



胡雨宽

巴黎理工学院 (Institut Polytechnique de Paris)
法国国立路桥学校 (École nationale des ponts et chaussées)
CERMICS 实验室, 博士后研究员

6 et 8 avenue Blaise-Pascal, Cité Descartes, Champs-sur-Marne
77455 Marne-la-Vallée Cedex 2, France

✉ +86-18810512770 | ✉ ykhu@lsec.cc.ac.cn | 🌐 <https://huyukuan.github.io>

研究方向

优化理论与算法及其在科学与工程计算中的应用. 目前研究聚焦计算量子化学与计算材料科学, 研究主题包括电子激发态计算、电子能量景观分析、强关联电子体系基态计算、晶体结构弛豫等.

教育经历

2019.09 - 2024.06	中国科学院大学	理学博士 (计算数学专业)	指导教师: 刘歆 研究员
2015.09 - 2019.06	同济大学	理学学士 (数学与应用数学专业)	指导教师: 殷俊锋 教授

工作经历

2024.09 - 2026.08	巴黎理工学院, 法国国立路桥学校	博士后研究员	合作导师: Eric Cancès 教授
2024.07 - 2024.08	香港理工大学, 应用数学系	研究助理	合作导师: 张在坤 助理教授

已发表论文与预印本

*: equal contribution, †: corresponding author

1. Y. Hu[†] and L. Grazioli. Constrained dynamics for searching saddle points on general Riemannian manifolds. arXiv preprint arXiv:2601.03931, 2026. <https://arxiv.org/abs/2601.03931>.
2. L. Grazioli*, Y. Hu^{*}, and E. Cancès. Critical point search and linear response theory for computing electronic excitation energies of molecular systems. Part I: General framework, application to Hartree-Fock and DFT. Accepted in *The Journal of Chemical Physics*, 2026+. <https://arxiv.org/abs/2506.16420>.
3. Y. Wang, Y. Hu, and X. Liu. Complexity of tensor product functions in representing antisymmetry. Under Minor Revision in *Science China Mathematics*, 2025. <https://arxiv.org/abs/2501.05958>.
4. Y. Hu, M. Li, X. Liu, and C. Meng. Sampling-based approaches for multi-block optimization problems over transport polytopes. *Mathematics of Computation*, 2025, 94(353): 1281-1322. DOI: 10.1090/mcom/3989.
5. Y. Hu and X. Liu. The exactness of the ℓ_1 penalty function for a class of mathematical programs with generalized complementarity constraints. *Fundamental Research*, 2024, 4(6): 1459-1464. DOI: 10.1016/j.fmre.2023.04.006.
6. Y. Hu, J. Yin, X. Gao, X. Liu, and H. Song. Projected gradient descent algorithm for *ab initio* crystal structure relaxation under a fixed unit cell volume. *Physical Review B*, 2024, 109(22): 224109 (14 pages). DOI: 10.1103/PhysRevB.109.224108.
7. Y. Hu and X. Liu. The convergence properties of infeasible inexact proximal alternating linearized minimization. *Science China Mathematics*, 2023, 66(10): 2385-2410. DOI: 10.1007/s11425-022-2074-7.
8. Y. Hu, H. Chen, and X. Liu. A global optimization approach for multimarginal optimal transport problems with Coulomb cost. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2023, 45(3): A1214-A1238. DOI: 10.1137/21M1455164.
9. Y. Hu, X. Gao, Y. Zhao, X. Liu, and H. Song. Force-based gradient descent method for *ab initio* atomic structure relaxation. *Physical Review B*, 2022, 106(10): 104101 (10 pages). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.104101.

知识产权与软件

1. 高兴誉, 刘歆, 胡雨宽, 宋海峰, 陈欣, 王越超, 王丽芳. 基于非单调梯度型算法的晶体结构弛豫软件 ProME-SuRe: 2023SR1558824. *软件著作权*. 2023-12-04.
2. 高兴誉, 刘歆, 宋海峰, 胡雨宽, 陈欣, 王越超, 方俊, 王丽芳, 张乐. 固定晶格体积晶体结构弛豫的计算方法及装置: 202211210741.3. *发明专利*. 2023-07-21.

3. 高兴誉, 刘歆, 宋海峰, 胡雨宽, 方俊, 杨真, 赵亚帆, 王丽芳, 刘海风. 原子结构弛豫的非单调线搜索方法及装置: 202111534901.5. **发明专利**. 2022-12-02.

部分参研项目

2024.09 - 2026.08	ERC, EU Horizon 2020	“Extreme-scale Mathematically-based Computational Chemistry”
2022.12 - 2023.11	JKW “16X 工程”	“原子结构弛豫优化算法研究与程序研制”
2019.09 - 2021.12	国防基础科研核科学挑战专题	“晶体结构弛豫的高效局域优化算法”

部分学术报告

2026.03	The 96th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics (GAMM 2026)	<i>Stuttgart, Germany</i>
2025.08	The 5th ABACUS Developers Conference (Poster)	<i>Beijing, China</i>
2025.08	The 15th International Conference on Optimization and Numerical Linear Algebra	<i>Harbin, China</i>
2025.07	The 8th International Conference on Continuous Optimization (ICCOPT 2025)	<i>Los Angeles, USA</i>
2025.06	The 22nd Conference on Advances in Continuous Optimization (EUROPT 2025)	<i>Southampton, UK</i>
2024.07	The 1st Forum for Ph.D. Students in Computational Mathematics	<i>Beijing, China</i>
2023.10	The 21st Annual Meeting of China Society for Industrial and Applied Mathematics	<i>Kunming, China</i>
2023.08	The 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023)	<i>Tokyo, Japan</i>
2023.08	The 14th International Conference on Optimization and Numerical Linear Algebra	<i>Taiyuan, China</i>

部分获奖经历

2025	中国科学院优秀博士学位论文 (中国科学院 78 人, 数学院 2 人)	中国科学院
2024	中国科学院院长奖学金特别奖 (中国科学院 59 人, 数学院 2 人)	中国科学院
2023	Financial Support Program	ICIAM 2023
2023	中国科学院朱李月华奖学金	中国科学院大学
2023	中国科学院数学与系统科学研究院院长奖学金特等奖 (所内唯一入选)	中国科学院数学学院
2023	北京数学会首届青年优秀论文 (在读博士唯一入选)	北京数学会
2022	中国科学院数学与系统科学研究院华罗庚奖学金 (10 万元)	中国科学院数学学院
2021	中国科学院数学与系统科学研究院华罗庚奖学金 (10 万元)	中国科学院数学学院

部分学术服务

• 会议组织

2025.06 EUROPT 2025	Session Chair for “Advances in Manifold Optimization”	<i>Southampton, UK</i>
-----------------------	---	------------------------

• 期刊审稿

IEEE Transactions on Signal Processing
The Innovation
Numerical Functional Analysis and Optimization
npj Unconventional Computing