

目录

一、会务指南 3

二、会议组织 4

三、会议日程 6

四、邀请报告 16

五、分会报告 A1 专题：函数空间的学习理论 I、II 19

六、分会报告 A2 专题：现代机器学习理论与方法 23

七、分会报告 A3 专题：强化学习的第二曲线：从奖励学习到科学智能 26

八、分会报告 A4 专题：人工智能与最优化 I、II 28

九、分会报告 A5 专题：大模型表征与迁移机制 32

十、分会报告 B1 专题：大模型的预训练 35

十一、分会报告 B2 专题：大模型基础理论 37

十二、分会报告 B3 专题：大模型理论与科学计算 40

十三、分会报告 B4 专题：生成式 AI 理论与算法 43

十四、分会报告 C1 专题：数学智能 AI4Math I、II 46

十五、分会报告 C2 专题：机器学习与材料计算 I、II 50

十六、分会报告 C3 专题：基于模型降阶的机器学习方法与理论	54
十七、分会报告 C4 专题：物理问题驱动的机器学习算法	56
十八、分会报告 C5 专题：神经科学与人工智能交叉	58
十九、分会报告 C6 专题：神经算子学习	61
二十、分会报告 C7 专题：Generative AI4Science	64
二十一、分会报告 C8 专题：AI 赋能材料仿真 I、II	66
二十二、分会报告 C9 专题：深度学习与复杂非线性系统：算法与应用	71
二十三、分会报告 C10 专题：机器学习与 PDE 反问题	74
二十四、分会报告 C11 专题：融合物理与数据的 AI：面向复杂物理系统的应用	76
二十五、分会报告 C12 专题：机器学习与交叉	78
二十六、分会报告 D1 专题：AI 在未来能源系统中的应用	81
二十七、分会报告 D2 专题：人工智能中的计算能耗管理	83
二十八、分会报告 D3 专题：人工智能在科学成像中的应用 I、II	85
二十九、学生论坛	89

一、会务指南

中国机器学习与科学应用大会（CSML）自2022年发起以来，已成为领域内的重要学术平台。2026年第四届会议（CSML 2026）将于2026年8月7-9日在上海交通大学陈瑞球楼举行。

本次会议旨在交流机器学习的以下三方面。数学机器学习：从数学角度研究机器学习，如理论研究或者建模。科学机器学习：将机器学习应用在科学问题中或者由科学计算的算法启发的机器学习算法设计。工业机器学习：将机器学习研究应用到工业生产中的研究。

The Chinese Symposium on Machine Learning and Scientific Applications (CSML), inaugurated in 2022, has established itself as a premier academic platform in the field. The fourth edition of the symposium (CSML 2026) will be held from August 7-9, 2026, at the Chen Ruiqiu Building, Shanghai Jiao Tong University. The conference focuses on the following three aspects of machine learning. Mathematical machine learning: study machine learning from a mathematical perspective, such as theory and model. Scientific machine learning: the application of ML to scientific problems and design of ML algorithms inspired by scientific computing. Industrial machine learning: the application of ML in industry.

会议时间： 2026年8月7-9日（8月8-9日开会）

签到时间： 8月7日17:00-21:00

签到地点： 白金汉爵酒店1楼

会议地点： 上海交通大学陈瑞球楼（上海市闵行区东川路800号）

会议网站： <https://c2sml.cn/conference.html>

会务组联系方式： 罗涛：luotao41@sjtu.edu.cn

二、会议组织

大会主席：

鄂维南（院士，北京大学）

金石（教授，上海交通大学）

会议学术委员会（按姓氏拼音排序）：

包刚（院士，浙江大学）

鄂维南（院士，北京大学）

高小山（研究员，中国科学院数学与系统科学研究院）

龚新高（院士，复旦大学）

江松（院士，北京应用物理与计算数学研究所）

金石（教授，上海交通大学）

刘卫东（教授，上海交通大学）

马志明（院士，中国科学院数学与系统科学研究院）

王立威（教授，北京大学）

杨志坚（教授，武汉大学）

印卧涛（阿里巴巴（美国）达摩院决策智能实验室）

张钹（院士，清华大学）

张平文（院士，武汉大学）

张志华（教授，北京大学）

周志华（院士，南京大学）

会议组织委员会（按姓氏拼音排序）：

组织委员会主席：

罗涛（上海交通大学）

组织委员会成员：

董彬（北京大学）

梁经纬（上海交通大学）

刘方辉（上海交通大学）

马征（上海交通大学）

闵含城（上海交通大学）

吴磊（北京大学）

许志钦（上海交通大学）

袁坤（北京大学）

张耀宇（上海交通大学）

主办单位

上海交通大学自然科学研究院

上海交通大学数学科学学院

上海交通大学人工智能学院

科学与工程计算教育部重点实验室

上海市现代分析前沿科学研究基地

协办单位

北京大学国际机器学习研究中心

北京国际数学研究中心

北京大学数学科学学院

复旦大学物理系

中国数学会数学与人工智能专委会（筹）

中国物理学会AI物理专委会（筹）

三、会议日程

大会总体日程

时间		内容		地点
8月7日（周五）				
17:00-21:00		会议注册（签到）		白金汉爵酒店1楼
8月8日（周六）				
08:20-08:40		致辞		会场1 陈瑞球楼100
08:40-09:25	邀请 报告	杨泓康：慢思考的第一性原理建模		
09:30-10:15		罗涛：从Math4AI到AI4Math的初步探索		
10:15-10:30		茶歇		
10:30-12:00		观点论坛（主题：AI与数学）		
12:00	合影			
12:15-13:30	午间休息			
13:30-15:30	分会 报告	A1：函数空间的学习理论I、II		会场8 陈瑞球楼117
		A2：现代机器学习理论与方法		会场2 陈瑞球楼106
		C1：数学智能AI4Math I、II		会场3 陈瑞球楼107
		C4：物理问题驱动的机器学习算法		会场4 陈瑞球楼108
		C6：神经算子学习		会场5 陈瑞球楼109
		C9：深度学习与复杂非线性系统：算法与应用		会场6 陈瑞球楼110
		D2：人工智能中的计算能耗管理		会场7 陈瑞球楼114
15:30-16:00	茶歇			
16:00-18:00	分会 报告	A1：函数空间的学习理论I、II		会场8 陈瑞球楼117
		A3：强化学习的第二曲线：从奖励学习到科学智能		会场2 陈瑞球楼106
		C1：数学智能AI4Math I、II		会场3 陈瑞球楼107
		C3：基于模型降阶的机器学习方法与理论		会场4 陈瑞球楼108
		C5：神经科学与人工智能交叉		会场5 陈瑞球楼109
		C10：机器学习与PDE反问题		会场6 陈瑞球楼110
		B2：大模型基础理论		会场7 陈瑞球楼114
8月9日（周日）				
08:30-09:15	邀请 报告	束俊：大模型基础理论的若干探索		会场1 陈瑞球楼100
09:15-10:00		梁经纬：大规模论文形式化：惯性加速案例研究		
10:00-10:15	茶歇			
10:15-12:15	分会 报告	C7：Generative AI4Science		会场2 陈瑞球楼106
		A4：人工智能与最优化I、II		会场3 陈瑞球楼107
		B3：大模型理论与科学计算		会场1 陈瑞球楼100
		C2：机器学习与材料计算I、II		会场4 陈瑞球楼108
		C8：AI 赋能材料仿真I、II		会场5 陈瑞球楼109
		C11：融合物理与数据的AI：面向复杂物理系统的应用		会场6 陈瑞球楼110
		D3：人工智能在科学成像中的应用I、II		会场7 陈瑞球楼114
	A5：大模型表征与迁移机制		会场8 陈瑞球楼117	
12:15-13:30	午间休息			
13:30-15:30	分会 报告	A4：人工智能与最优化I、II		会场3 陈瑞球楼107
		B4：生成式AI理论与算法		会场2 陈瑞球楼106
		C2：机器学习与材料计算I、II		会场4 陈瑞球楼108
		B1：大模型的预训练		会场1 陈瑞球楼100
		D1：AI 在未来能源系统中的应用		会场5 陈瑞球楼109
		D3：人工智能在科学成像中的应用I、II		会场7 陈瑞球楼114
		C12：机器学习与交叉		会场6 陈瑞球楼110
	C8：AI 赋能材料仿真 I、II		会场8 陈瑞球楼117	
15:40-17:40	学生论坛			会场2 陈瑞球楼106

8月8日 (周六)

时间	会议主题		演讲人	地点
08:20-08:40	致辞			会场1 陈瑞球楼 100
08:40-09:25	邀请报告：慢思考的第一性原理建模	杨泓康	记忆张量	
09:30-10:15	邀请报告：从Math4AI到AI4Math的初步探索	罗涛	上海交通大学	
10:15-10:30	茶歇			
10:30-12:00	观点论坛（主题：AI与数学） 嘉宾：罗涛、马家骏、孙若愚、项阳 主持人：许志钦			
12:00	合影			
12:15-13:30	午间休息			
13:30-15:30	A1 函数空间的学习理论I、II（组织者：刘方辉、吴磊、石磊、凌舒扬）			会场8 陈瑞球楼 117
	Reproducing kernel Banach spaces with the l_p norm for $0 < p < 1$	张海樟	中山大学	
	面向数据低维流形表示的度量学习方法	应时辉	上海大学	
	密度比估计与协变量偏移	郭正初	浙江大学	
	基于范数约束的神经网络学习：从RKHS到Barron空间	刘方辉	上海交通大学	
	A2 现代机器学习理论与方法（组织者：束俊、廖振宇）			会场2 陈瑞球楼 106
	从现象理解深度学习	许志钦	上海交通大学	
	Safe Alignment of LLMs under Reward Over-Optimization: Mitigating Catastrophic Goodhart Effect via Rényi Regularization	张慧铭	北京航空航天大学	
	神经网络的不确定性原理与复制对称性破缺原理	张俊杰	西北核技术研究所	
	大语言模型的可解释性：理论机制、实证工具与未来路径	邹荻凡	香港大学	
	C1 数学智能AI4Math I、II（组织者：罗涛、王天宇）			会场3 陈瑞球楼 107
	基于黎曼优化框架的量子线路设计	赖志坚	北京大学	
	面向开放性数学问题的自动推理与形式化验证	居造成	北京大学	
	MechMath Agent Team: LLM Driven Agents for Mathematical Research	刘俊杞	中国科学院数学与系统科学研究院	
	Automated Algebraic Reasoning in Lean 4	沈皓	中国科学院数学与系统科学研究院	

8月8日（周六）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
13:30-15:30	C4 物理问题驱动的机器学习算法（组织者：印佳、李颖洲）			会场4 陈瑞球楼 108
	数据驱动算法在分子模拟中的应用	苏茂	上海人工智能实验室	
	奇性编码的格林函数及其在加速迭代法中的应用	孙琪	同济大学	
	材料逆向设计算法和软件介绍（Con-CDVAE, PODGen）	吴泉生	中国科学院物理研究所	
	面向强关联分子体系的可扩展神经网络选择组态方法	阚博文	中国科学技术大学	
	C6 神经算子学习（组织者：黄政宇、郭汝驰）			会场5 陈瑞球楼 109
	Guided Flow Matching for Forward and Inverse PDE Problems with Sparse Observations	赵进	首都师范大学	
	从材料微结构到宏观本构：非弹性均匀化的算子学习	曹梁皓	加州理工大学	
	RealPDEBench：整合真实物理测量与配对模拟数据的神经算子基准	吴泰霖	西湖大学	
	一种连接学习与迭代的warm-basis方法：以荧光分子断层成像为例	姜嘉骅	上海科技大学	
	Flow-based Bayesian filtering for high-dimensional nonlinear stochastic dynamical systems	王欣童	同济大学	
	C9 深度学习与复杂非线性系统：算法与应用（组织者：毛志平）			会场6 陈瑞球楼 110
	基于机器学习的天体流体力学快速求解方法	董若冰	北京大学	
	神经网络的中心原则及其应用	毛志平	宁波东方理工大学	
	The Staircase Phenomenon and its applications in initialization of Neural Network Training Dynamics	杨将	南方科技大学	
	面向复杂工程系统的可泛化神经算子建模与应用	汪祺能	中科院微小卫星创新研究院	
	D2 人工智能中的计算能耗管理（组织者：李彤欣、尤鹏程）			会场7 陈瑞球楼 114
	预测-优化一体化的新能源系统发电量申报优化	杨浩翔	香港中文大学（深圳）	
	因果表示学习在跨领域HVAC能耗预测中的应用	唐国明	香港科技大学（广州）	
	基于攻防博弈的大模型越狱攻击与安全演化	张乔生	上海人工智能实验室	
	卫星计算中AI推理能耗优化的初步思考	娄炯	上海交通大学	
15:30-16:00	茶歇			

8月8日（周六）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
16:00-18:00	A1 函数空间的学习理论I、II（组织者：刘方辉、吴磊、石磊、凌舒扬）			会场8 陈瑞球楼 117
	基于卷积光滑hinge损失的结果加权学习算法研究	向道红	浙江师范大学	
	过参数化浅层神经网络的非空泛化界限	雷云文	香港大学	
	光滑函数的神经网络逼近与学习	杨云斐	中山大学	
	光滑激活函数的理论优势：逼近与泛化	刘雨濠	北京大学	
	A3 强化学习的第二曲线：从奖励学习到科学智能（组织者：温颖）			会场2 陈瑞球楼 106
	面向开放世界的具身多智能体决策	李阳	上海交通大学	
	面向大模型的强化学习研究进展	俞扬	南京大学	
	Efficient Differentiable Robot Learning in the Real World	任云帆	同济大学	
	复杂科学系统的强化学习控制--以可控核聚变为例	熊铮	上海创智学院	
	C1 数学智能AI4Math I、II（组织者：罗涛、王天宇）			会场3 陈瑞球楼 107
	一个普通数学工作者的 AI 实践	马家骏	厦门大学	
	迈向可靠的 AI4Math：从推理图到长程 Lean 自动形式化	张原赫	University of Warwick	
	后AI时代的数学教育与科研人才培养	张继耀	香港中文大学	
	形式化规约的评估：基于对抗合成的测试集扩展与化简	刘晓洋	上海交通大学	
	C3 基于模型降阶的机器学习方法与理论（组织者：王东、刘皓）			会场4 陈瑞球楼 108
	数据驱动的偏微分方程识别	何雨晨	香港城市大学	
	Enhancing Future Prediction of Linear and Nonlinear Reduced-Order Models for Transport-Dominated Problems Using Lagrangian Data	彭志超	香港科技大学	
	基于神经网络的函数型数据分析	樊军	香港浸会大学	
	Towards Understanding & Improving Flow Matching	王超	南方科技大学	

8月8日（周六）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
16:00-18:00	C5 神经科学与人工智能交叉（组织者：李松挺、周栋焯）			会场5 陈瑞球楼 109
	Shaping Sequence Attractor Schema in Recurrent Neural Networks	弭元元	清华大学	
	预测学习中认知地图的形成：网络架构如何塑造神经表征	陈语思	中国科学院脑科学与智能技术卓越创新中心	
	脑-智双向驱动类脑智能计算	马征宇	北京大学	
	Why Neural Codes Drift: Coordinated Dynamics and Replay-Based Continual Learning	秦山山	上海交通大学	
	C10 机器学习与PDE反问题（组织者：闫亮）			会场6 陈瑞球楼 110
	反问题的神经网络方法	陆帅	复旦大学	
	神经网络求解PDE的收敛性分析	金邦梯	香港中文大学	
	函数空间上的归一化流模型	贾骏雄	西安交通大学	
	Dictionary learning based regularization in quantitative MRI: A nested alternating optimization framework	董国志	中南大学	
	B2 大模型基础理论（组织者：刘勇）			会场7 陈瑞球楼 114
	基于求解器 - 校验器差值的大语言模型自迭代训练动力学理论建模	滕佳烨	上海财经大学	
	从 FlashAttention 看低精度 Transformer 训练失败机理	姚权铭	清华大学	
	大语言模型的无监督校正	孔雨晴	北京大学	
	从机制到鲁棒性看上下文学习理论	李帅	上海交通大学	

8月9日 (周日)

时间	会议主题		演讲人	地点	
08:30-09:15	邀请报告：大模型基础理论的若干探索		束俊	西安交通大学	会场1 陈瑞球楼 100
09:15-10:00	邀请报告：大规模论文形式化：惯性加速案例研究		梁经纬	上海交通大学	
10:00-10:15	茶歇				
10:15-12:15	C7 Generative AI4Science（组织者：王涵）				会场2 陈瑞球楼 106
	基于机器学习与物理机制的材料可合成性研究		巨明刚	东南大学	
	自由能极小：从大自然到大语言模型		王磊	中国科学院物理研究所	
	材料科学数据构建和智能体介绍和思考		吴泉生	中国科学院物理研究所	
	数据驱动的晶体结构预测方法		吕健	吉林大学	
	A4 人工智能与最优化I、II（组织者：王祥丰、袁坤）				会场3 陈瑞球楼 107
	ReasFlow：面向数学优化研究的自主科学发现智能体		袁坤	北京大学	
	面向大语言模型多目标优化的优化器设计		刘晨	香港城市大学	
	大语言模型辅助的优化通用建模与求解		钱鸿	华东师范大学	
	Tight Bounds for Logistic Regression with Large Stepsize Gradient Descent in Low Dimension		刘名睿	George Mason University	
	B3 大模型理论与科学计算（组织者：易鸣洋）				会场1 陈瑞球楼 100
	基于数理原理的分子科学扩散模型设计举例		刘畅	北京中关村学院	
	大模型强化学习中的若干问题		易鸣洋	中国人民大学	
	Federated Foundation Models Fine-Tuning with Heterogeneous Compressed Clients		曾锦山	西安交通大学	
	基于模型蒸馏的快速PDE求解方法		邹荻凡	香港大学	

8月9日（周日）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
10:15-12:15	C2 机器学习与材料计算I、II（组织者：张露婵）			会场4 陈瑞球楼 108
	从薛定谔方程到组分筛选：人工智能驱动的材料设计与发现	王涵	北京应用物理与计算数学研究所	
	机器学习力场，快速算法和材料大模型	徐振礼	上海交通大学	
	Optimization-based energy splitting methods for 2D discrete dislocation dynamics	戴书洋	武汉大学	
	成分复杂合金多尺度模拟：基于有限数据的神经网络异质多尺度方法	任辰扬	香港科技大学	
	C8 AI 赋能材料仿真I、II（组织者：陈景润、孙羿斐）			会场5 陈瑞球楼 109
	Prescribed-Basis Coefficient-to-Coefficient Neural Operator for Partial Differential Equations	项阳	香港科技大学	
	一种用于偏微分方程深度求解器的多层次深度框架	贺巧琳	四川大学	
	瀚海量子材料模拟智能体	胡伟	中国科学技术大学	
	复杂域上偏微分方程的两级随机特征方法	孙羿斐	中国科学技术大学	
	C11 融合物理与数据的AI：面向复杂物理系统的应用（组织者：吴泰霖）			会场6 陈瑞球楼 110
	基于人工智能的科学知识自动发现	陈云天	宁波东方理工大学	
	物理信息神经算子驱动的复杂动力系统建模与工业应用	张瑞	中国人民大学	
	科学智能仿真和设计	朱霖潮	浙江大学	
	飞行器气动布局设计的生成式建模方法研究	寇家庆	西北工业大学	
	D3 人工智能在科学成像中的应用I、II（组织者：姜若曦、孙赫）			会场7 陈瑞球楼 114
	从低秩分解到生成式先验：物理场稀疏重构中的表征学习路径	方楷楷	浙江大学	
	深度学习赋能傅里叶叠层显微成像	张韶辉	北京理工大学	
	基础模型驱动的医学成像探索	王珊珊	中国科学院深圳先进技术研究院	
	生成模型在物理模拟和物质生成领域的应用研究	魏龙	复旦大学人工智能创新与产业研究院	

