

# 第二届 GPUMD 开发者大会暨 AI 分子动力学前沿研讨会

(第一轮通知)

(6.12-6.15 吉林·长春)

开发拥有自主知识产权、基于人工智能技术的分子动力学方法及高性能软件与平台是人工智能赋能新材料研发、锻造新质生产力的关键需求。GPUMD (Graphics Processing Units Molecular Dynamics, <https://gpumd.cn>) 作为我国自主研发的 GPU 加速分子动力学软件, 在国家科技创新 2030 重大项目支持下取得突破性进展。2025 年 4 月发布的 4.0 版本更新了若干重要功能: 多个功能模块 (变盒子能量最小化、角度分布函数、角度依赖的径向分布函数、液体热力学积分、NEP 不确定度估计、通用的轨迹输出)、对深度势能 (Deep Potential)、通用型 EAM 势、复合型 ILP-SW 和 ILP-NEP 势等多种势函数的支持、推出包含 89 种元素的 NEP89 通用势函数库、以及对多种显卡的统一支持。经过一年的快速发展, 2026 年 3 月发布的 5.0 版本继续更新了若干重要功能: 完善了多个功能模块 (键取向序参数、弹性常数、声子色散、摩擦模拟、流体热导率计算)、增加了 ILP-Tersoff 势和 ADP 多体势、提出了包含库伦力的 qNEP 模型和一系列相关功能、提出了基于 NEP 的粗粒化模型 (NEP-CG) 以及全原子-粗粒化多尺度耦合模型 NEP-AACG、提升了各类势函数计算效率。为共同探讨 GPUMD 和以 NEP、NNAP 为代表的神经网络势函数开发及应用的最新成果, 更好地规划相关软件及技术的发展蓝图, 兹定于 2026 年 6 月 12 日-15 日在吉林省长春市举办**第二届 GPUMD 开发者大会暨人工智能分子动力学前沿研讨会** (<https://gpumd.svipmeeting.com>)。会议将围绕 GPU 加速算法优化、多尺度机器学习势函数构建、AI 驱动材料模拟等核心议题展开研讨, 并举办线下培训班。现诚邀国内外计算材料学、人工智能、软件开发等领域的专家学者拨冗参会, 交流思想, 分享经验, 共同推进 AI 分子动力学模拟与机器学习势函数的技术革新与应用实践。现将会议有关事宜通知如下:

## 一、 会议内容

本次会议以探讨 GPUMD 和以 NEP、NNAP 为代表的神经网络势函数开发及应用的最新研究成果为主题，以**特邀报告、专题报告、墙报展示和圆桌讨论**等形式进行分享与交流。为了帮助软件用户更好地使用 GPUMD 程序及相关分子动力学模拟技术，兹定于**6月15日，举办 GPUMD& (NEP、NNAP) 线下学习班**。

## 二、 会议组织

### 主办单位：

中国科学院宁波材料所前沿交叉科学研究中心

吉林大学

渤海大学

## 三、 会议日程

| 日期    | 时间 | 会议安排                                  | 地点              |
|-------|----|---------------------------------------|-----------------|
| 6月12日 | 全天 | 报到及注册                                 | 长春和润记忆酒店        |
| 6月13日 | 上午 | 开幕式<br>特邀报告                           | 长春和润记忆酒店<br>和润厅 |
|       | 下午 | 专题报告                                  |                 |
| 6月14日 | 上午 | 专题报告                                  | 长春和润记忆酒店<br>和润厅 |
|       | 下午 | 专题报告<br>圆桌讨论                          |                 |
| 6月15日 | 全天 | <b>GPUMD&amp; (NEP、<br/>NNAP) 培训班</b> | 长春和润记忆酒店<br>和润厅 |

注：会议具体报告日程表及学习班培训大纲见后续通知。

#### 四、会议墙报

为鼓励各位师生及科研人员参与本次会议，展示研究成果，促进学术交流，大会组委会开设墙报展示及评奖环节。

- (1) 展示时间：2026年6月13日-14日。
- (2) 评选时间：2026年6月14日中午。
- (3) 评选形式：由墙报作者进行现场讲解，墙报评选委员会现场进行评定。
- (4) 颁奖时间：2026年6月14日下午闭幕式上宣布获奖名单并颁奖。
- (5) 参与形式：竖版，宽90 cm × 高120 cm。要求在墙报最下方居中注明“**第二届 GPUMD 开发者大会暨 AI 分子动力学前沿研讨会**”字样，将墙报导出高像素（1200 dpi）的 PDF 格式文件发送给墙报负责人，会务组统一印制墙报。

