深度学习与科学计算研讨会
Workshop on Deep Learning and Scientific Computing
会议手册 Manual



宁波東方理工大學
EASTERN INSTITUTE OF TECHNOLOGY, NINGBO

数学科学学院
School of Mathematical Sciences
Eastern Institute of Technology, Ningbo

math@eitech.edu.cn
copyright©东方理工数学科学学院

CONTENT

学校及学院介绍 1
About the University & the School

地图 2
Maps

会议介绍 3
About the Workshop

日程表 4
Schedule

报告题目及摘要 6
Keynote Speech

笔记 13
Note

会议组织者 **Organizing committee**

陈敏 Min Chen
付书彬 Shubin Fu
黄富铿 Fukeng Huang
毛志平 Zhiping Mao
明平兵 Pingbing Ming
沈捷 Jie Shen
王晓明 Xiaoming Wang
赵宸 Chen Zhao

会务联系人 **Contact**

毛志平 Zhiping Mao zmao@eitech.edu.cn
吴锡娇 Xijiao Wu xwu@eitech.edu.cn



学校及学院介绍
About the University & the School

宁波东方理工大学

宁波东方理工大学是一所由社会力量举办、国家重点支持、省市共同建设的高起点、小而精、创新型、国际化的新型研究型大学。

学校以服务国家发展、推动社会进步为使命，强化基础研究、聚焦前沿交叉、突出工程技术，形成以理学、工学、信息、商科为主，兼备特色人文社科的学科体系，打造一所由社会力量举办、国家重点支持、省市共同建设的高起点、小而精、创新型、国际化的新型研究型大学。

学校坚持志存高远、求真务实的培养理念，造就具有宽厚基础、创新能力、家国情怀、国际视野的拔尖创新人才。

宁波东方理工大学数学科学学院

一、学院简介

数学是现代科技创新的基石，我院致力于汇聚顶尖人才，打造高水平国际化数学教研平台。学院拥有多位国家高层次人才领衔的国际化教研团队，在计算数学、偏微分方程、概率统计、量子计算等多个领域活力充沛。核心特色是推动数学与物理、数据科学、人工智能等领域深度交叉，营造宽松包容的学术氛围，鼓励探索与合作。

二、学院定位

打造国内一流、国际有影响力的数学科学学院，成为基础研究高地、应用创新枢纽、顶尖人才摇篮。以国家战略和前沿科学为导向，兼顾基础与交叉，为学术、人才培养和社会发展提供坚实数学支撑。构建“基础研究+交叉应用+人才培育”三位一体发展格局，以数学智慧赋能未来。

三、学科发展

面向未来，聚焦重点方向，推动学科高质量发展：
重点方向：优化与机器学习、概率统计、数学建模，计算流体\材料力学及与量子计算等新兴学科的交叉领域。
核心目标：瞄准国家战略与前沿难题，强化优势、培育新增长点，打造特色学科体系。

地图
Maps



会议介绍
About the Workshop

为促进人工智能与科学计算领域学者之间的学术交流与合作，拓展合作空间，宁波东方理工大学数学科学学院拟于2026年11月12日至14日在宁波举办“深度学习与科学计算研讨会”。

本次研讨会拟邀请约20位国内知名学者参会，围绕深度学习与科学计算的前沿问题展开深入研讨，重点关注深度学习求解微分方程、大语言模型与科学发现、不确定性量化、高性能软件开发，以及数学与工程科学的交叉研究等方向，回应国家战略需求，探索学科发展前沿。

会议将通过主题报告与深入讨论，深化对相关前沿问题的认识，推动相关理论在科学与工程问题中的应用。本次研讨会有望促进我校数学及相关交叉学科的发展，加强人才培养与科研合作，提升学校在国内外学术界的声誉与影响力，为学科建设和学校的长远发展提供有力支持。

To promote academic exchange and collaboration among researchers in artificial intelligence and scientific computing and to explore new opportunities for collaboration, the School of Mathematical Science at the Eastern Institute of Technology, Ningbo (EIT, Ningbo), plans to host the Workshop on Deep Learning and Scientific Computing in Ningbo on November 12–14, 2026.

Approximately 20 leading scholars from across China will be invited to participate. The workshop will explore frontier research in deep learning and scientific computing, with a particular focus on deep learning methods for solving differential equations, large language models and scientific discovery, uncertainty quantification, high-performance software development, and interdisciplinary research at the intersection of mathematics and engineering sciences. These topics address national strategic priorities and emerging research frontiers.

