

计算化学网格计算培训

什么是网格计算？

- 网格
 - 使用 IT 资源像使用水电一样简单
 - 把地理上广泛分布的资源虚拟为超级计算机
- 特征
 - 资源共享
 - 虚拟化
 - 动态，异构
- SCE Portal
 - 无处不在的作业管理

SCE Portal

- 用户登录

Scientific Computing Grid Login

【登录 Login】

用户名

密码

记住我的登录

登录

[忘记您的密码了吗?](#)

SCE Portal

• 应用概述

用户管理 计算

首页 历史作业

欢迎访问ScGrid

计算化学



计算化学是应用计算机研究化学反应和物质变化的科学。以计算机为技术手段，建立化学化工信息资源化和智能化处理的理论和方法，认识物质、改造物质、创造新物质和认识反应、控制反应过程和创造新反应、新过程是计算机化学研究的主体。

Gaussian VASP
more>>

工程力学



工程力学是研究有关物质宏观运动规律及其应用的科学。工程给力学提出问题，力学的研究成果改进工程设计思想。从工程上的应用来说，工程力学包括：质点及刚体力学，固体力学，流体力学，流变学，土力学，岩体力学等。

Fluent
more>>

计算金融



计算金融利用现代计算机技术有效解决金融领域金融产品定价、风险管理、投资管理、金融产品设计和金融计量等实际问题，为投资者提供科学准确的决策参考。

DHM
more>>

生物信息



生物信息学是建立在分子生物学的基础上的，主要研究序列比对、蛋白质结构比对和预测、基因识别、分子进化和比较基因组学、列重叠群(Contigs)装配、遗传密码的起源，以及基于结构的药物设计。

more>>

SCE Portal

- gaussian 作业

Gaussian03

Gaussian03作业提交

作业基本信息

作业名称: *

作业参数

标准输出:

标准错误:

工作目录:

运行时间: 天* 时*

作业资源

CPU个数:

上传文件

.com或者.gjf文件: *

上传

更多输入文件

提交

作业可用资源列表

请选择合适的资源

选择	节点名称	队列名称	最长运行时间	全部作业	挂起作业	运行作业
<input checked="" type="radio"/>	deepcomp7000	scgrid	720	0	0	0
<input type="radio"/>	deepcomp7000	x64_blades	360	3974	2848	1062

SCE Portal

- 实验和练习
- URL:
 - <http://159.226.49.52:8080/gridsphere>
- 用户
 - 用户名 : user11[00-05]
 - 密码 : chem09[00-05]
- 反馈 :
 - caorq@sccas.cn