

华东师范大学 73 周年校庆系列学术交流活动

上海应用与交叉数学研讨会日程

时间：2024 年 10 月 9 日周三 9:00-18:00

地点：华东师范大学数学楼 102 报告厅

主办单位：华东师范大学科技处 数学科学学院

8:50-9:00 致辞 主持:郑海标

9:00-10:00 郭玲 (上海师范大学) 主持:羊丹平
Uncertainty Quantification in Scientific Machine Learning

10:00-11:00 徐振礼 (上海交通大学) 主持:许鹏博
Random Batch Molecular Dynamics

11:00-12:00 周栋焯 (上海交通大学) 主持:张向韵
脑启发的人工神经网络模型与应用
午餐

14:00-15:00 殷俊锋 (同济大学) 主持:潘建瑜
Preconditioned GMRES methods for the least square problems

15:00-16:00 应文俊 (上海交通大学) 主持:朱升峰
非齐次方程无界区域界面问题的直角网格方法

16:00-17:00 杜洁 (华东师范大学) 主持:应文俊
High order bound preserving discontinuous Galerkin methods for compressible multi-species flow with chemical reactions

晚餐

华东师范大学 73 周年校庆系列学术交流活动

题 目：Uncertainty Quantification in Scientific Machine Learning

报告人：郭玲 教授

报告人简介：

郭玲，上海师范大学数学系教授，博士生导师，国家级人才计划入选者。主要研究领域为不确定性量化与深度学习。先后主持国家自然科学基金等多项课题，在 SIAM Review, SISC, JCP 等国际知名期刊发表论文多篇。

报告内容简介：

Neural networks (NNs) are currently changing the computational paradigm on how to combine data with mathematical laws in physics and engineering in a profound way, tackling challenging inverse and ill-posed problems not solvable with traditional methods. However, quantifying errors and uncertainties in NN-based inference is more complicated than in traditional methods. In this talk, we will present a comprehensive framework that includes uncertainty modeling, new and existing solution methods, as well as Information bottleneck based uncertainty quantification for neural function regression and neural operator learning.

题 目：Random Batch Molecular Dynamics

报告人：徐振礼 教授

报告人简介：

徐振礼，中国科学技术大学本硕博，曾任美国北卡罗莱纳大学夏洛特分校博士后、德国斯图加特大学洪堡学者。2010年任上海交通大学特别研究员，2016年晋升正教授，2019-2021年任数学学院副院长，2021年起任教务处副处长。2010年入选新世纪优秀人才计划，2012年中组部青年拔尖人才计划，2023年获国家自然科学基金杰出青年基金。担任AAMM、CMS和MCA等杂志编委。曾获上海市和国家级教学成果奖、上海交通大学十大科技进展、上海市自然科学奖等。研究方向为快速算法和高性能计算、分子动力学算法和偏微分方程的数值方法等，发表80多篇研究论文。

报告内容简介：

The development of efficient methods for long-range systems plays important role in all-atom simulations of biomolecules and materials science. This talk reviews recent progress of random batch molecular dynamics, including random-batch Ewald and random-batch sum-of-Gaussians (SOG) method, together with the package development. These algorithms take advantage of the random minibatch strategy for the force calculation between particles, leading to an order N algorithm. It is based on the Ewald or the SOG splitting of the Coulomb kernel and the random

importance sampling is employed for the Fourier part, thus avoiding the use of the FFT and greatly improving the scalability of the molecular simulations, achieving 1 order of magnitude faster than classical lattice-based methods. Numerical and application examples are presented to show the attractive performance of our methods.

题 目：脑启发的人工神经网络模型与应用

报告人：周栋焯 教授

报告人简介：

周栋焯，上海交通大学自然科学研究院/数学科学学院，特聘教授，获得国家自然科学基金委的优青、杰青，研究领域为计算与应用数学。他分别于2002年和2007年在北京大学数学科学学院获得学士和博士学位，他在计算神经科学研究方向产出了具有代表性的成果，相关成果发表在CPAM、PNAS、PRL等一流国际期刊上，主持基金委杰出青年科学基金、科技部重点研发课题、科技创新2030脑科学与类脑智能子课题等科研项目，担任CNS计算神经科学分会秘书长、CSIAM数学生命科学分会常务理事。代表工作被期刊选为亮点与封面文章。

报告内容简介：

类脑智能研究既是科学前沿，也是国家脑计划和人工智能发展规划的核心内容，而作为大脑信息处理的基本单元即单个神经元的动力学建模是实现脑计算的定量理解和发展脑启发的人工智能的第一步。然而，现有的点神经元模型在捕捉与神经信息处理至关重要的复杂树突效应方面存在不足，不能够反映真实神经元强大的树突计算能力。我们通过建立包含树突结构的电缆理论的渐近分析框架，将基于偏微分方程组的电缆神经元模型简化成基于常微分方程的点神经元模型，我们的生物物理模型引入了额外的突触整合电流，它源自于空间树突上的突触电流之间的非线性相互作用。此外，我们的模型有效刻画了具有复杂树突结构的神经元的胞体的电压响应，能够实现复杂的树突计