Through keynote presentations and in-depth discussions, the workshop aims to deepen understanding of key research challenges and advance the application of relevant theories to problems in science and engineering. It is expected to contribute to the development of mathematics and related interdisciplinary fields at EIT, Ningbo, strengthen education and research collaboration, and enhance the university’ s academic reputation and visibility both in China and internationally. The workshop will thus provide valuable support for the university’ s academic development and long-term growth.

Invited external experts

陈升 北京师范大学	**崔涛** 中国科学院数学与系统科学研究院
翟佳羽 上海科技大学	**郭玲** 上海师范大学
贺巧琳 四川大学	**蒋嘉敏** 中国科学技术大学苏州高等研究院
李志远 宁波大学	**廖奇峰** 上海科技大学
明平兵 中国科学院数学与系统科学研究院	**孙春龙** 南京航空航天大学
王飞 西安交通大学	**王涵** 北京应用物理与计算数学研究所
翁明兴 中国科学院数学与系统科学研究院	**徐勐** 中国科学院数学与系统科学研究院
张钊 山东大学	**张志跃** 南京师范大学
赵进 首都师范大学	**周涛** 中国科学院数学与系统科学研究院

日程表
Schedule

11月12日

宁波镇海开元名都酒店

TIME	PROGRAM
12:00-18:00	报到
18:30-20:30	晚餐

11月13日 上午

宁波东方理工大学数理楼410室

TIME	SPEAKER	PROGRAM	HOST
08:30-08:50		Opening Remark （沈捷、明平兵）	毛志平
08:50-09:20	张志跃	基于机器学习数值求解界面问题的一些混合方法及其拓展	明平兵
09:20-09:50	蒋嘉敏	用于求解复杂流动问题的保结构图神经算子	陈 敏
09:50-10:20		茶歇 & 合影	
10:20-10:50	王 涵	原子大模型驱动的材料设计与发现	王晓明
10:50-11:20	廖奇峰	A high-dimensional density estimation method and its application for solving PDEs	郭 玲
11:20-11:50	赵 进	Evo-GTransNet Galerkin Methods for Parabolic and Phase-Field PDEs	徐 劼
11:50-13:00		午餐	

11月13日 下午

宁波东方理工大学数理楼410室

TIME	SPEAKER	PROGRAM	HOST
14:20-14:50	崔 涛	CAD-CAE一体化与MSCAX平台	周 涛
14:50-15:20	贺巧琳	A Hybrid Physics-informed holomorphic neural networks Method	孙春龙
15:20-15:40		茶歇	
15:40-16:10	王 飞	Randomized Neural Network Methods for Partial Differential Equations	陈 升
16:10-16:40	张 钊	Physics-Guided Conditional Flow Matching for Generative Inversion and Uncertainty Quantification of Two-Phase Darcy Flows in Porous Media	黄富铿
16:40-17:10	翟佳羽	Implicit Manifold Reconstruction with Diffusion Model	付书彬
17:30		晚宴	

11月14日

TIME	PROGRAM
09:00-17:00	自由讨论与离会

报告题目及摘要
Keynote Speech

张志跃

南京师范大学

基于机器学习数值求解界面问题的一些混合方法及其拓展

Some accurate and efficient numerical methods have been proposed for interface problems with extreme conditions such as very big jump ratio, coefficient blow-up and geometric singularity interface. One of the schemes combines DNN technique with FDM to build decoupling second order method for the problem. The second one proposed a hybrid augmented approach coupling FEM with ELM for interface problem. The third one based on operator learning to construct predictor corrector method for interface problems, the main advantages of this method is saving computational costs and having higher accuracy, in addition, it can be applied to moving interface and 3D interface problems. The fourth one proposed a perturbation-correction framework based on Loacal Randomized Neural Networks(LRaNNs) for nonlinear interface problem. The last one proposes an Operator Splitting Method (OSM) based on Extreme Learning Machines (ELM) to decouple the geometric interface evolution from the physical field reconstruction for Stefan Problems. Examples confirmed theoretical results and efficiency of proposed methods. In addition, recent numerical results of some interesting problems such as shocks, Helmholtz equation and PME, etc have been shown in this talk.

