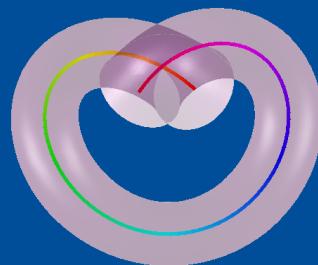


International Workshop on Biophysics and Soft Matter

26-28 May 2023

City University of Hong Kong



Program Booklet 会议手册

Introduction of this workshop

This workshop is organized and sponsored by the Department of Physics and Institute for Advanced Study (IAS) of City University of Hong Kong. In this workshop, we will bring together active researchers in various areas of biophysics and soft matter, including but not limited to the structures and interactions of DNA, proteins, and other biomolecules, polymer physics, rheology, colloids, active matter, self-assembly/organization, Monte Carlo simulation, molecular dynamics simulation, and single-molecule experiments. Latest research findings and future research directions will be presented and discussed.

Organizer & Contact

Liang DAI, Assistant Professor, Department of Physics, City University of Hong Kong

Email: liangdai@cityu.edu.hk Tel: +852 3442 6025

<http://personal.cityu.edu.hk/liangdai/conference/>

Program

| Date | Time | Event | Location |
|-----------------|---------------|---|---|
| 26 May Friday | 14:00 – 18:00 | Registration | Lecture Theatre 17 |
| | 18:00 – 20:00 | Welcome Dinner | CityU Faculty Lounge 城大西餐厅 |
| 27 May Saturday | 09:30 – 12:30 | Invited Talks | Lecture Theatre 17 |
| | 12:30 – 14:30 | Lunch | CityU Lodge Bistro 城大宾馆餐厅 |
| | 14:30 – 17:30 | Invited Talks | Lecture Theatre 17 |
| | 17:30 – 19:00 | Take a bus to Hung Hom Ferry Pier (红磡码头) | Rental Bus 租用的双层巴士 |
| | 19:00 – 20:30 | Dinner | Oriental Pearl 东方之珠游船 包自助餐 |
| | 20:30 – 21:00 | Walk along “Avenue of Stars” 沿星光大道步行至尖沙咀 | Avenue of Stars 星光大道 |
| 28 May Sunday | 09:30 – 12:30 | Invited Talks | Lecture Theatre 17 |
| | 12:30 – 14:00 | Lunch | CityU Chinese Restaurant (8 th floor) 城大中餐厅 |
| | 14:00 – 14:40 | Take a bus to the Central (中环) | Rental bus 租用的双层巴士 |
| | 14:40 – 15:10 | Take a tram to the Peak | Tram 山顶缆车 |
| | 15:10 – 17:50 | Trail at Victoria peak | Victoria peak 太平山顶 |
| | 17:50 – 18:20 | Take a tram from the Peak | Tram 山顶缆车 |
| | 18:20 – 19:00 | Take a bus back to CityU | Rental bus 租用的双层巴士 |
| | 19:00 – 20:30 | Dinner | CityU Chinese Restaurant (8 th floor) 城大中餐厅 |

27 May 2023 Saturday Morning 09:30 - 12:17

Session Chairs: DAI Liang & HU Wenbing

| | Time | Presenter | Title |
|---|---------------|--|--|
| | 09:30 – 09:36 | WANG Xun-Li 王循理 (i) Former Head of Physics, City Univ. of Hong Kong (ii) Executive Director of the Hong Kong Institute for Advanced Study | Opening remarks |
| | 09:36 – 09:42 | REN Yang 任洋 Head of Physics, City Univ. of Hong Kong | |
| | 09:42 – 09:48 | DAI Liang 代亮 CityU, Hong Kong | Briefing introduction of this workshop |
| | 09:48 – 10:00 | | Take a group photo of all people |
| 1 | 10:00 – 10:13 | SHI An-Chang 史安昌 McMaster Univ, Canada | Theory of ordered phases self-assembled from soft matter |
| 2 | 10:13 – 10:26 | CHAI Yu 柴愚 CityU, Hong Kong | Self-assembly of nanoparticles at the liquid interface |
| 3 | 10:26 – 10:39 | MAN Xing-Kun 满兴坤 Beihang Univ. | Onsager variational theory of gel swelling |
| 4 | 10:39 – 10:52 | QIAN Hu-Jun 钱虎军 Jilin Univ. | Coarse-Graining in Binary Polymer Systems |

