

求解 Ericksen-Leslie 方程的一阶精度、线性稳定的数值格式

韩宇倩, 牛丽芳, 贾宏恩
(太原理工大学数学学院, 山西 晋中 030024)

摘 要: 本文研究了液晶流不可压缩动力学方程组的数值求解问题. 利用鞍点方法构造泛函, 并对泛函进行变分, 提出了一个具有一阶精度的解耦数值格式. 通过数值模拟结合理论分析, 得出所提方法可以准确描述液晶中的缺陷、分子分布规律以及符合动力学规律的结论. 丰富了求解液晶动力学模型的内容.

关键词: 向量液晶; 有限元方法; 鞍点结构; 增量投影法

MR(2010) 主题分类号: 35Q35; 76A15

中图分类号: O241.82

文献标识码: A

文章编号: 0255-7797(2023)01-0086-09

1 引言

液晶的研究对于基础科学研究和工业应用都有重要意义. 许多专家和学者先后从微观分子到宏观连续建立了不同层次的数学理论^[1,2]. 目前研究主要集中在用以描述液晶中的缺陷、分子分布规律以及动力学规律的 Ericksen-Leslie 动力学方程组^[3-6].

简化的 Ericksen-Leslie 模型既保持了原模型的数学性质, 又降低了研究的难度. 求解该方程最大的困难在于指向矢的约束在数值模拟时难以实现, 为此提出一些相对松弛的约束条件, 如加罚方法和鞍点方法. 加罚方法研究由 [7] 提出, 之后被广泛研究应用, 可参考 [8-12]. 使用加罚方法的不足之处在于构造的数值格式稳定性过于依赖. 在文献 [13] 中将加罚方法和极限方法置于统一的框架下进行研究和探索, 该方法在克服指向矢的约束的同时引入的拉格朗日乘子还可以克服非线性带来的困难. 值得注意的是鞍点方法的研究较少, 新的实验工作和理论推广需要大量的建模和分析工作, 从分析的角度来看, 现有的工作远远不够. 本文使用增量投影算法结合显隐处理构造了一个一阶精度的、线性的、无条件稳定格式, 以期对相关研究提供参考.

2 数学模型

在 $Q = (0, T) \times \Omega, \Omega \in R^N (N = 2, 3)$ 上, 简化的 Ericksen-Leslie 方程如下:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \mathbf{d} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d} - \gamma(|\nabla \mathbf{d}|^2 \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}) = 0, \\ |\mathbf{d}| = 1, \\ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p + \lambda \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^t \nabla \mathbf{d}) = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

*收稿日期: 2021-10-25

接收日期: 2022-03-07

基金项目: 山西省自然科学基金资助 (201801D121016).

作者简介: 韩宇倩 (1996-), 女, 山西长治, 主要研究方向: 微分方程的数值解法.

其中, $\mathbf{d}:Q \rightarrow R^N$ 表示向列液晶流分子的局部指向矢, $\mathbf{u}: Q \rightarrow R^N$ 表示流体流动速度, $p:Q \rightarrow R^N$ 表示压力; $\lambda > 0$ 是弹性常数; $\gamma > 0$ 是松弛时间常数; $\nu > 0$ 是流体粘度常数. $(\nabla \mathbf{d})^T$ 是 $\nabla \mathbf{d} = (\partial_j d_i)_{i,j}$ 的转置, $|\mathbf{d}| = |d(x, t)|$ 表示 $\mathbf{d}$ 的欧几里得范数, $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d} = \sum_{i=1}^M u_i \partial_i \mathbf{d}$, $\Delta \mathbf{d} = \sum_{i=1}^M \partial_{ii} \mathbf{d}$.

上述方程中梯度的平方增长 $|\nabla \mathbf{d}|^2 d$ 以及弹性应力张量 $\nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^T \nabla \mathbf{d})$ 这两个复杂的非线性项以及非线性代数约束 $|\mathbf{d}| = 1$ 给我们的理论分析及数值模拟带来极大的困难, 特别是调和映照热流方程中的 $|\nabla \mathbf{d}|^2 d$ 在高维情况必定会造成奇性.

简化的 Ericksen-Leslie 方程的鞍点结构如下:

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{d} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d} - \gamma (q \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}) = 0, \\ \mathbf{d} \cdot \mathbf{d} - \varepsilon^2 q = 1, \\ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p + \lambda \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^T \nabla \mathbf{d}) = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \end{cases} \quad (2.2)$$

其中, $q = \frac{1}{\varepsilon^2} (\mathbf{d} \cdot \mathbf{d} - 1)$. 对比方程 (2.1) 可以发现, 使用鞍点模型引入乘子 q , 既克服了 $|\nabla \mathbf{d}|^2 d$ 非线性项带来的困难, 又松弛了 $|\mathbf{d}| = 1$ 的限制.

