

第二届 GPUMD 开发者大会暨 AI 分子动力学前沿研讨会

(第三轮通知)

(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: 增加了梯度法训练 NEP 的 GNEP 程序、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技术与工程研究所

吉林大学

渤海大学

承办单位：

吉林大学物理学院

大会报告人：（已确定报告人）

曹坤、陈基、陈默涵、陈卫、邓天琪、丁子峻、樊哲勇、高博、管鹏飞、李德楠、梁挺、刘建军、欧阳滔、邵学成、宋可可、王彦超、王彦周、谢禹、熊世云、徐贲、徐克、应鹏华、于宏宇、张林、张亚君、郑卓群、钟志诚、周柯、周文江、朱有亮、朱哲文

三、 会议日程

(1) 报告日程

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	长春和润记忆酒店

		特邀报告	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 和润厅
	下午	专题报告	
		圆桌讨论	
6月15日	全天	GPUMD&(NEP、 NNAP) 培训班	长春和润记忆酒店 和润厅

已确定报告人及报告题目	
曹 坤	基于消息传递神经网络的含磁自由度原子间势
陈 基	超越密度泛函理论的第一性原理计算
陈默涵	ABACUS 支撑机器学习势函数开发的方法与实践
陈 卫	面向高端装备的功能晶体设计与热管理
邓天琪	半导体材料中声子散射的分子动力学研究
丁子峻	共价有机框架材料界面热输运计算方法开发与应用
樊哲勇	分子动力学模拟软件 GPUMD 和神经演化势 NEP
高 博	机器学习方法驱动的金属晶界剪切响应动力学机制研究
管鹏飞	基于人工智能技术的高性能多尺度分子动力学模拟平台
李德楠	分子铁电 TMCM-CdCl ₃ 中巨压电效应的微观起源
梁 挺	Highly Efficient Machine Learning Potentials toward Thermal Transport and Beyond
刘建军	MatMind: 智能体矩阵的构建与材料闭环优化
欧阳滔	极低热导率材料的理论设计
邵学成	基于无轨道密度泛函理论的大尺度计算方法

宋可可	铁中氢鼓泡的原子模拟
王彦超	物质合成可能性预测方法与应用
王彦周	Atomistic understanding of hydrogen bubble-induced embrittlement in tungsten enabled by machine learning molecular dynamics
谢 禹	材料模拟软件 ARES 及其在固态电解质设计中的应用
熊世云	基于 nep 的机器学习势函数开发及微纳尺度声子输运调控
徐 贲	TBD
徐 克	NEP-Device: 器件热管理的原子级模拟
应鹏华	侧链动力学主导 MOF 的反常热学行为——从声子局域化到热膨胀反转
于宏宇	面向磁性与铁电体系的神经网络势函数
张 林	Ti 的机器学习势构建与 MLP-杂化 MD/DFTB 策略计算钛纳米团簇结构与电子态
张亚君	电磁功能材料多尺度模拟与多场耦合力学
郑卓群	典型二维材料的粗粒化机器学习势函数
钟志诚	人工智能驱动的新材料设计
周 柯	纳米限域水体系的机器学习势模拟
周文江	超离子材料中的能量规范和热输运
朱有亮	软物质介观尺度模拟方法、软件和应用
朱哲文	纳米液滴结晶动力学的分子模拟研究

(2) 培训课程安排

时间	会议安排	培训人
09:00-09:55	GPUMD 原理与功能简介	樊哲勇
10:00-10:55	NEP 和 qNEP 介绍与使用	唐本瑞

11:00-11:55	NNAP 介绍与使用	李庆安
14:00-14:55	GPUMD 功能模块使用	徐 克
15:00-15:55	GPUMDkit 介绍与使用	严子韩
16:00-16:55	答疑	所有人

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（周宇航：zyh@calypso.cn），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。

 <p>(注册二维码)</p>	 <p>(缴费二维码)</p>
<p>对公转账：</p> <p>账户名称：长春市会小秘会展传媒服务有限公司</p> <p>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</p> <p>账号：61040078801400000896</p>	

注册费标准：

	正常注册缴费 (2026年6月2日后)	学习班培训费
普通参会人员	2200 元/人	500 元/人
学生参会人员	1200 元/人	500 元/人

*所有注册均以缴费成功为准，6月1日前已注册未缴费的代表将按照6月2日后的注册费标准进行收费。

*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”。

*请注册完的老师添加 **aqi407926** 后进微信群，方便后续消息通知。

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、重要时间节点

1. 墙报截止时间：6月6日24点前。

七、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

八、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。

九、 联系方式

王建云（13463336655, wangjianyun@jlu.edu.cn）

李冬冬（15981653528, dongdongli@jlu.edu.cn）

周宇航（18626643885, zyh@calypso.cn）