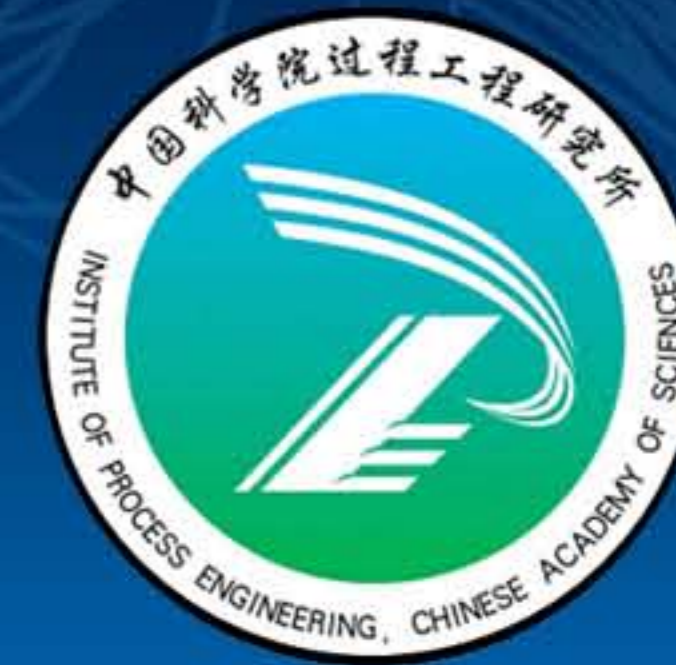




多相复杂系统国家重点实验室

STATE KEY LABORATORY OF MULTIPHASE COMPLEX SYSTEMS



高性能计算与化学信息学课题组

Group of High Performance Computing and Chemoinformatics

本课题组多年来一直致力于将先进的信息技术与化学化工领域的知识相结合，研究工作逐步深入和系统化，形成了两大研究方向：其一是高性能计算，力图采用先进的软硬件技术，解决多相复杂系统模拟和计算中的相关问题，主要合作伙伴是我所李静海院士领导的课题组；另一个研究方向是Web化学化工资源的挖掘，力图解决Web化学化工信息的大规模获取、管理和高效利用。

本课题组人员精干，工作严谨、求实，气氛活跃。所培养的学生在交叉领域的相关学科得到扎实的训练，课题组产出的工作成果可靠。

The research in our group is focused on developing methods and computer based tools by combining advanced informatics and hardware with domain knowledge of chemistry and chemical engineering. Our efforts in the past decade have been directed to two areas, one is high performance computing in discrete simulation that is closely linked with Prof. Jinghai Li's group, and another is Web chemical resources discovery that aims at domain focused resource discovery method and developing search engines covering both Chemistry Surface Web and Deep Web.

主要研究领域 (Research)

- ◆ 离散模拟的数据前处理与可视化 (Data pre-processing and visualization in discrete simulation);
- ◆ 分布式高性能计算 (Distributed HPC);
- ◆ 大规模粒子并行模拟的通信模式与负载均衡 (Communication model and load balance in paralleled large scale particle simulation);
- ◆ 高性能计算集群系统支撑软件 (HPC System Software);
- ◆ 基于GPU的分子动力学模拟 (GPU based molecular dynamics simulation);
- ◆ 化学专业搜索引擎 (Chemistry search engine);
- ◆ 化学深层网的统一检索、数据提取与集成 (Chemistry Deep Web search, data extraction and integration);
- ◆ 大规模化学结构、子结构检索 (Large scale chemical structure and substructure searching).

课题组成员 (People)

- ◆ 郭力, 研究员, 课题组长 (Prof. Li Guo)
- ◆ 李晓霞, 研究员 (Prof. Xiaoxia Li)
- ◆ 聂峰光, 副研究员 (Assoc. Prof. Fengguang Nie)
- ◆ 袁小龙, 助理研究员 (Assist. Prof. Xiaolong Yuan)
- ◆ 夏诏杰, 博士, 助理研究员 (Assist. Prof. Zhaojie Xia)
- ◆ 陶晓芳, 实习研究员 (Xiaofang Tao)
- ◆ 唐武成, 秘书 (Admin. Secretary Wucheng Tang)



毕业的硕士生、博士生 (Students Graduated)

- ◆ 颗粒模拟并行计算: 王小伟、易峰、秦东明、江鹰、何牧君、严历、郭卫卫
- ◆ 化学深层网数据提取: 储春梅、卓流艺、刘增才、李海波、井银铃
- ◆ 化学搜索引擎: 陈越、王志刚、梁春燕、夏诏杰、苏亮、祝宇、霍东云
- ◆ ChIN资源导航系统自动生成工具: 黄苏华、刘宗红、王华彦、王启斌、李新宇
- ◆ Web信息自动获取与检索工具: 王新宇、陈峰、王磊、叶晓兵、任群立、刘春元、刘超、贾红阳、吴忠俊

主要成果 (Outcomes)

- ◆ 发表论文请见课题组网页;
- ◆ 独享自主知识产权的可用工具、平台、解决方案
 - 国家科学数字图书馆化学学科信息门户 - ChIN (在线运行、公开访问 <http://chin.csdli.ac.cn/>)
 - 化学深层网统一检索引擎 - ChemDB Portal (在线运行、公开访问 <http://www.chemdb-portal.cn/>)
 - 大规模化学结构检索、子结构检索解决方案 (参见ChemDB Portal的结构检索功能, 请在线测试其功能)
- ◆ 设计、创建和维护的专业网站平台 (为合作者提供)
 - 亚洲化学会FACS官方网站 (在线运行、公开访问 <http://www.facs-as.org/>)
 - 中国循环经济技术集成与标准服务平台 - 3RT China (在线运行、公开访问 <http://www.3rtchina.com/>)
 - 多尺度模拟 - MultiScale IPE (在线运行、公开访问 <http://www.multiscalesci.org/>)
- ◆ 获奖
 - 2007年北京市科学技术奖三等奖 ("Internet化学资源导航系统ChIN") ChIN简介展板-2008、ChIN简介-2007
 - 1997年中国科学院科技进步一等奖 ("科学数据库及其信息系统")
 - 1994年中国科学院科技进步二等奖 ("CCT科技排版系统")
 - 1992年获中国科学院科技进步三等奖 ("基于知识的有机物性数据系统(KB-OPDS)")
- ◆ 计算机软件著作权登记 (更多正在登记中)
 - Internet化学主题搜索引擎软件V1.0 (ChemEngine), 2009SRBJ0253
 - Internet化学主题网络爬虫软件V1.0 (ChemCrawler), 2009SRBJ0263
 - 隐含语义检索系统1.0 (IPELSIS), 2009SRBJ0270
- ◆ 美国专利
 - Zhangyuan Yang, Li Guo, Yanhua Wang, Coding method for binary digits coding and its circuit for digits transmission, US7,463,682, 2008

更多详情请访问 [课题组网站](http://chemport.ipe.ac.cn/IPE-ChINGroup/index.html) (Please visit our group Web site for more details)

<http://chemport.ipe.ac.cn/IPE-ChINGroup/index.html>

联系人: 郭力

E-mail: lguo@home.ipe.ac.cn