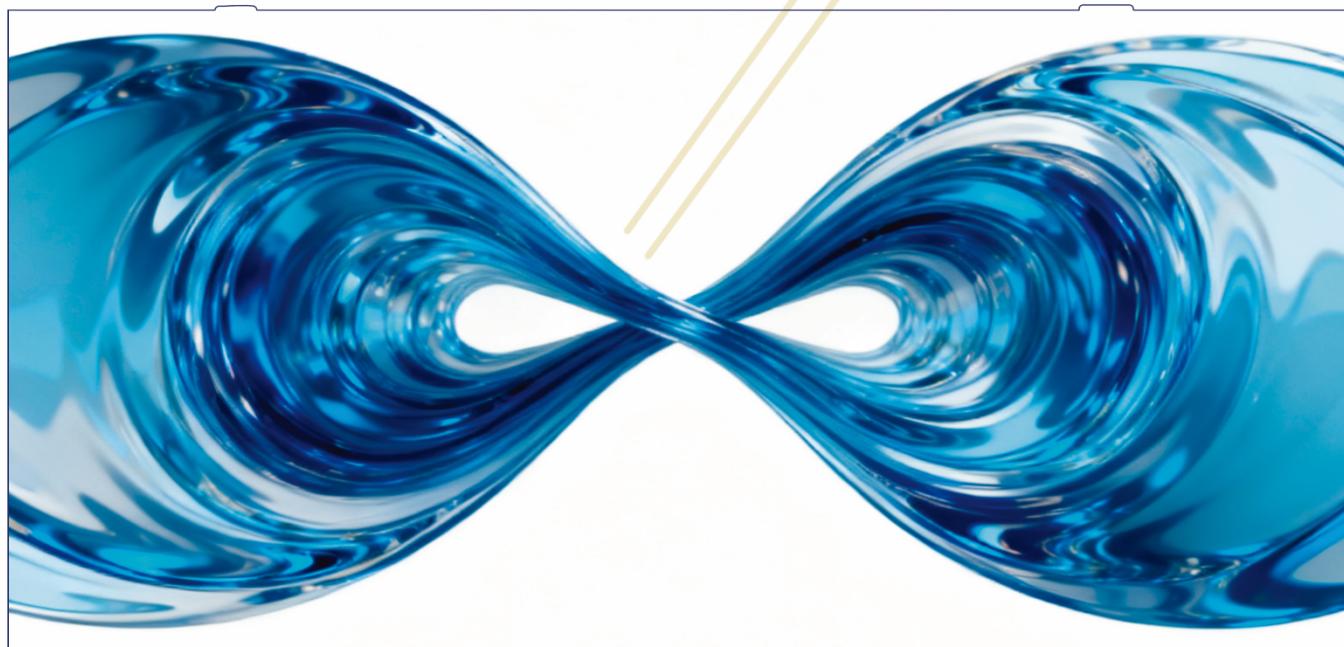


AI赋能 流变学建模与HPC算法 研讨会

中国 · 北京 2025.11.16-11.18

中国科学院数学与系统科学研究院, 南楼219



中国科学院数学与系统科学研究院

数学科学全国重点实验室

中国化学会、中国力学学会 · 流变学专业委员会

中国工业与应用数学学会 · 油水资源数值方法专业委员会

AI 赋能流变学建模与 HPC 算法研讨会

会议手册

主办单位

中国科学院数学与系统科学研究院

数学科学全国重点实验室

中国化学会、中国力学学会 · 流变学专业委员会

中国工业与应用数学学会 · 油水资源数值方法专业委员会

中国·北京 2025.11.16~18

目录

会议简介	5
会议指南	7
会议日程	9
会议报告题目和摘要	12
参会人员名单	30

会议简介

流变学作为研究物质流动与变形规律的科学，自创立之初便融合了应用数学、流体力学、化学、地球物理、生物、医学及工程技术，形成一门高度交叉的学科。复杂介质动力学的多尺度、多物理、非平衡与非线性特征，使得传统实验和理论方法在定量建模和求解都面临巨大挑战。近年来，人工智能（AI）与高性能计算（HPC）技术的迅猛发展，为破解海量数据和求解复杂系统的维度灾难提供了前所未有的新工具，正在形成流变学研究的新范式。

在此背景下，本次研讨会旨在汇聚国内外流变学、应用数学、地球物理、AI 与科学计算领域的学者和产业界专家，共同搭建一个高水平、跨学科的交流平台。会议将深入探讨 AI 与 HPC 如何深度融合并赋能流变学的基础理论创新和工业应用突破，主题涵盖高阶数值算法、GPU 并行计算与神经网络等新型计算方法；多尺度、多物理场耦合模拟与复杂流体体系建模；以及地震勘探、化工、生物等典型应用场景的智能流变学研究。尝试通过多学科交叉交流和讨论，探讨流变学智能（AI for Rheology）研究的技术演进路径，共同构建分布式协同创新基础设施及模型和算法的基准测试集。诚邀您出席此次会议！

本次会议由**数学科学全国重点实验室**和**自然科学基金委项目 12171464**资助。

主办单位：

中国科学院数学与系统科学研究院（计算数学与科学工程计算研究所）

数学科学全国重点实验室

中国化学会、中国力学学会 · 流变学专业委员会

中国工业与应用数学学会 · 油水资源数值方法专业委员会

组织委员会（以姓名拼音排序）

冷 伟，副研究员，中国科学院数学与系统科学研究院

于海军，研究员，中国科学院数学与系统科学研究院

袁学锋，教授，广州大学

张晨松，研究员，中国科学院数学与系统科学研究院

张林波，研究员，中国科学院数学与系统科学研究院

张劲军，教授，中国石油大学（北京）

会议指南

1. 报到时间和地点

报到时间: 2025 年 11 月 16 日 14:00-20:00

报到地点: 物科宾馆

2. 会议时间和地点

会议时间: 2025 年 11 月 17 日至 18 日, 19 日离会

会议地点: 中国科学院数学与系统科学研究院南楼

3. 会议用餐

11 月 16 日晚餐: 18:00-20:00 (物科宾馆 3 楼)

11 月 17 日午餐: 12:10-14:00 (物科宾馆 3 楼)

11 月 17 日晚餐: 18:30-20:30 (物科宾馆 3 楼)

11 月 18 日午餐: 12:20-14:00 (物科宾馆 4 楼)