算功能。此外，我们通过渐近分析框架推导出一个双线性整合法则，并建立了一个真实神经元与人工神经元之间的简单而有效的映射关系，该映射在模拟真实神经元胞体动力学的准确性、训练复杂度、参数量以及动态时序数据处理等方面都明显优于现有的模型。我们的工作作为研究具有空间树突结构的神经元动力学与功能提供了一个系统的理论和计算框架，为设计脑启发的人工神经网络提供了新的思路。

题 目：Preconditioned GMRES methods for the least square problems

报告人：殷俊锋 教授

报告人简介：

殷俊锋，同济大学教授，创新创业学院副院长。主持和参与国家级和省部级以上科研项目 10 余项，发表论文 60 余篇，指导多项团队在各类创新大赛中获奖。学术兼职包括中国工业与应用数学学会副秘书长，中国创造学会副秘书长等。参与国家教学成果二等奖 1 项和上海市教学成果奖 2 项。

报告内容简介：

After reviewing the numerical solution of large sparse least square problems, we propose Kaczmarz-type preconditioned GMRES method, as well as sketching techniques. Theoretical analyses is given to guarantee the convergence and parameter tuning strategies are studied in details. Numerical experiments on least square problems further verify the efficiency of the preconditioners and show that the proposed method is superior to the existing preconditioned GMRES method.

题 目：非齐次方程无界区域界面问题的直角网格方法

报告人：应文俊 教授

报告人简介：

应文俊，2005 年在美国杜克大学数学系获博士学位，2011 年入选首批国家高层次青年人才计划，2023 年入选中央网信办优秀人才支持计划，现为上海交通大学自然科学研究院及数学科学学院教授，任第八届中国工业与应用数学学会副秘书长。主要研究面向工程应用的高效高精度偏微分方程数值解法，擅长科学计算软件开发。近期主要致力于面向自由边界问题、移动界面问题和多物理场耦合问题的直角网格方法，CAD、CAE 一体化工业软件与相关通过深度学习求解偏微分与积分方程的高精度快速高效算法。工作得到国家自然科学基金委，科技部，中国工程物理研究院，中国科学院，中国船舶集团等单位的支持。过去 5 年在 JCP、SISC、CMAME、JSC 和 CICP 等期刊上发表近 40 篇文章。现任期刊 Applied Numerical Mathematics 的编委。

报告内容简介：

对不规则无界区域上的非齐次偏微分方程应用边界积分方法进行求解，除了需要计算边界积分外，还需要计算体积分。用传统的方法计算边界与体积分会涉及到奇性和满矩阵的典型问题。文献中已经存在不少提高积分计算精度和加速矩阵向量相乘的技术，如奇性消去法和快速多极算法。在这个报告中我们将介绍一个精确且快速计算边界积分和体积分的新方法。这个方法把积分的计算转换成一个在矩形区域上定义的简单等价界面问题用直角网格及有限差分方法来完成，在计

算过程中不求格林函数，不涉及奇性问题。潜在的问题是等价界面问题在矩形区域上的边界条件需要通过计算对应的边界积分或体积分来完成。直接计算矩形边界所有离散网格点上积分的工作量比较大。我们通过引入一个过渡圆，利用圆周上的超收敛积分格式，先把不规则边界上的积分或区域内的积分压缩映射到过渡圆上，再在矩形区域的边界计算过渡圆上的积分。过渡圆周上只需要选少数几个点便可达到精确且快速的计算效果。

题目: High order bound preserving discontinuous Galerkin methods for compressible multi-species flow with chemical reactions

报告人: 杜洁 青年研究员

报告人简介:

杜洁, 华东师范大学青年研究员, 博士生导师。2015 年于中国科学技术大学获得理学博士学位。读博期间前往香港大学担任研究助理, 并作为联合培养博士研究生前往布朗大学学习。2015 年进入香港中文大学进行博士后的工作。2017 年就职于清华大学。2023 年就职于华东师范大学。主要从事偏微分方程高精度数值算法研究工作, 于数值计算及其应用方向的主流杂志上已发表 30 篇学术论文, 其中包括应用数学类以及工程类著名杂志 SIAM Journal on Scientific Computing、Journal of Computational Physics 和 Transportation Research Part B 等。

报告内容简介:

In this talk, we consider bound preserving problems for multispecies and multireaction chemical reactive flows. In this problem, the density and pressure are nonnegative, and the mass fraction should be between 0 and 1. The mass fraction does not satisfy a maximum principle and hence it is not easy to preserve the upper bound 1. Also, most of the bound-preserving techniques available are based on Euler forward time

integration. Therefore, for problems with stiff source, the time step will be significantly limited. Some previous ODE solvers for stiff problems cannot preserve the total mass and the positivity of the numerical approximations at the same time. In this work, we will construct third order conservative bound-preserving methods to overcome all these difficulties. Moreover, we will discuss how to control numerical oscillations.