



2018lammps分子动力学案例分析 培训班

尊敬的_____先生/女士，您好！

2018lammps分子动力学案例分析培训班将于2018年01月在北京召开。

会议内容

各科研院所单位：

随着计算机技术的发展，分子模拟及其工程应用越来越受到人们的重视。分子模拟在现代科学技术研究开发中发挥着重要的作用，一方面，它能从本质上定量化探索机理和规律，另一方面，又能促进我们的研究开发工作向经济、高效和有预见性的方向发展。

近年来，分子动力学计算模拟，发展和普及得异常迅速，出现多款物美价廉，功能强大的计算模拟软件，如LAMMPS全称是“大规模原子分子并行模拟器”主要用于分子动力学相关的一些计算和模拟工作。LAMMPS可以支持包括气态，液态或者固态相形态下、各种系综下、百万级的原子分子体系，并提供支持多种势函数，且LAMMPS有良好的并行扩展性。应广大学员要求，并进一步促进您的科研工作进展，普及分子动力学计算软件LAMMPS使用，北京博宏科睿企业管理顾问有限公司特举办“LAMMPS分子动力学案例分析技术应用”培训班。

会议日程

【培训目标】本次培训将面向LAMMPS软件使用、本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”目的，采取深入浅出方法，先以简单的案例引入分子模拟的基本原理，随后重点讲解多种常用单元的功能和特性，以及实用技术和处理方法，紧密结合应用实例，针对工作中存在的疑难问题进行分析讲解和专题讨论，有效提升学员解决复杂问题的能力。

【培训对象】各省市、自治区从事材料科学、力学、生物与医学、化学与化工、机械与自动化、物理、能源与环境等相关的科研单位技术骨干、科研院所研究人员和大专院校相关专业教学人员及在校研究生、硕士、博士等相关人员，以及分子模拟计算的广大爱好者。

【时间地点】

2018年01月25日----01月28日 中国*北京

(时间安排：第一天报到、授课三天)

【培训方式】

(一)课程讲座

(二)3天上机操作(课堂提供电脑)

(三)理论研讨与案例讲解结合

(欢迎学员带着在工作中遇到的疑难问题与老师一起探讨)

【报名方式】

提前一周发**报到通知**(详细培训地点及乘车路线)名额有限，报名从速。

【课程主题】

- (1)、LAMMPS简介；
- (2)、LAMMPS编译、安装及运行；
- (3)、建模以及显示操作及高级应用；
- (4)、LAMMPS实例讲解 (1)；
- (5)、LAMMPS实例讲解 (2)；
- (6)、LAMMPS实例讲解 (3)；
- (7)、LAMMPS实例讲解 (4)；

时间安排	课程主题	课程内容
第一天上午 (9:00-12:00)	一、 LAMMPS简介	1. LAMMPS命令及文档 2. LAMMPS 基本框架 3. 相互作用和分子力场 4.data文件及in文件分析
	二、 LAMMPS编译、安装及运行	1. Windows下的安装及运行 2. Linux下的编译、安装及运行 3. Linux相关命令及工具
第一天下午 (13:30-17:00)	三、 建模以及显示操作及高级应用	1. 分子模拟建模 2. Moltemplate 建模 3. VMD菜单及操作&常用命令 4. 性质计算及数据分析
第二天上午 (9:00-12:00)	四、 LAMMPS实例讲解 (1)	案例1：全原子模型建模以及计算 案例2：粗粒化模型建模以及计算 案例3：水模型建模以及计算
第二天下午 (13:30-17:00)	五、 LAMMPS实例讲解 (2)	案例4：LAMMPS的GPU加速的计算 案例5：GPU应用范围以及加速实例
第三天上午 (9:00-12:00)	六、 LAMMPS实例讲解 (3)	案例6：热传导的计算 案例7：材料力学的模拟计算
第三天下午 (13:30-17:00)	七、 LAMMPS实例讲解 (4)	案例8：非平衡态的计算 案例9：平衡态热学性质计算

【主讲老师】

魏老师：副教授，博导。博士毕业于厦门大学物理系，之后在德国包豪斯大学做访问学者。2012-2014年在清华大学固体力学系从事博士后，科研工作当中一直采用分子动力学模拟进行研究，主要研究领域集中在物质、能量的耗散运输。至今发表包括Nature comm.,Nanoscale,PRE,Applied material&interface,Carbon在内SCI收录期刊40余篇，引用超过1000次。

会议门票

RMB:3600元/人（含报名费、授课费、教材资料费、场地费、午餐费等）食宿可统一安排，费用自理。

优惠政策：在校学生凭学生证参加，费用2800元/人

