

# 2012 年高性能计算化学软件 NWChem

## 讲习班通知

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，中国科学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2012年10月17~19日在北京联合举办2012年高性能计算化学软件 NWChem讲习班。

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，利用中国科学院超级计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。

NWChem 软件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 6.1。

- **培训对象：**

深腾 7000 用户、从事计算化学、计算材料研究的科研院所和高校教师、研究生、科研工作人员及相关企业工程师。

- **培训时间：**

2012 年 10 月 17 日~19 日，报名截止时间：2012 年 10 月 12 日，名额有限，报名从速。

- **培训费用:包括教材费、培训费、上机费、午餐费**

科学院所属单位：¥600 元/人；

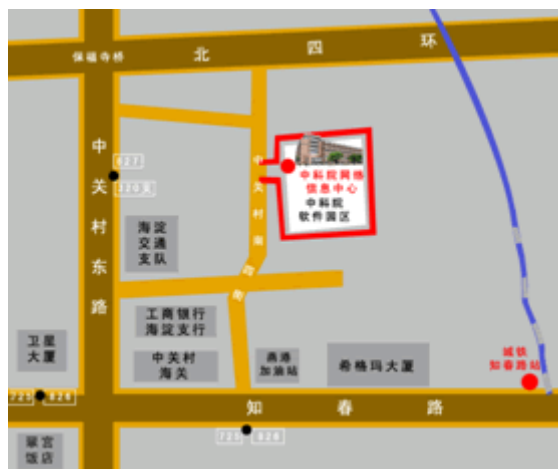
教育科研：¥800 元/人；

企业：¥1000 元/人。

- **培训地点：**

中国科学院计算机网络信息中心 5 层 514 会议室

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



- **报名方式:**

按照报名回执表的要求填写各项内容，然后发邮件到 [zhangbh@sccas.cn](mailto:zhangbh@sccas.cn)，我们将在一个工作日之内给予回复。

联系人：张宝花，联系电话：010-58812131。

- **付款信息**

**电汇（推荐）：**截止日期 2012 年 10 月 12 日（含）。凭汇款单在签到时领取发票（发票项目：超算计算化学培训费），请在回执中填写正确的发票单位名称。

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：0200 0496 0920 0016 431

**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

- **拟定培训内容（详见课程安排，如有变更，请以实际培训为准）:**

- ◇ NWChem 软件理论知识和软件使用方法

- ◇ NWChem 软件上机实践、软件安装编译

- ◇ 中国科学院超级计算环境介绍

- ◇ NWChem 软件应用实例及科研动态分享

- **乘车路线:**

- ◇ **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；
- ◇ **北京西站:** 公交 319 路到海淀交通支队站下车；
- ◇ **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。
- ◇ **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

地铁站点： 知春路站

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

● **报名回执表**

姓名	性别	工作单位	职务/职称	办公电话	手机	E-mail	开发票单位名称	备注

注：各个字段都是必填项，请正确填写，以便联络，谢谢！