4. 联系人

赵梨, 电话: [18373287736](tel:18373287736), E-mail: lizhao@lsec.cc.ac.cn

5. 会议酒店

(1) 北京物科酒店地址信息卡 (Wuke Hotel)

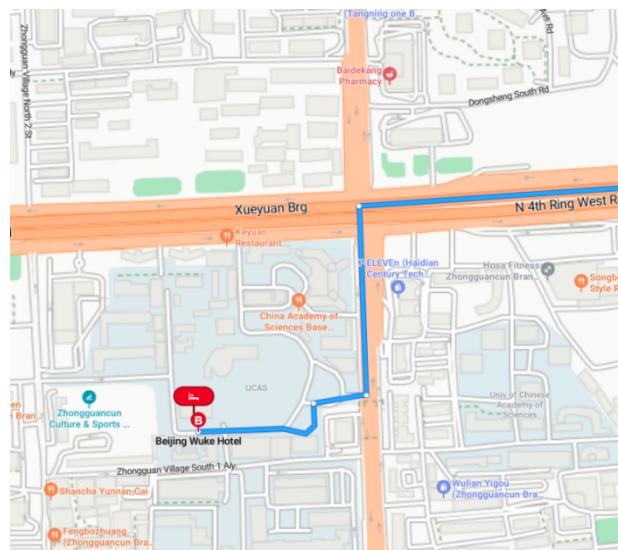
中文地址: 中国北京市海淀区中关村南三街 8 号

(保福寺桥南中国科学院基础科学园区东门进入)

邮编: 100190

English Address: No. 8, Zhongguancun Nansanjie, Haidian District, Beijing, 100190, China
(Near Baofusi Bridge)

前台电话 / Front Desk: +86-10-82649140 / +86-10-82649482



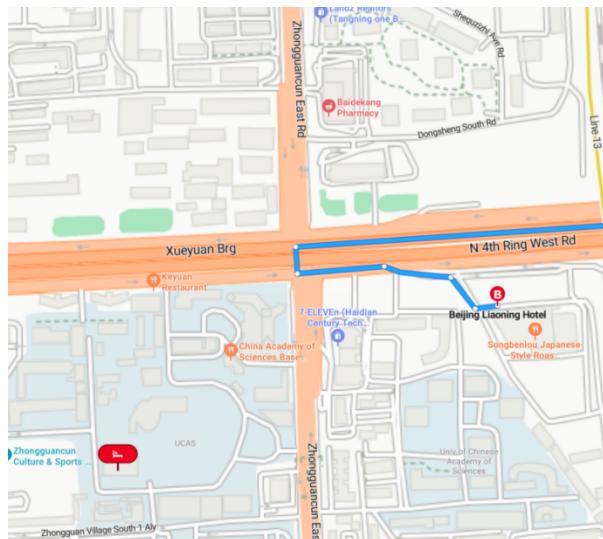
(2) 北京辽宁大厦地址信息卡 (Beijing Liaoning Hotel)

中文地址：中国北京市海淀区北四环西路甲 2 号

邮编：100190

English Address: A2, North Fourth Ring Road West, Haidian District, Beijing, 100190, China

前台电话 / Front Desk: +86-10-62589999



会议日程

2025年11月17日上午（地点：南楼219）			
时间	报告人	报告题目	主持人
8:00-8:10	开幕式		张林波
8:10-8:40	孙树瑜 Shuyu Sun (Tongji University)	Multipoint Stress Mixed Finite Element Methods for Linear Viscoelasticity	
8:40-9:10	Rishabh Vishnu More (Monash University)	Micromechanical origins of yield stress and multiscale evolution of structure in dilute soft particulate gels	袁学锋
9:10-9:40	Prabhakar Ranganathan (Monash University)	If You Can't Thin, You Can't Win: Capillary Breakup as a Benchmark for Polymer Constitutive Models	
9:40-10:10	合影、休息		
10:10-10:40	赵立豪 (清华大学)	强剪切稀化流动中纤维颗粒诱导的不稳定流动研究	
10:40-11:10	许晓阳 (西安科技大学)	高聚物成型加工问题的SPH方法研究进展	张劲军
11:10-11:40	钟旦明 (浙江大学浣江实验室)	基于制备参数的水凝胶本构模型及其在材料性能设计方面的应用	
11:40-12:10	刘庚鑫 (东华大学)	自主可控和自动化的流变仪	

2025年11月17日下午（地点：南楼219）				
时间	报告人	报告题目	主持人	
14:00-14:30	刘铁刚 (北京航空航天大学)	高阶间断有限元并行软件开发框架及应用	张晨松	
14:30-15:00	林峰辉 (中国科技大学)	粘弹性湍流直接数值模拟的高效GPU加速算法		
15:00-15:30	陈国 (中国石油勘探开发研究院)	化学驱油物化机理及数值模拟技术	于海军	
15:30-16:00	李晓丽 (山东大学)	High-order and physics-preserving schemes for two-phase flows in porous media		
16:00-16:20	讨论、休息			
16:20-16:50	晋刚 (华南理工大学)	复杂流场下的流体动力驱动粒子操控	于海军	
16:50-17:20	蒋凯 (湘潭大学)	液晶高分子体系复杂结构自组装行为的理论研究		
17:20-17:50	冷伟 (中国科学院数学与系统科学研究院)	面向地震勘探与冰川动力学的粘弹性数值模拟方法研究		
17:50-18:20	杨朔 (北京雁栖湖应用数学研究院)	Projection-free iterative schemes for some non-convex constrained variational problems		

2025年11月18日上午（地点：南楼219）			
时间	报告人	报告题目	主持人
8:00-8:30	袁学锋 (广州大学)	Toward AI-Enabled Predictive Modeling of Elastic Turbulence and Turbulent Drag Reduction	冷伟
8:30-9:00	陈帆 (北京大学)	复杂反应流体的人工智能建模方法及应用	
9:00-9:30	蔡力 (西北工业大学)	求解心血管流固耦合问题的 PINN 方法研究	
9:30-10:00	周天航 (中国石油大学 (北京))	人工智能大模型耦合多尺度模拟在化工中的应用	
10:00-10:20	讨论、休息		
10:20-10:50	叶挺 (吉林大学)	血液流变学的数值模拟：细胞力学与血流动力学的多尺度关联	张硕
10:50-11:20	王智超 (湘潭大学)	复杂岩土弹塑和弹粘塑系列本构模型构建及应力积分算法	
11:20-11:50	欧治松 (武汉岩土力学研究所)	Interface-Driven Multi-Scale Dynamic Simulation Method for Multiphase Rheology	
11:50-12:20	徐勘 (中国科学院数学与系统科学研究院)	Frame hydrodynamics for the biaxial nematic phase: modeling, analysis and numerical method	
2025年11月18日下午（地点：南楼219）			
时间	主题研讨		主持人
14:00-16:00	“AI-流变学”协同创新——AI 赋能流变学的机遇与挑战		袁学锋

