

# “分子模拟的理论与算法” 课程作业平台

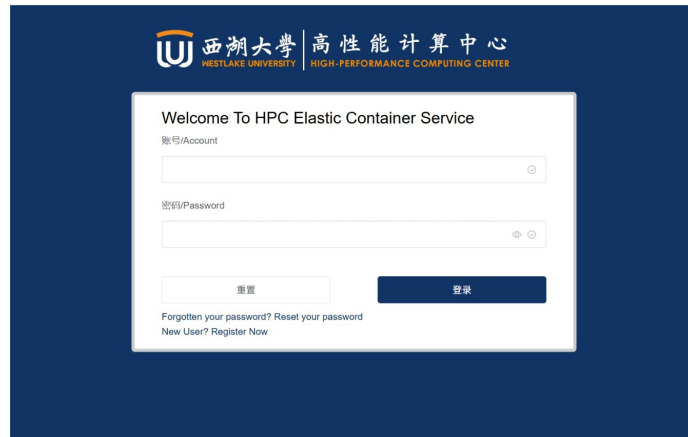
## “Molecular Simulation: Theory and Algorithms” Coursework Platform

### 使用指南

### User Guide

#### 平台登录 Accessing the Platform

登录网址 URL	<a href="https://hpc.westlake.edu.cn:7003/class-resource">https://hpc.westlake.edu.cn:7003/class-resource</a>		
用户账号 Account	西湖大学学/工号	Westlake University Identity and Access Management Platform UID	
用户密码 Password	西湖大学学/工号密码	Westlake University Identity and Access Management Platform Password	



登入平台后 when logged in,

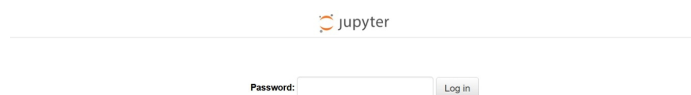
1. 点击 “分子模拟的理论与算法” 课程，click on “分子模拟的理论与算法”；
2. 点击 “打开环境” click on “打开环境”；



3. 记录端口密码 copy the password;
4. 点击 “网页访问” click on “网页访问”。



5. 输入端口密码并进入作业环境 enter the password and login the coursework environment。



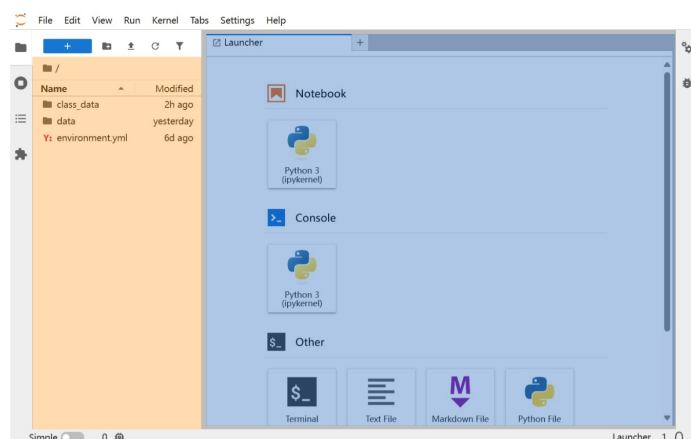
如果用户登录遇到问题，请联系课程助教。

Consult your teaching assistant for login issues.

## 平台简介 Introducing the Platform

课程作业主要依托 JupyterLab 平台。界面左侧为文件管理器（橙色），右侧为工作区（蓝色）。

The left part (orange region) is the File Explorer and the right part (blue region) is the workspace.



在文件管理器中

- ‘class\_data’ 文件夹包含一些课程资料以及作业模板，学员仅拥有只读权限 (学员不可直接编辑该文件夹中的文件)；
- ‘data’ 文件夹为学员的作业区，学员拥有读写权限。

此外，其他文件路径下的文件或数据均非持久化存储。

在退出平台或关闭端口之后，除了位于 ‘data’ 和 ‘class\_data’ 下的其他数据或文件将在再次登陆时丢失。

在退出平台或关闭端口之后，除了位于 ‘data’ 和 ‘class\_data’ 下的其他数据或文件将在再次登陆时丢失。

在退出平台或关闭端口之后，除了位于 ‘data’ 和 ‘class\_data’ 下的其他数据或文件将在再次登陆时丢失。

学员应全程都在 ‘data’ 文件夹下完成和测试作业代码。

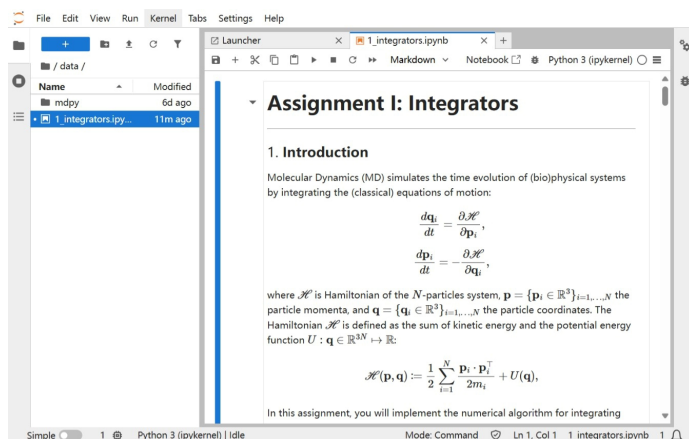
以安全合理的方式保存研究数据是科学研究的基本技能，我们不对学员因非持久化储存所导致的数据丢失负责。

## 作业准备 Preparing for the assignments

所有课程作业的内容围绕分子动力学模拟的算法实现开展。平台提供了用于简单模型体系分子动力学模拟的 MDPY 程序，尽管学员无需了解其实现细节，在每次作业中，学员将在给出的作业样例的指导下利用 MDPY 的预设接口实现并测试分子动力学模拟算法。

以第一次作业为例，学员应当进行如下准备工作：

1. 将 ‘class\_data/mdpy’ 文件夹整体复制到 ‘data’ 文件夹下；
2. 将 ‘class\_data/assignments’ 文件夹下的当次作业的 ‘1\_integrators.ipynb’ 文件复制到 ‘data’ 文件夹下；
3. 根据 ‘data/1\_integrators.ipynb’ 中的指示，在其中完成第一次作业。



## 作业提交 Submitting for the assignments

学员完成作业后，将作业文件（例如 ‘1\_integrators.ipynb’）保存在 ‘data’ 中即可，主讲教师能够查看学员账户中的 ‘data’ 文件夹下的全部内容。

## 注意事项 Important notes

1. 如果学员保存了同一次作业的多个副本，主讲教师将仅查看编辑时间最晚的作业副本。
2. 如果学员在当次作业的截止时间后修改了作业文件，则需要通知主讲教师，否则我们将仅查看截止时间前的作业文件。
3. 如果学员的实现涉及对 MDPY 源代码的修改，则需要给出详细的修改位置及原因，否则将被视为实现错误。
4. 如果学员在完成作业的过程中受益于他人的指导或讨论，则需要在作业中明确致谢，这将对作业评价产生负面影响。
5. 禁止共享账号或代替他人完成作业 Account sharing or proxy submissions are strictly prohibited.