8月9日（周日）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
10:15-12:15	A5 大模型表征与迁移机制（组织者：刘方辉、闵含城）			会场8 陈瑞球楼 117
	AdaRoPE: 一种自适应的位置编码	李建	清华大学	
	On the Nonlinearity of Learning Rate Scaling for LLM Training	张景昭	清华大学	
	Transformer模型的算法学习与发现研究	曹原	香港大学	
	理解神经网络的泛化能力：从神经切线核到自适应特征	李易诚	华东师范大学	
12:15-13:30	午间休息			
13:30-15:30	A4 人工智能与最优化I、II（组织者：王祥丰、袁坤）			会场3 陈瑞球楼 107
	两层神经网络稳态平台的几何刻画	孙若愚	香港中文大学（深圳）	
	基于(多模态)大语言模型的自动优化建模	李忠	大湾区大学	
	正则化深度矩阵分解的损失景观与误差界分析	江如俊	复旦大学	
	Lifting Game Solvers into Language Space	李文浩	同济大学	
	B4 生成式AI理论与算法（组织者：胡天阳）			会场2 陈瑞球楼 106
	超快速扩散生成：图像、语言与前沿挑战	罗维俭	小红书dots大模型	
	Sampling Acceleration of Diffusion Language Models	李根	香港中文大学	
	面向自回归生成的序列化表征学习	胡天阳	香港中文大学（深圳）	
	Provable Sample-Efficient Transfer Learning Conditional Diffusion Models via Representation Learning	张成	北京大学	
	C2 机器学习与材料计算I、II（组织者：张露婵）			会场4 陈瑞球楼 108
	基于最优控制视角的终端约束流式生成模型	高卫国	复旦大学	
	Quantum Algorithms for Young-Measure Relaxations in Continuum and Atomistic Models	张镭	上海交通大学	
	功能材料可解释组分优化与晶体生成方法研究	黄阳	中国科学技术大学	
	Discrete Mean-Field Games on Graphs as Finite-Dimensional Initial-Value Optimization: A Neural Network Method	冯雅昕	香港科技大学	

8月9日（周日）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
13:30-15:30	B1 大模型的预训练（组织者：吴磊、吕凯风）			会场1 陈瑞球楼 100
	模型越宽，优化真的会越难吗？从矩阵算子范数看神经网络优化器	陆一平	西北大学	
	大规模训练中的数据问题	吕凯风	清华大学	
	Mano: 流形优化与大模型训练	谢泽柯	香港科技大学（广州）	
	迈向高效的大语言模型退火训练：样本选择的一类原则性方法	李忠	微软亚洲研究院	
	D1 AI 在未来能源系统中的应用（组织者：尤鹏程、李彤欣、江彦）			会场5 陈瑞球楼 109
	数据驱动的海量分布式资源灵活性识别、量化与控制方法研究	郭毅	北京理工大学	
	AI4AI在高效后训练中的应用	宋磊	上海行云致理人工智能研究院	
	面向复杂能源系统的数据驱动控制	袁臻毅	香港科技大学（广州）	
	面向新型电力系统的可信AI智能体：高效感知、前瞻决策与泛化调控	叶宇剑	东南大学	
	D3 人工智能在科学成像中的应用I、II（组织者：姜若曦、孙赫）			会场7 陈瑞球楼 114
	面向专病诊疗的多模态医学智能体及世界模型	王炼	复旦大学数字医学研究中心	
	星衍：天文图像自监督时空去噪算法	张昊	清华大学自动化系	
	对抗优化范式的科学应用：图像去噪、两样本检验与隐私保护	张景锋	复旦大学智能机器人与先进制造创新学院	
	基于表征学习的物理仿真	姜若曦	复旦大学人工智能创新与产业研究院	
	C12 机器学习与交叉（组织者：张耀宇）			会场6 陈瑞球楼 110
	从热方程到扩散模型: 1822-2022	刘康	法国勃艮第大学	
	超越低维限制的参数景观生成式学习	肖卓成	上海纽约大学	
	对称性先验嵌入的深度网络架构	谢琦	西安交通大学	
	神经网络架构塑造训练动力学：对称性、结构不变流形和凝聚现象	张耀宇	上海交通大学	

8月9日（周日）（续）

时间	会议主题		演讲人	地点
13:30-15:30	C8 AI 赋能材料仿真 I、II (组织者: 陈景润、孙羿斐)			会场8 陈瑞球楼 117
	偏微分方程的随机神经网络方法	王飞	西安交通大学	
	隐身材料中波传播模型的有限元方法与可制造设计	王唯	中国科学技术大学	
	Finding Navier-Stokes equations from Boltzmann equation with the data driven method	王艳莉	北京计算科学研究中心	
	关于非线性梯度流计算的JKO方案	魏朝祯	电子科技大学	
15:40-17:40	学生论坛			会场2 陈瑞球楼 106
	对于非线性偏微分方程的神经算子预条件子	周楠	上海交通大学	
	理解Adam优化器的动力学：损失尖峰的动力学溯源及其在退化景观中的加速机制	白志威	上海交通大学	
	基于神经网络的含时方程时间半离散方法	王贵宏	上海交通大学	
	无穷小初始化下对角线性网络的梯度流动力学与隐式正则化	赵佳杰	上海交通大学	
	非参工具变量中的深度学习：优化与泛化	陈宗昊	伦敦大学学院	
	微积分形式化库Calculus_21与形式化辅助教学系统	周可信	华东理工大学	
	Mamba的非对称偏好	陈天一	上海交通大学	

四、邀请报告

1. 杨泓康

简介：杨泓康，普林斯顿大学应用与计算数学博士，现任记忆张量科技有限公司与上海算法创新研究院的研究员。研究领域为认知能力的基本原理建模与大模型的自主学习和自发演化。研究成果包括生成模型的泛化理论、记忆分层的语言模型、思考行为的第一性原理理论等。

报告题目：慢思考的第一性原理建模

摘要：大模型的飞速演化使高级认知功能的实现成为可能，也愈发需要数学理论指导认知功能的工程实践。我们的论文尝试为思考行为建立一套第一性原理的理论，在不涉及唯象假设的前提下，推导出所有可能的慢思考模型。直观来说，问题可表述为将数据“展开”，使之变得更好理解。论文将问题建模为概率分布在数据空间与隐序列空间上的提升与投影，由此推得慢思考模型的设计空间。该空间的两个主要的维度是表示层级与采样层级，攀登这两个层级可以逐步提高推理模型的逼近能力与采样效率。同样的方法可用于“展开”文本以外的数据，包括图片与环境，以此刻画感知的主动性。

2. 罗涛

简介：罗涛，上海交通大学数学科学学院/自然科学研究院副教授。2012年获上海交通大学致远学院学士学位，2017年获香港科技大学博士学位，并获香港数学会最佳博士论文奖。2017至2020年，担任普渡大学数学系Golomb访问助理教授。研究方向为计算材料科学、深度学习数学理论（Math4AI）和数学智能（AI4Math）。研究内容包括材料科学的Peierls-Nabarro模型、Cauchy-Born法则；深度学习的频率原则、凝聚理论；数学智能的自动形式化、语义评估、结构化自然语言等。在ARMA/SIAM系列/M3AS/JMLR/NeurIPS/ICML/ICLR等应用数学和机器学习期刊和会议发表论文40余篇。获NeurIPS 2021 Spotlight、NeurIPS 2025 Oral、ICML 2026 Oral等。

报告题目：从Math4AI到AI4Math的初步探索

摘要：人工智能的蓬勃发展正重塑科学研究范式，数学与AI的深度交叉呈现出“双向赋能”的新格局。本报告将汇报团队近期在“Math4AI”（基于数学理论的深度学习机理解析）与“AI4Math”（基于人工智能的数学研究辅助）两个方向的初步探索。在Math4AI层面，我们引入

几何测度论、动力系统与渐近分析方法，深入剖析深度学习的训练动力学机制，针对偏微分方程求解中的泛化失效、神经网络训练中的参数凝聚与秩坍塌现象，以及注意力机制中“聚焦-稀释”的多阶段演化规律提供了初步的理论诠释。在AI4Math层面，我们致力于弥合自然语言与形式语言的语义鸿沟，提出了算子树与结构化自然语言等创新性表示框架。该框架不仅显著提升了自动形式化的准确率与语义评估的鲁棒性，更为数学文献的智能检索与学生、专家的交互式研读提供了有力工具。报告最后将展望这一交叉领域的未来挑战与研究愿景。

3. 束俊

简介：束俊，西安交通大学数学与统计学院教授（校青拔A），博导。于2016年和2023年分别获西安交通大学理学学士与理学博士学位。目前从事于机器学习基础理论与方法研究；已在JMLR/TPAMI/TMLR/NSR/NeurIPS/ICML等国际顶级期刊和会议发表学术论文30余篇；ESI高被引论文2篇；单篇论文引用超1200次。主持科技部重点研发计划青年科学家项目、基金委面上项目以及多项企业横向课题等。曾获陕西省科学技术进步奖一等奖（排名第3）、教育部“基础学科拔尖学生培养计划”2.0“提问与猜想”活动特等奖优秀指导教师、“CCF博士学位论文激励计划”提名、粤港澳大湾区（黄埔）国际算法算例大赛擂台赛冠军、NeurIPS杰出审稿人奖等奖项。

报告题目：大模型基础理论的若干探索

摘要：近年来，以GPT类、Claude类和DeepSeek类为代表的大模型技术取得显著发展。相比于之前的机器学习方法，大模型技术呈现出“智能涌现”与“强任务泛化能力”等新的技术现象，但这些技术现象背后的数学机理缺乏系统的理论解释。本报告将围绕大模型基础理论中的若干问题展开，分别发展了大模型的学习理论与极限理论，揭示了大模型完全不同于小模型的统计学习规律。

4. 梁经纬

简介：梁经纬，上海交通大学自然科学研究院副教授。2016年获法国卡昂大学数学博士学位，曾在英国剑桥大学理论物理与应用数学系从事博士后研究，并任英国伦敦玛丽王后大学数学科学学院数据科学讲师，2021年加入上海交通大学。主要研究兴趣为非光滑优化、AI4Math、数学图像处理和数据科学等。

报告题目：大规模论文形式化：惯性加速案例研究

摘要：过去几年，随着大语言模型推理能力的持续提升，AI for Mathematics (AI4Math) 受到越来越广泛的关注。作为AI4Math的核心基础设施之一，数学形式化近年来取得了快速发展，并涌现出M2F、Archon、Lean4Skills等基于大语言模型的自动形式化智能体。本报告将以优化算法为例，介绍一种面向大批量论文的Paper-to-Formalization工具链，实现从论文解析、数学知识抽取、Lean4形式化到自动验证的完整流程。在此基础上，我们进一步构建理论发现与形式化验证的闭环，并以惯性加速方法为案例，展示该框架如何辅助理论分析、发现新的数学结论并完成机器验证。

五、分会报告 A1 专题：函数空间的学习理论 I、II

组织者：刘方辉、吴磊、石磊、凌舒扬

报告时段：8月8日13:30-15:30；8月8日16:00-18:00

会场：时段1：会场8，陈瑞球楼117；时段2：会场8，陈瑞球楼117

A1-1 Reproducing kernel Banach spaces with the l_p norm for $0 < p < 1$

张海樟，中山大学

摘要： This paper advances the theory of reproducing kernel Banach spaces (RKBS) by systematically investigating the general l_p regularization framework, with a particular focus on the non-convex regime $0 < p < 1$. While our preceding work established the foundation for RKBS with the l_1 norm, the pursuit of stronger sparsity—closer to the l_0 pseudo-norm—naturally motivates this exploration into l_p quasi-norms. Our primary objective is to construct RKBSs with l_p norms that admit a linear representer theorem. We will see that there are fundamental differences between the three cases $0 < p < 1$, $p = 1$, and $p > 1$. Numerical experiments will also be presented to compare the accuracy and sparsity of solutions for these three cases.

A1-2 面向数据低维流形表示的度量学习方法

应时辉，上海大学

摘要： 医学影像智能分析的本质是建立医学影像或其特征与疾病之间的映射关系。由于医学影像多具有多来源、维度高、样本少、无结构等特性，因此，医学影像智能分析多为小样本学习/分类问题。本报告将从数据分布的最优描述和特征迁移两个角度对小样本学习/分类问题进行初探。具体地，首先给出基于正定群表征的线性度量学习保结构算法。在此基础上，结合子空间方法，建立更为鲁棒的线性度量学习方法。进一步，通过核方法和局部线性化与单位分解技术，从两个方面建立非线性度量学习的模型与内蕴算法。从而实现数据的最优分布描述。其次，基于数据的边际分布和条件分布对齐和数据的流形结构，获得特征迁移学习方法。进一步，将特征迁移思想引入深度结构，将不同模态或多源数据的特征进行融合，实现多模态医学小样本的精确分类。最后，对基于度量学习和迁移学习方法实现多源小样本数据精确鲁棒的分类进行总结与展望。

A1-3 密度比估计与协变量偏移

郭正初，浙江大学

摘要：协变量偏移在现代机器学习中起着重要作用，通常依赖于估计目标（测试）分布与源（训练）分布之间的密度比。现有文献大多假设该密度比是有界的，但在实际应用中，这一假设往往并不成立。在本次报告中，我们将探讨在可能无界的密度比条件下的学习这一具有挑战性的问题。我们提出了一种三步方法，利用来自源（训练）分布和目标（测试）分布的无标签样本：首先估计相对密度比，然后对其进行截断以控制不稳定性，最后将其转化为标准密度比的估计，用于重要性加权回归。我们推导了密度比估计和下游回归的有限样本保证，并表明所提出的方法在温和的假设下能够达到最优或接近最优的收敛速率。我们的分析为密度比估计提供了新的理论见解，并将协变量偏移理论的应用范围扩展到了无界密度比的情形。

A1-4 基于范数的神经网络学习：从RKHS到Barron空间

刘方辉，上海交通大学

摘要：本次报告将探讨哪些函数类可以被神经网络高效学习。首先，我将介绍 F_p 空间连接了RKHS和Barron空间。我将讨论从RKHS到Barron空间之间近似难度发生相变的理论结果。进一步，在Barron空间中，我将探讨Barron空间学习的统计效率基本极限。我们的结果表明，能够在样本复杂度和输入维度之间达到“最优”的权衡，并进一步凸显了关键的统计-计算鸿沟以及与自适应核学习的关系。最后，基于范数约束的原则，我简要讨论传统的经验风险最小化机制也会被重新塑造。

A1-5 基于卷积光滑hinge损失的结果加权学习算法研究

向道红，浙江师范大学

摘要：精准医疗的核心目标是基于患者的异质性构建最优个体化治疗规则，以最大化临床收益。基于hinge损失的结果加权学习算法凭借对“输入-动作-结果”型医疗数据的高效学习能力，成为估计最优个体化治疗规则的主流方法。然而，Hinge损失函数固有的非光滑性，使得算法在高维数据场景下面临优化上的困难，如梯度不连续导致的训练振荡、学习率需严格受限以保证收敛稳定性等问题。本报告重点研究基于卷积光滑hinge损失的结果加权学习算法。理论上，首先建立了卷积平滑hinge损失与标准hinge损失所定义的泛化误差之间的定量逼近关系，有效克服了基于卷积光滑hinge损失的目标函数无界的困难；其次证明了卷积光滑hinge损失对应的Bernstein

型方差-期望不等式。最后，基于上述两个结果，在分布满足一定噪声的条件下，得到了算法的最优学习率（相差一个对数因子）。数值模拟实验结果表明：卷积平滑hinge损失在不降低个体化治疗效果的前提下，显著提升了算法的计算效率，展现出其在个体化治疗规则学习中的应用潜力。

A1-6 过参数化浅层神经网络的非空泛化界限

雷云文，香港大学

摘要：过参数化神经网络经常表现出一种良性的过拟合现象，尽管参数数量超过了训练样本数，但仍能取得优异的泛化性能。传统的泛化分析通常由于过参数化而得出空洞的界限。在本次报告中，我们通过控制过参数化浅层神经网络（SNNs）的 Rademacher 复杂度，展示了非空洞的泛化界限，并辅以关于高度过参数化SNNs 的实证研究。我们的复杂度界限依赖于与初始化点的距离，并以网络的路径范数（path-norm）来表达。

A1-7 光滑函数的神经网络逼近与学习

杨云斐，中山大学

摘要：本报告将讨论ReLU神经网络逼近与学习理论的一些最新进展。我们将神经网络的逼近理论按使用的方法分为两类。第一种方法利用分段多项式逼近光滑函数，再构造神经网络逼近分段多项式，从而建立关于网络宽度和深度的最优逼近阶。在第二种方法中，我们考虑浅层神经网络的函数空间，即Barron空间，并利用随机逼近方法估计该空间中的逼近误差。通过研究Barron空间与光滑函数空间之间的关系，我们可以用网络宽度和参数矩阵的某种范数来刻画神经网络的逼近误差。最后，我们将讨论这些逼近结果在非参数回归中的应用。特别地，我们将证明基于深度或浅层神经网络的最小二乘估计，能够在多种设定下达到学习光滑函数类的最优收敛速率。

A1-8 光滑激活函数的理论优势：逼近与泛化

刘雨濠，北京大学

摘要：以 GELU、SwiGLU 等为代表的光滑激活函数已广泛应用于现代深度学习，但其理论优势仍缺乏系统理解。本报告从逼近论与统计学习角度，刻画了光滑激活函数可自适应利用目标函数任意阶光滑性的理论优势。针对Sobolev空间，我们构造了常数深度、宽度与参数范数可控的神经网络逼近器，并证明其能达到最优逼近速率。基于该逼近器的低复杂度结构，我们进一步证明，

对相应网络类实施无需稀疏约束的经验风险最小化算法，即可达到minimax速率。最后，我们揭示了以 ReLU 为代表的非光滑激活函数的内在深度瓶颈：固定网络深度下，其可达逼近与泛化速率会饱和。

六、分会报告 A2 专题：现代机器学习理论与方法

组织者：束俊、廖振宇

报告时段：8月8日13:30-15:30

会场：会场2，陈瑞球楼106

A2-1 从现象理解深度学习

许志钦，上海交通大学

摘要：深度学习的基础研究是重要的研究方向，其中一类重要的研究方法是现象驱动。通过对重要现象的发现和挖掘，可以使基础研究更好的服务于神经网络的理解和使用。本报告将介绍一些重要的现象，包括频率原则、凝聚现象等，理解深度学习的原理，从最简单的感知机的学习到大规模模型的记忆和推理。参考《深度学习现象导论》。

A2-2 Safe Alignment of LLMs under Reward Over-Optimization: Mitigating Catastrophic Goodhart Effect via Rényi Regularization

张慧铭，北京航空航天大学

摘要：This talk addresses the challenge of machine learning generalization under heavy-tailed distributions, providing a theoretical foundation for the stable improvement of models such as Reinforcement Learning from Human Feedback (RLHF). We propose a novel heavy-tailed information-theoretic framework for generalization bounds. Traditional information-theoretic bounds typically control the generalization error using KL divergence, which relies on the existence of the moment generating function (MGF) of the loss or reward, or on sub-Gaussian tail assumptions. However, in modern machine learning paradigms such as RLHF and stochastic optimization, losses and rewards often are heavy-tailed, where the MGF may not exist, rendering KL-based tools ineffective. Even when the KL mutual information is small, rare extreme events can dominate generalization performance. We show that under heavy-tailed rewards, KL divergence-based trust regions in RLHF can suffer from the "Catastrophic Goodhart effect" - where the proxy reward can blow

up without bound even when the KL constraint is small. In contrast, RLHF with Rényi regularization effectively controls reward inflation under heavy-tailed sub-Weibull rewards. Furthermore, for the Best-of-n strategy, we show that Rényi-regularized alignment provides finite reward guarantees and ensures that best-of-N policies remain well-controlled. Finally, we successfully apply Rényi regularization to Direct Preference Optimization (DPO) for LLMs.

