

# 学术报告

X U E S H U B A O G A O

## 报告题目

Optimization Models and Approaches for Strictly Correlated Electrons

## 报告人

刘歆 研究员

## 报告人简介

主要研究方向包括：流形优化、分布式优化及其在材料计算、大数据分析和机器学习等领域的应用。

- 中国科学院数学与系统科学研究院“冯康首席研究员”，博士生导师，计算数学与科学与工程计算研究所副所长。
- 中国科学院青年创新促进会理事长；中国运筹学会常务理事；中国工业与应用数学学会副秘书长，中国数学会计算数学分会常务理事。
- 现担任 MPC, JCM, JIMO, APJOR 等国内外期刊编委，《中国科学·数学》（中英文）青年编委，《计算数学》副主编。
- 分别于 2016 年, 2021 年和 2023 年获得国家自然科学基金委优秀青年科学基金项目、杰出青年科学基金项目和科技部重点专项的资助。

## 报告内容

In electronic structure calculations, Kohn-Sham equations rank among the most widely adopted mathematical models. However, due to the deficiency of available approximations for exchange-correlation energy, Kohn-Sham equations cannot well describe strictly correlated electrons at present. To this end, some models based on the strong-interaction limit of density functional theory have been developed in recent decades. The associated energy minimizations can be formulated as multi-marginal optimal transport problems with Coulomb cost (MMOT). Since the curse of dimensionality resides in MMOT, its low-dimensional reformulations are indispensable. In this talk, we consider the reformulation based on a Monge-like ansatz. We discuss the difficulties in the corresponding optimization problems, and also propose a global optimization

## 报告时间

2024 年 4 月 25 日（星期四）14:00-15:00

## 报告地点

长春理工大学 南校区研究生楼 302 会议室

## 组织单位

数学与统计学院 数学与工程科学交叉研究中心  
科学技术研究院 研究生院