会议报告题目和摘要

(按报告顺序排列)

Multipoint Stress Mixed Finite Element Methods for Linear Viscoelasticity

Shuyu Sun Tongji University

Abstract: When a body of material is subjected to mechanical loads, very often, materials do not merely display elastic behavior. In many materials, previous behavior may impact the mechanical response. In particular, viscoelastic materials possess both elastic characteristic of solid and viscous characteristic of fluid, which is devoting an increasing attention, particularly to the applications of synthetic polymers or biological materials. In this talk, we propose a family of Multipoint Stress Mixed Finite Element (MSMFE) methods for linear viscoelasticity with weak symmetry on quadrilateral grids. The methods are constructed based on the lowest order Brezzi-Douglas-Marini mixed finite element spaces for elastic and viscous stress, piecewise constant velocity and piecewise constant (linear) vorticity. A special quadrature rule is applied for local stress and vorticity elimination. This results in a positive definite cell centered velocity-vorticity or only velocity system at each time step. Unconditional energy-dissipation of the MSMFE methods is proved rigorously. The accuracy of all the numerical solutions in their nature norms are established to be first order space convergence, both for the semi-discrete and fully-discrete formulations. Numerical results validate the theory results of the proposed methods. This is a joint work with Prof. Yang Wang in Hubei Normal University.

个人简介：孙树瑜，同济大学数学科学学院院长，教育部长江学者讲座教授。他先后于1991年和1994年毕业于天津大学获学士和硕士学位，随后继续就读于天津大学化工研究所获化学工程专业博士（1997年，师从中国科学院院士余国琮）；

之后就读美国德克萨斯大学奥斯丁分校并获计算与应用数学专业博士（2003年，师从美国国家工程院院士Mary Wheeler）。他于2003年至2009年间先后在美国德克萨斯大学奥斯丁分校任博士后和副研究员及在美国克莱姆森大学任助理教授兼博士生导师。2009年8月，他作为百位创校教授之一加盟阿卜杜拉国王科技大学（KAUST），任该校计算传质现象实验室（CTPL）主任，地球科学系教授，石油工程系教授和数学系教授。2024年12月他全职回国加入同济大学。他已发表SCI期刊论文400余篇，总计被引超过15000余次，H指数63。先后指导硕博研究生共50余名（已毕业博士20名），博士后研究人员20余位。目前兼任 *Journal of Computational Physics* (JCP) 和 *Computational Geoscience* 等国际知名期刊的编委或者编辑，以及 *Applied Energy*, *Applied Thermal Engineering*, *Fuel*, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (CMAME), *Journal of Computational Physics* (JCP) 等国际知名期刊客座主编。他从2020年起至今，连续五年入选了“工程学科全球顶尖科学家”（斯坦福大学发布的全球前2%顶尖科学家榜单）；并在工程和数学两个学科都荣列国际知名学术网站 Research.com 发布的 2024 年度全球顶尖科学家名录，排名全球第1922名。他目前是InterPore Saudi Chapter的主席。

Micromechanical origins of yield stress and multiscale evolution of structure in dilute soft particulate gels

Rishabh More Monash University (Australia)

Abstract: Soft particulate gels—ubiquitous across consumable, injectable, and 3D-printable materials—exhibit complex rheological behavior arising from their evolving microstructure. These systems, formed by a small volume fraction of weakly attractive colloidal particles dispersed in a fluid medium, display hallmark features such as a finite yield stress, shear thinning, and thixotropy. While macroscopic manifestations like yielding and time-dependent viscosity are well recognized, a quantitative link between these behaviors and the underlying microstructural dynamics remains elusive.

In this study, we explore the interplay between microscopic constraints and multiscale structure evolution that governs the rheology of soft particulate (depletion) gels. Using coarse-grained particle-level simulations, we uncover that the emergence of yield stress cannot be explained solely by network connectivity or attractive forces. Instead, we identify *rotational constraints* between bonded particles as a critical, previously overlooked factor that gives rise to mechanical rigidity and finite yield stress. Building upon this micromechanical insight, we further examine the multiscale structural evolution of these gels under flow and rest conditions to elucidate the origins of thixotropy.

We propose physically grounded measures of the evolving structure—ranging from coordination number (microscopic) to cluster fractal dimension (mesoscopic) and effective cluster volume fraction (macroscopic)—and demonstrate their correspondence with the phenomenological structure parameter (λ) used in thixotropic constitutive models. This framework bridges particle-level physics and continuum descriptions, providing a unified understanding of how microstructural constraints, hierarchical reorganization, and stress response are interlinked.

Together, these findings establish a pathway toward structurally informed rheological models and rational design strategies for engineering next-generation soft materials with tunable flow and solidification properties for applications spanning cosmetics, food, bioprinting, and soft robotics.

If You Can't Thin, You Can't Win: Capillary Breakup as a Benchmark for Polymer Constitutive Models

Prabhakar Ranganathan Monash University (Australia)

Abstract: Complex flows in soft matter are fundamentally about macro–micro coupling: continuum deformation fields tightly linked to evolving microstructural dynamics. For any complex fluid, one cannot hope to tune microstructural parameters

toward engineering design objectives if the constitutive model connecting these scales is inaccurate. In viscoelastic polymer solutions, this challenge is especially acute, since complex flows typically involve strong extensional deformations and the buildup of large normal stresses as molecules stretch. This makes experimental testing of constitutive models indispensable.