A2-3 神经网络的不确定性原理与复制对称性破缺原理

张俊杰，西北核技术研究所

摘要：现代机器学习正在从经验驱动的工程体系，走向具有统一数理基础的科学体系。然而，深度神经网络为何在高精度预测的同时表现出对抗脆弱性、幻觉风险与泛化不稳定性，仍缺乏统一的原理性解释。本报告围绕“神经网络的不确定性原理与复制对称破缺原理”展开，尝试从物理学和数学的角度刻画智能系统的两个基本机制：其一，神经网络的不确定性原理揭示了精度、鲁棒性与幻觉风险之间并非独立可调，而是受同一可靠性边界约束；其二，神经网络的复制对称破缺原理将 Dropout、Batch Normalization、Equivariance 等看似分散的经验方法统一理解为对优化景观中对称结构的破坏、选择与重构。前者刻画智能系统在决策边界上的能力-可靠性极限，后者刻画训练动力学中从高维冗余到有效表征形成的机制。通过将损失函数、梯度、优化景观和对称结构纳入统一框架，本工作为理解深度学习中的脆弱性、泛化、可解释性与训练技巧提供了可计算、可检验的理论路径。该研究旨在推动现代机器学习从“性能经验学”走向“智能物理学”，为建立人工智能的普适规律和数理基础提供一个早期原理框架。

A2-4 大语言模型的可解释性：理论机制、实证工具与未来路径

邹荻凡，香港大学

摘要：大语言模型展现出强大的能力，但其内部运作机制在很大程度上仍处于“黑盒”状态。本报告聚焦大模型可解释性这一前沿方向，系统介绍当前世界范围内的关键进展，探讨我们如何逐步揭示模型内部的注意力机制、层次分工与推理路径。理解这些内部机理，不仅有助于回答模型行为背后的“为什么”，也为后续研究提供了重要基础。在方法层面，本报告将介绍几类主流工具，例如通过电路发现定位负责特定任务的关键神经元，以及利用稀疏自编码器将复杂的内部状态映射为更易理解的表示形式。这些工具已在模型分析、干预与编辑中展现出初步成效。通过

多个具体案例，包括模型如何在上下文中解决稀疏回归问题、强化学习如何重塑推理模式、微调过程中内部结构的演化，以及如何引导模型“遗忘”特定信息，本报告尝试探讨可解释性研究在哪些方面有助于我们理解“模型为何出错”、“如何做出决策”以及“知识存储于何处”等根本性问题。进一步，我们将讨论理解内部机理对后续研究的实际价值。这些价值体现在多个方面：例如设计更高效的训练与微调策略，减少不必要的计算开销；提升模型输出的可控性与安全性，降低不可预期行为带来的风险；以及推动模型压缩、编辑与对齐等实际应用落地。可以说，可解释性正在从“锦上添花”的辅助分析，逐步走向支撑模型研发与治理的关键环节。最后，本报告回应一个开放性问题：可解释性研究如何在与经验发现、理论提炼与第一性原理探索的互动中，持续推动大模型向更可信、更可控的方向发展。我们也将分享对未来研究路径的思考，包括如何平衡理论深度与实用价值，以及哪些方向可能成为下一个突破点。

七、分会报告 A3 专题：强化学习的第二曲线：从奖励学习到科学智能

组织者：温颖

报告时段：8月8日16:00-18:00

会场：会场2，陈瑞球楼106

A3-1 面向开放世界的具身多智能体决策

李阳，上海交通大学

摘要：真实世界远比实验室中的理想化任务设定更加开放与复杂。环境状态持续变化，交互对象不断演化，协作关系动态调整，任务目标也可能随时间发生改变。对于具身智能体而言，真正的挑战并非仅是在预定义条件下完成既定任务，而是在不确定、动态和开放的环境中持续感知、推理与决策，并使多智能体系统能够形成、维持和优化有效协作。从这一视角来看，开放性既是具身多智能体研究面临的核心挑战，也是迈向通用具身智能过程中必须解决的关键问题。本报告以“面向开放世界的具身多智能体决策”为主题，围绕开放环境下具身智能体面临的感知理解、决策规划、协同交互与适应学习等核心问题，探讨可能的技术路径与发展方向。同时，结合我们近期在相关方向上的探索实践，分享一些阶段性的思考与研究进展。

A3-2 面向大模型的强化学习研究进展

俞扬，南京大学

摘要：随着大语言模型应用的不断深入，强化学习已成为提升模型能力的重要技术路径。报告将汇报奖励建模与训练范式方面的进展：大语言模型内部可能已蕴含可直接激活的内生奖励信号，同时异策略价值学习可通过复用历史轨迹提升训练效率与任务表现。报告将总结相关方法的核心思想、理论依据及发展方向。

A3-3 Efficient Differentiable Robot Learning in the Real World

任云帆，同济大学

摘要：学习型控制器已在敏捷机器人任务上展现出超越经典方法的潜力，但主流范式将仿真器与物理世界视为黑箱，依赖奖励驱动的大规模试错：样本效率低下、稀疏奖励下学习信号匮乏，且策略一经部署便被冻结，难以应对硬件退化、外部扰动等真实世界固有的非平稳性。对机器人学习而言，真正的挑战不仅是在理想化仿真中习得高性能策略，更是以可负担的样本代价获得可靠

的学习信号，并让系统在动态变化的物理世界中持续适应与进化。从这一视角出发，如何将物理模型的结构知识作为可微分的一等公民融入学习过程，用低方差的解析梯度取代黑箱估计，是提升学习效率与真实世界适应能力的关键。本报告以“面向真实世界的高效可微分机器人学习”为主题，围绕可微分仿真中的梯度质量与学习效率、精度敏感任务下的端到端策略学习、物理先验与数据驱动模型的融合、以及真实环境中的在线自适应等核心问题，探讨可能的技术路径与发展方向。同时，结合我们近期在敏捷飞行方向上的探索实践，分享一些阶段性的思考与研究进展。

A3-4 复杂科学系统的强化学习控制——以可控核聚变为例

熊铮，上海创智学院

摘要：诸多科学智能问题涉及复杂系统的演化与智能控制，而强化学习为解决这一问题提供了有力的工具。本报告以托卡马克等可控核聚变装置中的控制问题为例，分享强化学习在聚变智能控制中已经取得的进展、当前面临的挑战，以及交互环境的建模、策略的泛化性对于强化学习落地应用的重要性。

八、分会报告 A4 专题：人工智能与最优化 I、II

组织者：王祥丰、袁坤

报告时段：8月9日10:15-12:15；8月9日13:30-15:30

会场：时段3：会场3，陈瑞球楼107；时段4：会场3，陈瑞球楼107

A4-1 ReasFlow：面向数学优化研究的自主科学发现智能体

袁坤，北京大学

摘要：近年来，大语言模型的发展推动了自主 AI 智能体在科学研究中的应用，但现有自动化科研智能体多集中于经验驱动、易于量化评测的领域，对于需要严格推理、理论证明和领域知识综合的理论型科学发现仍探索不足。本次报告提出ReasFlow，一个面向数学推理驱动科学发现的端到端自主智能体系统，旨在让人类专家与智能体协同开展理论研究。ReasFlow通过内部验证循环提升推理过程的逻辑一致性，并结合自动化知识检索与自我改进机制，主动获取陈述性知识和过程性启发式经验，从而减少人工干预并提高研究可靠性。ReasFlow统一支持文献综述、算法设计、定理证明、实验验证和论文撰写等科研流程。实验表明，ReasFlow 能够基于极简提示自主生成多篇包含严格理论与实证内容的完整研究论文，并在基于 LLM 的评审准则下优于多个开放获取基线系统。

A4-2 面向大语言模型多目标优化的优化器设计

刘晨，香港城市大学

摘要：我们以机器遗忘为例，深入剖析了大语言模型对齐等多目标优化任务中普遍存在的高不稳定性与超参数敏感性问题。为此，我们提出了DualOptim和 DualOptim+两种新型优化框架。首先，DualOptim引入了自适应学习率与解耦动量机制，在图像分类、扩散模型等多种任务中显著提升了机器遗忘的有效性与稳定性。在此基础上，针对大语言模型的特性，我们进一步设计了进阶的 DualOptim+ 架构。通过自适应地管理多个共享或解耦状态，DualOptim+能够动态化解大模型微调过程中，不同阶段、不同程度的多目标梯度冲突。最后，结合显存高效的8-bit量化版本，广泛的实验表明，该系列框架在机器遗忘及真实世界安全对齐任务中，均能在遗忘效能与模型综合效用之间实现更优的权衡。

A4-3 大语言模型辅助的优化通用建模与求解

钱鸿, 华东师范大学

摘要: 优化在现实应用中起着举足轻重的作用, 相较于发展迅猛的优化问题机器求解算法, 优化问题机器自动建模发展较为缓慢, 这主要是由于通用优化问题的定义与建模涉及问题理解、抽象、推理等, 往往高度依赖专家知识与经验, 建模成本高昂。随着大语言模型的快速发展, 其在知识理解与推理方面表现出良好潜质, 是通往优化问题通用机器建模的可行路径之一。有鉴于此, 本报告将汇报大语言模型辅助的优化通用建模与求解工作, 并介绍研究组在这方面的探索工作。

A4-4 Tight Bounds for Logistic Regression with Large Stepsize Gradient Descent in Low Dimension

刘名睿, George Mason University

摘要: We consider the optimization problem of minimizing the logistic loss with gradient descent to train a linear model for binary classification with separable data. With a budget of T iterations, it was recently shown that an accelerated $1/T^2$ rate is possible by choosing a large stepsize $\eta = \Theta(\gamma^2 T)$ (where γ is the dataset's margin) despite the resulting non-monotonicity of the loss. In this paper, we provide a tighter analysis of gradient descent for this problem when the data is two-dimensional: we show that GD with a sufficiently large learning rate η finds a point with loss smaller than $O(1/(\eta \gamma^2 T))$, as long as $T \geq \Omega(n/\gamma + 1/\gamma^2)$, where n is the dataset size. Our improved rate comes from a tighter bound on the time τ that it takes for GD to transition from unstable (non-monotonic loss) to stable (monotonic loss), via a fine-grained analysis of the oscillatory dynamics of GD in the subspace orthogonal to the max-margin classifier. We also provide a lower bound of τ matching our upper bound up to logarithmic factors, showing that our analysis is tight. This work will appear at the Conference on Learning Theory (COLT) 2026.

A4-5 两层神经网络稳态平台的几何刻画

孙若愚，香港中文大学（深圳）

摘要：本文研究具有光滑激活函数的两层神经网络损失景观中稳态平台的几何结构，重点探究“神经元分裂”现象，也就是复制一个隐层神经元后，规模更大的网络中会形成仿射稳态点集合；文中对这类平台上的稳态点开展完备分类，厘清稳态点成为局部极小点或鞍点的条件，相关分析依托一种逐神经元曲率算子——“内海森矩阵”展开，研究表明内海森矩阵的定号性与分裂系数共同决定平台的局部几何特征；我们证明，对局部极小点进行神经元分裂，生成的平台可能同时包含局部极小点与鞍点，也可能完全由鞍点构成，并在温和假设下划定了必然存在鞍点的区域，与之不同，分裂鞍点得到的平台全部为鞍点；上述结论阐释了网络扩容保留或改变稳态点属性的时机与机制，为理解神经网络宽度扩充与重参数化带来的影响提供了几何理论视角。

A4-6 基于(多模态)大语言模型的自动优化建模

李忠，大湾区大学

摘要：自动优化建模作为LLM x 运筹学的代表方向之一，近年来受到了业界和学术界的广泛关注。然而，目前的优化建模社区已有的 benchmarks 的复杂度往往较低（只包含几个到几十个变量和约束），我们将介绍如何构造工业级别的优化建模 benchmark (包含上百万个变量和约束)；除此以外，我们将介绍如何使用Agentic RL来微调 4B 的模型，使其在优化建模上面的表现能够媲美 685B 的 DeepSeek 通用模型。最后，我们将探讨优化建模的一些未来方向，包括多模态优化建模、优化建模的幻觉检测等。

A4-7 正则化深度矩阵分解的损失景观与误差界分析

江如俊，复旦大学

摘要：深度矩阵分解（DMF）是许多应用中的基础模型，其中包括深度线性神经网络。尽管其形式较为简单，正则化 DMF 问题却呈现出高度非凸的优化景观，而这一景观目前尚未被完全理解。在本报告中，我们分析正则化深度矩阵分解的损失景观和局部几何结构。我们刻画所有临界点，并给出判断一个临界点是局部极小点、全局极小点、严格鞍点或非严格鞍点的条件。进一步地，我们建立了临界点集附近的误差界，从而得到基于梯度的方法的线性收敛保证。我们的结果为理解一阶方法为何在正则化 DMF 中表现良好提供了理论解释，并以深度线性网络这一重要应用为例，为其优化行为提供了统一的视角。

A4-8 Lifting Game Solvers into Language Space

李文浩，同济大学

摘要：LLMs are now routinely used as optimizers and search operators, but usually in an ad hoc, prompt-engineering fashion. This talk proposes a systematic alternative: lifting classical game solvers into language space, keeping their iterative structure and equilibrium/fixed-point semantics while binding each numeric primitive to an LLM-realized, verbalized operator. Part A develops the methodology and instantiates it as Prompt-PSRO, where an LLM acts as best-response oracle and a neural equilibrium solver yields a coarse-correlated-equilibrium meta-strategy over prompt populations. Part B lifts probabilistic inference into Verbalized Belief Propagation for multi-agent dialogue, with natural-language messages and explicit message scheduling, evaluated on email scheduling, debate, and fruit-trading tasks. Throughout: LLMs provide semantics, solvers provide structure.

九、分会报告 A5 专题：大模型表征与迁移机制

组织者：刘方辉、闵含城

报告时段：8月9日10:15-12:15

会场：会场8，陈瑞球楼117

A5-1 AdaRoPE：一种自适应的位置编码

李建，清华大学

摘要：旋转位置编码（RoPE）已被广泛应用于Transformer中以编码位置信息，但标准实现会对所有注意力头施加统一的频率调度和缩放因子。通过简化检索任务和长度泛化场景，我们从实验和理论两方面表明，功能角色不同的注意力头需要不同的频率范围和缩放因子才能有效运作。忽视这种结构会导致嵌入维度的利用不够理想，并损害性能，尤其在长上下文设置下尤为明显。为解决这些局限，我们提出了AdaRoPE，它为每个注意力头配备可学习的旋转频率和缩放因子。采用AdaRoPE的预训练大语言模型在性能上持续优于现有的RoPE变体，包括partial-RoPE和NoPE基线。在上下文扩展方面，我们进一步表明，YaRN等方法中使用的统一频率和注意力缩放并非最优。通过应用头特定的缩放，AdaRoPE能够在更好地扩展上下文的同时，在外推设置和长上下文持续预训练设置中更好地保持短上下文性能。这些结果凸显了在单个注意力头层面优化旋转位置编码的重要性。

A5-2 On the Nonlinearity of Learning Rate Scaling for LLM Training

张景昭，清华大学

摘要：Learning-rate transfer can reduce the cost of training large language models: instead of sweeping learning rates at target scale, practitioners extrapolate from smaller runs. Existing approaches often assume that the optimal learning rate follows a log-linear scaling law in data scale and model size. We carefully examine and evaluate this scaling law. In our empirical study of GPT-2--style models from 22M to 707M parameters trained on 5B to 100B tokens, the optimal learning rate develops upward curvature at larger scales, leading to inaccurate extrapolation. We find that this curvature largely disappears when learning rates are replaced by

effective learning rate (the step size in normalized weight space), and when data D extrapolation is used instead of model size N extrapolation. Next, we explain nonlinearity in scaling: weight-norm converges to equilibrium slower when optimal learning is small, requiring a larger step size to reduce the transient phase. Experiments with AdamH, which directly controls the effective learning rate, further support this explanation.

A5-3 Transformer模型的算法学习与发现研究

曹原, 香港大学

摘要: 近年来, Transformer 模型在上下文学习中展现出了显著能力。一个重要观点认为, Transformer 的上下文学习能力可能来源于其在给定上下文中隐式学习并执行某些算法, 从而实现对新任务的快速适应。本报告将围绕“Transformer 模型的算法学习与发现”展开, 重点讨论带有 softmax 注意力机制的 Transformer 如何在上下文学习线性分类任务。我们首先构造了一类多层 Transformer, 并证明其可以在上下文中实现逻辑回归学习: 其中每一层都精确对应于对上下文损失函数执行一步归一化梯度下降。进一步地, 我们展示这类 Transformer 可以通过训练一个单层自注意力模块获得: 该模块以标准梯度下降的一步更新作为监督信号进行训练, 并通过循环应用形成 looped Transformer 模型。我们还将介绍该训练过程的收敛性保证, 以及循环模型在分布外数据上的泛化能力保证。一个尤其有趣的现象是, 尽管模型在训练时受到的是普通梯度下降步骤的监督, 它最终学到的却是归一化梯度下降算法; 并且在所研究的线性分类问题中, 这一被模型“发现”的算法相比作为教师算法的普通梯度下降更加高效。这表明 Transformer 不仅能够模仿训练信号中的算法行为, 还可能在训练过程中发现更适合任务结构的隐式算法。

A5-4 理解神经网络的泛化能力: 从神经切线核到自适应特征

李易诚, 华东师范大学

摘要: 为克服神经切线核框架下“惰性训练”无法解释神经网络特征学习这一缺陷, 本文提出了一个通用的自适应特征模型框架。该框架引入了参数化、可训练的特征映射, 用以模拟真实网络中的特征学习过程。为了量化特征学习的质量, 本文创新性地提出了一种特征误差度量, 通过衡量所学特征与目标函数结构之间的对齐程度, 建立了特征自适应性与泛化性能之间的数学联系。

在此框架下，本文深入分析了两种具有代表性的自适应模型：对角参数化模型与方向参数化模型。研究表明，前者能够根据目标函数的稀疏性结构动态调整特征权重，而后者则通过学习低维子空间来捕捉数据的内在几何结构。两者在训练过程中对特征映射的改进都可以通过特征误差度量得到精确定量。这说明了由梯度下降驱动的隐式正则化效应能使模型自适应地对齐目标函数，从而显著提升泛化性能。

十、分会报告 B1 专题：大模型的预训练

组织者：吴磊、吕凯风

报告时段：8月9日13:30-15:30

会场：会场1，陈瑞球楼100

B1-1 模型越宽，优化真的会越难吗？从矩阵算子范数看神经网络优化器

陆一平，西北大学

摘要：为什么同一种优化器，在小模型上效果很好，但当模型变宽、参数规模变大之后，训练却可能变得不稳定？我们把 AdamW、Muon 等常见优化器统一放到“矩阵算子范数下的最速下降”这个视角中重新理解。进一步地，我们也关心一个更底层的问题：矩阵算子范数，是否真的能够刻画神经网络内部更本质的几何结构，并因此解释不同优化器在宽度变化下的行为差异？我们希望从更底层的几何结构出发，解释优化器为什么会随着模型宽度变化而表现不同。在分析过程中，我们发现，传统的矩阵范数放到深层网络里并不好用，因为它们难以逐层组合，也就很难给出对网络宽度不敏感的稳定性的保证。为了解决这个问题，我们提出了一类均值归一化的算子范数，并基于它构造出更适合宽模型的优化方式，例如重缩放版 AdamW、行归一化和列归一化方法。直观来说，我们是在寻找一种更合理的更新尺度，让每一层在模型不断变宽时依然能够保持训练稳定。进一步地，我们给出了一套更系统的学习率缩放规律，用来说明超参数应该如何随着模型宽度一起变化，这也让小模型到大模型之间的超参数迁移更有依据。我们的理论结果表明，Muon 的平滑性常数在最坏情况下会随着宽度增长到 $O(\sqrt{\text{Width}})$ ，而我们提出的行归一化方法则可以做到对宽度不敏感。基于这些分析，我们进一步提出了优化器 MOGA。在 GPT-2 和 LLaMA 的大规模预训练实验中，我们观察到 MOGA，尤其是行归一化版本，能够取得与 Muon 相当的效果，并且在大 token、低 loss 阶段表现出更高的训练效率。