Bio: 张志跃，南京师范大学数学科学学院教授，博士生导师。2001年毕业于山东大学数学学院计算数学专业，师从袁益让教授获理学博士学位。2002年至2004年曾在中国科学院大气物理研究所师从穆穆院士进行博士后研究工作。在第八届世界华人数学家大会做45分钟邀请报告，中国工业与应用数学学会油水资源专委会委员，主持完成多项国家自然科学基金面上项目和江苏省自然科学基金面上项目，发表学术论文八十余篇。目前主要的研究兴趣为偏微分方程数值解、机器学习、PDE约束的最优控制问题和计算流体动力学。

蒋嘉敏

中国科学技术大学苏州高等研究院

用于求解复杂流动问题的保结构图神经算子

双曲守恒律广泛描述了各类以输运过程为主导的动力学现象，其解通常包含激波、接触间断以及复杂的波系相互作用，这为基于深度学习的代理模型构建带来了独特挑战。传统数值方法能够提供鲁棒且满足物理约束的数值解，但其较高的计算成本限制了其在参数化研究、设计优化等需要大量重复求解的任务中的应用。相比之下，现有神经网络代理模型虽然具有较高的推理效率，却往往难以保持偏微分方程内在的数学与物理结构，容易产生非物理数值伪影、长时间预测不稳定以及泛化能力不足等问题。

我们提出一种具有可解释性和结构保持特性的图神经网络求解器，将经典数值方法的基本原理与图神经网络（GNN）相结合。不同于直接预测状态更新的黑箱模型，该网络被设计为一种基于学习的状态重构与数值通量计算算子，从而在模型结构上自然保证局部守恒性和迎风特性等关键性质。进一步地，受任意高阶导数（ADER）格式的启发，我们将消息传递GNN重新解释为空间–时间高阶预测器，使神经网络求解器能够在较大时间步长下实现守恒且稳定的数值更新。

在一系列具有挑战性的超声速流动基准算例上对所提出的方法进行了验证，涵盖几何构型、初始与边界条件以及流动状态等方面的广泛参数变化。实验结果表明，与具有竞争力的神经网络代理模型基线相比，所提出的求解器在长时间序列滚动预测中表现出更高的稳定性和精度，同时优于低阶数值离散方法，并相较于高分辨率数值模拟实现了数个数量级的计算加速。

Bio: 蒋嘉敏，博士后就职于美国斯坦福大学SUPRI-B数值模拟研究中心；2019-2024在美国雪佛龙技术中心数值模拟科研组担任研究科学家；2024年加入中国科学技术大学苏州高等研究院，现任特任研究员。近几年围绕地下渗流和油气开发等领域对高效高精度数值求解算法和模拟技术的需求，取得了一系列创新研究成果。在权威应用数学类期刊（Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Journal of Computational Physics, etc.), 以及地下水文和油气等交叉领域期刊共发表论文23篇，其中第一作者通讯作者21篇。发表论文他引1300余次。研究成果被应用于各大科研机构和石油、软件公司（Chevron, Total, Schlumberger, CMG等），大幅提升了实际数值仿真的精度、效率与稳定性。曾作为核心人员参与了多个国外先进工业仿真软件的科研项目：1)斯坦福SUPRI-B中心研究模拟器AD-GPRS 2) 业界领先Chevron/Schlumberger/Total新一代油气模拟平台INTERSECT 3)新一代开源多物理场耦合模拟器GEOS.

王涵

北京应用物理与计算数学研究所

原子大模型驱动的材料设计与发现

面向性质的材料设计受制于实验数据稀缺与分布外泛化两大困难。本报告介绍以原子大模型为核心的应对路径。理论上，我们建立局域原子环境的完备等变表示，并证明等变图神经网络的万有逼近性质。据此设计的DPA4 模型在 Matbench Discovery、OMat24、OMol25等基准上，以更少的参数量与推理开销达到领先精度。大规模预训练获得的原子尺度先验经微调可迁移至小数据性质预测任务，显著改善分布外泛化。以轻质因瓦合金设计为例，原子大模型与智能体驱动的干湿闭环相结合，仅需少量实验迭代即突破传统合金路线的边界，获得兼具近零膨胀与更低密度的候选合金。理论保证的架构、大规模预训练与闭环实验反馈的结合，为稀缺数据下的材料设计提供了系统性途径。

Bio: 王涵自2014年起任职于北京应用物理与计算数学研究所教授，并担任博士生导师。2011年获北京大学数学科学学院理学博士学位。2011—2014年在德国柏林自由大学数学与计算机科学系从事博士后研究。研究方向主要包括科学智能（AI for Science）、原子尺度建模与计算方法。曾获2020年戈登·贝尔奖（Gordon Bell Prize）及2024年国际基础科学大会前沿科学奖（Frontiers of Science Award）。

廖奇峰

上海科技大学

A high-dimensional density estimation method and its application for solving PDEs

Probability density estimation remains an open challenging problem in computational science and engineering. By coupling the Knothe-Rosenblatt (KR) rearrangement and the flow-based generative model, we developed an invertible transport map, called KRnet, for high-dimensional density estimation. In this talk, we give an overview of KRnet and discuss its adaptive version for the Fokker-Planck equations and stochastic dynamic systems.