Capillary thinning provides the simplest complex flow--a nominally zero-dimensional macroscopic necking dynamics governed directly by polymer microstructure. It should therefore serve as the acid test of constitutive models: if a theory cannot capture capillary thinning, it is unlikely to succeed elsewhere. Yet, the Capillary Breakup Extensional Rheometer (CaBER) is still widely interpreted as a tool to obtain a “relaxation time.” The troubling and systematic dependence of this inferred time on device geometry reveals a deeper truth: CaBER does not measure a relaxation time, but rather probes a self-selected extensional strain rate set by the balance of capillary and polymer stresses.

In this talk, I shall demonstrate this idea for dilute and semidilute-unentangled polymer solutions by showing that while both the FENE-P and the Conformation-and-Concentration Dependent Drag (C2D2) models appear to predict the same qualitative behaviour, only the latter is able to systematically predict and explain experimental observations across a wide range of polymer–solvent combinations, polymer molecular weights, and concentrations. This highlights the importance of incorporating the physics of both intra- and intermolecular hydrodynamic interactions into the constitutive model. I shall briefly outline how the C2D2 model can be extended with insights from blob theory to include multimodal response, polydispersity, as well as other interactions including excluded volume or electrostatic interactions. With the correct microstructural model, one can also clarify what is universal — leading to data collapse onto master plots — and what is not.

强剪切稀化流动中纤维颗粒诱导的不稳定流动研究

赵立豪 清华大学

摘要: 研究剪切稀化流动中纤维颗粒的动力学特性对预测复合材料力学性能具有重要意义。鉴于此, 本文通过浸没边界方法数值模拟了剪切稀化流体(Carreau流体)槽道流中纤维颗粒的取向和空间分布特性及其对流动的调制作用。结果表明, 剪切稀化流变特性显著影响纤维的取向微结构及空间分布特性。纤维颗粒在剪切稀化流体中呈现分层取向特性: 在弱剪切稀化效应($Cu < 8$)流动中, 纤维颗粒呈现3层取向微结构(shell-core-shell), 而在强剪切稀化效应($Cu > 8$)条件下, 纤维颗粒表现为5层取向结构(skin-shell-core-shell-skin)。在纤维颗粒空间分布方面, 强剪切稀化效应使纤维颗粒空间分布更加均匀, 且倾向于聚集在壁面附近。此外, 在强剪切稀化条件下, 当纤维悬浮液呈现出不稳定流动现象, 不同于槽道中牛顿流体的惯性湍流, 纤维悬浮液不稳定流动的脉动速度呈现出近似各向同性特性, 且流向湍动能谱近似满足-3次率。

个人简介: 赵立豪, 清华大学长聘教授, 长期从事复杂湍流两相流基础研究, 在JFM、PRL、Sci. Adv.、Nature Sustain.等期刊上发表SCI论文百余篇, 成果曾入选JFM Focus on Fluids、美国物理联合会AIP Scilight等。入选了国家特殊支持计划领军人才(2024)、德国洪堡基金会资深学者(2024)、国家海外高层次青年人才计划(2016), 获得了周培源青年力学奖(2023)等。担任包括International Journal of Multiphase Flow在内的多个国际期刊编委、中国力学学会流体力学专委会秘书长、环境力学专委会副主任及对外交流与合作委员会副主任等。

高聚物成型加工问题的SPH方法研究进展

许晓阳 西安科技大学

摘要: 光滑粒子流体动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)方法是一种拉格朗日型的无网格数值方法, 它既保留了拉格朗日方法描述物质界面准确的优势, 又兼备了欧拉方法易处理大变形的长处, 因此适宜模拟含有自由面的粘弹性流动问题。本报告将介绍SPH数值方法的研究进展及其在高聚物注塑成型加工问

题中的典型应用，包括SPH基础算法的改进、多物理场耦合算法的开发、注塑成型多尺度模型的建立、复杂型腔注塑模型的构建等。

个人简介：许晓阳，西安科技大学教授、博士生导师。主要从事Navier-Stokes方程的数值解法、复杂流体的多尺度建模与计算、无网格SPH方法的理论及应用、深度学习/机器学习的数学基础、工业仿真软件的研发等研究。主持国家自然科学基金、省部级及各类纵向项目10余项，发表SCI论文30余篇，其中ESI高被引论文(全球前1%)1篇。入选陕西省“高层次人才特殊支持计划”青年拔尖人才、陕西省青年科技新星等人才计划，博士论文入选“陕西省优秀博士学位论文”。

基于制备参数的水凝胶本构模型及其在材料性能设计方面的应用

钟旦明 浙江大学浣江实验室

摘要：水凝胶是生物医学、柔性器件等领域不可或缺的功能性软材料。水凝胶的力学性能与其制备参数密切相关，然而现有的本构模型通常仅描述水凝胶的宏观力学行为，而忽略制备参数与材料微观结构、宏观性能间的内在关系，因此本构模型在指导材料设计与性能调控方面的能力亦不足。在本研究中，通过结合连续介质力学与高分子物理理论，建立了交联程度、初始单体含量、当前含水量等制备参数与交联模量、缠结模量、特征松弛时间等物理量间的映射关系，发展了基于制备参数的超弹性与粘弹性本构模型。在力学模型的指导下，进一步提出了结合低交联和脱水诱导缠结的水凝胶增韧、抗疲劳策略。低交联度导致长链结构，为高断裂韧性与高疲劳阈值提供基础。脱水处理增强了分子链间的缠结作用，既大幅提升材料模量，亦提供能量耗散，增强材料抵抗裂纹扩展的能力。所发展策略在保证水凝胶高含水量的前提下，同时提升了材料的模量、拉伸性、断裂韧性与疲劳阈值，打破了传统单网络水凝胶难以克服的模量-断裂韧性冲突与模量-疲劳阈值冲突。本研究为水凝胶材料力学性能的预测与调控以及高力学性能水凝胶的设计提供了理论基础。

个人简介：浣江实验室研究员、浙江大学平台百人计划研究员，第十届中国流变学专业委员会委员，第四届中国力学学会青年人才蓄水池项目入选者。从事软材

料本构建模、性能调控、仿生设计与应用等研究，以第一/通讯作者在 *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*、*Nature Communications*、*Macromolecules* 等国际权威期刊上发表学术论文，SCI 引用 1200 余次，主持国家自然科学基金青年基金项目、面上项目等课题。研究成果揭示了溶剂含量变化引发超弹-黏弹转变的微观机制，建立了大变形流变学本构模型；发展了以缠结临界聚合物含量为核心变量的超弹性本构关系，构建了制备参数与力学性能间的映射关系；开发了水凝胶增韧、抗疲劳新策略，打破了单网络水凝胶难以克服的模量-韧性冲突与模量-疲劳阈值冲突，提升了材料在极大变形、极高能量释放率等极端载荷下的实用性。