B1-2 大规模训练中的数据问题

吕凯风，清华大学

摘要：随着预训练规模的持续扩大，高质量数据的获取已逐渐成为主要瓶颈。本次报告将介绍我们团队近期的一系列工作，旨在更系统地理解并应对这一挑战。首先，多 epoch 训练可以提升数据的利用效率，但在出现过拟合之前，我们究竟可以对同一数据进行多少轮有效训练？我们近

期从 scaling law 的角度对这一问题进行了分析。除了简单重复使用数据之外，合成数据也为缓解数据稀缺提供了一条有前景的技术路径。我们将介绍一种简单但在知识注入方面表现突出的数据合成基线方法，并进一步从理论角度探讨合成数据中的若干基本问题。

B1-3 Mano：流形优化与大模型训练

谢泽柯，香港科技大学（广州）

摘要：大语言模型预训练算力成本高昂，优化器是提升训练效率、降低开销的核心模块。现有主流优化器存在明显短板：AdamW忽略参数结构特性，Muon损失曲率信息，传统流形优化也难以适配大模型训练。围绕几何感知流形优化方向，本次报告将介绍近期的三个进展：1）首创流形优化器Mano实现流形优化在大模型训练中的落地，2）迭代Mano2修正空间错位问题、完善自然梯度理论，3）提出与Muon结合的算法TMuon，优化Muon动量冗余缺陷。三类算法均在LLaMA、Qwen3模型上的大规模训练实验中验证有效。

B1-4 迈向高效的大语言模型退火训练：样本选择的一类原则性方法

李忠，微软亚洲研究院

摘要：大语言模型预训练的退火阶段是模型最终收敛并确立质量的关键时期，然而如何在该阶段有效选择训练数据仍是一大挑战。常规策略通常依赖于领域过滤或上下文扩展等经验启发式方法，缺乏基于优化几何动态的原则性依据。针对这一问题，我们通过损失地形的谱几何视角来刻画退火阶段的模型训练，指出优化收敛要求梯度更新满足不同特征方向上的异构约束。为实现这一目标，我们将退火阶段的样本选择重新表述为一个约束受限优化问题。该问题基于Hessian矩阵的谱特性，对各样本梯度施加明确的方向约束，从而识别出符合最优曲率感知的下降路径对应的训练样本，进一步提升模型的收敛质量。

十一、分会报告 B2 专题：大模型基础理论

组织者：刘勇

报告时段：8月8日16:00-18:00

会场：会场7，陈瑞球楼114

B2-1 基于求解器 - 校验器差值的大语言模型自迭代训练动力学理论建模

滕佳烨，上海财经大学

摘要：自提升是大语言模型（LLM）领域一项关键技术，其目标是不依赖外部数据即可提升大语言模型性能。尽管该技术具备重要价值，但学界对大语言模型在自提升流程中性能整体的演化规律，目前研究仍较为匮乏。本文借助求解器 - 校验器差值这一概念，对自提升的训练动力学过程开展理论建模。本文的研究思路源于一项猜想：自提升带来的性能增益，本质来自大语言模型的求解能力与校验能力二者间的差值。依托这套理论框架，我们进一步给出了完整训练轨迹的建模方法。将理论模型拟合实验数据后，该框架可实现对自提升能力上限的量化计算。我们在多款大语言模型与多类数据集上验证了该理论框架的有效性。除纯自提升场景外，本文还拓展分析，在同一框架下探究外部数据会如何影响上述训练动态。值得注意的是，我们发现：在外部数据资源有限的条件下，于训练任意阶段引入外部数据，都不会对模型最终性能造成明显负面影响，这一结论与现有实证观测结果保持一致。

B2-2 从 FlashAttention 看低精度 Transformer 训练失败机理

姚权铭，清华大学

摘要：低精度训练是降低大模型训练成本、提升硬件利用效率的重要路径，也是未来高效大模型系统和专用 AI 芯片适配中的关键技术问题。然而，相比低精度推理，低精度训练需要同时保证前向计算、反向传播和参数更新的稳定性，因而面临更复杂的数值挑战。本报告将以长期困扰 nanoGPT/FlashAttention 训练实践的低精度稳定性问题为切入点，分析误差如何在 Transformer attention 的矩阵乘法、softmax、分块归一化和反向传播过程中传播与放大。报告将说明，低精度训练失败并非简单源于比特数不足，而与 attention 计算结构、kernel 实现路径和训练动态密切相关。相关分析为理解 FlashAttention 训练失败提供了一个典型的机制性解释，也为未来低精度训练算法、混合精度策略和硬件友好 kernel 设计提供参考。

B2-3 大语言模型的无监督校正

孔雨晴，北京大学

摘要：Villalobos 等人 (2024) 预测，公开可用的文本数据将在未来十年内枯竭。因此，在无法获取真实标注 (ground-truth labels) 的情况下提升模型性能变得愈发重要。我们提出了一种无需标注的后处理框架，利用一个虽然较弱但校准效果更好的参考模型，来改进一个性能强大但校准不良的模型。我们的框架能够在不依赖标签的情况下，确保最坏情况下的性能得到严格提升。我们的方法基于对“何时能实现严格提升”这一条件的刻画，即当强模型与参考模型未实现相互校准时。我们对这一条件进行了形式化处理，并将其与经济学中的“无套利” (no-arbitrage) 结果建立了联系。我们证明了该问题可以采用 Bregman 投影作为解决方案，前人研究 (Mohri 等人, 2025) 曾将其应用于语言模型的自我提升。我们将 Bregman 投影实现为一种针对强模型输出的高效后处理算法。在不同规模的代表性大语言模型 (LLMs) 上进行的实验表明，我们的无标注方法显著降低了适当损失 (proper losses) 和校准误差，实现了与有监督基线相当的性能。

B2-4 从机制到鲁棒性看上下文学习理论

李帅，上海交通大学

摘要：上下文学习 (In-context learning, ICL) 使语言和序列模型能够在不更新参数的情况下，通过少量示例推断任务。尽管其在实践中取得了成功，但一个核心的理论问题仍待解答：模型在推理过程中执行的是何种学习算法？其行为在什么情况下是可靠的？在本次报告中，我们提出了一种基于优化的统一视角，用于理解Transformer和Mamba状态空间模型中的ICL。我们首先解释了如何通过改变上下文表征，实现对有效预测目标的可控转移，这一过程与权重更新高度相似。接着，我们展示了Transformer隐藏状态如何隐式携带预测器，并说明注意力层和MLP层如何近似于对深度神经网络参数的梯度下降。这一机制将ICL的理论保证从线性回归扩展到了分类任务和光滑函数类。超越仅依赖注意力机制的模型，我们进一步分析了Mamba-2中结构化状态空间对偶层与线性自注意力之间的对偶关系。单个SSD层即可实现一步梯度更新，而混合SSD-LSA架构则能保留实现多步近似随机梯度下降所需的信息。然而，表达能力本身并不能保证ICL的可靠性。因此，我们研究了位置编码引入的提示顺序敏感性，发现较大的顺序重排会导致预测结果显著变化，而更长的上下文则会减弱固定大小扰动的影响。综上所述，一个完整的ICL理论必须同时

解释模型从提示中学习到什么内容以及其学习过程的可靠性。

十二、分会报告 B3 专题：大模型理论与科学计算

组织者：易鸣洋

报告时段：8月9日10:15-12:15

会场：会场1，陈瑞球楼100

B3-1 基于数理原理的分子科学扩散模型设计举例

刘畅，北京中关村学院

摘要：扩散模型已成为高维数据生成建模的主流框架之一，并正在分子科学研究中发挥日益重要的作用。尽管相关技术发展迅速，现有方法仍未能充分匹配分子系统的独特特征，这在模型框架、训练算法与训练信号等方面都带来了新的挑战与机遇。本报告首先介绍一种扩散模型新框架——商空间扩散模型。它从第一性原理出发，正确地实现了利用分子系统中的对称性减轻模型学习负担的目标。这一目标尽管在包括AlphaFold 3和GeoDiff在内的诸多知名工作中已有尝试，但我们发现它们未能保证生成正确的分布。训练算法方面，我们注意到扩散模型训练损失的最优值并非为零而是个未知的值，这使得训练损失值不能直接反映模型的绝对表现，带来一系列不便。为此，我们设计了有效的最优损失估计方法，使训练损失值变得有意义，并基于由此带来的新观察设计了表现更优的训练调度，同时指出了扩散模型尺度定律应有的形式。最后，我们强调分子科学其实可为生成模型训练提供数据之外的信息来源：物理定律可将目标分布与能量等其他更易获取的物理量联系起来。报告将展示如何利用这些额外信息来突破数据的局限性，从而提升生成模型对分子系统的建模能力。

B3-2 大模型强化学习中的若干问题

易鸣洋，中国人民大学

摘要：强化学习后训练是当前大语言模型的关键技术。本报告从强化学习后训练的可学习性出发，理论上证明后训练的可学习性。进一步地，我们揭示在多智能体场景下强化学习中的“梯度冲突”现象，并基于此提出如何平衡多智能体强化学习中的各个模块。最后，我们讨论一个“免训练”的强化学习算法，通过“Test-time-Scaling”的方式实现从强化学习后训练的目标分布中直接采样。

B3-3 Federated Foundation Models Fine-Tuning with Heterogeneous Compressed Clients

曾锦山，西安交通大学

摘要： Federated learning of foundation models faces a fundamental resource-asymmetry challenge: the institutions holding the most valuable domain-specific data cannot host billion-parameter models. Existing heterogeneous federated approaches attempt to bridge this gap through parameter-efficient tuning, model pruning, or knowledge distillation, yet each trades away a critical property, whether full-model memory reduction, architectural self-containedness, or representational fidelity, leaving the core tension unresolved. We propose FedSLM, a parameter-centric framework for federated fine-tuning with heterogeneous compressed clients. FedSLM uses SVD-based decomposition to produce self-contained client models, whose low-rank subspaces form nested manifolds that are structurally compatible for aggregation. It then applies a two-stage protocol that synchronizes lightweight adapters within compression groups and fuses full-rank reconstructions across groups via structural alignment. Finally, a weak-to-strong elicitation step with auxiliary confidence loss transfers the aggregated knowledge to the full-scale server, while an explicit bias-variance trade-off mitigates compression artifacts. We provide theoretical guarantees for adapter-level aggregation, subspace-alignment bounds for cross-group fusion, and a characterization of how the confidence loss mitigates weak-supervision noise. Experiments on natural language and vision-language benchmarks show that FedSLM outperforms existing federated baselines under both IID and non-IID partitions, while client models operate at roughly 50% of the GPU memory required by the full model.

B3-4 基于模型蒸馏的快速PDE求解方法

邹荻凡，香港大学

摘要： 我们提出了两种基于扩散模型和平均流的快速偏微分方程（PDE）求解方法。第一种是物理信息扩散模型蒸馏（PIDDM），它通过训练后的蒸馏策略在最终生成样本上直接施加PDE约束，

避免了以往方法中因Jensen gap而导致的精度与约束满足之间的折衷，能够实现快速单步生成，适用于正问题和反问题。第二种是时空平均流（Spatio-Temporal MeanFlow），它将连续时间积分器扩展至时空域，将多步数值格式转化为高效的单步预测，并具备可自由控制的积分长度和优异的分布外泛化能力。两种方法均将物理定律直接嵌入其动力学过程，相较于传统求解器在精度和计算效率上均有显著提升。综合来看，这两项工作表明，将物理约束与生成式、连续积分架构相结合，为构建下一代快速且准确的科学计算求解器提供了可行路径。

十三、分会报告 B4 专题：生成式 AI 理论与算法

组织者：胡天阳

报告时段：8月9日13:30-15:30

会场：会场2，陈瑞球楼106

B4-1 超快速扩散生成：图像、语言与前沿挑战

罗维俭，小红书dots大模型

摘要：扩散模型展现出了卓越的生成性能，但其迭代采样过程仍然伴随着较高的计算成本。本次报告首先聚焦于扩散模型的超高速加速方法，包括 Diff-Instruct、Score Implicit Matching，以及它们所代表的分布匹配蒸馏范式。该类方法通过直接匹配预训练扩散教师模型的分布，将其蒸馏为单步或少步图像生成器。我们将介绍其核心原理、理论联系，以及针对不同应用场景所发展出的实用变体。第二部分将回顾连续语言扩散模型的近期进展。这类模型构建于概率空间或词元嵌入空间，为传统的自回归解码提供了一种潜在的超高速、大规模并行建模方案。我们将重点介绍其在模型设计、训练目标和解码方法方面的最新进展，并讨论其在生成质量、推理效率和可扩展性等方面仍然面临的开放挑战。

B4-2 Sampling Acceleration of Diffusion Language Models

李根，香港中文大学

摘要：Diffusion language models (DLMs) have emerged as a compelling alternative to autoregressive (AR) models by enabling parallel, non-sequential token generation. Despite their strong empirical performance, the theoretical understanding of how decoding strategies affect sampling efficiency remains limited. In this talk, we present recent theoretical advances showing that DLM sampling can be substantially accelerated through decoding strategies. We establish convergence guarantees for both uniform and confidence-based decoding strategies. In particular, the iteration complexity depends on information-theoretic quantities that capture the intrinsic complexity of the target distribution. These results provide a theoretical foundation for efficient diffusion-based language generation and offer principled

insights into decoding strategy design.

B4-3 面向自回归生成的序列化表征学习

胡天阳，香港中文大学（深圳）

摘要：GPT范式的成功表明，自回归建模能够通过下一token预测目标学习复杂数据分布。但这一范式天然适合语言等具有序列结构的数据，而更多高维数据（如图像）本身并不存在明确的生成顺序。现有视觉自回归方法通常先以重建为目标学习离散tokenizer，再在冻结的token序列上训练自回归模型。这种两阶段设计隐含“重建最优表征即生成最优表征”的假设，但二者并不一致，导致表征与生成目标之间的系统性失配，从而限制生成效率与质量。本报告围绕这一问题，探索更适配自回归建模的序列化表征学习：包括在tokenizer中显式引入自回归先验以改善可预测性；根据序列信息复杂度调整码本容量以匹配由粗到细的生成结构；以及通过引入独立的前导token，将生成所需的全局信息从重建表征中解耦，从而在不损害重建质量的情况下提升自回归生成性能。总体上，这些结果指向同一结论：提升视觉自回归生成的关键，不仅在于模型本身，更在于学习与因果预测机制匹配的序列化表征结构。

B4-4 Provable Sample-Efficient Transfer Learning Conditional Diffusion Models via Representation Learning

张成，北京大学

摘要：While conditional diffusion models have achieved remarkable success in various applications, they require abundant data to train from scratch, which is often infeasible in practice. To address this issue, transfer learning has emerged as an essential paradigm in small data regimes. Despite its empirical success, the theoretical underpinnings of transfer learning conditional diffusion models remain unexplored. In this paper, we take the first step towards understanding the sample efficiency of transfer learning conditional diffusion models through the lens of representation learning. Inspired by practical training procedures, we assume that there exists a low-dimensional representation of conditions shared across all tasks. Our analysis shows that with a well-learned representation from source tasks, the sample complexity of target tasks can be reduced substantially. Numerical

experiments are also conducted to verify our results.

十四、分会报告 C1 专题：数学智能 AI4Math I、II

组织者：罗涛、王天宇

报告时段：8月8日13:30-15:30；8月8日16:00-18:00

会场：时段1：会场3，陈瑞球楼107；时段2：会场3，陈瑞球楼107

C1-1 基于黎曼优化框架的量子线路设计

赖志坚，北京大学

摘要：面向基态制备的量子线路设计是量子信息科学领域的基础研究问题。然而，标准变分量子算法普遍存在量子线路拟设表达能力有限、优化过程易陷入困境等瓶颈。为突破上述局限，本文从几何视角出发，将量子线路设计问题转化为酉群上的能量函数最小化问题，构建了基于回缩的黎曼优化框架，确保算法各步骤可直接在量子硬件上执行。依托该框架，本文提出黎曼随机子空间梯度投影法（Riemannian Random Subspace Gradient Projection, RRS GP），实现了对现有随机梯度类算法的统一表述。另外，相关几何优化方法多聚焦于一阶梯度下降算法，针对高效二阶算法的系统性研究仍较为匮乏。为此，本文还推导了黎曼 Hessian 的显式表达式，证明其可通过参数平移规则在量子硬件上直接估算。基于此，进一步提出黎曼随机子空间牛顿法（Riemannian Random Subspace Newton, RRS N），该算法为可扩展的二阶优化方法，能够依托测量数据构建牛顿方程。数值实验结果表明，相较于现有一阶算法及标准变分量子算法，RRSN 算法具备二次收敛特性，仅需更少迭代次数即可制备出高精度基态。综上，本工作为将各类高效黎曼优化算法系统性应用于量子线路设计奠定了理论与方法基础。

C1-2 面向开放性数学问题的自动推理与形式化验证

居造成，北京大学

摘要：近年来，大语言模型在数学推理任务中取得了显著进展，但对于开放性数学问题而言，仅依赖自然语言推理仍然面临表达不够精确、证明过程正确性难以系统检查等挑战。本报告介绍一种面向开放性数学问题的自动推理与形式化验证框架。该框架由自然语言推理智能体 Rethlas 和自动形式化智能体 Archon 两部分组成：前者探索证明思路并生成候选证明，后者将自然语言证明转化为 Lean 4 形式化证明。该框架自动解决了交换代数中的一个公开问题，并进一步将所得证明自动形式化为 Lean 4 证明，通过了形式化验证。此外，该框架中的自然语言推理智能体

还解决了多个代数几何、分析和概率领域的公开问题。

C1-3 MechMath Agent Team: LLM Driven Agents for Mathematical Research

刘俊杞, 中国科学院数学与系统科学研究院

摘要: AI reasoning has become a central focus in contemporary artificial intelligence, largely driven by the success of large language models. However, mathematical research, which is characterized by non-linear derivation paths, rigorous logical requirements, and protracted exploration cycles, poses severe challenges for existing reasoning systems. To overcome these limitations, we present the MechMath Agent Team (MMAT), which is a large language model driven agent designed to serve as a co-pilot throughout the full cycle of mathematical research. We design a tripartite Harness Architecture that decouples system responsibilities into Control, Execution, and Augmentation planes, thereby reconciling rigorous logical control with the agility demanded by open-ended research. Building upon this framework, we instantiate three specialized agents: a Knowledge Base Manager, a Natural Language Prover, and a Formal Language Prover, all operating in a closed loop to produce formally certified mathematical proofs. We evaluate MMAT on open problems in Number Theory, Algebraic Complexity Theory, Differential Algebra, Operator Algebra, and Inequalities. Across a two-month deployment, 11 problems have been solved, demonstrating its capacity to act as a co-pilot throughout the entire research cycle. The contributions are threefold: a general decoupled Harness Architecture for multi-agent mathematical reasoning, its concrete instantiation in the MMAT system, and empirical validation on a diverse suite of open problems.

C1-4 Automated Algebraic Reasoning in Lean 4

沈皓, 中国科学院数学与系统科学研究院

摘要: Groebner bases are foundational to symbolic computation, providing systematic algorithms for solving polynomial systems, deciding ideal membership, and transforming abstract reasoning about polynomial ideals into effective computation.

