



华南理工大学
South China University of Technology

科学计算及其相关应用研讨会

Workshop on Scientific Computing and Related Applications

2022 年 9 月 17-18 日

主办单位：华南理工大学数学学院



2022 年科学计算及其相关应用研讨会

华南理工大学数学学院

2022 年 9 月 17-18 日

本研讨会旨在聚焦计算科学及其相关领域的前沿科学问题，加强国内计算数学及其交叉学科同行专家之间的交流，助力华南理工大学数学学院学科建设和人才培养，并借此机会向华南理工大学组建 70 周年暨建校 105 年献礼。本次活动将采用线上腾讯会议的方式进行。

会议时间

2022 年 9 月 17-18 日

参会方式

腾讯会议号：555-758-6901

或点击链接直接加入会议：<https://meeting.tencent.com/p/5557586901>

组织委员会

主席：朱长江

委员（按姓氏排名）：何志坚，卢键方，姚文琦，朱远鹏

会议联系人

何志坚（邮箱：hezhijian@scut.edu.cn）

会议日程安排（腾讯会议：555-758-6901）

九月十七日（周六）	08:45-09:00	开幕式：朱长江院长致辞
	主持人：张 旭（四川大学）	
	09:00-09:40	许学军（同济大学、中科院数学与系统科学研究院） Eigensolvers with Domain Decomposition
	09:40-10:20	刘卫东（上海交通大学） 去中心化网络上的中位数快速算法
	10:20-10:30	休息
	主持人：岳荣先（上海师范大学）	
	10:30-11:10	李 若（北京大学） WENO 格式权重映射的保序性
	11:10-11:50	熊 涛（厦门大学） High order well-balanced asymptotic preserving finite difference WENO schemes for the shallow water equations in all Froude numbers
	11:50-14:30	午休
	主持人：卢键方（华南理工大学）	
	14:30-15:10	蔡振宁（新加坡国立大学） A conservative and entropic scheme for the Boltzmann equation
	15:10-15:50	王艳莉（北京计算科学中心） An asymptotic-preserving IMEX method for nonlinear radiative transfer equation
	15:50-16:00	休息
	主持人：何志坚（华南理工大学）	
	16:00-16:40	陆 帅（复旦大学） Increasing stability in the linearized inverse Schrodinger potential problems
	16:40-17:20	周 涛（中科院数学与系统科学研究院） Some numerical issues regarding deep neural network approximations for PDEs
九月十八日（周日）	主持人：姚文琦（华南理工大学）	
	09:00-09:40	邹青松（中山大学） Two novel deep neural networks methods for high dimensional PDEs
	09:40-10:20	毛志平（厦门大学） Solving high-speed flows using PINNs and DeepMMnets
	10:20-10:30	休息
	主持人：朱远鹏（华南理工大学）	
	10:30-11:10	朱春钢（大连理工大学） Toric 曲面的理论、算法与应用
	11:10-11:50	高文武（安徽大学） Hilbert 13th's problem and quasi-interpolation
	11:50-12:00	闭幕式：何志坚（华南理工大学）

报告详细信息

(按时间先后顺序)

周六 09:00-09:40

Eigensolvers with Domain Decomposition

许学军

同济大学、中科院数学与系统科学研究院

In this talk, we shall present a two-level block preconditioned Jacobi-Davidson (BPJD) method for solving discrete eigenvalue problems resulting from finite element approximations of 2mth ($m = 1, 2$) order elliptic eigenvalue problems. A new and efficient preconditioner is constructed by an overlapping domain decomposition (DD). This method may compute the first several eigenpairs, including simple, multiple and clustered cases. In each iteration, we only need to solve a couple of parallel subproblems and one small scale eigenvalue problem. This is a joint work with Qigang Liang and Wei Wang.

报告人简介：许学军教授，同济大学数学科学学院院长，中科院数学与系统科学研究院研究员，国家杰出青年基金获得者。现任上海市数学会副理事长，上海市工业与应用数学会副理事长，曾任中国计算数学学会常务理事、秘书长。曾获得过中科院优秀博士后称号和中国数学会的钟家庆数学奖，以及中科院数学与系统科学研究院十大重大科研进展奖（2007）和中科院数学与系统科学研究院突出科研成果奖（2008）。

周六 09:40-10:20

去中心化网络上的中位数快速算法

刘卫东

上海交通大学

最近几年，网络上的去中心化数据分析受到了前所未有的关注。在各个领域如无线传感网络数据分析、多智体协同决策、分布式计算等，去中心化数据分析已成为一个经常性的甚至是必须的任务。最近几年在数学优化、控制和并行计算等方向，有大量研究致力于最优化问题的去中心优化算法和理论。即便如此，对于数据分析的基本工具，如中位数的计算，在去中心化环境下的研究结果仍未达到最优。本文的目标是发展一种去中心化网络上的中位数计算方法。该方法具有快速的收敛速度，比如和均值的计算类似，网络通信次数仅是网络顶点数的近线性尺度。这一算法也不依赖于未知步长参数的选取，并适用于任意连通网络。

