

## 大连化物所因公出访事后公示表

<b>出访人团组成员基本信息:</b>		
<b>姓名</b>	<b>部门</b>	<b>职务</b>
张东辉	1102	研究员
<b>实际执行情况:</b>		
2014年12月13日大连到香港 2014年12月13-16日参加会议 2014年12月17-18日访问香港大学化学系 2014年12月19-20日参加会议 2014年12月21日启程回大连		
<b>经费开支情况:</b>		
境外差旅费: 18194.7元		
<b>出访总结:</b>		
<p>本人于2014年12月13日至16日应邀请前往香港参加“2014年度计算科学与工程国际研讨会”并做了题“Differential Cross Sections for Polyatomic Reactions”的邀请报告。该会是计算科学和工程领域最重要国际学术会议之一。与会期间，与到会的同行们就可能的合作研究进行了讨论。</p> <p>本人于2014年12月17-18日，访问了香港大学化学系。访问中，在该系做了题为“Theoretical Studies of Polyatomic Reactions”的学术报告。随后，于19-20日在香港大学参加了“理论与计算化学研究进展的研讨会”，并做了题为“Polyatomic Reaction Rate Constants via Ring Polymer Molecular Dynamics”的邀请报告。与会期间就研究课题及计算环境存在的问题与参会的专家们进行了交流和讨论。</p>		

## 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: 2014 年 12 月 14 日 大连-香港 2014 年 12 月 15 日-2014 年 12 月 16 日参加 2014 年度计算科学与工程国际研讨会。 2014 年 12 月 16 日 香港-大连		
经费开支情况: 往返香港机票: 4674 元; 住宿费: 2160 港币 注册费: 无		
出访总结: <p>“2014 年度计算科学与工程国际研讨会”(International Workshop on Computational Science and Engineering IWCSE 2014)于 2014 年 12 月 13 日至 16 日在中国香港浸会大学和香港城市大学举行。该会是计算科学和工程领域最重要国际学术会议之一,会议包括了计算科学和工程领域的许多热点议题,如:凝聚相物理及材料科学的计算,复杂生物体系的分子模拟学等。</p> <p>我所韩克利研究员此次应邀参会,并做题为“Reactant Coordinate Based State-to-State Reactive Scattering Dynamics Implemented on GPUs”(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,我们研究小组发展了原子-双原子态态反应散射过程的含时波包程序的高效的 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</p>		

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 + H<sub>2</sub> 的微分散射截面和 O(3P, 1D) + H<sub>2</sub> 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。

## 大连化物所因公出访事后公示表

<b>出访人团组成员基本信息:</b>		
<b>姓名</b>	<b>部门</b>	<b>职务</b>
李国辉	1106	研究员
<b>实际执行情况:</b>		
2014年12月12日 大连启程到上海再到香港		
2014年12月12-16日 参加会议		
2014年12月16日 启程回大连		
<b>经费开支情况:</b>		
境外差旅费: 9681.55元		
<b>出访总结:</b>		
<p>本人于2014年12月12日至16日前往香港参加“2014年度计算科学与工程国际研讨会”该会是计算科学和工程领域最重要国际学术会议之一，会议包括了计算科学和工程领域的许多热点议题，如：凝聚相物理及材料科学的计算，复杂生物体系的分子模拟学等。</p> <p>本人长期从事理论计算模拟研究，在生物大分子模拟上取得了系列成果。本人在此次会议上应邀做学术报告“GBEMP模型在生物分子体系的应用”，介绍了我所多尺度计算模拟研究领域的进展和学术成果，深入了解各国同行在多尺度计算模拟研究领域的最新进展和发展趋势，并对开展合作研究的可能性进行了探讨，对研究组课题的进一步开展提供了重要的帮助。本次出访内容与我所的科研领域密切相关，有利于提高我所的国际知名度，对促进我所的国际合作也具有重要意义。</p>		

## 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
庄巍	1107 组	研究员
实际执行情况： 2014 年 12 月 19 日 启程至香港 2014 年 12 月 20 日 参加会议 2014 年 12 月 21 日 香港返程		
经费开支情况：往返机票及开支共 10000 元。		
出访总结： 本人于 2014 年 12 月 19-21 日参加香港大学举办的理论计算化学发展研讨会，并做题为“Modeling the Collective water dynamics and the related vibrational spectroscopy in the ionic solutions”的报告。离子水合现象如何影响溶液中的微观动力学性质，长久以来吸引了广泛的研究兴趣。在研究者采用的诸多实验手段中，低频振动光谱，诸如光学科尔效应光谱，介电弛豫光谱及二维红外光谱等光谱实验方法起着至关重要作用。对于离子水溶液而言，特征弛豫时间较长、与体系内部整体运动相关的微观动力学行为通常反映在其光谱信号的吉赫兹-太赫兹频段，通过分析低频振动光谱，能够获得这些动力学行为的重要信息，包括转动扩散、分子间振动，离子对转动，受限转动及平动等。然而，由于低频动力学光谱线形较宽，使得对这些光谱现象背后的分		

子机制进行解读存在困难，因此，利用理论方法分析低频光谱信号中包含的动力学信息不可或缺，是本研究组目前的主要研究方向之一。本次理论化学研讨会汇集了国内外相关领域的数位专家，本人与参会专家进行了细致深入的讨论和交流，并对开展合作研究的可能性进行了探讨，对研究组课题的进一步开展提供了重要的帮助。

## 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
邓伟侨	1109 组	研究员
实际执行情况： 2014 年 12 月 13 日 大连启程到深圳再到香港 2014 年 12 月 14-15 日 参加会议 2014 年 12 月 15 日 启程回大连		
经费开支情况：往返机票及境外开支共 5919.27 元。		
出访总结 <p>本人于 2014 年 12 月 13-15 日前往香港城市大学参加学术研讨会。本次学术研讨会主题为 “International workshop on computational science and engineering”，会议汇集了这一领域的顶尖理论和实验专家。本人长期从事理论计算模拟研究，在计算材料模拟与设计领域取得了系列成果。本人在此次会议上应邀做学术报告 “Multiscale Simulation Method Development and its Application for the Design of Novel Materials”，介绍了我所多尺度计算模拟研究领域的进展和学术成果，深入了解各国同行在多尺度计算模拟研究领域的最新进展和发展趋势，并对开展合作研究的可能性进行了探讨，对研究组课题的进一步开展提供了重要的帮助。本次出访内容与我所的科研领域密切相关，有利于提高我所的国际知名度，对促进我所的国际合作也具有重要意义。</p>		