| | | | |
|--------------------|---------------|---|--|
| 5 | 10:52 – 11:05 | ZHANG Ce 张策 Northwest Univ. | Entropy-driven cellular response to mechanical cues |
| Tea Break (20 min) | | | |
| 6 | 11:25 – 11:38 | XU Ning 徐宁 Univ. of Sci. & Tech. of China | Instabilities of disordered solids under load |
| 7 | 11:38 – 11:51 | ZHANG Ge 张格 CityU, Hong Kong | Correlation between entropy and generalizability in neural networks |
| 8 | 11:51 – 12:04 | ZHANG Rui 张锐 HKUST, Hong Kong | Simulation insights into active matter interacting with complex environments |
| 9 | 12:04 – 12:17 | ZHUANG Bi-Lin 庄碧琳 NUS, Singapore | Self-assembly and phase transition in peptide solutions |

27 May 2023 Saturday Afternoon 14:30-17:28

Session Chairs: SHI An-Chang & CHAI Yu

| | Time | Presenter | Title |
|----|---------------|---------------------------------------|--|
| 10 | 14:30 – 14:43 | LI Bao-Hui 李宝会 Nankai Univ. | A Novel Mechanism of Co-Nonsolvency: A Simulation Study of Self-Assembly of Block Copolymers |
| 11 | 14:43 – 14:56 | XU Lei 徐磊 CUHK, Hong Kong | Revealing the three-component structure of water with PCA analysis of X-ray spectra |

| | | | |
|--------------------|---------------|--|--|
| 12 | 14:56 – 15:09 | LIU Hong 刘鸿 South China Normal Univ. | Catenation Reaction Model of DNA Rings Mediated by DNA Topoisomerase |
| 13 | 15:09 – 15:22 | HUANG Kai 黄恺 Shenzhen Bay Lab | Modeling of disordered biomacromolecules |
| 14 | 15:22 – 15:35 | TANG Ping 唐萍 Fudan Univ. | Molecular Simulations of Linear and Nonlinear Viscoelasticity of Covalent Adaptable Networks |
| 15 | 15:35 – 15:48 | LI Wei-Feng 李伟峰 Shandong Univ. | Physics-informed Deep Learning for Protein-Ligand Binding Prediction |
| Tea Break (22 min) | | | |
| 16 | 16:10 – 16:23 | LI Wei-Hua 李卫华 Fudan Univ. | Complicated Self-Assembly Behavior of Simple AB/AB Binary Blends |
| 17 | 16:23 – 16:36 | MENG Fan-Long 孟凡龙 Inst. of Theory Phys., CAS | Rheology of xLCEs |
| 18 | 16:36 – 16:49 | XU Yu-Ci 徐玉赐 Ningbo Univ. | Micellization of Block Copolymers in Polymeric Solvents |
| 19 | 16:49 – 17:02 | JIANG Kai 蒋凯 Xiangtan Univ. | Revealing quasiperiodic FCC grained boundaries |
| 20 | 17:02 – 17:15 | XU Hao-Ran 徐浩然 CUHK, Hong Kong | Autonomous waves and global motion modes in living active solids |
| 21 | 17:15 – 17:28 | HUANG Jin-qing 黄晋卿 HKUST, Hong Kong | Biomolecules studied by single molecule manipulation and Raman spectroscopy |