自主可控和自动化的流变仪

刘庚鑫 东华大学

摘要：AI 在流变数据解读方面已有多项进展，但是受制于流变仪，在实验验证方面还存在诸多限制。例如流变仪中的旋转流变仪被欧美巨头所垄断，难以自定义测量方式、兼容性不足、自动化代价高昂。我们将介绍具有自主知识产权的多种流变仪，能够施加剪切、拉伸等形变方式，适用于高分子熔体、溶液等，覆盖宽的黏弹性范围，并具备未来高通量集成的可能。

个人简介：东华大学先进低维材料中心研究员，先进纤维材料全国重点实验室固定成员，博士生导师；发展新的流变测量仪器装置，致力于阐明高分子解缠结和超越缠结的独特流变规律。获中国流变学青年奖、冯新德高分子奖最佳文章提名奖、优秀自费留学生奖学金、阿克伦大学高分子学院Frank Kelly奖；入选上海高校特聘教授“东方学者”。担任流变学专业委员会委员、力学学会高分子流变工作组组员、国家市场监管总局全国新材料与纳米计量技术委员会MTC29国际文件工作组组员。

高阶间断有限元并行软件开发框架及应用

刘铁钢 北京航空航天大学

摘要：基于间断有限元方法和直接间断有限元方法我们开发了一个基于组件的CFD开发框架（HODG），将前沿的有限元方法框架结合OpenMP/MPI/GPU为代表的高性能计算技术集成于平台之上，实现了一个高精度、快速高效、适用于二维、三维非结构、混合、高阶网格的Euler、Navier-Stokes方程的流场求解器，成功将高阶间断有限元方法应用到了实际问题中。针对求解定常跨音速和超音速流鲁棒性差的问题，我们提出了一个全新的内嵌数学物理机理的AI激波指示子和一种新的人工粘性方法，能有效提高数值格式的收敛性和鲁棒性。针对气动优化类问题，我们提出了一种给中间物型初始流场分布技术，大幅提升了基于高阶间断有限元方法进行外形优化设计的效率。开发框架经过了大量标准模型的测试与实验验证，并集成到国家数值风洞软件平台。

个人简介：北京航空航天大学教授，博士生导师，教育部“数学、信息与行为”重点实验室主任。长期从事计算数学和计算流体力学教学和研究工作，主要研究可压缩多介质流体、气动优化、流-固耦合数值方法与仿真。发表SCI论文100余篇，申请专利10余项。获2022年高等教育（研究生）国家级教学成果奖一等奖，北京市育人先锋。担任中国数学会计算数学分会常务理事，中国工业与应用数学学会数学与航天交叉学科专委会副主任，北京市计算数学学会常务理事，《计算数学》《计算物理》等期刊编委。

粘弹性湍流直接数值模拟的高效 GPU 加速算法

林锋辉 中国科学技术大学

摘要：直接数值模拟是揭示聚合物诱导的粘弹性湍流复杂机理的关键手段，然而其面临高昂的计算成本以及在高韦森伯格数（ Wi ）下的数值不稳定性问题。本报告介绍了一种针对该问题的高效GPU加速算法。该算法基于有限差分方法，集成了适用于FENE-P和Giesekus两种常用本构模型的粘弹性求解模块。为克服高 Wi 数下的数值不稳定性，我们采用了基于张量插值和WENO格式的空间离散化

方案，以保证聚合物构象张量的对称正定性。性能测试表明，该算法在多GPU平台上表现出优异的并行可扩展性。利用该算法的高计算效率，我们成功模拟了多种典型的粘弹性湍流现象，包括高雷诺数下的最大减阻极限、转捩雷诺数下的弹惯性湍流以及零惯性条件下的纯弹性湍流。研究结果表明，该GPU加速的数值方法为大规模、高保真地研究复杂粘弹性流动机理提供了一个强大而可靠的工具。

个人简介：林锋辉，中国科学技术大学，主要从事粘弹性湍流的数值模拟及其流动机理等方面的研究工作。在粘弹性流动的数值计算方法、粘弹性Taylor-Couette湍流等研究领域取得了具有创新性的研究成果，发表在J. Fluid Mech.、J. Non-Newton. Fluid Mech.、Phys. Rev. Fluids等期刊上，同时特别受邀在英国皇家学会的经典期刊Philos. Trans. Royal Soc. A发表关于粘弹性Taylor-Couette湍流的综述论文，代表性成果被JFM Focus on Fluids以专题形式进行报道。

化学驱油物化机理及数值模拟技术

陈国 中国石油勘探开发研究院

摘要：报告介绍了中国石油化学驱油发展历程、对驱油机理创新认识、物理化学现象数学描述方法和数值模拟技术。依据化学驱油实验室研究成果和现场应用取得的认识，建立了黏弹性聚合物驱油数学模型、化学复合协同效应数学模型、地质化学反应数学模型、化学相态数学模型和化学体系自适应驱油机理数学模型，完善描述了化学驱油过程发生的复杂物理化学现象，建立了适应复杂数学模型的高效求解方法，研发了化学驱油数值模拟软件。

个人简介：陈国，教授级高级工程师，大学毕业于哈尔滨船舶工程学院应用数学专业，硕士和博士毕业于清华大学管理科学与工程专业。从事化学驱油理论和现场应用研究，1990-2021期间在大庆油田勘探开发研究院工作，现在中国石油勘探开发研究院提高油气采收率全国重点实验室工作，任高级研究员。

High-order and physics-preserving schemes for two-phase flows in porous media

李晓丽 山东大学

摘要：In this talk, we first present several high-order and physics-preserving numerical schemes for two-phase flow in porous media. The constructed schemes only need to solve one linear system and a nonlinear algebraic equation with negligible computational cost at each time step. We also prove that the proposed schemes are energy stable, global mass-conservative and bounds-preserving for each phase without any restrictions of time step size. Furthermore, we will present recent developments in ensuring local mass conservation and preserving original energy dissipation.