报告人简介：刘卫东，上海交通大学特聘教授，国家杰出青年科学基金获得者，中国工业与应用数学学会理事。主要研究方向为统计学和机器学习等，目前已在AOS、JASA、JRSSB、Biometrika、JMLR、ICML、IJCAI、IEEE TSP等专业顶尖期刊/会议上发表论文五十余篇。主持国家重点研发计划课题1项，国家杰出青年科学基金1项，国家优秀青年科学基金1项。

周六 10:30-11:10

WENO 格式权重映射的保序性

李若

北京大学

在 ENO 重构的基础上, WENO 重构根据光滑度指示子构造非线性的权重, 加权组合 ENO 重构的中间结果, 从而可以提升精度。基于 WENO 重构所得的求解双曲守恒律的 WENO 格式, 可以同时保持高精度和抑制数值振荡, 因而广受欢迎。然而, 在长时间问题的模拟中, 同时保持高精度和抑制数值振荡似乎是一个甚为不同的问题, 极具挑战。过去的上十年中此问题持续受到关注, 文献中至少又已发展出 M 族和 Z 族两大类方法, 但仍未有明确的线索为此问题的解决给出方向。我们发现, 在加映射 WENO 重构的权重构造中, 保持非线性权在映射前后的相对顺序, 是此问题解决的关键。以此保序性为原则, 无论是对现有的格式进行修正, 还是设计全新的格式, 数值结果的效率和精度均可以获得显著的改进。

报告人简介: 李若, 北京大学博雅特聘教授, 博士生导师, 数学科学学院副院长。主要研究方向偏微分方程数值解和计算流体力学, 发表科研论文 100 余篇, 解决了玻尔兹曼方程 Grad 矩方程组双曲性缺失问题。目前为中国数学会计算数学分会副理事长, 北京计算数学学会监事长, 《数值计算与计算机应用》副主编, AAMM、MCA 和《CSIAM 通讯》编委, 曾担任北京计算数学学会理事长, SISC 和 NMTMA 等期刊编委。曾获得或入选全国优秀博士论文奖(2003), 教育部高校科学技术一等奖(2007), 教育部新世纪人才计划(2009), 国家杰出青年基金(2013), 教育部长江特聘教授(2015), 科技部中青年科技创新领军人才(2015), 中组部万人计划(2016), 冯康科学计算奖(2017), 第九届国际工业与应用数学大会报告人(2019)等。

周六 11:10-11:50

**High order well-balanced asymptotic preserving finite difference
WENO schemes for the shallow water equations in all Froude
numbers**

熊涛
厦门大学

In this work, high order semi-implicit well-balanced and asymptotic preserving finite difference WENO schemes are proposed for the shallow water equations with a non-flat bottom topography. We consider the Froude number ranging from $O(1)$ to 0, which in the zero Froude limit becomes the “lake equations” for balanced flow without gravity waves. We apply a well-balanced finite difference WENO reconstruction, coupled with a stiffly accurate implicit-explicit (IMEX) Runge-Kutta time discretization. The resulting semi-implicit scheme can be shown to be well-balanced, asymptotic preserving (AP) and asymptotically accurate (AA) at the same time. Both one- and two-dimensional numerical results are provided to demonstrate the high order accuracy, AP property and good performance of the proposed methods in capturing small perturbations of steady state solutions. (This is a joint work with Guanlan Huang and Yulong Xing.)

报告人简介：熊涛，厦门大学数学科学学院教授，国家高层次青年人才。主要研究兴趣是计算流体力学和动理学方程的高精度数值方法。近年来发展了全马赫可压缩欧拉方程组的一致稳定渐近保持有限差分 WENO 方法，多尺度动理学方程的一致稳定渐近保持间断 Galerkin 有限元方法等，成果发表在 SIAM Journal on Scientific Computing 和 Journal of Computational Physics 等杂志上。

周六 14:30-15:10

A conservative and entropic scheme for the Boltzmann equation

蔡振宁

新加坡国立大学

H-theorem is one of the important properties of the Boltzmann equation, which states the non-decreasing property of the Gibbs entropy. Meanwhile, it conserves the mass, momentum and energy, which are also fundamental laws in classical mechanics. In this work, we are interested in finding a numerical scheme of the Boltzmann equation that preserves both the entropy dissipation and the conservation laws. To achieve this, we first study a general ODE system with Gibbs entropy, and develop a simple entropy fix for entropy-violating solutions by a convex combination of the current numerical solution and the equilibrium state. It is shown rigorously that the entropy fix does not affect the numerical order. This approach can be applied to the Boltzmann equation if the numerical solution is positive. To this aim, we develop a positive-conservative projection method based on the spectral method for the Boltzmann equation. By combining the projection and the entropy fix, we obtain a numerical scheme with all desired properties. Numerical tests show that the scheme has better accuracy when the solution is close to the equilibrium.

