复杂流体动力学保耗散结构的封闭近似和粗粒化建模

姜姗

摘要

模型约化是一种从高维复杂系统获取可计算的低维数学模型的方法，其在复杂流体动力学建模的发展中起着关键作用。对于高维复杂系统，其动力学方程的求解不是一件容易的事。一种常用的可计算方法是从 Fokker-Planck 方程中得出关于高维构型分布函数的低阶矩的演化方程。通常得到的矩方程是不封闭的，为使得方程封闭并保持好的耗散性质，可以利用拟平衡态封闭近似方法将高阶矩表示成低阶矩的形式。拟平衡态近似基于最大熵原理，可得到与热力学一致的粗粒化模型。尽管拟平衡态近似具有良好的数学和物理性质，但由于其计算成本高，而关于其快速有效的数值实现的工作很少，因此影响了其在实际问题中的广泛使用。在本文中，我们使用多项式和分片多项式逼近，有效地实现了单位圆和单位球面上的对称问题的拟平衡态近似。与使用线性或三次插值的现有方法相比，我们以较低的存储成本实现了高精度的算法。得到封闭的宏观模型的另一种行之有效的方法是数据驱动的粗粒化建模。本文的后半部分，我们将复杂流体动力学模型同基于广义 Onsager 原理的 OnsagerNet 深度学习方法相结合，通过数据驱动的办法，使用采样的轨迹数据训练得到满足变分结构的可解释的粗粒化模型。这种途径学到的动力学模型是参数化的常微分方程，可以保证系统的耗散性和长时间的稳定性。我们将其应用在 0+1 维 Doi-Smoluchski 方程模拟中，运用 5 个主成分变量就可实现约 99.5%的方差捕捉，训练得到的模型在保持结构的同时又能高精度拟合和预测轨迹数据。

关键词：矩封闭近似，拟平衡态近似，Bingham 分布，谱方法，分片多项式近似，Onsager 原理，模型约化，耗散结构