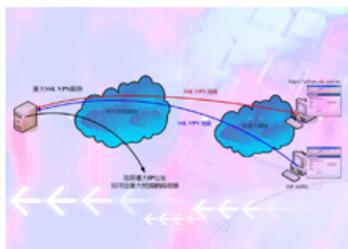
- 多媒體服務
- 電腦教室服務
- 高效能運算**

more...

焦點新聞 | SPOTLIGHTS

MORE

計資中心SSL VPN服務升級!



2009-12-28

SSL VPN服務是一種既安全又方便的校外連線方式,本校使用者在非壹大網路環境時,如果需要使用限制壹大IP位址才能享受的服務,例如圖書館電子期刊、計資中心授權軟體下載等校園專屬服務等,.....

計資中心快速列印服務 還在為找不到地方列印而煩惱嗎?



2009-12-28

計資中心秉持著服務同學的精神及因應同學們的列印需求,推出24小時不打烊的快速列印服務(Fast Print),同學只需攜帶USB隨身碟至計資中心快速列印區(Fast Print Area),.....

計中電子報 | e-NEWSLETTER

MORE



壹大筋斗雲服務-十萬八千里之意念跳躍

駕著孫悟空的「筋斗雲」去瞧瞧目前最夯的「雲端」到底是何方神聖?...



線上簽核-無紙化的最後一哩

清康熙三十五年六月初八,江寧織造曹寅上請安奏摺摺給康熙,康熙未批「知道了」...



全天候網站安全監控與檢測服務

為了幫助學校的網站管理者解決個資與機敏資料外洩的惱人問題...

資訊應用暨進階課程學習網

教室會議室借用

最新消息 | HIGHLIGHTS

MORE

- ▷ 2009/12/31 計資中心拾獲失物
- ▷ 2009/12/30 壹大計資中心誠徵博士後研究與研究助理各一名
- ▷ 2009/12/29 失物招領

2. 高效能運算 -> **點選** "報名網址"

國立臺灣大學計算機及資訊網路中心
NTU Computer And Information Networking Center

HIGH PERFORMANCE COMPUTING GRID COMPUTING

Grid computing

January 2, 2010

- News
- Introduction
- Facilities
- Application
- Projects
- Training
- Links
- Contacts

High Performance Computing 最新消息

教育訓練通知

本中心預計於暑假期間,舉辦多場教育訓練,內容涵蓋高效能軟硬體設備之環境介紹、平行化程式寫作、Matlab、Gaussian、Discovery Studio等應用軟體操作。歡迎有興趣同學隨時注意本網站公布資訊。

教育訓練線上報名網址

報名網址

歡迎申請高效能計算服務

帳號申請

2007年國立台灣大學
計算機及資訊網路中心
All Right Reserved.
NTU Computer and
Information Networking
Center.

3. 資訊應用暨進階課程學習網 -> **點選** ”*高效能運算系列: DS / MS 介紹及上機演練”，閱讀課程資訊

國立台灣大學計算機及資訊網路中心 教學研究組 e-Learning
線上報名 · 電腦Q&A · 首頁

資訊應用暨進階課程學習網

Dreamweaver網頁設計入門
多媒體網頁製作(員工子女班)
*資訊安全系列
--資訊進階課程--
*程式設計系列
ASP.NET3.5網頁程式設計與專題製作(班次A)
ASP.NET3.5網頁程式設計與專題製作(班次B)
C# 2008 程式設計基礎
VB 2008程式設計基礎
*資料庫管理系列
Access資料庫入門
*統計軟體系列
SAS統計分析基礎(班次A)
SAS統計分析基礎(班次B)
SPSS統計分析實務
*高效能運算系列
CUDA 程式設計介紹
CUDA 程式最佳化
Discovery Studio介紹及上機演練
Materials Studio介紹及上機演練
Mathematica介紹與運用及上機演練
MATLAB分散式運算與平行運算之應用
MATLAB基礎程式技術
MATLAB進階課程