28 May 2023 Morning 09:30-12:28

Session Chairs: LI Baohui & XU Ning

| | Time | Presenter | Title |
|----|--------------------|---|--|
| 22 | 09:30 – 09:43 | TONG Peng-Er 童彭尔 HKUST, Hong Kong | Emergent mechanics of living cells |
| 23 | 09:43 – 09:56 | MU Yu-Guang 慕宇光 NTU, Singapore | Application of variational graph encoders as an effective generalist algorithm in computer-aided drug design |
| 24 | 09:56 – 10:09 | FAN Jun 范俊 CityU, Hong Kong | Molecular dynamics simulations of DNA and protein sequencing by two dimensional nanopore |
| 25 | 10:09 – 10:22 | XU Wen-Sheng 徐文生 CIAC, CAS | Entropy Theory of Polymer Glass Formation |
| 26 | 10:22 – 10:35 | ZHANG Peng-Fei 张朋飞 Donghua Univ. | Conformation Transition of a Homopolymer Chain in Binary Mixed Solvents |
| 27 | 10:35 – 10:48 | ZHU You-Liang 朱有亮 Jilin Univ. | A molecular dynamics interpreter for polymers |
| | Tea Break (22 min) | | |
| 28 | 11:10 – 11:23 | WANG Qiang 王强 Colorado State Univ., USA | Correlations in Hard- and Soft-Core Generic Polymer Models |
| 29 | 11:23 – 11:36 | WANG Pei-Yi 王培毅 Southern Univ. of Sci. & Tech | Cryo-EM and its Application for Soft Matter |

| | | | |
|----|---------------|--|---|
| 30 | 11:36 – 11:49 | HAN Yi-Long 韩一龙 HKUST, Hong Kong | Polymorphic crystal on a crystal's surface before reaching their crystal-crystal transition point |
| 31 | 11:49 – 12:02 | XU Ye 徐晔 Beihang Univ. | Dynamic behaviors of micro-/nano-particles under flow: packing, aligning, and collective motion |
| 32 | 12:02 – 12:15 | ZHANG Xing-Hua 张兴华 Wuhan Univ. | DNA methylation promotes homologous recombination |
| 33 | 12:15 – 12:28 | DAI Liang 代亮 CityU, Hong Kong | Universal deformation pathways in DNA and RNA structures |

List of participants

| | | | |
|-----------------------|--|----------------------|---|
| CAO Yi 曹毅 | Nanjing University 南京大学 | CHAI Yu 柴愚 | City University of Hong Kong 香港城市大学 |
| CHEN Kang 陈康 | Soochow University 苏州大学 | CHEN Wenduo 陈文多 | Sun Yat-Sen University 中山大学 |
| CHU Xiangqiang 储祥薈 | City University of Hong Kong 香港城市大学 | DING Hongming 丁泓铭 | Soochow University 苏州大学 |
| FAN Jun 范俊 | City University of Hong Kong 香港城市大学 | GUO Hongxia 郭洪霞 | Institute of Chemistry, CAS 中科院化学所 |
| HAN Yilong 韩一龙 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 | HU Wenbing 胡文兵 | Nanjing University 南京大学 |
| HUANG Kai 黄恺 | Shenzhen Bay Lab 深圳湾实验室 | JIANG, Kai 蒋凯 | Xiangtan University 湘潭大学 |
| LI Baohui 李宝会 | Nankai University 南开大学 | LI Jianfeng 李剑锋 | Fudan University 复旦大学 |
| LI Weifeng 李伟峰 | Shandong University 山东大学 | LI Weihua 李卫华 | Fudan University 复旦大学 |
| LIU Hong 刘鸿 | South China Normal University 华南师范大学 | Huang jinqing 黃晋卿 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 |
| MAN Xingkun 满兴坤 | Beihang University 北京航空航天大学 | MENG Fanlong 孟凡龙 | Institute of Theory Physics, CAS 中科院理论物理所 |
| MU Yuguang 慕宇光 | Nanyang Technological University 南洋理工大学 | NI Ran 倪然 | Nanyang Technological University 南洋理工大学 |
| QIAN Hujun 钱虎军 | Jilin University 吉林大学 | QU Yuanyuan 屈媛媛 | Shandong University 山东大学 |
| SHI Anchang 史安昌 | McMaster University 麦克马斯特大学 | SU Haibin 苏海斌 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 |
| SUN Zhaoyan 孙昭艳 | Changchun Institute of Applied Chemistry, CAS 中科院长春应用化学所 | TANG Leihan 汤雷翰 | Hong Kong Baptist University 香港浸会大学 |
| TANG Ping | Fudan University | TIAN Wende | Soochow University |

