

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人： 林德焯 副研究员

(北京应用物理与计算数学研究所 中物院高性能数值模拟软件中心)

报告题目：

金属体系原子间作用势构建方法及应用

邀请人： 刘歆 副研究员

报告时间： 2019 年 2 月 18 日 (周一)

下午 16:30-17:30

报告地点： 科技综合楼三层

311 报告厅

摘要:

分子动力学模拟是研究材料微观动力学行为的重要手段，而原子间作用势的好坏直接决定分子动力学模拟的置信度。随着计算机硬件和软件水平的不断提升，利用高精度第一性原理计算获得的海量数据来构建作用势成为了可能。虽然该方案可系统提升作用势的可移植性，但同时也给势参数的优化带来了挑战。本报告首先简要介绍了金属体系主要采用的作用势模型及其适用范围。随后，围绕实际应用阐述势参数优化中关注的数值优化问题，并尝试给出一套系统的优化方案。最后，介绍机器学习方法在作用势构建中的一些初步应用。

欢迎大家参加！