重要訊息

* 線上報名 *	* 報名流程 *
證照核發	公務員學習時數認證
訂閱電子報	更多課程資源

公告事項

· 98學年第2學期資訊應用課程於**2009/12/25(星期五)**，09:00開放 [線上報名](#)！

*** 從這期開始，我們的資訊應用課程不一樣囉！***
為了提升我們的服務，讓學員學習到更有興趣的課程，將試辦檢討開課前4週報名人數沒有超過8人之課程是否要持續開班。若決定停課之課程將會另行由其他新課程遞補，所以請同學有喜歡的課程千萬不要再猶豫囉～請多多支持好的課程，趕快報名以免課程被取消喔！
^____^

- 停課通知

* openoffice簡介	2009/12/24	人數未達開班標準	退費	
* PDF與Acrobat (班次B)	2009/12/17	人數未達開班標準	退費	
* 文書應用2-製作簡報大綱 (班次B)	2009/12/10	人數未達開班標準	退費	98.12.22
* Excel函數應用	2009/10/29	人數未達開班標準	退費	

4. 資訊應用暨進階課程學習網 -> **點選** ”報名流程”，了解報名程序 -> **點選** ”線上報名”

國立台灣大學計算機及資訊網路中心 教學研究組 e-Learning
線上報名 · 電腦Q&A · 首頁

資訊應用暨進階課程學習網

下載課程一覽表

98學年度第二學期
--資訊應用課程--
*文書處理系列
Excel 2003 初階應用
PDF與Acrobat (班次A)
PDF與Acrobat (班次B)
Powerpoint 2003
文書應用1-合併列印(班次A)
文書應用1-合併列印(班次B)
文書應用2-製作簡報大綱(班次A)
文書應用2-製作簡報大綱(班次B)
*多媒體動畫系列
Flash CS3 動畫設計入門
*影像繪圖系列
PhotoImpact X3影像處理
Photoshop CS3數位影像處理及應用(班次A)
Photoshop CS3數位影像處理及應用(班次B)
*網頁設計系列
Dreamweaver網頁設計入門
多媒體網頁製作(員工子女班)
*資訊安全系列
--資訊進階課程--
*程式設計系列

重要訊息

* 線上報名 *	* 報名流程 *
證照核發	公務員學習時數認證
訂閱電子報	更多課程資源

公告事項

· 98學年第2學期資訊應用課程於**2009/12/25(星期五)**，09:00開放 [線上報名](#)！

*** 從這期開始，我們的資訊應用課程不一樣囉！***
為了提升我們的服務，讓學員學習到更有興趣的課程，將試辦檢討開課前4週報名人數沒有超過8人之課程是否要持續開班。若決定停課之課程將會另行由其他新課程遞補，所以請同學有喜歡的課程千萬不要再猶豫囉～請多多支持好的課程，趕快報名以免課程被取消喔！
^____^

- 停課通知

* openoffice簡介	2009/12/24	人數未達開班標準	退費	
* PDF與Acrobat (班次B)	2009/12/17	人數未達開班標準	退費	
* 文書應用2-製作簡報大綱 (班次B)	2009/12/10	人數未達開班標準	退費	98.12.22
* Excel函數應用	2009/10/29	人數未達開班標準	退費	

5. 資訊應用暨進階課程學習網 - 報名系統 -> 點選 ”線上報名”



6. 線上填寫個人資料並送出

(※ 校外人士: 一級單位請選 ”其它”, 二級單位請填上 “您所屬的單位名稱”)

個人資料	
* 一級單位：請選擇 <input type="text"/> (必填)	
* 二級單位：請先輸入一級單位 (必填)	
* 姓名： <input type="text"/> (必填, 列印證書用)	* 身份：請選擇 <input type="text"/> (必填)
<input type="checkbox"/> 有公務員終身學習護照 (公務員上傳學習時數之用)	* 出生日期：西元 <input type="text"/> 年 <input type="text"/> 月 <input type="text"/> 日 (必填)
* 身分證字號： <input type="text"/> (必填, 而且必須正確)	
* E-mail： <input type="text"/> (必填)	
學號或員工代號： <input type="text"/>	
* 聯絡電話： <input type="text"/> (必填)	
員工姓名： <input type="text"/> (員工子女班才填父母姓名)	就讀年級： <input type="text"/> (員工子女班才填, 例如: 小三, 國二)

報名課程及班次	
* 課程一：	不選 <input type="text"/> (必填)
課程二：	不選 <input type="text"/>
課程三：	不選 <input type="text"/>

7. 完成線上報名