

2012 年高性能计算化学软件 NWChem 讲习班通知

(第二轮)

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。

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，当前最新版本为 6.1.1。

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。

- 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。

- 培训日期：

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

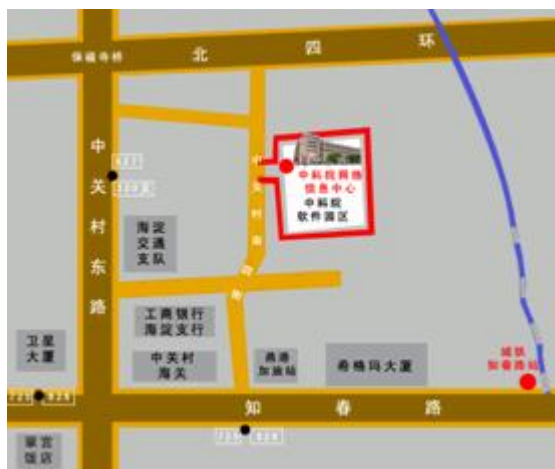
教育科研：¥800 元/人

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（截止日期：**10 月 12 日**）：

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，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）。

培训时凭汇款单领取发票（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

- 培训日程安排（详见课程安排，如有变更，请以实际培训为准）：

- 注册时间： 2012 年 10 月 17 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
- 培训时间： 上午：9：00~12：00， 下午：13：30~17：00
- 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；已电汇培训的学员请出示电汇凭证（告知电汇单编号或者提供电汇单原件/照片/扫描件等）。

拟定培训内容：

- ◇ 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、知春里东站

地铁站点：知春路站

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

- 住宿推荐

宾馆名称	联系电话	地址	备注
物料宾馆	010-82649482	中关村南三街 8 号（中国科学院物理所院内）	需提前预订； 步行时间：15 分钟之内。
天创宾馆	010-51192000	中关村南一条甲 1 号	需提前预订；

			步行时间：10 分钟之内。
康拓宾馆	010-68378288 010-62634975	中关村南一条甲 4 号	需提前预订； 步行时间：10 分钟之内
中国科学院空间会议 中心	010-62582916	中关村南二条甲 1 号	需提前预订； 步行时间：8 分钟之内
青年公寓 2 号楼地下 招待所	010-82680799	中关村东路 80 号（中国科学 院研究生院青年公寓）	需提前预订； 步行时间：8 分钟之内

*以实际报价为准

● 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！