Bio: 廖奇峰目前为上海科技大学信息科学与技术学院常任副教授、研究员、博士生导师、视觉与数据智能研究中心联合主任，中国数学会计算数学分会理事。于2010在英国曼彻斯特大学数学学院获得数值计算博士学位，于2006年获得四川大学数学学院学士学位。2011年1月至2012年6月，在美国马里兰大学计算机系从事博士后研究工作；2012年7月至2015年2月，在美国麻省理工学院航空航天系从事博士后研究工作；2015年3月，作为研究员加入上海科技大学信息科学与技术学院。

赵进

首都师范大学

Evo-GTransNet Galerkin Methods for Parabolic and Phase-Field PDEs

TransNet and GTransNet construct prescribed neural feature dictionaries without training their hidden parameters. In this talk, we present a unified fixed-feature Galerkin framework for evolving such dictionaries in time-dependent PDEs, with only the output coefficients treated as dynamical unknowns. A truncated weighted singular value decomposition identifies the effective trial space and produces identity-mass coordinates in the assembly-quadrature inner product. For linear parabolic equations, this formulation yields quadrature-semidiscrete energy dissipation and Crank–Nicolson contractivity. We then discuss why assembly-grid orthogonality alone is insufficient for reliable temporal studies and introduce independent quadrature audits for the retained mass and stiffness operators. On audited fixed spaces, classical high-order integrators recover their expected convergence rates before reaching spatial error floors. Finally, we extend the retained-space framework to Allen–Cahn and Cahn–Hilliard gradient flows using SAV and IEQ schemes, obtaining exact modified-energy dissipation identities and, for Cahn–Hilliard, assembly-quadrature mass conservation. Numerical examples in one, two, and three dimensions illustrate the roles of feature approximation, mass normalization, quadrature resolution, temporal accuracy, and structure preservation. This work is joint with Prof. Lili Ju.

Bio: 赵进，首都师范大学交叉科学研究院副教授、博士生导师。中国工程物理研究院博士，曾在北京大学数学科学学院从事博士后研究工作。他的研究方向主要集中在鞍点动力学与解景观，机器学习等，包括将机器学习应用到偏微分方程数值解和数学建模中。相关工作发表在SINUM，SISC, JCP, PRE, INT J HEAT MASS TRAN等权威学术期刊。获国家自然基金委面上项目、青年科学基金项目、中国博士后科学基金会面上项目（一等）资助，并参与一项国家重点研发计划青年科学家项目，获得北京市基础研究人才项目。

崔涛

中国科学院数学与系统科学研究院

CAD-CAE一体化与MSCAX平台

在传统CAD与CAE软件的应用过程中，存在大量数据转换与人工干预，制约了仿真精度与效率的进一步提升。随着新型工业化不断推进，CAX工业软件一体化正成为突破现有计算精度与效率瓶颈的关键技术路径之一。值得注意的是，中国科协将“复杂模型的设计-仿真-制造一体化算法与理论”列为2025年十大工程技术难题之首，凸显了该方向的重要性与紧迫性。本报告将从CAE数值计算方法稳定性的视角，分享对CAX一体化的若干思考，重点汇报我们团队在非拟合网格方法方面的研究进展，涵盖高质量网格自动生成、曲面数值积分及线性方程组求解等关键技术环节，并介绍我们在CAX一体化算法开发验证平台——MSCAX方面的研制进展。

Bio: 崔涛，中国科学院数学与系统科学研究院研究员，中国科学院大学岗位教授，博士生导师，入选国家级青年人才计划，2016年受“陈景润未来之星”特优人才计划资助,荣获2018年中国工业与应用数学学会第四届应用数学青年科技奖、2024年北京市科技进步二等奖。担任中国科学院数学与系统科学研究院基础软件研究中心常务副主任、中国工业与应用数学学会高性能计算与数学软件专业委员会秘书长、中国工业与应用数学学会数学与集成电路专业委员会（筹）副主任、北京市计算数学学会第十一届理事。承担中国科学院校先导B专项项目、国家重点研发计划项目课题、国家自然科学基金项目、北京市自然科学基金重点项目等。 主要从事并行自适应算法设计及其数学理论分析、并行自适应软件研究，在集成电路EDA仿真算法与工具、CAX一体化计算内核等方面取得了一系列原创性成果。