个人简介：李晓丽，山东大学教授，博士生导师，国家高层次青年人才入选者，山东省杰青，山东大学杰出中青年学者。担任中国数学会计算数学分会常务理事，CSIAM油水资源数值方法专委会秘书长。主要研究领域为偏微分方程数值解与计算流体力学。在SIAM J. Numer. Anal., SIAM J. Sci. Comput., Math. Comp., J. Fluid Mech., Math. Mod. Meth. Appl. Sci. 及 J Comput. Phys. 等计算数学高水平期刊上发表学术论文多篇。主持国家自然科学基金面上项目、重点项目子课题、青年项目等多个国家及省部级项目。

复杂流场下的流体动力驱动粒子操控

晋刚 华南理工大学

摘要：在微尺度上对软物质粒子（如分子、细胞、生物组织等）施加精准的应力激励，是研究其流变学行为的关键实验手段。相比于光、电、磁等外场驱动方法，流体动力驱动方法具有成本低、安全性高、且不依赖材料特性等优势，为软物质流变学研究提供了极具吸引力的解决方案。然而，在实际流场中，软物质粒子往往经历复杂应力作用，流场时空分布的复杂性以及粒子的随流运动都对实现应力

精准施加提出了严峻挑战。本团队结合人工智能技术，提出一种复杂流场下的流体动力驱动粒子操控方法，通过精确调控粒子空间位置，成功对流场内软物质粒子精准施加时变拉伸-剪切复合应力，为软物质流变学研究开辟了新的实验途径。

个人简介：晋刚，教授，博导，华南理工大学副校长，新疆大学副校长。长期从事聚合物加工过程实时测量与表征技术及相关仪器开发等相关研究。近几年先后主持，国家重大科学仪器设备开发专项、“十四五”国家重点研发计划项目、“十三五”国家重点研发计划项目子课题和国家自然科学基金面上项目。曾获得国家科技进步二等奖1项，国家技术发明二等奖1项，教育部科技发明二等奖1项，广东省科技进步一等奖1项、二等奖1项；发表论文50余篇，其中SCI收录论文30余篇，授权发明专利10项，实用新型专利16项，软件著作权7项。

液晶高分子体系复杂结构自组装行为的理论研究

蒋凯 湘潭大学

摘要：液晶高分子兼具晶体有序性与液体的流动性，其自组装形成的复杂结构在电子器件、智能响应材料、生物医用载体等前沿领域具有重要应用价值。然而，受限于实验中分子拓扑、液晶相互作用等多因素耦合调控难度，以及纳米尺度动态结构的实时表征瓶颈，对这些复杂结构的稳定性及形成机制仍缺乏全面理解。在本报告中，我们采用自洽平均场理论（研究嵌段共聚物自组装相行为及其热力学稳定性最成功的方法之一），构建了适用于液晶高分子体系的自洽场模型。针对该模型高维、非局部、多解的非线性鞍点问题，我们设计了一套精确、高效的并行数值算法，系统研究了T型、X型等液晶高分子体系的自组装相行为，包括周期晶体、准晶、晶界等，不仅成功复现了实验观察到的复杂结构及其转变序列，更揭示了液晶相互作用与高分子链熵效应协同调控结构稳定性的内在机制。

个人简介：蒋凯，湘潭大学教授，教育部重大人才计划青年学者；主要从事无理数引发的数学、算法及其应用，软物质体系可计算建模与模拟等方面的研究；主持国家重点研发计划重点项目课题、湖南省科技创新领军人才项目、国家自然科

学基金面上项目、湖南省杰出青年基金；获宝钢优秀教师奖；湖南省优秀博士论文指导教师；《计算数学》编委。

面向地震勘探与冰川动力学的粘弹性数值模拟方法研究

冷伟 中国科学院数学与系统科学研究院

摘要：粘弹性过程广泛存在于地球系统中，在地震波传播与冰盖流动中均起着关键作用。本报告将从这一统一的物理视角出发，介绍我们在地震勘探和冰川冰盖模拟中的相关研究。在地震勘探方面，报告重点介绍基于频域粘弹性波动方程的正演模拟方法，以及针对复杂地下结构开发的区域分解算法。该方法通过在子域间构造精确的界面匹配条件，实现高效并行与高精度求解，为大尺度地震波传播与成像提供了新的计算框架。在冰冻圈研究方面，冰川和冰盖作为地球五大圈层之一——冰冻圈的重要组成部分，其动力学变化对区域水资源、海平面上升和气候系统耦合具有深远影响。报告将进一步介绍我们在冰川冰盖流动模拟中研究和发展的高效数值方法，以及自主研发的冰盖数值模式，旨在实现复杂地形下大规模并行、稳定而精确的长期演化计算。

个人简介：冷伟，中国科学院数学与系统科学研究院，副研究员。2006年本科毕业于山东大学数学院，2011年于中科院数学与系统科学研究院获理学博士学位。2011至今在中科院数学与系统科学研究院工作。主要研究方向：并行计算、区域分解方法、地球物理问题的数值方法。曾在《SIAM Journal on Scientific Computing》、《Journal of Geophysical Research》、《The Cryosphere》等计算数学和地球物理一流期刊发表多篇学术论文。在冰盖数值模拟方面，提出了求解冰盖数值模拟的非线性方程组的高效迭代方法和求解线性方程组的高效预调件方法，并研发了自主知识产权的冰盖数值模拟软件PoLarIS；在频域波动方程区域分解方面提出了对角扫描区域分解算法。

Projection-free iterative schemes for some non-convex constrained variational problems

杨朔 北京雁栖湖应用数学研究院

摘要: In recent years, numerous numerical studies have been conducted on non-convex constrained energy minimization problems. Projection-free gradient flow methods, which handle constraints through tangent space updates, have been widely employed and analyzed. In our recent work, we propose a general framework for analyzing constraint violations in any projection-free iterative scheme that utilizes the tangent space update strategy. Furthermore, we enhance the conventional gradient flow by incorporating momentum terms. Our new algorithms show accelerated convergence and achieve higher-order constraint consistency.

个人简介: 杨朔, 2021年在美国马里兰大学取得博士学位, 现为北京雁栖湖应用数学研究院助理研究员。他的研究主要关注有材料科学背景的相关数学问题的建模、计算与数值分析。

Toward AI-Enabled Predictive Modeling of Elastic Turbulence and Turbulent Drag Reduction

袁学锋 广州大学/Guangzhou University

摘要/Abstract: Turbulent Drag Reduction (TDR) and Elastic Turbulence (ET) are extreme manifestations of the nonlinear dynamics of polymer solutions. In this talk, we shall discuss the fundamental challenges in the predictive modelling of TDR and ET, and how AI could accelerate a better understanding of the multiscale dynamic coupling mechanisms between polymeric chain molecules and the eddies of different sizes in these two dynamic extremes. A machine learning method for the super-resolution reconstruction of turbulence will also be proposed and validated.

