

2024 年数值计算研讨会

会议通知

尊敬的专家：

为探讨交流微分方程数值解、数值代数和人工智能等方面的最新研究进展，促进数学与交叉学科间的交流与合作，推动数学基础理论、算法及应用等方面的创新发展。2024 年“数值计算研讨会”将于 2024 年 10 月 31 日至 11 月 2 日在上海大学宝山校区 G 楼 GJ303 会议室召开。现代表本次会议组委会诚挚的邀请您前来参会。

组织委员会：

涂一辉、纪丽洁、潘晓敏、秦晓雪

举办单位：

上海大学 理学院数学系

会议费用：

本次会议不收取注册费，参会人员的食宿由会务组承担。

注册、住宿地点及研讨会地点：

注册和住宿：上海大学 北大门 乐乎新楼（上海市宝山区锦秋路 716 号）；

研讨会地点：宝山校区 G 楼 GJ303 会议室

会务组人员联系方式：

涂一辉 15382518826 Email: tuyihui@shu.edu.cn

上海大学理学院数学系

2024 年 10 月 29 日

2024 年数值计算研讨会

会议手册



上海大学
SHANGHAI UNIVERSITY

2024 年 10 月 31 日 ---- 2024 年 11 月 2 日

2024年10月31日		会议日程	
上午	注册		
13:00-17:00	讨论交流		
17:00-19:00	晚餐		
2024年11月1日		会议日程	
时间	题目	报告人	单位
9:30-10:30	现象驱动理解语言模型的推理与记忆	许志钦	上海交通大学
10:30-11:30	A fourth-order kernel-free boundary integral method for variable coefficients elliptic PDEs	谢雅宁	浙江工业大学
12:00-13:30	午餐		
14:00-15:00	Uniform convergent scheme for discrete-ordinate radiative transport equation with discontinuous coefficients on unstructured quadrilateral meshes	王艺红	上海立信会计金融学院
15:00-16:00	A penalty free weak Galerkin finite element method on quadrilateral meshes	王瑞姝	吉林大学
16:00-17:00	准二维带电库伦多体系统分子动力学模拟的 $O(N)$ 算法	干则成	香港科技大学 (广州)
17:00-19:00	晚餐		
2024年11月2日		会议日程	

9:30-11:30	讨论交流
离会	

摘要

现象驱动理解语言模型的推理与记忆

许志钦 上海交通大学

摘要：本报告将从现象驱动的角度切入，介绍神经网络在非线性训练区域的凝聚现象，即同层神经元具有倾向的现象。当模型参数在训练初始化阶段的尺度越小，凝聚现象会越明显。凝聚能够降低模型的有效复杂度。基于此，我们发现参数初始化对模型的推理和记忆有显著影响。当 Transformer 的网络参数初始化较大时，有效复杂度大，模型有足够大的复杂度能够记忆数据。当初始化较小时，参数凝聚使网络的有效复杂度显著降低。为了满足低复杂度的限制，网络通过学习尽量少的规律，结合推理的方式拟合数据。

A fourth-order kernel-free boundary integral method for variable coefficients elliptic PDEs

谢雅宁 浙江工业大学

摘要：We propose a fourth-order generalized boundary integral method for variable coefficients elliptic PDEs, including both boundary value and interface problems. The method is kernel-free in the sense that there is no need to know analytical expressions for kernels of the boundary and volume integrals in the solution of boundary integral equations. Evaluation of a boundary or volume integral is replaced with interpolation of a fourth-order Cartesian grid-based solution, which satisfies an equivalent discrete interface problem, while the interface

problem is solved by a fast solver in the Cartesian grid. It takes advantage of the well-conditioning property of discrete BIEs so that the number of Krylov subspace iterations is essentially independent of discretization parameter or system dimension. Numerical results are presented.

Uniform convergent scheme for discrete-ordinate radiative transport equation with discontinuous coefficients on unstructured quadrilateral meshes

王艺红 上海立信会计金融学院

摘要: This study presents a groundbreaking Asymptotic Preserving (AP) scheme for the steady-state radiative transport equation (RTE) with discontinuous coefficients on unstructured quadrilateral meshes. While numerous AP schemes have been developed for structured meshes, there is a scarcity of such schemes for unstructured or distorted meshes with discontinuous coefficients. Our research addresses this deficiency by employing the Tailored Finite Point Method (TFPM) to devise an AP scheme that not only uniformly converges with respect to the mean free path but also extends its validity to the boundary and interface layers.

A penalty free weak Galerkin finite element method on quadrilateral meshes

王瑞姝 吉林大学

摘要: The weak Galerkin finite element methods are non-standard finite

element methods. The newly defined weak functions are considered as the approximate functions, which have two parts, inner and boundary, on each element. Weak derivatives are correspondingly defined. Appropriate spaces should be used when no penalty term is employed. We use the Arbogast–Correa element to define the weak gradient and obtain a penalty-free weak Galerkin scheme, which is then employed to solve problems related to Stokes flow, linear elasticity, and poroelasticity.

准二维带电库伦多体系统分子动力学模拟的 $O(N)$ 算法

干则成 香港科技大学

摘要：科学工程问题中大量的软物质、材料以及生物系统，如胶体单层、二维材料、细胞膜等，从模型的角度都可以理解为带有库伦相互作用的准二维多体系统。通过分子动力学模拟理解这类多体系统的集体动力学以及平衡态性质非常重要。我们将介绍一系列相关的算法，用于高效模拟在准二维限制 (*quasi-2D confinement*) 条件下具有静电相互作用的粒子系统。主要用到的技术包括 Ewald 分解，核函数的指数求和估计，随机分批重要性采样方法等。我们的算法可以在线性时间内计算粒子间的两两长程相互作用，从而可以在单核上进行百万粒子规模的分子动力学模拟。