根据 (2.2) 第二式可得

$$q \left((\nabla \mathbf{d})^T \nabla \mathbf{d} \right) = \frac{1}{2} q \nabla (|\mathbf{d}|^2) = \frac{1}{2} q \nabla (\varepsilon^2 q) = \frac{1}{4\varepsilon^2} \nabla q^2. \quad (2.3)$$

现在对非线性项 $\nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^T \nabla \mathbf{d})$ 进行如下处理^[13]

$$\nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^T \nabla \mathbf{d}) = (\nabla \mathbf{d})^T \Delta \mathbf{d} + \frac{1}{2} \nabla (|\nabla \mathbf{d}|^2). \quad (2.4)$$

结合 (2.3) 和 (2.4), 得

$$\begin{aligned} \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^T \nabla \mathbf{d}) &= (\nabla \mathbf{d})^T \Delta \mathbf{d} - q (\nabla \mathbf{d})^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \nabla (|\nabla \mathbf{d}|^2) + \frac{1}{4\varepsilon^2} \nabla q^2 \\ &= (\nabla \mathbf{d})^T (\Delta \mathbf{d} - q \mathbf{d}) + \frac{1}{2} \nabla \left(|\nabla \mathbf{d}|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2} q^2 \right) \\ &= (\nabla \mathbf{d})^T \left(\frac{1}{\gamma} \partial_t \mathbf{d} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d} \right) + \frac{1}{2} \nabla \left(|\nabla \mathbf{d}|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2} q^2 \right). \end{aligned} \quad (2.5)$$

对 (2.2) 第二式求导并将压力调整为: $\tilde{p} = p + \frac{\lambda}{2} (|\nabla \mathbf{d}|^2) + \frac{\lambda}{2\varepsilon^2} q^2$, 为了简便仍将调整后的压力记为 p , 得

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{d} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d} - \gamma (q \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}) = 0, \\ q_t = \frac{2}{\varepsilon^2} \mathbf{d} \cdot \nabla \mathbf{d}, \\ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p + \frac{1}{\gamma} (\nabla \mathbf{d})^T (\partial_t \mathbf{d} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d}) = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases} \quad (2.6)$$

此外, 我们对速度场和方向场分别添加诺伊曼边界条件和齐次狄利克雷边界条件

$$\partial_n \mathbf{d}(x, t) = 0, \mathbf{u}(x, t) = 0, (x, t) \in \partial\Omega, \quad (2.7)$$

给定初始条件为

$$\mathbf{d}(x, t) = \mathbf{d}^0(x), \mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}^0(x, t), (x, t) \in \Omega, \quad (2.8)$$

其中, $\mathbf{u}^0 : \Omega \rightarrow \mathcal{R}^M$, $\mathbf{u}^0 \in \mathbf{H}$, $\mathbf{d}^0 : \Omega \rightarrow \mathcal{R}^M$, $\mathbf{d}^0 \in \mathbf{H}^1$, $|\mathbf{d}^0| = 1 \in \Omega$.

3 离散形式

增量投影方法分为使压力显式化的粘性步和矫正压力的投影步^[14,15].

粘性步:

$$\begin{cases} \frac{\tilde{u}^{n+1} - u^n}{\delta t} + (u^n \cdot \nabla) \tilde{u}^{n+1} - \nu \Delta \tilde{u}^{n+1} + \frac{\lambda}{\gamma} (\nabla d^n)^T \left(\frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t} + \tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla d^n \right) + \nabla p^n = 0, \\ \tilde{u}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

投影步:

$$\begin{cases} \frac{u^{n+1} - \tilde{u}^{n+1}}{\delta t} + \nabla (p^{n+1} - p^n) = 0, \\ \nabla \cdot u^{n+1} = 0, \\ u^{n+1} \cdot n|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.2)$$

把时间区间 $[0, T]$ 均匀的分成 N 个长度为 $\delta t = T/N$ 的小区. $t^n = n\delta t$, $0 \leq n \leq N$. 给定初始条件 $d^0, u^0, q^0 = \frac{(d^0)^2 - 1}{\varepsilon^2}$. 结合增量投影算法, 给出 (2.6) 的时间离散格式

Step 1: 求解 d^{n+1} 和中间变量 $\tilde{u}^{n+1}$

$$\begin{cases} W + \gamma q^{n+1} d^n - \gamma \Delta d^{n+1} + \frac{\gamma}{\varepsilon^2} (d^{n+1} - d^n) = 0, \\ \frac{\tilde{u}^{n+1} - u^n}{\delta t} - \nu \Delta \tilde{u}^{n+1} + \frac{\lambda}{\gamma} (\nabla d^n)^T W + B(u^n, \tilde{u}^{n+1}) + \nabla p^n = 0, \\ \partial_n d^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \\ \tilde{u}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.3)$$

其中, $W = \frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t} + \tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla d^n$, $B(u, v) := (u \cdot \nabla) v + \frac{1}{2} (\nabla \cdot u) v$.