贺巧琳

四川大学

A Hybrid Physics-informed holomorphic neural networks Method

Physics-informed holomorphic neural networks (PIHNNs) exploit complex-analytic representations to satisfy homogeneous PDEs by construction, but their extension to nonhomogeneous problems is nontrivial. We propose a hybrid physics-informed holomorphic neural network (HPIHNN) framework based on a decomposition of the solution into particular and homogeneous components. The particular component is computed by a spectral method on a simple extended domain, while the homogeneous component is approximated by a PIHNN trained only on the boundary with modified boundary data. The resulting formulation avoids meshing complex geometries and retains the dimensionality-reduction advantage of holomorphic representations. The method is applied to nonhomogeneous Poisson, Stokes, biharmonic, linear elasticity, and Helmholtz equations. Numerical experiments covering complex geometries, corner singularities, and nearly incompressible regimes demonstrate that the proposed method accurately resolves the corresponding solutions and, in the considered tests, generally achieves lower errors and shorter training times than standard PINNs. The results indicate that coupling spectral particular solutions with holomorphic neural approximations provides an efficient approach to nonhomogeneous PDEs on complex domains.

Bio: 贺巧琳，四川大学数学学院教授、博士生导师。主要研究领域为关于有奇异解问题的自适应网格方法、流体力学问题的计算方法, 复杂流体计算、数值分析和数值模拟、微分方程数值格式和深度学习的方法结合等等。在国际著名期刊上发表高水平论文50余篇。先后主持国家自然科学基金4项，科技部重点研发计划子课题，军科委项目等。

王飞

西安交通大学

Randomized Neural Network Methods for Partial Differential Equations

The numerical solution of partial differential equations (PDEs) is fundamental to scientific computing. While traditional numerical methods provide rigorous mathematical foundations and reliable accuracy and stability, they can become computationally expensive for complex, multiscale, and high-dimensional problems. Neural network methods offer flexible approximation capabilities but often require costly nonconvex optimization and lack rigorous error control. This talk presents recent advances in randomized neural network (RaNN) methods for solving PDEs and learning solution operators. By fixing randomly generated hidden-layer parameters and training only the output weights, RaNN methods reduce training to solving linear systems or least-squares problems, combining the flexibility of neural networks with computational efficiency and mathematical tractability. Building on this idea, we have developed a range of methods, including RaNN–Petrov–Galerkin, local RaNN–DG, local RaNN–HDPG, local RaNN–finite difference, adaptive-growth RaNN, adaptive-distribution RaNN, Schwarz-preconditioned RaNN, and randomized neural operators. These approaches combine randomized neural networks with traditional numerical methods, providing flexible, efficient, and mathematically tractable frameworks for solving PDEs.

Bio: 王飞，西安交通大学数学与统计学院教授、博士生导师，CNSNS 副主编，陕西省青年百人入选者、西安交通大学青年拔尖人才。研究领域涵盖科学计算与机器学习，主要研究兴趣包括偏微分方程数值解、深度学习与算子学习等。主持国家自然科学基金项目4项，参与国家重点研发计划项目 1 项；已在国际 SCI 期刊发表论文七十篇。近年来，王教授聚焦神经网络方法与传统数值方法的融合，提出了随机神经网络 Petrov–Galerkin 方法、局部随机神经网络 DG 方法、局部随机神经网络HDPG方法以及自适应随机神经网络方法等一系列新方法。同时，他还发展了基于随机神经网络的算子学习方法，在提升参数化 PDE 预测效率的同时，为算子网络训练提供了有效的加速机制。

张钊

山东大学

Physics-Guided Conditional Flow Matching for Generative Inversion and Uncertainty Quantification of Two-Phase Darcy Flows in Porous Media

Inverse problems associated with flows in porous media require sampling from posterior distributions subject to complex, nonlinear partial differential equation (PDE) models. Recent advances in generative modeling provide efficient tools for approximating high-dimensional posterior distributions. In the current study, we propose a physics-guided conditional flow matching (PGCFM) framework for Bayesian inverse problems of Darcy flows in porous media. The method employs conditional flow matching (CFM) to generate data-conditioned samples, incorporating an adaptive gradient-based correction during inference. The gradient is computed using a differentiable Fourier neural operator (FNO) surrogate of the forward simulator. A trust-region mechanism is further used to regulate the correction strength and preserve realistic geological structures.

