



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

- 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>.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Y. Wang, Y. Hu, and X. Liu. Complexity of tensor product functions in representing antisymmetry. arXiv preprint arXiv:2501.05958, 2025. <https://arxiv.org/abs/2501.05958>.

知识产权与软件

- 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.
- 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.
- 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

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

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)	中国科学院数学院

部分学术服务

● 会议组织

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

● 期刊审稿

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