They play a central role in automated algebraic reasoning and computational algebraic geometry. Despite their importance, efficient and formally verified polynomial computation in Lean 4 remains challenging due to the cost of large-scale algebraic operations inside a proof assistant. We present a comprehensive formalization of Groebner basis theory in Lean 4 together with a hybrid, certificate-based approach that combines external computation with internal verification. Computationally intensive tasks such as Groebner basis construction and polynomial remainder computation are delegated to SageMath, which produces explicit computational certificates. These certificates are then rigorously verified within Lean's trusted kernel. To enable scalable certification, we develop a formally verified data structure supporting efficient polynomial identity testing via kernel reduction. Building on this infrastructure, we implement an automated Lean tactic that manages the interaction with SageMath and completes the corresponding proofs without additional user input. The tactic solves a broad class of algebraic goals, including polynomial remainder certification, Groebner basis verification, ideal equality, and ideal and radical membership testing.

C1-5 一个普通数学工作者的 AI 实践

马家骏，厦门大学

摘要：这一两年，AI 和形式化工具在数学中的进展来得很快。AI 系统已经可以达到国际数学奥林匹克金牌水平，也开始参与发现、证明甚至证伪一些有深度的数学猜想；另一方面，在 AI 系统的辅助下，Lean 形式化也在明显加速，从强素数定理的快速形式化，到高维球堆积问题的机器验证，都显示出形式化数学正在进入一个新的阶段。不过，对大多数数学工作者来说，最现实的问题也许并不是“AI 能不能证明重大猜想”，更不是“AI 会不会替代数学家”，而是：这些工具到底能不能进入我们每天的学习、研究和教学？本报告想从一个普通数学工作者的角度，谈谈自己在这方面的一些尝试。报告主要包括三个方面。首先，介绍如何在论文写作过程中同步推进形式化验证；其次，介绍如何借助 AI 编程做计算实验、探索例子和验证数学猜想；最后，讨论数学分支领域形式化基础库的建设：比如已公开的 Computational Economics 形式化库

，并探讨不同数学分支如何逐步建立自己的形式化基础设施。通过这些例子我想说明：AI 与形式化工具并不只属于“AI 证明困难猜想”这样的宏大叙事。它们也可以很具体、很日常地进入普通数学工作者的学习、研究和教学。

C1-6 迈向可靠的 AI4Math：从推理图到长程 Lean 自动形式化

张原赫，University of Warwick

摘要：本报告围绕可靠 AI4Math 展开，介绍近期工作：LeanMarathon 构建多智能体系统，实现研究级证明的长程 Lean 自动形式化。AI4SLT 则面向统计学习理论建立 Lean 4 形式化库。报告旨在展示从机器验证到基础理论库建设的一条技术路径。

C1-7 后AI时代的数学教育与科研人才培养

张继耀，香港中文大学

摘要：随着前沿大模型在知识检索、内容生成与问题求解中的能力持续增强，如何重新界定并培养新时代科研人才，已成为高等教育亟需回应的问题。传统教育长期以专业知识与技能训练为主，但不少学生对知识的实际应用、学科之间的关联及其可能的职业路径缺乏具体理解。面对人工智能对常规知识性工作的重构，人才培养不能仅停留于知识积累与技能训练，而应更加重视学生发现问题、理解场景、判断证据和组织跨学科知识的能力。本报告提出，数学专业人才培养应从跨学科真实问题出发，使学生先理解知识点为何产生、能够解决什么问题及其应用边界，再形成具有明确目标的自主学习路径。在这一意义上，新时代的学习不再只关乎“怎么学”，更关乎“学什么、为何而学，以及如何将所学用于提出和解决真实问题”。

C1-8 形式化规约的评估：基于对抗合成的测试集扩展与化简

刘晓洋，上海交通大学

摘要：报告主要谈谈在人工智能辅助数学与可验证代码生成方向上的一些探索：从规约评估的可靠性瓶颈出发，尝试借助对抗性合成技术，揭示模型的真实能力边界。首先，介绍大语言模型在生成形式化代码规约时的评测现状和评测盲区。其次，讨论我们提出的对抗性测试集扩展框架，展示如何高效生成能够精准暴露规约缺陷的非预期输出。最后，汇报在形式化验证基准上的评测结果，实现对主流大语言模型形式化规约生成能力的精准评估。

十五、分会报告 C2 专题：机器学习与材料计算 I、II

组织者：张露婵

报告时段：8月9日10:15-12:15；8月9日13:30-15:30

会场：时段3：会场4，陈瑞球楼108；时段4：会场4，陈瑞球楼108

C2-1 从薛定谔方程到组分筛选：人工智能驱动的材料设计与发现

王涵，北京应用物理与计算数学研究所

摘要：材料的多尺度计算——从电子结构、原子尺度势函数，到介观组织演化与宏观连续介质力学——长期受制于“维数灾难”：多电子波函数或原子构型空间随体系规模呈指数增长，传统数值方法难以求解。本报告介绍利用深度学习突破这一瓶颈、贯通量子力学到材料设计全流程的系列工作。在原子尺度，团队构建了在数亿量子力学构型（覆盖全周期表、催化/晶体/分子体系）上预训练、并可在实验数据上微调的“原子大模型”（Large Atomistic Model），实现了跨越介观尺度、直接由原子尺度模型预测宏观实验性质的能力。最新的 DPA4 大模型在材料发现权威榜单 Matbench Discovery 上取得最优综合评分，训练成本较同精度模型降低约 43 倍；配合多任务微调算法，在分布外任务上可节省两个数量级的训练数据。团队进一步搭建了“预测-实验-训练”干湿实验闭环，仅需少量新实验数据微调即可将模型误差降低至基线水平以下。上述结果表明，原子大模型已成为加速新型功能材料发现与设计的有效计算工具。

C2-2 机器学习力场，快速算法和材料大模型

徐振礼，上海交通大学

摘要：机器学习原子间势已成为分子模拟领域的一类革命性力场模型，以极低的计算成本实现量子力学精度，并能对大规模系统进行长时程模拟。然而，这类方法通常仅聚焦于局部环境建模，忽视了关键的长程相互作用。我们提出了一种高斯和神经网络（SOG-Net），这是一个轻量级且功能丰富的框架，用于将长程相互作用整合到机器学习力场中，自适应地捕捉多样的长程衰减行为，同时在训练和模拟过程中通过非均匀快速傅里叶变换保持接近线性的计算复杂度。我们将讨论该方法的网络架构，整合随机分批快速算法加速分子模拟，并分享在材料大模型上的应用。

C2-3 Optimization-based energy splitting methods for 2D discrete dislocation dynamics

戴书洋，武汉大学

摘要：Dislocation dynamics is formulated as a typically gradient flow problem and most work solves it as an ordinary differential equation. In this talk, we consider the dynamics of dislocation as an energy minimization problem and introduce new methods to speed up the simulation. The nonsingular stress field theory is used to make sure that the interacting energy between dislocations is finite and computational, and that the two dimensional discrete dislocation dynamics are solved by the conjugate gradient method and the Bergman proximal gradient method.

C2-4 成分复杂合金多尺度模拟：基于有限数据的神经网络异质多尺度方法

任辰扬，香港科技大学

摘要：异质多尺度方法（Heterogeneous Multiscale Method, HMM）为耦合原子尺度物理与连续介质力学提供了严谨的理论框架，但在线分子动力学（MD）模拟的高昂计算成本严重制约了其在成分复杂合金中的应用。神经网络代理模型是一种极具潜力的替代方案；然而，准确的本构学习往往需付出高昂的微观尺度数据生成成本，且在采样应变域之外的外推能力仍不可靠。本工作提出了一种基于神经网络的异质多尺度方法（Neural HMM），通过引入离线训练的可微神经网络代理模型来表征材料的本构响应，从而加速多尺度模拟。该神经网络代理模型在保持训练分布内高精度的同时，显著降低了传统并发耦合方法的计算负担。为减小实际应用过程中的泛化误差，我们进一步通过引入在线自适应机制，发展了自适应神经网络异质多尺度方法（Adaptive Neural HMM）。数值实验表明，与并发 HMM 参考结果相比，本框架能够显著提高计算结果的一致性，同时实现大幅加速。凭借其在线自适应能力，本研究提出的框架为有限数据条件下的合金多尺度模拟提供了一条高效且准确的新途径。

C2-5 基于最优控制视角的终端约束流式生成模型

高卫国，复旦大学

摘要：我们通过最优控制框架，解决了使用预训练的流式生成模型从终端约束分布中采样的问题。在理论方面，我们用 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程刻画了值函数，并将最优反馈控制表征

为对应哈密顿量的极小化子。我们证明，当控制惩罚增大时，受控过程会恢复参考分布；而当惩罚趋于零时，终端分布收敛到约束流形上的广义 Wasserstein 投影。在算法方面，我们提出了终端最优控制流模型（TOCFlow），这是一种面向预训练流的几何感知采样时间引导方法。在跟踪参考轨迹的终端共动坐标系中求解控制问题，可沿黎曼梯度得到一个闭合形式的标量阻尼因子，该因子能在无需矩阵求逆的情况下捕获二阶曲率效应。因此，TOCFlow 以标准梯度引导的计算成本，实现了与 Gauss-Newton 更新相当的几何一致性。我们在三项高维科学任务上评估了 TOCFlow，涵盖等式约束、不等式约束和全局统计约束，即达西流、约束轨迹规划以及具有 Kolmogorov 谱缩放的湍流快照生成。在所有设置中，TOCFlow 在保持参考模型生成质量的同时，其约束满足程度均优于欧几里得引导和投影基线。本研究为与厉茗、李千骁的合作工作。

C2-6 Quantum Algorithms for Young-Measure Relaxations in Continuum and Atomistic Models

张镭，上海交通大学

摘要：We develop quantum algorithms based on sparse Young-measure linear-programming relaxations for nonconvex continuum and atomistic variational problems that exhibit fine-scale oscillations, including microstructure formation, vacancy defects, and chemical disorder. Under suitable assumptions on stability, discretization, and oracle access, the proposed quantum methods offer a potential advantage for disorder-averaging problems, such as those arising in random alloys. Numerical experiments support the validity of the quantum linear-programming framework.

C2-7 功能材料可解释组分优化与晶体生成方法研究

黄阳，中国科学技术大学

摘要：本研究以自适应迭代学习框架作为底层支撑，围绕功能材料可解释组分优化与微观晶体智能生成两大核心方向展开系统研究。研究构建成分加权符号回归模型，挖掘并推导材料组分与物理性能之间的显式关联规律，完成给定目标物性约束条件下的材料组分逆向优化设计；搭建晶体生成架构，该架构仅依靠化学式输入，便可自动化生成结构稳定的微观晶体构型。

C2-8 Discrete Mean-Field Games on Graphs as Finite-Dimensional Initial-Value

Optimization: A Neural Network Method

冯雅昕, 香港科技大学

摘要: In this work, we propose an initial-value formulation of discrete mean field games on finite graphs (Graph MFG) and design a neural network-based solver. Graph MFG describes an infinite number of non-cooperative, interacting homogeneous agents moving between node states via edges to optimize their respective goals. The Nash equilibrium of a Graph MFG is characterized by a coupled ordinary differential equation (ODE) system, comprising a forward continuity equation and a backward Hamilton-Jacobi equation at each node of the graph. We focus primarily on the potential mean field games (Potential MFG) on finite graphs, which features an infinite-dimensional constrained optimization structure. We reformulate Potential MFG as an initial-value, finite-dimensional optimization problem with dynamic constraints, named Graph MFG-IV. Specifically, the initial condition of the Hamilton-Jacobi equation is treated as the sole variable, constrained by a system of coupled Hamilton-Jacobi and continuity equations that serves as an ODE integrator. This finite-dimensional reformulation avoids time-discretization of infinite-dimensional paths, and has a much smaller search space than the general pathwise problem setting.

十六、分会报告 C3 专题：基于模型降阶的机器学习方法与理论

组织者：王东、刘皓

报告时段：8月8日16:00-18:00

会场：会场4，陈瑞球楼108

C3-1 数据驱动的偏微分方程识别

何雨晨，香港城市大学

摘要：从单条带噪声的时空轨迹中识别偏微分方程（PDE）是一项具有挑战性的任务。尽管近期研究发现弱形式能有效处理噪声带来的不稳定性，本报告将介绍一种基于微分特征的强形式方法 S-IDENT，它能够识别更一般的线性及非线性 PDE。我们将结合噪声自适应的微分算子，在保证精度阶数的同时实现低方差，并利用截断（trimming）和残差递减（reduction-in-residual）模型选择来稳定识别过程。数值实验表明，S-IDENT 能在比现有强形式方法更高的噪声水平下识别非线性 PDE，且效果可与弱形式方法相当。

C3-2 Enhancing Future Prediction of Linear and Nonlinear Reduced-Order Models for Transport-Dominated Problems Using Lagrangian Data

彭志超，香港科技大学

摘要：Designing effective reduced-order models (ROMs) for parametrized transport-dominated problems remains challenging because of the well-known Kolmogorov barrier. Autoencoder-based nonlinear ROMs have been developed to improve the compression ability for such systems. However, despite their stronger compression ability, autoencoder-based ROMs constructed in the Eulerian frame may fail to accurately predict future solutions, due to the poor coherence between historical and future solutions in the Eulerian frame. In contrast, we show that representing transport-dominated dynamics in the Lagrangian frame can lead to a significantly faster decay of the Kolmogorov n -width and improve coherence between historical and future solutions. Building on these insights, we develop two non-intrusive ROMs leveraging Lagrangian data: a Lagrangian autoencoder-based ROM

and a Lagrangian parametric dynamic mode decomposition. Numerical experiments demonstrate that these Lagrangian ROMs achieve more accurate and stable future predictions than their Eulerian counterparts.

C3-3 基于神经网络的函数型数据分析

樊军, 香港浸会大学

摘要: 神经网络不仅善于逼近函数, 其能力更可延伸至无限维输入下的非线性函数型回归。我们提出一种函数型神经网络架构, 由自适应核嵌入、特征函数投影及深度ReLU网络预测三部分组成。我们给出了相应的收敛速率与泛化分析理论结果, 并通过实验验证了该方法的有效性。

C3-4 Towards Understanding & Improving Flow Matching

王超, 南方科技大学

摘要: Classifier-free guidance (CFG) is a widely used technique for controllable generation in diffusion and flow-based models. Despite its empirical success, CFG relies on a heuristic linear extrapolation that is often sensitive to the guidance scale. In this work, we provide a principled interpretation of CFG through the lens of optimization. We demonstrate that the velocity field in flow matching corresponds to the gradient of a sequence of smoothed distance functions, which guides latent variables toward the scaled target image set. This perspective reveals that the standard CFG formulation is an approximation of this gradient, where the prediction gap, the discrepancy between conditional and unconditional outputs, governs guidance sensitivity. Leveraging this insight, we reformulate the CFG sampling as a homotopy optimization with a manifold constraint. This formulation necessitates a manifold projection step, which we implement via an incremental gradient descent scheme during sampling. To improve computational efficiency and stability, we further enhance this iterative process with Anderson Acceleration without requiring additional model evaluations. Our proposed methods are training-free and consistently refine generation fidelity and robustness to the guidance scale.

十七、分会报告 C4 专题：物理问题驱动的机器学习算法

组织者：印佳、李颖洲

报告时段：8月8日13:30-15:30

会场：会场4，陈瑞球楼108

C4-1 数据驱动算法在分子模拟中的应用

苏茂，上海人工智能实验室

摘要：分子模拟用于研究物质的结构、相行为和动力学等问题，已经成为了物理、化学、材料等多个领域不可或缺的研究手段之一。分子模拟的准确度取决于原子间相互作用势函数或力场。机器学习势函数通过人工智能算法来拟合第一性原理级别的势能和受力信息，可以兼顾精度和速度，已经引起了广泛关注。然而，高性能的机器学习势函数依赖大量的第一性原理计算用于标注训练数据，训练集采样不够充分将导致机器学习势函数在测试集上的精度急剧下降，进而导致模拟的崩溃。我们提出了一系列人工智能新算法，包括自监督学习、不确定度量化等，致力于更加高效地获取数据以及提升数据利用效率，有利于促进高精度分子模拟方法在更多实际问题中的应用。

C4-2 奇性编码的格林函数及其在加速迭代法中的应用

孙琪，同济大学

摘要：格林函数是连接椭圆型偏微分方程理论分析与数值方法之间的核心桥梁，然而其解析表达式普遍缺失，因此构建算子学习模型以指导高效求解器的设计显得尤为重要。然而，格林函数因其高维特性及内在奇性，对数值模拟带来极大挑战。针对上述问题，本文提出了一种奇性编码学习方法，旨在以无监督学习的方式实现格林函数的高效求解。该方法通过将格林函数的先验估计作为增广变量进行编码，将其嵌入至高维空间以提升正则性，并结合神经网络无惧维数灾难的特点在升维空间中进行求解。通过将训练所得的神经网络解投影回原始物理域，格林函数代理模型所具备的谱偏特点使其既可作为预条件子，亦可嵌入混合求解器框架来加速传统迭代格式。方法的有效性在二维及四维格林函数的数值实验中得到了验证，不仅能够精准处理奇异性，且能显著提升迭代求解器的收敛效率。

C4-3 材料逆向设计算法和软件介绍 (Con-CDVAE, PODGen)

吴泉生, 中国科学院物理研究所

摘要: 材料逆向设计以目标性能为约束, 直接生成满足需求的候选晶体结构, 是人工智能推动材料发现的重要技术。本报告介绍Con-CDVAE与PODGen两种条件生成算法及软件, 重点阐述其在晶体结构生成、目标性质控制、多目标优化和候选材料筛选中的基本原理与实现流程, 并结合第一性原理计算验证生成材料的稳定性与目标性能。同时比较两种方法在条件控制方式、模型迁移能力、训练成本和生成效率等方面的特点, 展示其在功能材料和拓扑材料自主发现中的应用潜力。

C4-4 面向强关联分子体系的可扩展神经网络选择组态方法

阚博文, 中国科学技术大学

摘要: 量子多体计算受困于组态空间的指数膨胀。本报告介绍 QiankunNet-SCI: 以高度并行的耦合计算精确评估局域能量, 并以自适应 Selected CI 集合动态管理海量组态, 在保持高精度的同时显著提升可扩展性与计算效率。QiankunNet-SCI 进一步引入生成式 Transformer, 借助自注意力捕捉长程关联、高效采样关键组态, 相较其他先进神经网络方法提升最高约 10 倍加速, 并能发现传统耦合易遗漏的高阶激发。对强关联FeS体系, 能量达化学精度内的 DMRG 基准。QiankunNet-SCI 为高性能平台上的高精度量子化学提供了可扩展路径。

十八、分会报告 C5 专题：神经科学与人工智能交叉

组织者：李松挺、周栋焯

报告时段：8月8日16:00-18:00

会场：会场5，陈瑞球楼109

C5-1 Shaping Sequence Attractor Schema in Recurrent Neural Networks

弭元元，清华大学

摘要：序列图式是抽象、可复用的知识结构，能促进新序列任务中的快速适应与泛化。塑造通过由简至繁的子任务渐进训练，是获取复杂序列图式的有效方式，但其神经动力学机制尚不清楚。本研究采用实验神经科学成熟范式，在气味序列任务中训练递归神经网络，复现了眶额皮层在图式学习中的关键特征：对新任务的快速适应、神经表征的结构化几何及学习过程中的维度压缩。分析表明，所学图式由序列吸引子实现，其动力学在塑造中逐步演化：从简单任务中的离散吸引子发展为链接序列，最终形成能捕捉共享任务结构的泛化吸引子。本研究揭示了一种基于吸引子的机制，阐明了图式通过塑造的动态演化过程，为理解生物与人工智能中抽象知识的获取提供了新视角。