个人简介: Professor YUAN Xue-Feng obtained a PhD from the University of

Manchester, UK in 1989. He is a Chartered Physicist, a Fellow of the Institute of Physics (FInstP) and a Fellow of Royal Society Chemistry (FRSC). He is the President, Chinese Society of Rheology (CSR), the Chinese Delegate of the International Committee on Rheology (ICR). He has more than 40 years research experience in theoretical, computational and experimental rheology of complex fluids.

复杂反应流体的人工智能建模方法及应用

陈帜 北京大学

摘要:在科学计算领域,计算流体力学(Computational Fluid Dynamics,简称CFD)被广泛认为是最成功的范例之一,已成为众多行业的重要研发设计工具。相比于CFD在空气动力学等领域的成功,涉及剧烈燃烧复杂化学反应的CFD,远没有到达同等的高精度和可信度。在AI for Science的科研新范式浪潮下,深度学习为代表的人工智能方法突破传统牛顿范式的物理建模限制,从根本上提升了复杂反应流体模拟的效率和精度。在此背景之下,报告人将分享面向AI for Science时代开发的开源计算平台DeepFlame,并分享燃烧流体研究与机器学习和高性能计算领域交叉的初步探索与实践。

个人简介:陈帜,北京大学力学与工程科学学院研究员、博导,北京科学智能研究院副院长。2016年获剑桥大学博士学位,2021入职北京大学,主要研究方向为湍流燃烧、高性能计算、AI for Science等。主持国家自然科学基金下一代人工智能重大研究计划重点项目、AI赋能工程科学专项项目。入选国家青年拔尖人才、中国科协青年人才托举工程,曾获英国皇家工程院Exceptional Talent奖、国际燃烧学会Bernard Lewis Fellowship奖。近年来致力于推动人工智能、高性能计算与燃烧流体等领域的交叉,主导了DeepFlame开源平台、FlameBench科学数据集等AI for Science科研生态建设工作,相关火箭发动机AI应用成果获2025年中国计算机学会超算最佳应用奖。

求解心血管流固耦合问题的 PINN 方法研究

蔡力 西北工业大学

摘要: 针对临床人体胸主动脉内血液流动问题开展了研究, 系统评估了ICPINN方法在真实胸主动脉血流建模中的预测能力。对于结构异常的部分主动脉, 纯物理驱动的全连接神经网络即可获得较好的预测精度; 对于结构复杂的健康和病变全胸主动脉, 则需要融合数据与物理约束的深度Galerkin方法(Deep Galerkin method)网络结构, 才能达到更加准确的预测效果。

个人简介: 蔡力, 西北工业大学教授、博导, 中国数学会计算数学分会常务理事, 陕西省工业与应用数学学会副理事长。主持/参与10余项国家级科研项目, 发表学术论文90余篇, 编写专著/教材3部。获陕西省科学技术二等奖1项、陕西高等学校科学技术一等奖1项、陕西高等学校科学技术研究优秀成果一等奖1项。

人工智能大模型耦合多尺度模拟在化工中的应用

周天航 中国石油大学（北京）

摘要: 人工智能大模型与多尺度模拟的耦合为化工行业突破传统瓶颈提供了关键路径。针对化工研发的多尺度复杂性与实验滞后痛点, 该技术通过跨尺度建模误差控制、分子动力学加速等方案实现高效突破, 在微观至宏观各层级建立精准关联。本次报告主要结合研究团队在化工、长时储能中的具体应用进行展示从分子到工业的具体展示。

个人简介: 周天航, 副教授, 院长助理, 获得德国最优等荣誉博士学位、中国石油大学（北京）青年拔尖人才、北京市“高创计划”青年人才托举、东营市黄河三角洲学者, 以“AI for Science”耦合多尺度模拟为研究手段, 围绕传统能源的低碳化和低碳能源的实用化开展先进分子设计和工艺优化, 主持/参与国家2030重大专项、基金委重点项目、国家自然基金青年项目、中国石油项目、中国石化项目等多项智能化相关课题, 获授权中国软著6项（智能化方向）, 以第一作者/通讯作者身份在Nat. Commun., Adv. Mater., J. Chem. Theory Comput.等能源和

计算方法TOP期刊发表SCI论文27篇，共发表论文40篇，担任《化工学报》、《化工进展》、《油气与新能源》青年编委。

血液流变学的数值模拟：细胞力学与血流动力学的多尺度关联

叶挺 吉林大学

摘要：血液作为一种复杂的非牛顿悬浮液，其宏观流变特性在很大程度上取决于其中细胞的微观力学行为。本报告从血液流变学发展历史出发，综述了细胞尺度血液流变学模拟的理论基础与研究进展。近些年，高性能计算使数十亿细胞量级的模拟成为可能；人工智能技术显著提升了细胞追踪、行为预测与降阶建模的能力；日益丰富的开源软件大大降低了跨学科研究人员的进入门槛，各类研究成果不断转化为生物医学应用。然而，血液流变学的数值模拟仍需在物理真实性与计算效率之间寻求平衡，面临多尺度整合、生理边界条件设定、计算成本与实验验证等多重挑战。展望未来，数据-物理融合、多尺度建模及高性能计算将为构建高可信度的血流数字孪生提供新途径，从而缩小数值模拟与临床应用之间的差距。

个人简介：叶挺，吉林大学数学学院，教授、博士生导师。2012 年于新加坡南洋理工大学获得博士学位，2014 年进入吉林大学数学学院工作。主要从事无网格粒子法理论及其在血液流变学模拟方面的应用研究，特别在耗散粒子动力学、流固耦合算法、以及细胞尺度血流模拟方面做了一些工作。

