

2010 年中国科学院超级计算中心计算化学软件

NWChem 讲习班

(第二轮通知)

各位学员，您好！

为普及和推广高性能计算化学软件使用、培养高性能计算化学专业人才，中科院计算机网络信息中心、美国能源部西北太平洋国家实验室(PNNL)下属环境分子科学实验室(EMSL, Environmental Molecular Sciences Laboratory)和清华大学将于 2010 年 12 月 11~13 日在北京联合举办 2010 年中国科学院超级计算中心计算化学软件 NWChem 讲习班。

NWChem 是运行在高性能并行超级计算机和 workstation 集群上的开源大规模并行计算化学软件。该软件使用标准量子力学方法描述电子波函数或密度，计算分子和周期性系统的特性，还可进行经典分子动力学和自由能模拟，当前版本为 6.0。本次培训将面向 NWChem 软件使用、本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”目的，利用中科院超算中心高性能计算机系统“深腾 7000”所提供的一流高性能计算机软硬件环境，为广大学员带来高性能计算化学的深度体验。我们特邀 NWChem 开发团队的多位专家——来自美国能源部西北太平洋国家实验室(PNNL)下属环境分子科学实验室(EMSL)的 William A. Shelton 博士、Wibe Albert de Jong 博士、Niranjan Govind 博士、Ping Yang 博士担任主讲教师，同时兼顾计算化学前沿研究的热点科学问题。在培训期间，我们将为广大学员提供上机实践的机会。

- **培训时间：**2010 年 12 月 11 日—12 月 13 日
- **培训地点：**中科院计算机网络信息中心 2 号楼 514 教室
- **培训费用：**包括教材费、午餐费、场地费
科研教育单位学员：¥300 元/人；
企业单位学员：¥800 元/人。
- **报名方式：**(截止日期：12 月 7 日)

按照报名回执表的要求填写各项内容，然后发邮件到 liuqian@sccas.cn，我们将在一个工作日之内给予回复。联系人：刘倩，联系电话：010-58812143，15201280496。

- **付款信息：**

电汇(推荐)：截止日期 2010 年 12 月 7 日(含)。凭汇款单在签到时领取发票，请在汇款备注留言中填写正确的发票单位名称及超算计算化学培训。

收款单位全称：中国科学院计算机网络信息中心

开户行名称：中国工商银行海淀支行营业部

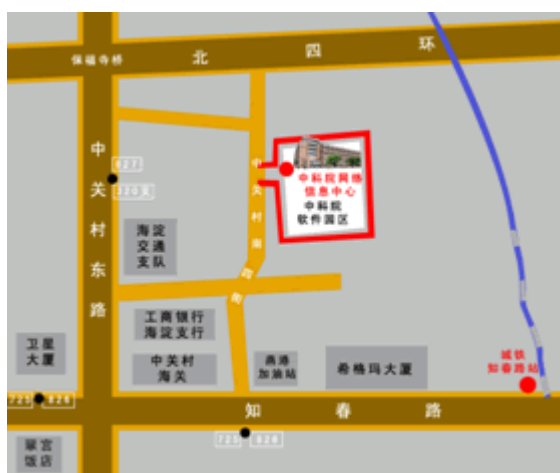
账号：0200049609200016431

现场付款：签到当天可以直接用现金或支票付款，并开具发票

- **注册时间：**2010年12月11日 8:00 – 10:00
- **注册地点：**中科院计算机网络信息中心2号楼五层大厅
- **食宿安排：**授课期间提供工作午餐，住宿自理
- **注意事项：**提供无线上网进行上机实践，**请学员自备电脑；已电汇培训费的学员请告知电汇单编号或者电汇单照片/扫描件。**

- **详细地址：**

- 北京市海淀区中关村南四街四号中科院软件园区2号楼



- **乘车路线：**

1. **首都机场：**机场巴士（首都机场—中关村）终点（即四环保福寺桥）下车，换乘公交641、619路到海淀交通支队站下车；或乘机场快线轻轨到三元桥站，换乘地铁10号线西行到知春路站下车；
2. **北京西站：**公交319路到海淀交通支队站下车；
3. **北京站：**地铁2号线到西直门站，换乘城铁13号线到知春路站下车。
4. **北京南站：**地铁4号线到海淀黄庄站，换乘10号线东行到知春路站下车。

附近公交站点：海淀交通支队、知春里东站

地铁站点：知春路站

具体路线请查询：<http://www.bjbus.com/index.htm>

● 培训日程安排:

日期	时间	课程内容	主讲人
12月11日 星期一	8:00-9:00	注册, 发放培训教材	
	9:00-9:10	开幕式	
	9:10-9:40	中科院超级计算环境和计算化学	金钟
	9:40-10:00	清华大学化学系介绍	李隽
	10:00-10:30	Group photo and coffee break	
	10:30-11:30	Basic Introduction of Computational Chemistry	EMSL 专家
	11:30-12:30	Basic Introduction of NWChem Software	EMSL 专家
	12:30-13:45	Lunch	
	13:45-14:45	NWChem Consulting: Input and Output Examples	EMSL 专家
	14:45-15:15	Introduction of CNIC Computing Environment	曹荣强
	15:15-15:30	Coffee Break	
	15:30-17:15	Hands-on tutorials	清华/超算 EMSL 专家
12月12日 星期日	9:00-10:00	Ground and Excited States with DFT and TDDFT	EMSL 专家
	10:00-11:00	Correlated Methods for Ground and Excited states	EMSL 专家
	11:00-11:20	Coffee Break	
	11:20-12:20	Relativity, Spectroscopy and the EMSL Basis Set Library	EMSL 专家
	12:20-13:45	Lunch	
	13:45-16:30	Hands-on tutorials	超算/清华 EMSL 专家
	16:30-17:00	参观深腾 7000 机房	刘飞
12月13日 星期一	9:00-10:00	Classical Molecular Dynamics and QM/MM	EMSL 专家
	10:00-11:00	<i>Ab Initio</i> Molecular Dynamics	EMSL 专家
	11:00-11:20	Coffee Break	
	11:20-12:20	Free discussion & hand-on tutorials	超算/清华 EMSL 专家
	12:20-13:45	Lunch	
	13:30-17:00	Hands-on tutorials	超算/清华 EMSL 专家