We evaluate the proposed framework on a three-dimensional two-phase Darcy flow problem. Comparisons are conducted against pure CFM, physics-guided unconditional flow matching (PGUFM), and the ensemble smoother with multiple data assimilation (ESMDA) method. The numerical results demonstrate that the proposed method improves consistency with the observed production data while maintaining geological realism and robust performance.

Bio: 张钊，山东大学数学与交叉科学研究中心副教授、博士生导师。2010年本科毕业于山东大学数学学院，2014年获得英国拉夫堡大学博士学位并于2014-2018年在英国赫瑞瓦特大学从事博士后研究，入选山东大学青年学者未来计划和省级人才项目。主要研究方向为计算流体力学、机器学习与不确定性量化，在Journal of Computational Physics等高水平期刊发表论文20多篇。

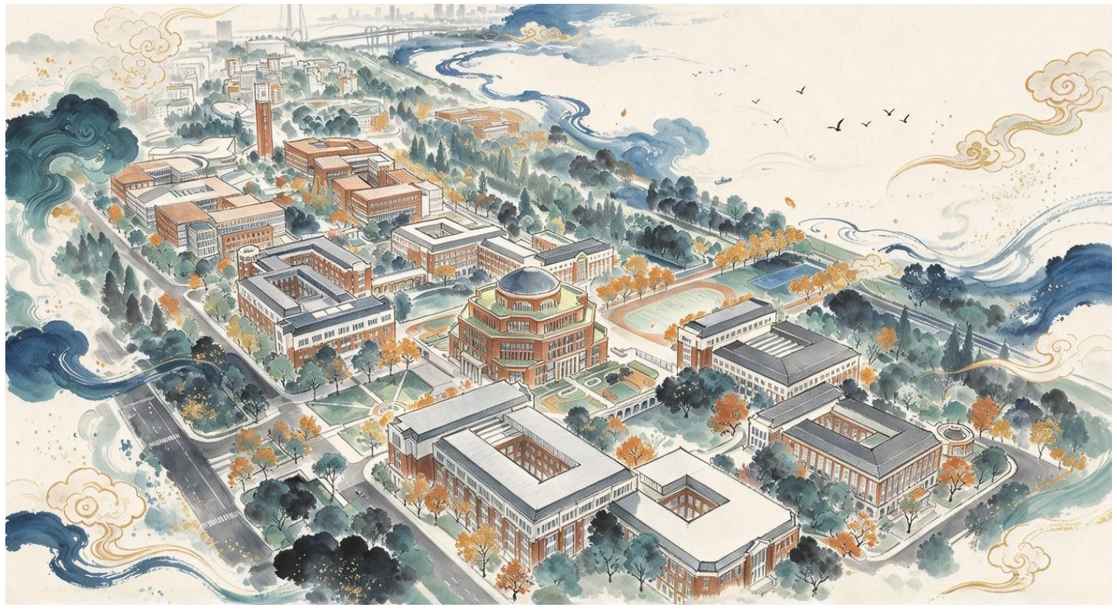
翟佳羽

上海科技大学

Implicit Manifold Reconstruction with Diffusion Model

Score-based diffusion models learn the score functions of progressively perturbed data distributions. Under the manifold hypothesis, which posits that high-dimensional data concentrate on or near a much lower-dimensional manifold, recent studies have shown that low-noise diffusion scores encode local manifold geometry. This raises a natural question: can the geometric information contained in diffusion scores be used not only to guide individual samples toward the data distribution, but also to reconstruct the entire manifold supporting the data? We propose a score-guided potential learning framework for implicit manifold reconstruction from unoriented point clouds.

Bio: Jiayu Zhai, is now an Assistant Professor, Senior Researcher and Doctoral Supervisor at IMS of ShanghaiTech University. He graduated from Louisiana State University with PhD in math, supervised by Dr. Xiaoliang Wan. Before joining ShanghaiTech, he was a Visiting Assistant Professor at the Department of Mathematics and Statistics of University of Massachusetts Amherst. His research interests involve numerical methods, data-driven methods, machine learning, uncertainty quantification, and their numerical and stochastic analysis.



NOTE