C5-2 预测学习中认知地图的形成：网络架构如何塑造神经表征

陈语思，中国科学院脑科学与智能技术卓越创新中心

摘要：认知地图（Cognitive Map）是大脑对外部世界抽象关系所形成的稳定内部表征，是导航、记忆和推理等高级认知功能的重要基础。近年来，越来越多的研究表明，仅通过预测未来感觉输入或未来状态，人工神经网络便能够自发形成与大脑神经活动相似的表征结构。然而，真实脑区中的表征形式并非统一存在：海马和内嗅皮层往往表现出高度结构化的世界表征，而早期感觉皮层的神经活动则更加随机；即使在海马内部，CA3和CA1也呈现出显著不同的稳定性和学习动态。不同物种之间，认知地图的表现形式同样存在明显差异。这些现象提出了一个核心问题：在相同任务目标下，为何不同脑区和不同生物系统会形成截然不同的内部表征？本报告将从预测学习的视角出发，系统探讨一些常见的生物学网络特性将如何塑造认知地图。结合数值模拟与理论分析，我们发现，较小的权重初始化、更深的网络层级以及更强的表征噪声，均会引入偏向低维、稳定且与未来预测相关特征的归纳偏置，从而促进更加压缩和结构化的任务表征；相比之下，

采用局部学习规则时，网络更容易形成随机化和分散化的内部表征。进一步分析发现，随机表征虽然学习速度快、适应性强，但只能处理有限复杂度的任务；结构化表征则具有更好的稳定性和跨任务泛化能力，能够捕捉不同任务之间共享的抽象关系。这些结果为理解不同脑区和不同物种中认知地图的多样性提供了统一的理论框架，也揭示了神经网络和人工智能系统中训练机制与网络架构所隐含的归纳偏置（inductive bias）如何共同塑造内部世界模型的形成。

C5-3 脑-智双向驱动类脑智能计算

马征宇，北京大学

摘要：大脑强大的信息处理能力源于其高效的网络结构与动力学机制。解析并借鉴这些机制，已成为连接脑科学与人工智能、实现智能突破的关键路径。本报告立足于“人工智能赋能脑网络动力学定量解析”与“脑机制启发脉冲网络模型构建”的双向闭环视角，汇报相关研究进展：一方面，利用物理模型、脉冲网络与机器学习交叉方法定量解析神经网络动力学，揭示脑网络信息处理的底层机理；另一方面，受脑网络结构与动力学机制的启发，从树突启发的脉冲神经元、脉冲注意力及高效训练算法等层面，发展高效深度脉冲网络模型。在此基础上，通过软硬件协同设计，兼顾高仿真度与高计算效率，推动脑科学与人工智能的双向赋能与协同进化，并探讨当前面临的挑战与未来方向。

C5-4 Why Neural Codes Drift: Coordinated Dynamics and Replay-Based Continual Learning

秦山山，上海交通大学

摘要：A central paradox in neuroscience is that behavior and memories stay stable despite representational drift—the continuous reconfiguration of neural population codes for familiar stimuli. This talk integrates two studies using artificial neural networks as normative models of drift. First, Hebbian/anti-Hebbian models show that drift arises from noisy synaptic dynamics within a degenerate solution space: receptive fields undergo a coordinated random walk that causes single-unit turnover while preserving population-level representational similarity, recapitulating observations in hippocampus and posterior parietal cortex. Second, comparing continual-learning algorithms reveals drift as a signature of weight-free rehearsal

(replay), whereas weight-anchoring methods like Elastic Weight Consolidation freeze representations and suppress it. Together, these findings suggest drift is an observable fingerprint of the brain's learning strategy-pointing to memory maintenance through ongoing rehearsal rather than synaptic rigidity, and marking drift as a structured feature of flexible, continually learning systems.

十九、分会报告 C6 专题：神经算子学习

组织者：黄政宇、郭汝驰

报告时段：8月8日13:30-15:30

会场：会场5，陈瑞球楼109

C6-1 Guided Flow Matching for Forward and Inverse PDE Problems with Sparse

Observations

赵进，首都师范大学

摘要：Reconstructing partial differential equation (PDE) solutions from sparse observations remains a core challenge in scientific computing. We present FM4PDE, a flow-matching generative framework that learns the joint distribution of PDE inputs (coefficients/initial states) and outputs (solutions/final states), enabling both forward simulation and inverse recovery in a single unified framework even with limited paired training data. At inference, sampling is guided by a composite loss enforcing both measurement agreement and PDE residual minimization, with support for deterministic, stochastic and hybrid samplers. We provide rigorous theoretical error guarantees for all sampling paradigms. Experiments on static and time-dependent PDE benchmarks demonstrate competitive accuracy and significantly faster inference than diffusion-based models.

C6-2 从材料微结构到宏观本构：非弹性均匀化的算子学习

曹梁皓，加州理工大学

摘要：本报告讨论如何用算子学习建立非弹性异质材料的跨尺度本构模型。对于这类材料，宏观本构关系（constitutive laws）通常需要通过代价较高的微观胞元计算获得，并同时受到材料微结构和加载历史的影响。我们考虑用数据驱动的代理模型替代在线微观计算，以提高宏观材料响应模拟的效率。报告将介绍一种基于内变量（internal variables）的神经算子框架。内变量用于记录材料的加载历史，神经算子则用于学习微结构相关的均匀化本构响应。在理论方面，我们以周期 Kelvin-Voigt 黏弹性材料（viscoelasticity）的均匀化问题为例，证明了相应的通

用逼近定理 (universal approximation theorem)，并给出了内变量维数的显式上界，解释了模型复杂度如何随目标精度和材料反差 (material contrasts) 变化。最后，报告将结合黏弹性和晶体塑性 (crystal plasticity) 数值算例，讨论内变量维数和样本量对学习效果的影响。

C6-3 RealPDEBench: 整合真实物理测量与配对模拟数据的神经算子基准

吴泰霖，西湖大学

摘要：预测复杂物理系统演化是科学和工程的关键挑战。尽管神经算子模型进展迅速，但现实数据昂贵且稀缺，致使大多数方法依赖数值模拟数据进行训练与验证。我们提出RealPDEBench——首个融合真实测量与配对模拟数据的科学机器学习基准，涵盖5个数据集（含700余条长周期轨迹）、3项任务、8个评估指标及10个基线模型。实验发现，模拟数据与真实数据之间存在显著差异，而基于模拟数据的预训练能够稳定提升模型的准确性与收敛速度，并详细分析不同神经算子在不同任务上的表现。我们期望RealPDEBench能推动未来神经算子方法的研究，加速其向弥合模拟-现实差距及实际部署迈进。同时基于此，我们正在主办NeurIPS 2026 RealPDE比赛 (<https://realpdecompetition.github.io/>)，分PDE Sim-to-Real和Long-Term Test-Time Adaptation两大赛道，21000总奖金池，欢迎想在这些全新重要问题上开发新方法的师生参与。

C6-4 一种连接学习与迭代的warm-basis方法：以荧光分子断层成像为例

姜嘉骅，上海科技大学

摘要：荧光分子断层成像 (Fluorescence Molecular Tomography, FMT) 是生物医学研究中广泛使用的一种非侵入式光学成像技术。然而，FMT 在深度方向的重建精度方面通常面临显著挑战；即使采用先进的正则化方法，传统迭代算法仍然容易受到低分辨率问题的限制。监督学习方法能够提高重建精度，但通常依赖大量高质量的成对训练数据，而这在实际应用中往往难以获得。因此，一个自然的问题是：如何将学习方法与迭代格式有效结合，从而构造更加精确且稳定的重建算法。在本文中，我们提出了一种新的 warm-basis 迭代投影方法 (warm-basis iterative projection method, WB-IPM)，并建立了其理论基础。该方法相比单纯基于学习的方法和传统迭代方法，能够实现显著更高精度的重建。此外，该方法允许使用一种更弱的损失函数，该损失函数仅依赖于真实解与神经网络输出之差的方向分量，从而大幅降低训练成本。我们的误差分析以及数值模拟和真实数据实验共同验证了这些优势。

C6-5 Flow-based Bayesian filtering for high-dimensional nonlinear stochastic dynamical systems

王欣童, 同济大学

摘要: Bayesian filtering for high-dimensional nonlinear stochastic dynamical systems is a fundamental yet challenging problem in many fields of science and engineering. Existing methods face significant obstacles: Gaussian-based filters struggle with non-Gaussian distributions, while sequential Monte Carlo methods are computationally intensive and prone to particle degeneracy in high dimensions. Although generative models in machine learning have made significant progress in modeling high-dimensional non-Gaussian distributions, their inefficiency in online updating limits their applicability to filtering problems. In this talk, we will present a flow-based Bayesian filter (FBF) that integrates normalizing flows to construct a novel latent linear state-space model with Gaussian filtering distributions. This framework facilitates efficient density estimation and sampling using invertible transformations provided by normalizing flows, and it enables the construction of filters in a data-driven manner, without requiring prior knowledge of system dynamics or observation models. Numerical experiments demonstrate the superior accuracy and efficiency of the FBF method.

二十、分会报告 C7 专题：Generative AI4Science

组织者：王涵

报告时段：8月9日10:15-12:15

会场：会场2，陈瑞球楼106

C7-1 基于机器学习与物理机制的材料可合成性研究

巨明刚，东南大学

摘要：在现代化实验室中，一场深刻的变革正在悄然发生。合成化学家们正在逐步告别传统“试错法”，转而拥抱理论计算与人工智能算法带来的精准预测能力。这一转变正在重塑合成化学的基本范式——从基于经验直觉的经验科学，转变为基于数据和算法的精准科学。无机材料的合成是一个涉及大量原子、结构和相的相互作用的复杂过程，目前缺少普适规则，加之温度、反应时间等多参数耦合影响，研究者往往陷入“经验试错”的困境。常规实验室受限于资源约束和变量控制难度，全面探索实验参数组合犹如大海捞针，导致新材料研发周期动辄以年计。计算能力的飞跃与机器学习技术的突破为这一困局带来转机。通过融合热力学/动力学机制、理论计算与机器学习技术，合成化学家能够深入理解材料合成过程并优化实验流程与参数。目前，机器学习在钙钛矿的设计和筛选方面取得了显著进展，大大促进了新型钙钛矿材料的发现。然而，相较于性质和结构的预测，材料可合成性的预测更为复杂，导致许多理论上预测的新材料在实验中无法实现。在典型实验室环境中，如何优化实验合成条件以加速新材料的实现成为一个亟待解决的基本挑战。本报告主要介绍两个主要方面的工作：1) 基于机器学习算法的材料可合成性预测；2) 结合机器学习势与增强采样的钙钛矿材料成核与生长研究。

C7-2 自由能极小：从大自然到大语言模型

王磊，中国科学院物理研究所

摘要：本报告将从自由能极小这一基本原理出发，介绍生成式人工智能应用于物质科学研究的新进展。通过若干实例，我将讨论一系列迷人的跨学科联系：语言模型与化学直觉，强化学习与变分优化，流模型与准粒子。

C7-3 材料科学数据构建和智能体介绍和思考

吴泉生，中国科学院物理研究所

摘要：材料科学正加速迈向数据驱动与智能化研究新范式。本报告将介绍MatElab、MaterialsGalaxy和VASPilot等平台在科研数据采集、标准化管理、知识关联、高通量计算及自动化模拟中的功能与实践，讨论如何构建可追溯、可复用、机器可读的材料科学数据体系。在此基础上，结合Codex等通用智能体的发展，进一步思考领域专用智能体的发展方向。

C7-4 数据驱动的晶体结构预测方法

吕健，吉林大学

摘要：Crystal structures are key to deeply understanding the various physical and chemical properties of condensed matter, and they also form the basis for theoretical materials modeling, simulations and discovery. Theoretical crystal structure prediction of materials, given only their chemical compositions, is crucially important. However, this task is extremely challenging as it involves identifying a vast number of energy minima on the lattice energy surface. In this report, I will first provide a brief introduction to the CALYPSO structure prediction method. Following that, I will detail our recent advancements in accelerating structure prediction through data-driven approaches, such as machine learning potentials and generative models. Through several benchmark and practical applications, we demonstrate that data-driven approaches are heralding a new era in crystal structure prediction.

二十一、分会报告 C8 专题：AI 赋能材料仿真 I、II

组织者：陈景润、孙羿斐

报告时段：8月9日10:15-12:15；8月9日13:30-15:30

会场：时段3：会场5，陈瑞球楼109；时段4：会场8，陈瑞球楼117

C8-1 Prescribed-Basis Coefficient-to-Coefficient Neural Operator for Partial Differential Equations

项阳，香港科技大学

摘要：Operator learning provides a data-driven approach for approximating solution operators of partial differential equations. A central issue in neural operator design is the representation of input and output functions. Pointwise discretizations often lead to mesh-dependent, high-dimensional neural network inputs and outputs, whereas available data-adaptive reduced bases require aligned snapshots and potentially expensive basis construction. We propose the Fixed-Basis Coefficient-to-Coefficient Network (FB-C2CNet) with prescribed bases serving as function encoder and decoder, a neural operator framework that learns PDE solution maps in fixed, data-independent approximation spaces. By separating basis selection from network training, FB-C2CNet avoids both neural basis learning and snapshot-based basis extraction, reduces the dimension of the trainable map, and substantially lowers the training cost. Numerical experiments on elliptic, nonlinear time-dependent, weak-solution, high-dimensional, and inverse Stokes boundary-recovery problems show that FB-C2CNet achieves competitive accuracy with significantly reduced training time, especially for high-resolution and irregularly sampled data.

C8-2 一种用于偏微分方程深度求解器的多层次深度框架

贺巧琳，四川大学

摘要：受多重网格法启发，提出了一种用于深度求解器的多层次深度框架。总体而言，该方法将整个训练过程划分为不同的训练层次。在每一层训练中，首先采用本文提出的一种自适应采样方法获取新的训练点，使这些点逐步集中于对应高频分量的计算区域。随后，利用深度神经网络的泛化能力，基于之前所有层次的训练结果，更新用于下一层训练的偏微分方程。严格的数学证明和详细的数值实验验证了所提方法的有效性。

C8-3 瀚海量子材料模拟智能体

胡伟，中国科学技术大学

摘要：大语言模型（Large Language Models, LLMs）在辅助科学发现领域展现了巨大潜力，然而其在材料科学中的深入应用仍受制于材料结构表征难、领域数据稀缺、人工介入成本高以及物理可解释性不足等关键挑战。如何有效桥接LLMs的逻辑推理能力与计算材料学的精确性，是当前“AI for Science”领域亟待解决的核心课题。为了突破上述局限，本研究提出了一套从提示工程优化进阶至全流程自动化多智能体协同的系统性框架[1]。我们在方法论上实现了两个维度的创新：一是开发了多类集成提示工程策略，利用思维链（Chain of Thought, CoT）技术激发LLMs在化学场景下的推理潜能，有效解决了领域知识注入与幻觉抑制问题；二是构建了闭环式的自主多智能体架构。该架构以LLM为核心，无缝集成了如支持高并行PWDFT（plane-wave density functional theory）[2]计算引擎与Python解释器等外部工具，形象地赋予了智能体“手”与“眼”的功能。在此架构下，智能体不仅能够精准理解自然语言描述的科学问题，更能零人工干预地自动执行涵盖晶体结构正交化、输入文件生成及实时属性计算的全流程操作。实验结果表明，该智能体在大幅降低计算门槛的同时，兼顾了预测结果的物理精确性，证明了将领域知识、计算工具与大模型推理深度融合，是加速材料性质预测与科学探索的有效途径。

C8-4 复杂域上偏微分方程的两级随机特征方法

孙羿斐，中国科学技术大学

摘要：偏微分方程广泛用于科学与工程问题，但复杂解或复杂区域会显著增加传统数值方法在近似空间构造和网格生成上的成本。随机特征方法（RFM）无需网格，适合复杂区域，但在高复杂度问题中会产生大规模线性系统。本文提出一种用于椭圆型 PDE 的两级 RFM。该方法先将复杂

区域按其包围盒坐标平面分解，在各子区域上使用局部随机特征求解小规模问题，并仅在相邻子区域间传递神经网络输出层权重，作为复杂解的压缩表示，从而具备良好的并行性。随后，在细粒度局部问题和粗粒度全局问题上分别进行 QR 分解，并在迭代中复用，以较少迭代实现全局收敛。三维泊松方程、多尺度椭圆方程和弹性问题的数值实验表明，该方法在不牺牲精度的前提下显著降低计算成本，可在约 100 秒内求解具有复杂解和/或复杂区域的问题，表现出良好的效率和鲁棒性。

C8-5 偏微分方程的随机神经网络方法

王飞，西安交通大学

摘要：偏微分方程数值求解是科学计算的核心问题。传统数值方法具有严格的数学理论基础，在精度、稳定性和结构保持方面优势明显，但在高维、复杂几何、多尺度耦合、界面问题以及多查询参数化场景中，仍面临网格依赖强、自由度规模大、重复求解代价高和快速适应能力不足等瓶颈。神经网络方法具有灵活表征能力，但通常依赖非线性非凸优化，存在训练成本高、稳定性不足和误差可控性较弱等问题。本报告围绕随机神经网络方法，介绍其在偏微分方程求解与算子学习中的若干进展。随机神经网络固定隐藏层随机参数，仅求解输出层权重，可将训练转化为线性系统或最小二乘问题，从而兼具神经网络的表达能力和传统数值方法的可分析性。基于这一思想，我们发展了 RaNN-Petrov-Galerkin、局部 RaNN-DG、局部 RaNN-HDPG、局部 RaNN-有限差分、自适应生长 RaNN、自适应分布 RaNN、Schwarz 预条件 RaNN、多尺度 RaNN、无界域近远场耦合 RaNN 以及随机神经算子等方法，实现随机特征空间与弱形式、区域分解、DG 格式、混合化结构、有限差分、界面条件和算子学习框架的深度融合。数值结果表明，随机神经网络方法在较少自由度下即可实现高精度求解，并在复杂界面、高维问题、多尺度问题、结构保持问题、无界域问题和参数化算子学习中展现出良好的效率、稳定性和扩展潜力。总体而言，随机神经网络方法为融合传统数值分析与现代机器学习、构建误差可控、结构保持、高效可扩展的学习型科学计算方法提供了一条有前景的新路径。

C8-6 隐身材料中波传播模型的有限元方法与可制造设计

王唯，中国科学技术大学

摘要：隐身材料对国防科技至关重要，但其研发受制于高性能要求与极端工艺带来的实验难题。高保真数值模拟是破解该瓶颈的关键。本报告围绕波传播模型，开展相关有限元方法与可制造设

计研究。在时域建模中，针对外隐身超材料构造了无条件稳定全离散格式，数值揭示能量聚集现象。针对静态隐身中的跨尺度、奇异性及多场耦合等困难，建立变分框架，提出GSTC自适应有限元、TFSF源变分、无奇异参数及阻抗界面等方法，并推广至声波与电热双场。面向制备现实，发展分层设计理论和梯度自适应分层策略，实现电热双功能斗篷的自然材料设计；建立多层膜选择与厚度联合优化模型，融合强化学习与传输矩阵，实现大库自动化设计。针对非线性隐身，构建变换热学完整框架，设计自适应有限元算法并严格证明牛顿迭代局部二次收敛；提出Kerr介质修正有限元与基于Cardano公式的显式格式，彻底消除不稳定性且效率提升逾4倍，成功模拟孤子动力学。上述工作形成了从机理到工程的完整链条，为隐身材料智能化设计提供了数学基础与高效计算工具。

C8-7 Finding Navier-Stokes equations from Boltzmann equation with the data driven method

王艳莉，北京计算科学研究中心

摘要：Navier-Stokes (NS) equation is one of the most important governing equations in the macroscopic regime. However, it fails in the transition regime when the Knudsen number is large. The Boltzmann equation, as one of the most important governing equations in the mesoscopic regime, is a bridge between the macroscopic and microscopic perspectives. In this work, a data-driven machine learning method is proposed to find an extended NS equation from the Boltzmann equation, where an extra numerical flux of the extended NS equation is learned from the numerical flux of the Boltzmann equation. Besides, a special neural network is designed to keep Galilean invariance, and the technique of layer normalization is utilized to reduce the computational cost. Several numerical examples, including the 1D3V wave and sod problem, and 2D3V isentropic vortex problem, and Taylor-Green vortex problem, are studied to validate the efficiency of this new extended NS equation.