报告人简介：蔡振宁，新加坡国立大学助理教授。2008 年于北京大学获理学学士学位，2013 年于北京大学获计算数学方向博士学位。2014 年至 2015 年获德国洪堡基金会资助于亚琛工业大学做博士后研究，2016 年先后于美国马里兰大学和杜克大学担任访问助理教授。主要研究方向包括气体动理学的建模与计算、开放量子系统的模拟以及量子色动力学中复 Langevin 方法的理论研究，在国际学术期刊发表论文四十余篇。

周六 15:10-15:50

An asymptotic-preserving IMEX method for nonlinear radiative transfer equation

王艳莉

北京计算科学中心

We present an asymptotic preserving method for the radiative transfer equations in the framework of P_n method. An implicit and explicit method is proposed to solve the P_n system based on the order analysis of the expansion coefficients of the distribution function. The order of each expansion coefficient is derived by Chapman-Enskog method. The coefficients of high order are treated explicitly while those of low order are treated implicitly in each equation of P_n system. Energy inequality is proved for this numerical scheme. Several numerical examples validate the efficiency of the AP scheme in both optical thick and thin regions. (Joint work with Weiming Li, Peng Song, Jinxue Fu)

报告人简介：王艳莉，本科毕业于吉林大学，2014 年在北京大学数学科学学院获得理学博士学位。2014 年至 2017 年在北京应用物理与计算数学研究所担任助理研究员，2019 年 7 月至 2022 年 7 月在北京计算科学研究中心担任特聘副研究员，2022 年 8 月至今担任特聘研究员。主要从事偏微分方程数值解和稀薄气体动理学相关研究，研究课题有动理学方程的模型约简与高效数值方法，辐射输运方程的渐近保持方法等；主持了国家自然科学基金面上、青年项目，参与了国家自然科学基金重点项目；有数篇研究成果在 SIAM J. Sci. Comput., J. Fluid Mech. 等计算数学和流体力学等学术刊物上发表。

周六 16:00-16:40

Increasing stability in the linearized inverse Schrodinger potential problems

陆帅

复旦大学

Inverse Schrodinger potential problem concerns about the recovery of a potential function in the Schrodinger equation in a bounded domain through the DtN map. In this talk, we introduce the linearized DtN map, and prove a stability estimate with explicit dependence on wavenumbers. This is an increasing stability result, in the sense that the logarithmic stable term decays when wavenumber increases. The talk is based on joint works with Victor Isakov (Wichita), Mikko Salo (Jyvaskyla), Boxi Xu (SUFU) and Sen Zou (Fudan).

报告人简介：陆帅，复旦大学数学科学学院教授，主要从事数学物理反问题计算方法与数学理论的研究，特别是反问题正则化方法收敛性分析及偏微分方程反问题稳定性理论等。至今在 *Inverse Problems*、SIAM 系列、*Numer. Math.*、*Math. Comp.* 等权威期刊共发表学术论文五十余篇，合作出版英文学术专著一本。2019 年获得国家杰出青年科学基金资助，现任《*Inverse Problems*》的编委，曾获上海市自然科学奖一等奖（第二完成人）。

周六 16:40-17:20

**Some numerical issues regarding deep neural network
approximations for PDEs**

周涛

中国科学院数学与系统科学研究院

Deep neural networks have been widely used for solving PDEs in recently years. In this talk, we shall discuss some numerical issues for such approaches. In particular, we shall present some recent ideas for dealing with nonlocal operators and effective sampling strategies on unbounded domains.

报告人简介：周涛，中国科学院数学与系统科学研究院研究员。曾于瑞士洛桑联邦理工大学从事博士后研究。主要研究方向为不确定性量化、随机最优控制以及时间并行算法等。在国际权威期刊如 SIAM Review、SINUM、JCP 等发表论文 70 余篇。2018 年获自然科学基金委“优秀青年科学基金”资助。现担任 SIAM J. Sci. Comput.、Commun. Comput. Phys、J. Sci. Comput.等国际期刊编委，国际不确定性量化期刊（International Journal for UQ）副主编。

周日 09:00-09:40

Two novel deep neural networks methods for high dimensional PDEs

邹青松

中山大学

In this talk, we report two new deep NN methods for high dimensional PDEs. The first one is the so-called adaptive neural networks method (ADN). By applying three adaptive techniques: adaptive activation function, adaptive loss and adaptive sampling, to the well-known DNN method PINN, we significantly improve the accuracy of the PINN method. The second method is the so-called deep temporal difference methods (FBSTD). With this method, we first transform the deterministic parabolic PDE to a system of forward backward stochastic differential equation. Then by regarding this FBSDE as a Markov rewarding process, we use the Temporal Difference method in the reinforcement learning to train a neural network. Comparing to the deep stochastic method such as deep BSDE in the literature, our method can improve the accuracy and computational speed.