| | | | |
|-----------------------|---|------------------------|---|
| 唐萍 | 复旦大学 | 田文得 | 苏州大学 |
| TONG Penger 童彭尔 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 | WANG Peiyi 王培毅 | Southern University of Science and Technology 南方科技大学 |
| WANG Qiang 王强 | 科罗拉多州立大学 Colorado state university | WANG Rong 汪蓉 | Nanjing University 南京大学 |
| XU Haoran 徐浩然 | The Chinese University of Hong Kong 香港中文大学 | XU Lei 徐磊 | The Chinese University of Hong Kong 香港中文大学 |
| XU Ning 徐宁 | University of Science and Technology of China 中国科学技术大学 | XU Qin 许钦 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 |
| XU Wensheng 徐文生 | Changchun Institute of Applied Chemistry, CAS 中科院长春应用化学所 | XU Ye 徐晔 | Beihang University 北京航空航天大学 |
| XU Yuci 徐玉赐 | Ningbo University 宁波大学 | YANG Kai 杨恺 | Soochow University 苏州大学 |
| YUAN Bing 元冰 | Songshan Lake Materials Laboratory 松山湖材料实验室 | ZHANG Ce 张策 | Northwest University 西北大学 |
| ZHANG Ge 张格 | City University of Hong Kong 香港城市大学 | ZHANG Liangshun 张良顺 | East China University of Science and Technology 华东理工大学 |
| ZHANG Pengfei 张朋飞 | Donghua University 东华大学 | ZHANG Rui 张锐 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 |
| ZHANG Xinghua 张兴华 | Wuhan University 武汉大学 | ZHOU Jiajia 周嘉嘉 | South China University of Technology 华南理工大学 |
| ZHU Youliang 朱有亮 | Jilin University 吉林大学 | ZHUANG Bilin 庄碧琳 | National University of Singapore 新加坡国立大学 |
| ZHANG shengkai 张晟恺 | Institute of Advanced Science Facilities, Shenzhen 深圳综合粒子设施研究院 | LI Lei 李雷 | Institute of Advanced Science Facilities, Shenzhen 深圳综合粒子设施研究院 |
| XIE Mingyuan 谢明远 | Institute of Advanced Science Facilities, Shenzhen 深圳综合粒子设施研究院 | ZHANG Jinde 张锦德 | Institute of Advanced Science Facilities, Shenzhen 深圳综合粒子设施研究院 |
| HUANG Jinqing 黄晋卿 | Hong Kong University of Science and Technology 香港科技大学 | | |

Organizer and Helpers of the workshop

DAI Liang 代亮
liangdai@cityu.edu.hk
+852 34426025



HE Hao 何好



QIU Qiyuan 邱其缘



SUN Liang 孙良



TIAN Fujia 田馥嘉
+852 66342460



WANG Simin 王思敏



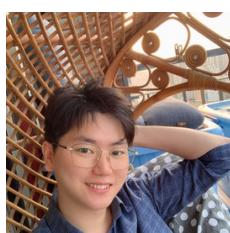
ZHANG Zhiyu 张智毓



ZUO Hongwei 左洪威
+852 54481455



ZHU Haoqi 朱浩琦



ZHU Yongjian 朱永健



Notes and Tips

1. **Route to the meeting room:** At the C exit of MRT, Festival Walk, go straight to the escalator at the entrance of Taste, go up two floors and turn right to the escalator on the left hand side, then go up the escalator at the school gate. After entering the school, go straight to the Yeung Kin Man Academic Building, go up the escalator in front of Run Run Shaw Library to the 4th floor, and walk straight to LT17 theater in the purple area.