C8-8 关于非线性梯度流计算的JKO方案

魏朝祯，电子科技大学

摘要：本报告将介绍一种基于最小运动格式（minimizing movement scheme，亦称JKO格式）的新型数值方法，用于求解一类广泛出现于材料科学与生物学中的梯度流问题，包括多孔介质流、肿瘤生长、相分离、晶体缺陷迁移以及表面扩散驱动的动力学等。利用系统内在的变分结构及其与最优输运理论之间的密切联系，我们构造了一类保结构的全离散JKO格式，并将每个时间步转化为一类具有线性约束的凸优化问题，进而采用提出的原始-对偶算子分裂方法进行高效求解。该方法内在保持解的严格正性或上下界约束，同时满足质量守恒与熵耗散性质，并能够有效克服强非线性和退化性所引起的数值稳定性问题。这一JKO计算框架还可进一步推广至交叉扩散系统和混合度量梯度流系统。报告中将展示一系列数值模拟结果，以说明该方法的有效性与广泛的适用性。

二十二、分会报告 C9 专题：深度学习与复杂非线性系统：算法与应用

组织者：毛志平

报告时段：8月8日13:30-15:30

会场：会场6，陈瑞球楼110

C9-1 基于机器学习的天体流体力学快速求解方法

董若冰，北京大学

摘要：探索行星形成过程不仅有助于理解地球及其生命的起源，也为寻找地外生命提供关键线索。行星形成于原行星盘中；原行星盘是围绕新生恒星旋转、由气体和尘埃组成的扁平盘状系统，尺度可达数千亿公里。原行星盘是一个由流体力学和引力等物理规律控制的复杂系统。通过数值模拟这些物理规律，并与观测图像比较，天文学家可以研究行星如何形成。然而，传统数值模拟计算代价高，限制了大规模参数探索和观测反演。本报告介绍我们针对这一问题发展的机器学习替代方法。首先，我们利用深度算子网络（Deep Operator Network）学习从物理参数到流体力学偏微分方程解的映射，从而快速预测原行星盘中的密度结构和速度场，并进一步从观测到的盘结构中反演潜在行星参数。该方法显著降低了正问题求解和反问题推断的计算成本。其次，我们探索了物理信息神经网络（PINN）在原行星盘二维可压缩流体动力学中的应用。与依赖大量标注模拟数据的方法不同，PINN 直接通过控制方程进行训练。我们发现，标准 PINN 在处理行星扰动产生的时间依赖和空间高频结构时，存在收敛慢、长期演化误差累积以及高频特征捕捉不足等问题。为此，我们引入自适应激活函数、时间推进训练策略和模型继承方法，从而提高了训练效率和预测精度。

C9-2 神经网络的中心原则及其应用

毛志平，宁波东方理工大学

摘要：在神经网络的训练中，针对谱偏置现象，研究者发现了频率原则，也即神经网络训练一般从低频到高频的顺序进行学习，这是从频域空间来研究神经网络的训练。最近，我们从物理空间发现神经网络训练一般是从神经网络输入的范数由小到大的顺序进行训练，我们称之为“中心原则”。进而，我们还对该现象（原则）进行了分析，并利用该原则设计了几类新型神经网络以提高神经网络的效率。

C9-3 The Staircase Phenomenon and its applications in initialization of Neural Network Training Dynamics

杨将, 南方科技大学

摘要: Understanding the training dynamics of deep neural networks (DNNs), particularly how they evolve low-dimensional features from high-dimensional data, remains a central challenge in deep learning theory. In this work, we introduce the concept of ϵ -rank, a novel metric quantifying the effective feature of neuron functions in the terminal hidden layer. Through extensive experiments across diverse tasks, we observe a universal staircase phenomenon: during training process implemented by the standard stochastic gradient descent methods, the decline of the loss function is accompanied by an increase in the ϵ -rank and exhibits a staircase pattern. Theoretically, we rigorously prove a negative correlation between the loss lower bound and ϵ -rank, demonstrating that a high ϵ -rank is essential for significant loss reduction. Moreover, numerical evidences show that within the same deep neural network, the ϵ -rank of the subsequent hidden layer is higher than that of the previous hidden layer. Based on these observations, to eliminate the staircase phenomenon, we propose a novel pre-training strategy on the initial hidden layer that elevates the ϵ -rank of the terminal hidden layer. Numerical experiments validate its effectiveness in reducing training time and improving accuracy across various tasks. Therefore, the newly introduced concept of ϵ -rank is a computable quantity that serves as an intrinsic effective metric characteristic for deep neural networks, providing a novel perspective for understanding the training dynamics of neural networks and offering a theoretical foundation for designing efficient training strategies in practical applications.

C9-4 面向复杂工程系统的可泛化神经算子建模与应用

汪祺能，中科院微小卫星创新研究院

摘要：复杂工程系统中的神经算子不仅需要逼近高代价PDE的输入-输出映射，还必须面对部件数量、空间构型、边界条件及运行工况不断变化所造成的分布外泛化问题。本报告介绍一条从“全局映射”走向“物理组合”的研究路线：首先，由直接预测单一性能指标转向学习完整物理状态，使模型能够复用于性能评估、敏感性分析与优化；随后，通过局部物理响应的分解与组合，使神经算子能够由少量局部单元外推至更大规模的未见构型；进一步，将量纲一致性转化为自监督约束，在无需新增仿真标签的情况下提升少样本与噪声条件下的泛化能力；最后，将热源、部件和边界区段表示为可组合物理因子，通过树结构逐层学习其相互作用，实现对可变部件数量和边界组织的组合外推。相关研究表明，复杂非线性系统中的泛化能力并不主要来自网络规模扩张，而来自对物理状态、不变量、局部机制和对象关系的结构化建模。未来，这类神经算子可进一步与工程智能体结合，作为快速预测设计修改后果的物理认知模块。

二十三、分会报告 C10 专题：机器学习与 PDE 反问题

组织者：闫亮

报告时段：8月8日16:00-18:00

会场：会场6，陈瑞球楼110

C10-1 反问题的神经网络方法

陆帅，复旦大学

摘要：在本报告中，我们将介绍课题组关于反问题的神经网络方法及其理论分析。

C10-2 神经网络求解PDE的收敛性分析

金邦梯，香港中文大学

摘要：神经网络求解偏微分方程在近年来广受关注，其理论研究亦有重要进展。本报告将汇报神经网络求解微分方程正反问题的收敛性分析，包括求解含微分方程低正则性解时的泛化误差和优化误差等。

C10-3 函数空间上的归一化流模型

贾骏雄，西安交通大学

摘要：由偏微分方程驱动的反问题是众多科学与工程应用的核心，然而此类问题的贝叶斯推断往往面临不适定性、高维性以及离散化依赖性等挑战。本报告介绍基于泛函归一化流的无穷维贝叶斯推断的最新进展。首先，我们提出一种无穷维连续归一化流框架，用于从简单的参考测度出发，构造富有表达力的数据驱动先验测度，并给出保证适定性的理论条件。其次，我们发展了基于归一化流的无穷维变分推断方法，以实现高效的后验近似，包括能够处理不同维度观测数据的条件模型，从而降低计算代价。此外，我们还讨论了训练策略与后验采样算法，并在若干典型反问题上展示了所提框架的性能，包括达西流、电阻抗层析成像、逆散射问题以及热传导反问题。数值实验结果验证了理论分析，并体现了所提方法的高效性与离散化无关性。

C10-4 Dictionary learning based regularization in quantitative MRI: A nested
alternating optimization framework

董国志, 中南大学

摘要: We consider dictionary-learning-based regularization techniques for quantitative MRI. This is a generalization of the concept of dictionary learning for nonlinear inverse problems. We realize this concept via a nested optimization scheme, and show its convergence and convergence rates in an abstract setting.

二十四、分会报告 C11 专题：融合物理与数据的 AI：面向复杂物理系统的应用

组织者：吴泰霖

报告时段：8月9日10:15-12:15

会场：会场6，陈瑞球楼110

C11-1 基于人工智能的科学知识自动发现

陈云天，宁波东方理工大学

摘要：本报告聚焦于人工智能（AI）在科学知识发现领域的最新进展，探讨了AI如何助力科学探索与物理化学规律揭示。通过符号数学与AI算法的结合，我们揭示了此前未知的全新方程，用于粘性重力流、复杂地形降水、波浪破碎过程、化学极性等复杂现象的建模。在最新研究中，我们基于从数学手册中提取的200余类方程进行训练，构建出预训练知识发现模型EqGPT。我们基于隐空间生成式建模，提出GenSR方法。本报告将重点介绍知识发现领域多种前沿模型，为科学家跨越知识与数据壁垒、深入理解自然提供了全新方法。

C11-2 物理信息神经算子驱动复杂动力系统建模与工业应用

张瑞，中国人民大学

摘要：本报告围绕物理信息神经算子的基础算法与工业应用展开，重点介绍如何将物理方程、数值格式和神经网络模型深度融合，构建兼具精度、效率与泛化能力的新型智能求解器。在物理方程已知的场景中，报告将介绍基于纯物理监督和迭代式监督的神经算子训练方法，以降低对高质量仿真数据的依赖，并提升模型训练稳定性；在物理方程未知的场景中，报告将进一步介绍谱启发神经算子和面向刚性系统的物理嵌入架构，以增强模型在复杂动力系统的外推能力和稳定预测能力。此外，报告还将讨论三维流体基础模型、多物理场仿真基准测试以及几何优化框架等工业应用方向，展示物理信息神经算子在加速仿真、反问题求解、控制优化和气动设计等任务中的应用潜力。

C11-3 科学智能仿真和设计

朱霖潮，浙江大学

摘要：科学智能正推动科学计算从单纯依赖物理机理或数据拟合，迈向数据与机理深度融合的新范式，在大幅提升仿真与设计精度的同时显著降低计算成本。本报告将围绕正向求解与逆向设计

两大核心环节，系统梳理 AI 驱动科学仿真与设计的方法体系与发展脉络。在方程正向求解方面，报告将介绍以神经算子为代表的求解范式，重点剖析基于注意力与基于谱的两类方法：前者擅长刻画局部、非规则结构，后者在全局长程依赖与跨分辨率泛化上具有优势，并讨论二者融合统一的思路与前沿进展。在逆向设计方面，报告将介绍生成式模型在物质与结构设计中的应用，阐释如何将从功能到序列/结构的反向映射建模为条件生成问题，实现面向目标性质的高效设计。报告最后将结合流体力学、材料科学、生物医学等典型场景，探讨 AI 驱动技术如何重塑科学仿真与设计流程，并展望其在加速科学发现与工程创新中的机遇与挑战。

C11-4 飞行器气动布局设计的生成式建模方法研究

寇家庆，西北工业大学

摘要：气动布局是决定飞行器性能的核心关键，在飞行器概念设计阶段，针对明确的任务需求开展多样化、创新性的气动布局设计，是突破现有飞行器性能的重要环节。然而，传统气动优化方法在面对复杂气动外形设计时，往往高度依赖专家经验，导致设计方案缺乏多样性。随着生成式人工智能（Generative Artificial Intelligence）的快速发展，通过生成式模型快速实现多种设计方案并筛选出最优构型的“设计需求-气动布局”的端到端设计范式成为可能。本报告提出了一种基于生成对抗网络的气动布局概念设计框架，以小型通航飞机为研究对象，开展了气动布局生成式设计研究。首先，提出了基于条件Wasserstein生成对抗网络（CWGAN-GP）的气动布局生成式模型，并实现了气动布局参数的快速生成；其次，针对飞行马赫数0.6和2度迎角的通航飞机典型工况，开展了通航飞机气动布局生成式设计。最后，在上述模型基础上，提出一种引入物理信息的条件增强生成式模型，显著提升了模型性能；结合可解释机器学习方法，研究了生成式模型的生成偏好，增强了模型可解释性。研究成果不仅为飞行器生成式设计提供了新方法，也为未来航空器多学科优化设计奠定了重要基础。

二十五、分会报告 C12 专题：机器学习与交叉

组织者：张耀宇

报告时段：8月9日13:30-15:30

会场：会场6，陈瑞球楼110

C12-1 从热方程到扩散模型：1822-2022

刘康，法国勃艮第大学

摘要：基于 Score 的扩散模型近年来已成为一类强大的生成模型，在众多应用中取得了最先进的性能。然而，尽管其经验表现十分成功，人们对其稳定性和生成机制的严格数学理解仍然十分有限。在本工作中，我们建立了一个偏微分方程（PDE）理论框架，为 Score 扩散模型提供坚实的数学基础。基于热方程的 Li-Yau 微分不等式，我们证明了相关 Score-Fokker-Planck 动力学的适定性和精确能量估计，从而给出了扩散模型演化过程的严格数学描述。进一步地，利用熵稳定性方法，我们证明了：对于任意紧支撑的数据分布、广泛的初始生成分布以及任意有限终止时间，扩散模型的反向时间动力学都会收敛并集中到原始数据流形上。除了理论意义之外，我们的分析还为扩散模型设计提供了实践指导，包括 Score 函数构造、损失函数设计、停止时间选择的理论依据，以及对“模仿精度（fidelity）”与“生成能力（generative capacity）”之间权衡关系的定量理解。本报告基于与 Enrique Zuazua（德国埃尔朗根-纽伦堡大学）合作完成的研究工作。

C12-2 超越低维限制的参数景观生成式学习

肖卓成，上海纽约大学

摘要：生物动力系统的参数景观向来难以解析：维数高，仿真探索成本高。并且分岔结构使系统行为被划分为性质迥异的动力学区域。因此，对于可行的参数构成的集合，局部优化或低维参数扫描往往会遗漏它的很大一部分，也不便于理解鲁棒性如何由参数相互作用形成。我们提出一种基于分数的扩散生成框架，可直接从数据中学习可行参数流形的几何结构，从而实现超越低维扫描限制的快速探索。我们首先随机采样参数，仿真模型，并用少量指标概括其长期行为。在给定目标指标值的条件下，扩散模型生成集中分布在相应可行参数流形上的新参数样本。我们在三个系统中展示该框架。在 Lorenz 常微分方程中，我们在三维参数空间内重构了可行参数流形和

分岔骨架；远离骨架时，这些流形高度规则，并随指标值变化形成近似平行、类似水平集的片状结构。在 Izhikevich 神经元模型中，多种放电模式的可行参数流形揭示了局部补偿几何，提示了一条通向异稳态（heterostasis）的定量路径：多个参数可协同变化以维持功能。扩散模型还能估计流形的内蕴维数，从而揭示参数-指标映射的有效秩。最后，在 dsODE（我们针对脉冲神经网络提出的常微分方程理论）中，我们在 12 维参数空间中识别出发放率可行参数流形；这些流形与兴奋-抑制（E-I）平衡相一致，同时揭示此前未显现的依赖关系。学习得到的分岔骨架组织了稳态活动、 γ/β 振荡和多稳态。总体来看，生成式学习为刻画复杂生物模型中的机制与鲁棒性提供了系统化、可扩展的分析框架。

C12-3 对称性先验嵌入的深度网络架构

谢琦，西安交通大学

摘要：等变（equivariant）深度学习通过显式嵌入对称性先验，显著提升了模型在具有几何或物理约束任务中的泛化能力与数据效率。本报告介绍等变性的数学基础（即网络层运算需与输入数据的对称群作用相容）与课题组在等变网络设计上的系列工作，为对称性驱动的深度学习方法研究提供了理论参考与技术启示。

C12-4 神经网络架构塑造训练动力学：对称性、结构不变流形和凝聚现象

张耀宇，上海交通大学

摘要：神经网络架构是深度学习取得成功的核心要素，但架构本身如何塑造训练动力学，却始终是理论上的一个困难问题。根本的挑战在于，实际训练中架构与数据、损失函数及优化器深度耦合，使我们难以分离出架构的独立贡献。在本次报告中，我将介绍我们为此发展的一个新理论框架，它借助动力学系统视角和几何控制论工具，清晰地分离并完整刻画了模型参数化对其梯度流的固有约束。我们证明，结构不变流形——那些与数据和损失无关、严格限制梯度流轨迹的低维子流形——恰好是该模型梯度向量场族所生成轨道的并集。进而我们发现，神经网络中普遍存在的对称性，尤其是同层神经元间的置换对称性，会自然诱导出满足该对称性的低维结构不变流形。运用这一框架，我们揭示了全连接网络中对称性所诱导的结构不变流形具有由置换对称群刻画的层级嵌入结构，其上的训练动力学呈现出强烈的神经元凝聚，表达能力等效于窄网络。对于两层网络，我们进一步证明所有的结构不变流形皆由对称性所诱导，从而确立了架构的对称性在塑造训练动力学中的根本性地位。总的来说，我们的工作为分析模型架构设计对动力学的影响建立了理

论基础，也为进一步理解神经网络凝聚现象的机制和泛化性能提供了新的路径。

二十六、分会报告 D1 专题：AI 在未来能源系统中的应用

组织者：尤鹏程、李彤欣、江彦

报告时段：8月9日13:30-15:30

会场：会场5，陈瑞球楼109

D1-1 数据驱动的海量分布式资源灵活性识别、量化与控制方法研究

郭毅，北京理工大学

摘要：在高比例可再生能源并网的发展趋势下，建筑与交通领域电气化催生的热泵、电动汽车等终端资源，是电力系统关键的需求侧灵活性来源，如何精准识别、系统量化并高效调控这类资源，是新型电力系统运行的核心议题。分布式资源体量庞大、耦合关系复杂，受多重物理约束与源荷不确定性共同制约，规模化优化调度面临严峻的计算扩展性瓶颈，传统方法难以同时兼顾求解效率与精度。对此，我们提出基于物理信息机器学习的 PolyFormer 优化框架，通过捕捉复杂约束的内在几何结构，将其重构为高效多面体形式，解耦问题原生复杂度与求解难度，支撑通用求解器在可控最优性损失下高效输出可行解。基于该方法，我们以瑞士及中欧地区为实证案例，量化测算至 2050 年建筑与交通部门的新增用电规模与灵活性潜力，系统评估其在降低系统投资、减少可再生弃电、平抑电价波动等维度的系统价值，推动终端用能设备从被动电力消费者向分布式能源资产转型，助力电力系统净零目标落地。

D1-2 AI4AI 在高效后训练中的应用

宋磊，上海行云致理人工智能研究院

摘要：本报告将围绕“AI4AI 在高效后训练中的应用”展开，介绍如何利用 AI agent 自动参与模型后训练流程中的数据构建、实验设计、评测诊断、失败归因与迭代优化。传统后训练往往依赖大量人工经验与反复试错，而 AI4AI 可以在明确的目标、指标和安全边界内，自动发现问题、提出改进方案、执行实验并沉淀经验，从而提升训练迭代效率与系统优化质量。

D1-3 面向复杂能源系统的数据驱动控制

袁臻毅，香港科技大学（广州）

摘要：机器学习在人工智能时代的快速发展，以及计算机系统计算与处理能力的持续提升，推动了数据驱动方法在科学与工程诸多研究领域中的广泛应用。在控制系统领域，针对难以通过传统

模型分析方法进行控制器设计的复杂系统，数据驱动方法能够直接利用采集的数据，以便捷而高效的方式学习控制器。然而，学习得到的控制器往往缺乏对稳定性、安全性和鲁棒性等控制性能的严格理论保证。这一问题对于复杂电力、能源系统等安全关键系统尤为重要，因为控制器的非预期行为可能会对底层物理系统造成不可逆的损害，甚至威胁人身安全。本报告将介绍如何利用行为系统理论的相关工具，在数据驱动控制方法与安全关键约束之间建立联系。首先，报告将介绍一种面向双线性系统的直接数据驱动控制框架。从经典的 Willems 基本引理出发，阐述如何利用系统过去的观测数据，对双线性系统可能的未来行为进行参数化表征。在此基础上，进一步说明如何利用这一参数化形式，将基于模型的约束控制问题转化为完全基于数据的控制问题，并从理论上严格证明二者的等价性。随后，报告将借助 Koopman 算子理论，把上述控制方法拓展至一般复杂非线性系统。当系统存在精确的 Koopman 双线性化表示时，所提出的方法能够获得与双线性系统情形相同的理论保证；当精确的双线性化表示不存在时，该方法仍能够对近似误差进行定量刻画。最后，报告将以暖通空调（HVAC）系统为例，介绍上述方法在能源系统控制中的工程应用。

