

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 何连花

(中国科学院计算机网络信息中心)

报告题目:

基于国家高性能计算环境的应用服务社区及 **DFT** 时间预测算法原型系统

邀请人: 戴小英 研究员

报告时间: 2021 年 9 月 10 日 (周五)

上午 11:00-12:00

报告地点: 数学院南楼

802 教室

Abstract:

高性能计算机体系结构日趋复杂，为生物医药、量子化学、材料科学等领域用户使用高性能计算带来更多的挑战。为了更好地服务于生物医药、量子化学等领域的终端用户，我们开发了基于国家高性能计算环境的应用服务社区，提供的服务涵盖新药研发、个性化医疗、生物信息和计算化学等。应用服务社区 (<http://biomed.cngrid.org/>)是集计算与数据库于一体的高性能计算平台，用户只需要拥有一个浏览器，就可以通过此平台进行计算。该平台后端直接与国家高性能计算环境相连，支持单软件计算与 workflow 计算，实现了作业在线提交和监控、结果分析、数据提取与数据管理。我们设计并实现了基于深度学习的神经网络模型和统计模型并行的混合推荐模型，为用户智能推荐应用软件及专业文献；同时我们提出了一种密度泛函计算时间预测算法，能够根据用户提供的泛函基组合以及分子结构信息，给出可靠的机时预测结果。

欢迎大家参加！