

# Scientific Computing & Flow-based Generative Models

## 专题 0: AI with Applied Mathematics

### 主要内容

#### No One-Size-Fits-All Neurons: Task-based Neurons for Artificial Neural Networks

使用遗传算法或者张量分解来找多项式，找出最适合的阶数作为动力信息传到网络，保留激活函数，训练微调，可以并行加速，并且泛化友好。

#### MULTILINEAR OPERATOR NETWORKS

除去了非线性激活层，从而可以显式写出来拟合表达式，采用全秩 + 低秩信息混合：

$$Y = C[(AX) \cdot (BDX) + AX]$$

ImageNet C 测鲁棒性，发现低归纳偏置（处理比较通用，一般是 ViT，CNN 是高归纳偏置），小数据一般不佳，但是 monet 也效果好，说明捕捉发现规律的效率很快，捕食者模型 ODE 推的效果非常好。

消融实验：金字塔结构（有效果，节省计算），宽和深（深更好），空间位移错位交叉（不重要），低秩压缩（可以压得很大但不影响准确率）。

#### Hyper-Compression: Model Compression via Hyperfunction

用非有理缠绕让一条线遍历二维单位正方形，用 kd 树最近邻搜索来记录参数值，这样参数的浮点数就变成了整数，能减少存储比特。把参数按照  $K = 2$  分组，选定  $a$  使得尽量密铺，并且分成  $M$  组来缩放，可以并行加速。

#### An AI-Aided Algorithm for Multivariate Polynomial Reconstruction on Cartesian Grids and the PLG Finite Difference Method

三角格和主格之间用  $D$  阶置换群来通信，用部分置换的想法来把问题分解成为顺序操作，从而可以用回溯法来生成一个适定的三角格，以便于对边界进行多项式 Lagrange 插值，其中回溯的顺序用到了部分置换群。

发现最小二乘的条件数随膨胀先小后急剧升高。

#### Reconstructing Riemannian Metrics From Random Geometric Graphs

给出了  $n^{-\frac{1}{d+2}}$  的收敛阶，仅使用邻接矩阵信息  $AA^T$  (随机几何图二阶统计量/共同邻居)，也即保存  $N$  个样本点和  $k$  个稀疏邻居，即可重建流形信息，并且对缺失边具有鲁棒性。

不知是否可以用到 GNN 或 PDE 求解上，以兔子为例， $N \times 32 \times 3$  三维点云，用上述方法存则为  $N \times k \times \log_2 N$ ，但显然高维空间的低维流形可行，100 万个点，3 维流形，误差界 0.06，实用性有待探究。流形学习的意义在于黎曼度量优化（类似于自适

应), 符合语义距离, 以及给出合理的插值路径 (欧氏空间线性插值会出现鬼影, 不一定落在有意义的图像流形上), 一大类去噪模型本质就是学会将流形附近的点推回流形上。

---

## 参考文献

- [1] Feng-Lei Fan et al. *No One-Size-Fits-All Neurons: Task-based Neurons for Artificial Neural Networks*. 2024. <https://arxiv.org/abs/2405.02369>.
- [2] Yixin Cheng et al. “Multilinear Operator Networks”. In: *The Twelfth International Conference on Learning Representations*. 2024. <https://openreview.net/forum?id=bbCL5aRjUx>.
- [3] Fenglei Fan et al. *Hyper-Compression: Model Compression via Hyperfunction*. 2025. <https://arxiv.org/abs/2409.00592>.
- [4] Qinghai Zhang, Yuke Zhu, and Zhixuan Li. “An AI-aided algorithm for multivariate polynomial reconstruction on Cartesian grids and the PLG finite difference method”. In: *Journal of Scientific Computing* 101.3 (2024), p. 66.
- [5] Han Huang, Pakawut Jiradilok, and Elchanan Mossel. “Reconstructing Riemannian Metrics From Random Geometric Graphs”. In: *arXiv preprint arXiv:2511.05434* (2025).