D1-4 面向新型电力系统的可信AI智能体：高效感知、前瞻决策与泛化调控

叶宇剑，东南大学

摘要：随着新能源与储能装机规模持续增长，新型电力系统运行调度正由单时刻、确定性优化转向强波动、强不确定性和长时序耦合下的连续决策，传统优化与通用人工智能方法难以同时兼顾决策质量、计算时效和运行可信性。本报告围绕输电线路越限预防控制与含储能配电网日内调度，介绍面向新型电力系统的可信AI智能体研究进展：通过时空图网络增强电网运行态势感知，基于带约束马尔科夫决策过程统一描述经济目标与安全约束，引入状态安全与轨迹安全协同机制提升多时间尺度安全性，结合数据-机理融合训练增强强时序耦合下的前瞻决策能力，并利用风险约束与策略算子学习提升强不确定性及系统参数变化下的鲁棒性和跨环境泛化能力。相关算例与工程实践表明，所构建的智能体能够在保障电网安全的同时提高调度经济性与决策效率，为形成“预测-仿真-决策”贯通的电力智能调度中枢提供技术基础。

二十七、分会报告 D2 专题：人工智能中的计算能耗管理

组织者：李彤欣、尤鹏程

报告时段：8月8日13:30-15:30

会场：会场7，陈瑞球楼114

D2-1 预测-优化一体化的新能源系统发电量申报优化

杨浩翔，香港中文大学（深圳）

摘要：在电力市场中，可再生能源发电商在设计有利可图的竞价策略时面临重大挑战，因为实时发电量以及日前市场与实时市场之间的价差都具有高度不确定性。本文提出了一个用于可再生能源发电量申报的集成学习与优化（Integrated Learning and Optimization, ILO）框架。不同于标准 ILO 设置中不确定性主要出现在目标函数中的情形，本文所研究的问题中，发电量不确定性会进入下游问题的约束。我们采用机器学习预测模型，并以优化模型的目标函数作为机器学习模型的损失函数，构造了 ILO 问题并通过自动求解梯度进行训练。基于合成数据的实验表明，ILO 的表现优于先预测后优化、随机优化以及相关基准方法。

D2-2 因果表示学习在跨领域HVAC能耗预测中的应用

唐国明，香港科技大学（广州）

摘要：跨领域HVAC能耗预测对规模化建筑能耗管理至关重要，但不同建筑、气候区和季节模式带来的数据稀缺与异质性使该任务极具挑战性。在本报告中，我们将介绍一个因果可解释的深度序列模型CaberNet，它通过学习不变表示实现稳健的跨领域预测。该模型以数据驱动方式运行，无需任何先验知识，整合了全局特征门控与领域训练方案。在三个不同气候城市的真实建筑数据上进行验证，结果表明CaberNet一致优于所有基线，归一化均方误差较最佳基准降低22.9%，证明了其在跨领域HVAC能耗预测任务中的有效性与泛化能力。

D2-3 基于攻防博弈的大模型越狱攻击与安全演化

张乔生，上海人工智能实验室

摘要：大语言模型（LLM）的安全能力对于实际部署与应用至关重要。然而，现有安全防御方法通常依赖静态、预先收集的数据分布，难以跟上不断演化的对抗攻击。我们提出一种新颖的多轮多智能体强化学习框架 MAGIC，将 LLM 安全对齐建模为非对称对抗博弈。具体而言，攻击者智

能体学习将原始问题逐步改写为具有欺骗性的提示词；同时，防御者智能体优化其策略，以识别并拒绝此类攻击。这一动态过程促成攻防双方的协同演化：攻击者不断变化的策略持续暴露长尾漏洞，进而推动防御者泛化至未见过的攻击模式。值得注意的是，具备较强推理能力的攻击者能够通过迭代式强化学习训练，演化出新颖、此前未出现过的组合式攻击策略，凸显了该方法的潜力。理论上，我们分析了更稳健的博弈均衡，并推导出相应的安全性保证。大量实验验证了该框架的有效性：在不损害模型有用性的前提下，MAGIC 实现了更高的防御成功率。

D2-4 卫星计算中AI推理能耗优化的初步思考

娄炯，上海交通大学

摘要：随着智能处理任务逐步向星上迁移，卫星有限且周期变化的能源供给、受限的计算与散热条件，对人工智能模型的持续高效推理提出了新的挑战。相关研究目前仍处于探索阶段。本报告将首先介绍卫星计算中人工智能推理的典型场景，分析模型精度、推理时延、计算能耗与任务完成之间的基本权衡；随后结合我们过去在生成式模型推理加速、资源受限环境下的任务调度与计算迁移等方面的一些工作，讨论缓存复用、弹性推理和资源感知调度等方法在卫星计算场景中的潜在应用；最后介绍围绕卫星能源状态、任务负载与模型推理过程协同优化的初步研究设想。

二十八、分会报告 D3 专题：人工智能在科学成像中的应用 I、II

组织者：姜若曦、孙赫

报告时段：8月9日10:15-12:15；8月9日13:30-15:30

会场：时段3：会场7，陈瑞球楼114；时段4：会场7，陈瑞球楼114

D3-1 从低秩分解到生成式先验：物理场稀疏重构中的表征学习路径

方楷楷，浙江大学

摘要：物理场的稀疏重构是机器学习与科学计算交叉中的核心问题：在有限传感器、有限观测频率和不完备边界条件下，如何恢复连续、高维、动态演化的物理场。传统方法往往依赖强物理先验或固定离散网格，而深度学习虽提升了表达能力，却仍面临数据效率、频率泛化、动态一致性与可解释性不足等挑战。本报告将围绕“表征”这一主线，讨论物理场稀疏重构从低秩建模到生成式建模的演进路径。首先介绍低秩矩阵/张量表征在物理场压缩、补全与动态建模中的作用，并结合连续流形动态张量相关工作，说明如何用低维结构刻画连续时间演化的场数据。随后，报告将进一步讨论生成式建模如何从“拟合单个场”转向“学习物理场分布”，使模型能够在稀疏观测条件下生成与观测一致、且具有物理合理性的完整场结构。最后，报告将以 SIDFT 等近期探索为例，介绍频域表示、稀疏观测和生成式先验结合的可能路径，并讨论其在声场、热场、流场等高维物理系统重构中的应用前景。

D3-2 深度学习赋能傅里叶叠层显微成像

张韶辉，北京理工大学

摘要：傅里叶叠层显微成像通过多角度照明采集低分辨率强度图像，并在傅里叶域中进行相位恢复与合成孔径重构，能够在不依赖精密机械扫描和干涉测量系统的条件下获得大视场、高分辨率复振幅图像，已成为计算显微成像中的重要技术框架。然而，传统FPM方法在重构速度、低信噪比鲁棒性、系统误差校正和复杂样本适应性等方面仍存在限制。近年来，深度学习为FPM提供了新的计算范式，使其从单纯依赖迭代优化的物理重构方法，逐步发展为融合数据先验、网络结构先验和可微物理模型约束的智能显微成像框架。本报告重点介绍本实验室在可微分神经网络构建与优化方面的系统工作，将系统失准、光学像差、数据质量限制等多重参数纳入统一的可微分框架中进行联合重建与协同优化，实现了无需精密校准的高质量重建与光学-算法全链路一体化。

在此基础上，我们将可微分框架进一步拓展至光学衍射层析三维成像场景，实现了对样本三维折射率分布的快速高质量重建。相关实验验证了可微分框架在突破传统FPM成像局限、提升成像性能方面的有效性，展示了深度学习赋能条件下FPM技术的发展潜力。

D3-3 基础模型驱动的医学成像探索

王珊珊，中国科学院深圳先进技术研究院

摘要：本报告围绕医学影像基础模型的构建与应用，系统介绍从“物理驱动成像”到“通用智能诊断”的范式演进，汇报课题组近一年多在Nature BME, IEEE trans 等发表的工作。针对医学影像中多模态异构、标注稀缺及跨设备分布差异等核心挑战，报告将阐述如何融合成像物理模型与数据驱动方法，构建具备高保真重建、跨任务泛化及弱/无标注学习能力的基础模型框架，并重点展示在快速MRI、多模态视觉-语言建模及自动化病灶定位等方面的代表性进展及临床转化成果。最后，报告将展望医学影像基础模型向全流程诊疗一体化发展的新趋势，以及其在真实临床环境中的应用潜力与关键科学问题。

D3-4 生成模型在物理模拟和物质生成领域的应用研究

魏龙，复旦大学人工智能创新与产业研究院

摘要：近年来，生成式人工智能技术的快速发展催生了科学领域的大量应用。该报告将从有数据学习和无数据学习两个方面，介绍报告人将生成模型应用于物理模拟、物质生成等领域的研究成果。在有数据学习方面，扩散模型在复杂高维物理系统的逆向设计、控制等任务，显示出强大的泛化能力，尤其具有组合泛化的优势，并应用到了多体碰撞、机翼设计、流体控制等领域。在无数据学习方面，基于能量函数，实现了玻尔兹曼高效分布高效采样，在分子生成、蛋白质生成等应用中取得了领先结果。

D3-5 面向专病诊疗的多模态医学智能体及世界模型

王烁，复旦大学数字医学研究中心

摘要：本次报告将聚焦智能体在医学领域特别是临床疾病诊疗中面临的问题和专病解决思路，具体包括基于专病基础模型的多模态感知、多智能体协同的多学科会诊以及医疗设备智能体探索。另外，将围绕专病诊疗的发展需求，介绍医学世界模型的发展和近期相关工作。

D3-6 星衍：天文图像自监督时空去噪算法

张昊，清华大学自动化系

摘要：天文成像观测的探测极限受到多种噪声源的制约。其中，一部分噪声在空域和时域具有相关性，因此可以通过深度学习方法校正。我们提出了一种基于自监督 Transformer 的天文图像去噪算法——星衍 (ASTERIS)，该算法能够融合多次曝光中的时空信息。测试表明，在完整性 (Completeness) 和纯净度 (Purity) 均达到90%的阈值下，星衍可将探测极限提升1.0个星等，同时保持点扩散函数 (PSF) 和测光精度不受影响。利用詹姆斯·韦布空间望远镜 (JWST) 和昴星团望远镜 (SUBARU) 的观测数据进行验证后，星衍成功识别出此前无法探测的特征，包括低表面亮度的星系结构和引力透镜弧。将其应用于 JWST 的深场图像时，星衍识别出的早期高红移星系候选体数量达到以往方法的三倍，极限探测深度比传统方法提升1.0个星等。

D3-7 对抗优化范式的科学应用：图像去噪、两样本检验与隐私保护

张景锋，复旦大学智能机器人与先进制造创新学院

摘要：对抗优化通常用于提升机器学习模型的安全性与鲁棒性，其核心 Min-Max 结构也是一种具有广泛适用性的数学机器学习范式：内层最大化主动刻画模型在最坏情形下的薄弱环节，外层最小化则据此提升模型的鲁棒性。本报告将介绍该范式在三个不同科学问题中的应用。首先，针对深度图像去噪器的脆弱性，构建零均值对抗扰动与混合对抗训练方法，提升图像去噪质量和鲁棒性；其次，将对抗优化引入非参数两样本检验，提升深度核方法在数据扰动下的检验效力和鲁棒性；最后，面向扩散模型的低秩适配LoRA，构建基于 Min-Max 博弈的隐私保护 LoRA，降低模型共享中的隐私泄漏风险。报告旨在展示对抗优化如何从安全防御工具拓展为连接图像处理、统计推断与隐私计算的通用方法，为科学机器学习提供新的研究视角。

D3-8 基于表征学习的物理仿真

姜若曦，复旦大学人工智能创新与产业研究院

摘要：数据以何种方式被“表示”，直接影响着模型理解世界的深度，也决定了其模拟复杂物理现象时的精确度。科学计算中的逆问题（如由观测反推系统参数）与正问题（如动态系统演化），均可在表征学习的视角下得到统一刻画。本报告围绕这一主线，介绍表征学习与物理仿真交叉方向上的近期相关工作。在表征层面，我们重新审视了深度网络中沿用至今的残差连接，指出恒等捷径在保障梯度传播的同时抑制了特征的逐层归纳学习。面向逆问题，我们提出 Embed &

Emulate 框架，通过对比学习将观测数据与物理参数嵌入共享表征空间，以轻量级代理模型替代昂贵的数值模拟器。面向正问题，我们进一步将层级表征思想延伸至动力系统的长时程模拟，提出多尺度隐式神经模拟器。在高雷诺数 Navier-Stokes 湍流模拟实验中，在同等参数量下显著提升了中短期预测的准确率。本次报告将以上述工作为例，探讨表征学习如何推动压缩理解、成为物理仿真模拟的关键基础。

二十九、学生论坛

报告时段：8月9日15:40-17:40

会场：会场2，陈瑞球楼106

E1-1 对于非线性偏微分方程的神经算子预条件子

周楠，上海交通大学

摘要：Newton-Krylov方法是求解大规模非线性偏微分方程的重要工具，但其性能高度依赖于有效预条件子的设计。传统预条件方法通常基于线性化模型或问题特定结构，面对强非线性、多尺度问题时存在适应性不足的问题。本文提出一种基于神经算子的预条件框架，通过抽取神经算子中的结构化信息构造数据驱动的预条件器。在保持Newton-Krylov求解框架可靠性的同时，该方法利用神经算子中谱压缩信息，从而减少Krylov子空间迭代次数。针对非线性对流扩散方程的数值实验表明，所提出的方法能够有效减少内循环迭代次数，并在不同网格尺度和非线性强度下保持良好的泛化能力。

E1-2 理解Adam优化器的动力学：损失尖峰的动力学溯源及其在退化景观中的加速机制

白志威，上海交通大学

摘要：Adam等自适应优化算法在深度学习模型训练中取得了巨大成功，但其训练过程中频繁出现的“损失尖峰（Loss Spikes）”现象，揭示了该类算法内部存在尚未被完全理解的不稳定性。本次报告将从这一广受关注的经验现象出发，深入剖析Adam优化器内部自适应预处理器的动力学特性，揭示内生不稳定性与局部加速收敛背后的统一数学机理。首先，报告将探讨损失尖峰的动力学溯源。传统观点往往将尖峰归咎于损失景观的陡峭化，但我们指出其主要原因在于Adam二阶矩估计器与瞬时平方梯度之间的“解耦（Decoupling）”机制，该机制会导致自适应调节功能的阶段性失效。具体而言，当二阶矩估计值持续下降时，预处理器的滞后性会导致预处理Hessian矩阵的最大特征值不断攀升并突破局部稳定性阈值，进而触发剧烈的损失尖峰。基于二次近似分析，我们系统刻画了尖峰演化的五个物理阶段，并提出了一种基于梯度方向曲率的精确监测指标。随后，报告将视线转向这一解耦机制的“另一面”——即其在优化过程中扮演的正面角色。我们发现，恰恰是这种引发不稳定性的解耦效应，赋予了Adam在高度退化多项式损失景观上的显著优化优势。通过严谨的局部稳定性分析，我们证明了该机制能够指数级放大有效学习率

，使得Adam在无需外部学习率调度器的情况下，即可在此类退化函数上实现线性收敛，从本质上突破了标准梯度下降和动量方法在此类退化地形中所面临的次线性收敛瓶颈。综上所述，本次报告将结合超参数相图与状态空间动力学，为理解Adam算法中的内生不稳定性与自适应加速机制提供一个统一的数学视角。

E1-3 基于神经网络的含时方程时间半离散方法

王贵宏，上海交通大学

摘要：基于神经网络的偏微分方程求解方法近年来受到广泛关注，但在求解精度和计算效率方面仍面临挑战。本研究聚焦于时间依赖偏微分方程的数值求解，指出将空间变量与时间变量耦合在同一神经网络中进行逼近，往往会增加模型的学习难度。为此，本研究提出一种时间半离散方法，将经典数值时间积分格式与随机神经基相结合：在时间方向采用传统数值格式进行离散，在空间方向利用神经网络进行函数逼近。进一步地，本研究引入自适应操作，以增强网络对不同尺度特征的表达能力，从而提升多尺度偏微分方程求解中的一致逼近精度。数值实验表明，所提出框架具有良好的有效性，并验证了时间积分格式的收敛性以及神经网络的逼近性能。

E1-4 无穷小初始化下对角线性网络的梯度流动力学与隐式正则化

赵佳杰，上海交通大学

摘要：本文针对回归任务下对角线性网络在无穷小初始化时的梯度流动力学展开研究。通过拓展Pesme & Flammarion (2023) 中的定理 1，将相关分析推广至深层对角线性网络及更广泛的一类两层对角线性网络。研究表明，上述模型的训练轨迹可由本文提出的算法 1 进行等效刻画，且该算法收敛于加权 L_1 范数最小化解。基于此，本文确立了在无穷小初始化下，两种网络架构的隐式正则化均对应于加权 L_1 范数。此外，通过揭示结构不变流形在塑造学习过程中的关键作用，本文为理解此类动力学背后的底层机制提供了几何视角。

E1-5 非参工具变量中的深度学习：优化与泛化

陈宗昊，伦敦大学学院

摘要：我们首次建立了神经网络两阶段最小二乘法 (2SLS) 在非参数工具变量回归 (Nonparametric Instrumental Variable Regression, NPIV) 中的全局收敛性理论。为此，我们采用了基于均值场朗之万动力学 (Mean-Field Langevin Dynamics, MFLD) 的提升 (lifted) 视

角。然而，与标准 MFLD 不同，2SLS 的求解本质上对应于概率测度空间上的双层优化（bilevel optimization）问题。针对这一挑战，我们利用了近期提出的基于罚梯度（penalty gradient）的双层优化方法，将双层优化重构为一个拉格朗日优化问题。在此基础上，我们提出了一种全新的、完全基于一阶信息的算法，称为 F2BMLD。除了优化收敛性分析外，我们还建立了算法的泛化误差界，揭示了拉格朗日乘子取值在优化性能与统计泛化能力之间所固有的权衡关系。最后，我们在离线强化学习（offline reinforcement learning）基准任务上进行了实验，验证了所提出方法的有效性。

E1-6 微积分形式化库Calculus_21与形式化辅助教学系统

周可信，华东理工大学

摘要：本报告介绍形式化辅助教学系统的构想和为教学设计的微积分形式化库Calculus_21。系统将融合AI与形式化验证，支持证明的结构化阅读、条件追踪与即时验证，通过实现贴近草稿纸演算的交互，打造严谨且智能的自主数学学习新体验。

E1-7 Mamba的非对称偏好

陈天一，上海交通大学

摘要：状态空间模型（SSM）作为一种有前景的模型路线已经出现，其中Mamba架构在处理长序列时表现出卓越的性能和线性复杂度。然而，Mamba和Transformer架构之间的根本区别仍未完全理解。我们通过精心设计的合成任务揭示了Mamba的内在局限性。通过实验，我们发现Mamba的非线性卷积引入了一种非对称偏好，这严重削弱了其识别对称模式和关系的能力。通过复合函数和逆序序列匹配任务，我们证明了Mamba强烈偏好非对称解而不是对称式解，并且在处理需要匹配逆序序列的任务时表现不佳。这些局限性并非源于SSM模块本身，而是源于其之前的非线性卷积，该卷积以非对称的方式融合了信息。这些见解为理解Mamba提供了新的视角，并为未来的序列模型提出了具体的架构改进建议。