

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:

生物分子模拟与计算

报告时间: 2015 年 4 月 23 日 (周四)

下午 16:00-17:00

报告地点: 数学院科技综合楼

三层 311 报告厅

摘要:

生命是一个多尺度多物理过程。分子模拟是在单分子的层面模拟研究生命的微观分子结构、活动及其功能的，并服务于制药、生物工程等行业。尽管当前计算能力已十分强大，但通常分子动力学模拟的尺度仍受到很大限制。连续模型是对离散系统模拟的一种粗粒化近似，可以提高模拟尺度。结合我们的工作，主要以离子通道模拟为例，介绍分子及离子溶液体系的连续模型方法及有关计算问题，如变系数问题、网格生成、界面问题、快速算法、可视化、云计算等，对相关数值算法、软件、以及物理等都提出了丰富的研究课题。

欢迎大家参加！