前往会议室：地铁C又一城出口直行至Taste门口扶梯，上两层右转顺行至左手侧扶梯，上扶梯到校门通道；进入学校后直行进入杨建文学术楼，邵逸夫图书馆门前扶梯上一层至4楼，向右后侧走到紫区LT17教室。

2. **We provide a set of souvenirs to every invited speaker, including a jacket, a backpack, and a 3D print model.**



3. **Please bring your dining vouchers for lunch and dinner. The dining vouchers are distributed upon registration based on the requests of participants.**
4. **We rent a bus from CityU (conference venue) to Hung Hom Ferry Pier (红磡码头) on 6:00 pm, 27 May 2023. Please board the bus at CityU, Tat Chee Ave (达之路城大四不像外). If you miss the bus, please take the MTR train from Kowloon Tong (九龙塘站) to Hung Hom Ferry Pier (红磡站) or contact ZUO Hongwei (+852 54481455 or +86 18907986496)**



达之路城大校门四不像

5. We rent a bus from CityU (conference venue) to the Central (中环) on 2:20 pm, 28 May 2023. Please board the bus at CityU, Tat Chee Ave (达之路城大四不像外). If you miss the bus, please take the MTR train from Kowloon Tong (九龙塘站) to Central (中环) or contact ZUO Hongwei.

6. We rent a bus from the Central (中环) to CityU on 6:30 pm, 28 May 2023. Please board the bus at The Peak Tram (中环花园道缆车站). If you miss the bus, please take the MTR train from the central (中环站) to CityU or contact ZUO Hongwei.



中环花园道缆车站



Trail at Victoria Peak. Take a tram up. An easy trail. 维多利亚山顶观光行山，坐缆车(小轨道列车)上山。步行路段全平地，很轻松，可俯揽香港中心地段。

全国统一化运营平台

云端构筑极致算力体验



首次免费体验30天

10000 核·时 / 1000 卡·时

7*24小时高效服务响应



免费领取



平台
让专业的人做专业的事



用户
为用户创造更大的价值

专业

运营团队具备30年+从业经验，覆盖计算、应用、数据、调优、咨询等一站式服务；面向并行优化的存储和全新计算基础设施，让每一位用户用的省心、安心、舒心；

统一

全国统一运营、商业化运营，提供给用户更高质量的服务；

高效

100Gb/200Gb 超高速计算/存储网络，同时提供互联网专线、国际宽带、科技云等接入条件；提供面向高密度计算场景的并行云存储；

丰富

国产X86、AMD、Intel多类型资源，生态最佳；异构架构，技术多元融合，面向数值模拟+数据处理+智能分析多样化综合型应用；

安全

合作中心按照三级等保标准设计和建设，网络安全与数据安全全方位保障。

省时

直接运营海量计算资源、稳定、可持续扩展、算力，免去用户排队，加速创新；

省力

统一门户调度全国资源，全图形可视化操作，快速上传下载任务，带给用户极致算力体验；

省钱

全部采用物理机，性能无损耗；浸没液冷计算节点，解锁芯片频率，额外带来20-40%的应用性能提升；弹性按需，相比自建、运维运营计算环境总成本节约50%以上；

省心

专属微信群，7*24小时在线的基础服务；应用软件支持，作业问题分析的专业服务；大客户性能评估，代码优化的专属服务。全方位、及时响应用户需求；

创新

配有国产自主计算系统，实现了从芯片、整机到集群的系统和应用优化；联合申报国产化题材科研课题，加快创新；应用成果商业化、产品化最佳实践。



AC.sugon.com

登录网站了解更多信息



400-8100-466

用智能超算問景派科技

廣州景派科技有限公司
Guangzhou Ginpie Technology Co., Ltd.

