

数学与系统科学研究院  
计算数学所定期学术报告

报告人: **Prof. Ben-zhuo Lu**

( *LSEC, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Academy of Mathematics and Systems Science Chinese, Academy of Sciences* )

报告题目:

问题在哪里? --- 谈谈分子及离子溶液的模拟

报告时间: **2012年10月11日(周四)**

**下午 16: 00~17: 00**

**(15: 30~16: 00 茶歇)**

报告地点: **科技综合楼三层 311**

**计算数学所报告厅**

## 摘要:

简单介绍分子模拟的现状，然后以分子及离子溶液的模拟为例，从实际问题出发，引出一系列由简单到复杂的模型和计算的问题。其中，模型有从平衡态到非平衡态的离子分布，从简单点电荷到有限体积的带电离子，从常系数到变系数的介电模型等。介绍与这些模型有关的一些计算问题，以及分子网格、可视化等，并提及我们在这些方面的一些工作。

**欢迎大家参加!**