报告人简介: 邹青松, 中山大学计算机学院教授, 博士生导师, 数据科学系主任, 广东省计算数学学会理事长, 期刊 *International Journal of Numerical Analysis and Modelling* 编委。长期从事偏微分方程数值解法方面的研究工作, 在包括 *SIAM J Numer Anal*, *Math Comp*, *Numer Math* 等在内的知名国际发表论文 60 多篇。主要研究方向包括高阶高精度有限体积法 (项目“高次有限体积法的构造和理论分析”获得 2020 年广东省自然科学奖二等奖), 自适应算法, 偏微分方程深度学习算法, 以及药物设计和金融工程中的人工智能算法等。

周日 09:40-10:20

Solving high-speed flows using PINNs and DeepMMnets

毛志平

厦门大学

Recently, neural network-based deep learning methods, which are different from the classical numerical methods, have attracted lots of attention not only in the traditional artificial intelligence community but also the scientific computing community. In this talk, I will introduce my work using physics-informed neural networks (PINNs) and deep multi-scale multi-physics nets (DeepMMnet) for high-speed flows. In particular, I shall solve the inverse problems of the shock wave problems in supersonic flow by using PINNs based on the information of density gradient and limited data of pressure and inflow conditions instead of using boundary conditions. Then I will introduce the inference of the flow past a normal shock in hypersonic flow by using the DeepMMnets with the help of DeepOnets.

报告人简介：毛志平，厦门大学数学科学学院教授，2009 年本科毕业于重庆大学，2015 年博士毕业于厦门大学计算数学专业，2015 年 10 月至 2020 年 9 月在美国布朗大学应用数学系从事博士后研究。毛志平博士主要从事谱方法以及机器学习方面的研究，其目前在 SIREV、JCP、SISC、SINUM、CMAME 等国际高水平杂志上发表论文 20 余篇。

周日 10:30-11:10

Toric 曲面的理论、算法与应用

朱春钢

大连理工大学

Toric 曲面是一类多边有理参数曲面表示方法，经典的 Bézier 曲面是其特殊形式，toric 曲面继承了 Bézier 曲面的大多数良好性质。与 Bézier 方法相比，toric 曲面的参数域更加多样，可以表示多边曲面与多面实体，造型范围更加广泛。本报告中，我们将介绍 toric 曲面的一些基本理论、几何算法及其在等几何分析中的应用。

报告人简介：朱春钢，大连理工大学数学科学学院教授，计算科学研究所所长。现任中国工业与应用数学学会常务理事，辽宁省计算数学与数据智能重点实验室副主任。目前主要从事计算几何与计算机辅助几何设计方向的研究工作，在 ACM TOG、CAGD、CAD、CGF 等期刊发表论文多篇，出版教材 2 部，主持多项国家自然科学基金项目。个人主页: <http://faculty.dlut.edu.cn/zhu>。

周日 11:10-11:50

Hilbert 13th's problem and quasi-interpolation

高文武
安徽大学

In 1900, David Hilbert raised a conjecture known as Hilbert's 13th problem. In 1957, Kolmogorov and his 19 year student Arnold gave a negative answer to Hilbert's 13th problem by proving a remarkable fact that any multivariate function can be represented as addition and composition of (finite) numbers of univariate functions, which was called Kolmogorov's superposition theorem. There have been many attempts to generalized Kolmogorov's superposition theorem, such as radial basis function approximation, Kronecker-product approximation, additive models, neural networks as well as deep learning. However, most attempts require solving a minimization problem to obtain the final approximant. In this talk, I shall provide our works on circumventing the problem under the framework of quasi-interpolation. In addition, I shall provide some of our works on constructions of quasi-interpolation, properties and applications of quasi-interpolation.

报告人简介：高文武，安徽大学大数据与统计学院副院长、教授、博士生导师。复旦大学应用数学专业博士，上海宝钢研究院与复旦大学管理学院统计系博士后，美国科罗拉多矿业大学应用数学与统计学访问副教授。研究工作主要聚焦在统计学与数据科学领域交叉方向的核心基础算法的构造理论及其应用如概率数值逼近、不确定量化、统计学习、无网格微分方程数值解等。先后获得国家自然科学基金青年项目、面上项目的资助，在 *Applied and Computational Harmonic Analysis*, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, *SIAM Journal on Scientific Computing*, *Advances in Computational Mathematics*, *Numerical Algorithms* 等国际知名期刊上发表多篇学术论文。