景派科技是高性能計算解決方案提供商，長期服務于核能研究、氣候科學、高分辨率氣象學、海洋學、生物和醫學研究、材料科學、計算物理、航空航天等領域，竭誠為高性能計算客戶提供需求分析、計算系統集羣搭建與部署優化及後期運維的全方位精準服務。

結合各領域計算中常用的計算軟件特徵進行適配，編譯，安裝調試和優化，如 VASP、Geant4、amber、lammps、cp2k、Matlab、SAMTOOL、Mrbayes、LS-DYNA、CLUMMP、BEAST、GATK 等軟件。

合作院校遍布全國各地，如清華大學、武漢大學、中山大學、國防科技大學、華南理工大學、南方科技大學、香港中文大學（深圳）、澳門大學等全國知名學府。

2U24盤位存儲—R22FB

基于Intel® Xeon® 二代處理器的高密度存儲服務器
2U空間內集成384TB硬盤存儲容量

**RMB 59,900.00
(HKD 67,200.00)**



24X16TB企業級機械硬盤

支持各種安全RAID

8卡深度學習服務器—R24FG

單精度首選加速卡

**RMB 239,000.00
(HKD 267,000.00)**



地址：廣東省廣州市天河區黃埔大道中666號保利金融大都彙13層
官方網站：www.ginpie.com 方案諮詢：400-835-1355

CPU 雙路至強鉑金處理器 (單頻2.5GHz, 24核)
GPU 8xGeForce RTX 4090
內存 768GB 高性能計算
硬盤 2x960GB SSD 固態硬盤、RAID1 安全陣列

三大运营商+国产算力

新资源

天翼云
英伟达A100/A10/T4

广东联通
英伟达A100

福建移动
英伟达A100/V100

长沙超算
飞腾

郑州超算
海光7185+DCU

武汉超算
鲲鹏920+英伟达A100

并行科技四大产品



超算云

并行超算云是并行科技基于中国国家网格与云计算技术，结合自身在高性能计算领域多年研发经验推出的一站式超算服务平台。



智算云

面向高校、科研院所、企事业单位在人工智能和高性能计算等方向的GPU算力需求，提供专业的GPU算力云。



超算行业云

并行超算行业云面向行业客户，按照业务专属需求，提供云上+云下混合架构定制化超算云资源、软件和服务。



设计仿真云

Paratera CAX Cloud设计仿真云是面向CAD/CAE设计仿真领域的云平台，集成图形图像加速、资源共享、数据安全管控的软硬件一体化云平台解决方案。



并行科技官方联系方式 400-650-1286

北京市海淀区西北旺东路10号院（东区）21号楼三盛大厦三层 sales@paratera.com

并行科技

助力科技强国 让计算更简单

www.paratera.com

关于并行

北京并行科技股份有限公司（简称并行科技，股票代码：839493）成立于2007年，是国内领先的超算云服务和运营服务提供商。提供超算云、智算云、行业云、设计仿真云和计算资源建设及运营服务。

秉承“助力科技强国，让计算更简单”的企业使命，并行科技积极布局国家“算力网络”建设，整合国内大批优质算力资源，已接入超80,000台服务器，总计算力超1,000PFlops，存储资源超800PB，为超过20个应用行业用户提供“多、快、好、省”的超算云服务，推动算力资源从“可用”向“好用”发展。

并行科技服务规模



16年
超算服务经验



100亿
核算机时



20,000+
专属微信服务群



20+
应用行业



200款
应用软件SaaS化



1,000+
企业



10,000+
单位



超80,000台
服务器接入



总计算力超
1,000 PFlops



存储资源超
800 PB



并行科技官方联系方式 400-650-1286

北京市海淀区西北旺东路10号院（东区）21号楼三盛大厦三层 sales@paratera.com

City University of Hong Kong