

大连化物所因公出访事后公示表

出访人团组成员基本信息:		
姓名	部门	职务
韩克利	1101 组	研究员
实际执行情况:		
2015 年 1 月 25 日-26 日 大连-厦门-台北		
2015 年 1 月 27 日-29 日 参加第六届海峡两岸理论与计算化学会议		
2015 年 1 月 30 日 台北-杭州-大连		
经费开支情况:		
往返国际机票: 5200 元;		
住宿费: 3000 新台币		
注册费: 4800 新台币		
出访总结:		
<p>“第六届海峡两岸理论与计算化学会议”(CTCC-6)于 2015 年 1 月 26 日至 30 日在中国台湾中正大学举行。该会议始于 2006 年 5 月,由中国厦门大学化学系张乾二院士和台湾中央研究院原子与分子科学研究所林圣贤院士联合发起的,会议主旨是为了促进海峡两岸理论与计算化学的研究,并增加彼此之间的合作与了解。在福建武夷山举办了第一届会议,此后,陆续在 2008、2009、2011、及 2012 年分别举办了第二届(台湾台北),第三届(四川成都)、第四届(台湾金门)及第五届(陕西西安)会议。此次大会是该系列会议的第六届,由台湾中正大学主办。台方还邀请了祖国大陆其它科研机构 and 大学的有关学者与会。此次会议将为该领域的科研人员提供交流机会,加强相互了解,有利于提高海峡两岸的同行在计算化学领域的研究水准。</p> <p>我所韩克利研究员此次应邀参会,并做题为“State-to-state Reactive Scattering Dynamics Implemented on Graphics Processing Unit”(基于 GPU 方法研究态-态反应散射动力学的研究)的邀请报告。韩克利研究员向与会者介绍了,其研究小组发展了研究原子-双原子态态反应散射过程的含时波包程序的</p>		

高效的 GPU 版本。分别编写了反应物 Jacobi 坐标和产物 Jacobi 坐标传播这两种方法的程序。通过对矩阵数组的组织 and 乘积的操作，实现了在 GPU 上并行计算。由于在 CPU 上准备初始波包后，整个传播过程都在 GPU 上进行，引入一个新的分裂算符处理哈密顿量的转动部分，显著的减少了节点和节点间通信。使用该程序得到了 H + H₂ 的微分散射截面和 O(3P, 1D) + H₂ 反应 J = 0 时产物态分辨反应几率。相对于 CPU 串行来说，单个 GPU 并行、两个 GPU 并行和包含新分裂算符的两个 GPU 并行计算的加速比分别是 22.11、38.80 和 44.80。

此次会议，不但扩大了我们的研究小组在国际上的影响，而且还有利于加强我所与国际同行在计算化学领域国际前沿课题的合作。