

## 多尺度建模与计算研究

多尺度建模与计算是当今一个前沿性的课题。中国是较早涉足此领域研究的国家之一。本课题组张平文教授连续三年组织多尺度建模与计算学术研讨会。邀请到众多国内外从事多尺度问题研究的中青年学术带头人一起探索此前沿领域，由于该课题具有学科交叉性质，需要研究者具备扎实的基础学科功底。它吸引了众多不同领域的知名学者投入在此领域。由于发展较早，我们取得了丰硕的成果。我们相信在未来很长的时间里，这种具有多学科互补性质的领域将会是整个基础研究界的兴趣所在。

### A. 复杂流体计算

高分子流体具有复杂，丰富的现象，我们研究了多尺度模型，主要是哑铃和棒状模型。对这些模型，我们研究了方程的适定性，设计了计算格式，对某些格式做了数值分析。证明格式的稳定性和收敛性。利用新的模型，在大型机上模拟了高分子流体运动，观察到了分子运动的一些状态，如 Flow aligning, tumbling, wagging, Log-rolling, Kayaking 等，以及剪切变稀，旋转位移等现象。

### B. HMM 算法研究

HMM 算法是一研究多尺度问题新的计算方法。我们研究了椭圆方程 HMM 算法的稳定性和收敛性，对非线性和随机分布系数也得到深刻的收敛性结果。对抛物型方程 HMM 算法仍然有效。我们不仅设计了算法，也证明了算法的收敛性。我们近期的文章“Analysis of the Heterogeneous Multiscale Methods for Elliptic Homogenization Problems”已被美国数学学会杂志收录，该杂志是国际上数学领域最有影响力的期刊之一。

### C. 材料多尺度建模与计算

在材料多尺度建模与计算方面，我们研究了磁微观结构问题和晶体马氏体材料的无应力大变形问题。在微观尺度上分别采用多点 Young 测度和有限秩一凸包算法、在宏观尺度上采用有限元方法，并结合了如人工边界方法和网格变换法等高效算法。理论分析和数值实验的结果显示这些多尺度计算模型及算法是非常有效的，值得进一步的深入研究。有关的研究成果如下：

① 用多点 Young 测度和人工边界方法数值模拟磁微观结构问题。得到了较好的数值分析和计算结果。由于该方法考虑的是交换能为 0 的极限情况，所

以特别适合于大尺度材料的磁微观结构问题的数值模拟。

② 我们研究了晶体微观结构的多尺度计算模型，并应用该模型模拟了马氏体材料的无应力大变形。