

NWChem

Općenito

NWChem pruža računalno-kemijske alate koji se mogu skalirati i do tisuće procesorskih jezgri te je s toga prikladan za korištenje na naprednim računalnim resursima.

Posjeduje mogućnost rada s biomolekulama, nanostrukturama i čvrstim stanjem, s osnovnim i pobuđenim stanjima, može predviđati svojstva i relativističke efekte te drugo.

Verzija NWChem-a dostupna na računalnom klasteru Isabella kompajlirana je Intelovim C/C++ i Fortran kompajlerima te koristi Open MPI knjižnice.

Moduli

Moduli koji dopremaju NWChem u vašu okolinu definirani su u tablici niže:

Verzija	Modul
7.0.2	nwchem/7.0.2

Primjer korištenja - paralelno izvođenje

Ulazne tj. *input* podatke za primjer niže možete preuzeti u obliku [.nw datoteke](#).

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N nwchem
#$ -cwd
#$ -pe *mpi 20
#$ -l memory=2

export OMP_NUM_THREADS=1
module load nwchem/7.0.2

mpirun -np ${NSLOTS} nwchem Input_c240_pbe0.nw
```

Vrijeme za izvođenje ovog posla u paralelnoj okolini navedenoj u zaglavlju skripte iznosi oko 1 h i 50 minuta.