#### 五、会议注册与缴费

本次会议推荐采用微信扫码方式缴费，请扫描下方二维码完成注册及缴费，原则上不接受现场注册及缴费。

|  |   |
|--|---|
| <br>(注册二维码) | <br>(缴费二维码) |
| <b>对公转账：</b><br>账户名称：长春市会小秘会展传媒服务有限公司  |   |

开户银行：上海浦东发展银行股份有限公司长春繁荣路支行  
账号：61040078801400000896

### 注册费标准：

|        | 优惠注册缴费<br>(2026年6月1日24点前) | 正常注册缴费<br>(2026年6月1日后) | 学习班培训费 |
|--------|---------------------------|------------------------|--------|
| 普通参会人员 | 2000元/人                   | 2200元/人                | 500元/人 |
| 学生参会人员 | 1000元/人                   | 1200元/人                | 500元/人 |

注：请在缴费备注栏清晰注明“**姓名+注册费**”，参加学习班人员，除缴纳相应注册费外，需额外支付500元/人培训费用，支持合并缴费，缴费备注栏注明“**姓名+注册费+培训费**”。

### 重要提醒：

1. 本次会议的注册费及学习班培训费开具电子发票。
2. 会议期间统一安排食宿，费用自理，无会议补贴。

## 六、 会议住宿

### 长春和润记忆酒店：

A区房间：双人间/大床房 450元/晚

B区房间：双人间/大床房 350元/晚

(以上房价含1-2份早餐，具体根据登记人)

地址：吉林省长春市南关区谊民路555号

酒店联系人：刘贺 17843040888

## 七、 会议交通

**会议报到地点：长春和润记忆酒店（长春市南关区谊民路555号）。**

可通过以下方式到达：

### **长春站（南出口）**

A 公共交通：步行至地铁 1 号线（约 5 分钟），市政府站下车，步行 1.6 公里约 25 分钟至酒店全程约 45 分钟。或市政府站下车转乘出租车或网约车即可抵达全程 35 分钟，地铁票价 3 元，网约车预计 7-10 元。

B 网约车直达：全程 13 公里，费用预计 25-35 元，约 25 分钟。

### **长春站（北出口）**

A 公共交通：步行至地铁 1 号线（约 5 分钟），市政府站下车，步行 1.6 公里约 25 分钟至酒店全程约 45 分钟。或市政府站下车转乘出租车/网约车即可抵达全程 35 分钟，地铁票价 3 元，网约车预计 7-10 元。

B 网约车直达：全程 16 公里，费用预计 28-40 元，约 30 分钟。

### **长春西站**

A 公共交通：步行至地铁 6 号线（约 4 分钟），抵达华庆路站，换乘地铁 1 号线市政府站下车，步行 1.6 公里约 25 分钟至酒店全程约 55 分钟。或市政站下车转乘出租车/网约车即可抵达全程 45 分钟，地铁票价 4 元，网约车预计 7-10 元。

B 网约车直达：全程 15 公里，费用预计 28-40 元，约 32 分钟。

### **长春龙嘉机场**

A 公共交通：步行至龙嘉机场巴士（约 5 分钟），卫星广场站下车转乘出租车或网约车即可抵达全程 1 小时 35 分钟，巴士票价 25 元，网约车预计 7-10 元。

B 网约车直达：全程 42.5 公里，费用预计 80-100 元，约 45 分钟。

## **八、 联系方式**

王建云（13463336655, [wangjianyun@jlu.edu.cn](mailto:wangjianyun@jlu.edu.cn)）

李冬冬（15981653528, [dongdongli@jlu.edu.cn](mailto:dongdongli@jlu.edu.cn)）

周宇航 (18626643885, [zyh@calypso.cn](mailto:zyh@calypso.cn))