

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 张宝花 博士

(中科院软件所)

报告题目:

**GridMol——基于网格的高性能  
计算化学应用平台**

邀请人: 卢本卓 研究员

报告时间: 2016 年 11 月 11 日 (周五)

上午 10:00-11:00

报告地点: 数学院南楼七层

702 教室

## 摘要:

如何利用云计算资源有效整合各种高性能计算化学软件，实现计算文件输入或建模，计算任务提交执行、作业监控管理及计算结果输出分析的一站式服务体系，日渐成为计算化学应用研究的热点问题。GridMol 依托于中国科学院超级计算环境的软硬件设施，集标准输入、高性能计算、计算结果可视化及智能分析为一体。它是主要面向理论化学计算和药物分子设计的高度集成的平台，为广大科研人员提供便捷、高效的计算化学服务。在本次报告中，将从软件技术框架、部署架构及功能算法等方面对 GridMol 平台进行介绍。

# 欢迎大家参加！