复杂岩土弹塑和弹粘塑系列本构模型构建及应力积分算法

王智超 湘潭大学

摘要：为了表征岩土体超固结、结构性、剪胀性、各向异性和率敏性等复杂力学性质，并考虑土体初始粘聚力、中主应力和小应变刚度的影响。本文以上下负荷面模型构建方法为基础，引入统一表述Von-Mises、Tresca、Mohr-Coulomb、Lade-Duncan和Matsuoka-Nakai五种屈服破坏准则的形状函数 $\Gamma(\theta)$ 来和抗拉强度

Pt, 构建一种呈水滴形的统一盖帽屈服面，并通过参数 χ 控制剪胀规律，利用率敏感性来反映土体的粘塑性，选择塑性或粘塑性偏应变增量为迭代变量，利用Newton-Raphson 迭代开发了系列新模型的应力积分算法，编写了UMAT子程序，成功将新模型嵌入大型商业有限元软件ABAQUS中。结果表明：1) 系列新模型能同时表征土体的超固结、结构性、剪胀和应力诱导各向异性，预测结果与试验数据吻合良好；2) 系列新模型物理意义明确表述简单，便于工程推广应用；3) 系列新模型的应力积分算法收敛速度快，每个增量步所需的迭代次数少，收敛精度高，算法运行稳定可靠。

个人简介：王智超，博士、教授，湘潭大学土木工程学院党委委员、道路与桥梁工程系主任，“岩土力学与工程安全”湖南省重点实验室副主任，湖南省岩石力学与工程学会副理事长、湖南省力学学会理事、第十届全国流变学专业委员会委员。先后主持国家自然科学基金和湖南省自科学基金3项、国家留学基金1项，主持其它纵横向课题18项；发表学术论文70多篇，其中被SCI、EI收录论文30余篇；申请国家专利15项。主要从事道路工程研究，研究特色为流变学，并在岩土本构模型理论、路基沉降计算、地下工程以及路面工程方面有所专长。2017~2019年入选湘潭大学韶峰学者特聘岗，2014年获第八届中国流变学青年奖。

Interface-Driven Multi-Scale Dynamic Simulation Method for Multiphase Rheology

欧治松 中国科学院武汉岩土力学研究所

摘要：Multiphase systems exhibit complex interactions among distinct phases and physical processes that span a wide range of spatial and temporal scales. Traditional modeling approaches rely on empirical closure relations to approximate interphase interactions, which limits their generality, accuracy, and predictive capability. In this work, we introduce a physics-based, interface-driven multiphase modeling framework that systematically bridges phase-scale dynamics and continuum-scale representations through a unified one-field approach. By informing interfacial mechanics—such as

momentum, heat, and mass transfer—at the phase boundaries, the proposed method enables consistent coupling across scales without resorting to *ad hoc* assumptions. This framework is broadly applicable to a variety of multiphase scenarios, including fluid-solid, fluid-fluid, and reactive systems, and offers a promising, scalable path towards multiscale rheology simulations grounded in fundamental physical principles.

个人简介：欧治松，助理研究员。国家重大科技基础设施（中国地镜）项目骨干，入选博士后国家资助计划。主持国家自然科学基金，中国科学院特别研究助理计划项目等。从事多相流与多介质力学研究，在多相界面力学理论与数值方法方面取得进展。获国际会议最佳报告奖2次，发表JCR Q1论文20余篇，授权发明专利7项，登记软件2项。

Frame hydrodynamics for the biaxial nematic phase: modeling, analysis and numerical method

徐勘 中国科学院数学与系统科学研究院

摘要： Biaxial nematic phases can be formed by non-axisymmetric rigid molecules. The corresponding hydrodynamics is constructed by carefully deriving intermolecular and molecule-fluid interactions from the molecular architecture. Then, the tensor model is constructed by closure approximation, either through the maximum entropy state or using the quasi-entropy. The biaxial frame hydrodynamics is then deduced under the Hilbert expansion near the biaxial bulk energy minimum. The well-posedness and rigorous biaxial limit from the tensor model to the frame model is established. Numerical methods are designed emphasizing the frame constraints and the energy dissipation.

个人简介：徐勘博士在液晶建模与模拟、梯度流的数值方法方面取得了突出的原创成果，代表工作包括：针对复杂液晶分子发展了基于分子理论的系统建模方法；独立提出了拟熵这一可计算建模的有力工具；提出了梯度流的标量辅助变量方法。获 2024 ICCM Distinguished Paper Award 和 International Congress of Basic Science 2025 Frontiers of Science Award。

参会人员名单

(按姓名拼音排序)

姓名	单位
Prabhakar Ranganathan	Monash University, Australia
Rishabh Vishnu More	Monash University, Australia
蔡力	西北工业大学
曹绪祥	国家超级计算天津中心
陈国	中国石油勘探开发研究院
陈帜	北京大学
段莉莉	国家超级计算天津中心
冯润楷	中国科学院数学与系统科学研究院
黄丹晨	中南大学
蒋凯	湘潭大学
晋刚	华南理工大学
冷伟	中国科学院数学与系统科学研究院
李帅	国家超级计算天津中心
李晓丽	山东大学
梁显荣	华南理工大学
林锋辉	中国科技大学
刘庚鑫	东华大学
刘敬仁	华南理工大学
刘铁刚	北京航空航天大学
罗咏璇	湘潭大学
欧治松	武汉岩土力学研究所
潘定一	浙江大学
孙树瑜	同济大学
孙旭	中国石油大学（北京）
汪子尧	北京大学
王斌	湘潭大学
王红豆	国家超级计算天津中心
王齐	中国石油大学（北京）
王智超	湘潭大学
武桂松	中国科学院数学与系统科学研究院
谢炎	中国科学院数学与系统科学研究院
徐勘	中国科学院数学与系统科学研究院
许晓阳	西安科技大学
杨朔	北京雁栖湖应用数学研究院

叶挺	吉林大学
叶洋溢	中国科学院数学与系统科学研究院
于海军	中国科学院数学与系统科学研究院
余鹏	南方科技大学
袁学锋	广州大学
张晨松	中国科学院数学与系统科学研究院
张健	中科院力学所
张劲军	中国石油大学（北京）
张林波	中国科学院数学与系统科学研究院
张硕	中国科学院数学与系统科学研究院
张耀中	上海交通大学
张自兵	中国力学学会
赵梨	中国科学院数学与系统科学研究院
赵立豪	清华大学
钟旦明	浙江大学浣江实验室
周天航	中国石油大学（北京）
周岩	国家自然科学基金委员会数理科学部
左丽丽	中国石油大学（北京）