Step 2: 求解 p^{n+1}

$$\begin{cases} \nabla \cdot \tilde{u}^{n+1} + \Delta (p^{n+1} - p^n) = 0, \\ \partial_n (p^{n+1} - p^n)|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.4)$$

Step 3: 求解 u^{n+1}

$$\begin{cases} \frac{u^{n+1} - \tilde{u}^{n+1}}{\delta t} + \nabla (p^{n+1} - p^n) = 0, \\ \nabla \cdot u^{n+1} = 0, \\ u^{n+1} \cdot n|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.5)$$

Step 4: 求解 q^{n+1}

$$\begin{cases} \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{q^{n+1} - q^n}{\delta t} = d^n \frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t}, \\ \partial_n q^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.6)$$

在方程 (3.3) 中增加稳定化项 $\frac{\gamma}{\varepsilon^2}(d^{n+1} - d^n)$ 是为了平衡使用拉格朗日乘子简化非线性项带来的误差. 事实上, q^{n+1} 的计算可以从 Step 1 中解耦出来. 由 (3.6) 得知 $q^{n+1} = q^n + \frac{2}{\varepsilon^2} d^n (d^{n+1} - d^n)$ 带入 (3.3) 得

$$\frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t} + \tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla d^n + \gamma q^n d^n + \gamma \left(\frac{2}{\varepsilon^2} d^n (d^{n+1} - d^n) \right) d^n - \gamma \triangle d^{n+1} \frac{\gamma}{\varepsilon^2} (d^{n+1} - d^n) = 0.$$

另外, 从这四个分步可以看出, 只有在 Step 1 中 d^{n+1} 和 $\tilde{u}^{n+1}$ 有弱耦合, 如果我们令 (3.5) 第一式的第二项为 $\tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla d^n$, 则我们的半离散格式在求解所有未知数的时候就是全解耦的.

定理 若 $(d_h^{n+1}, q_h^{n+1}, \tilde{u}_h^{n+1}, p_h^{n+1}, u_h^{n+1})$ 为方程 (3.3-3.6) 的解, 则满足如下能量定律:

$$(E(u^{n+1}, d^{n+1}, q^{n+1}) + \frac{\delta t}{2} \|\nabla p^{n+1}\|^2) - (E(u^n, d^n, q^n) + \frac{\delta t}{2} \|\nabla p^n\|) \leq 0 \quad (3.7)$$

其中, $E(u, d, q) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 + \frac{\lambda}{2} |\nabla \mathbf{d}|^2 + \frac{\lambda \varepsilon^2}{4} q^2$.

证 将 (3.3) 第一式与 $\frac{\lambda}{\gamma} \frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t}$ 做内积得

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda}{\gamma} \|W\|^2 - \frac{\lambda}{\gamma} (W, \tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla d^n) + \left(\lambda q^{n+1} d^n, \frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t} \right) + \frac{\lambda}{\varepsilon^2} \|d^{n+1} - d^n\|^2 \\ & + \frac{\lambda}{2\delta t} (\|\nabla d^{n+1}\|^2 - \|\nabla d^n\|^2 + \|\nabla(d^{n+1} - d^n)\|^2) = 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

令 (3.3) 第二式与 $\tilde{u}^{n+1}$ 做内积, 得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\tilde{u}^{n+1}\|^2 - \|u^n\|^2 + \|\tilde{u}^{n+1} - u^n\|^2) + \nu \|\nabla \tilde{u}^{n+1}\|^2 + (\nabla p^n, \tilde{u}^{n+1}) \\ & + \frac{\lambda}{\gamma} ((\nabla d^n)^T W, \tilde{u}^{n+1}) = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

令 (3.4) 和 $\delta t p^n$ 做内积可以得到

$$\frac{\delta t}{2} (\|\nabla p^{n+1}\|^2 - \|\nabla p^n\|^2 - \|\nabla(p^{n+1} - p^n)\|^2) - (\nabla p^n, \tilde{u}^{n+1}) = 0. \quad (3.10)$$

若 (3.5) 第一式分别与 u^{n+1} 和 $\frac{\delta t}{2}$ 做内积, 得

$$\frac{1}{2\delta t} (\|u^{n+1}\|^2 - \|\tilde{u}^{n+1}\|^2 + \|u^{n+1} - \tilde{u}^{n+1}\|^2) = 0. \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{2\delta t} \|u^{n+1} - \tilde{u}^{n+1}\|^2 = \frac{\delta t}{2} \|\nabla(p^{n+1} - p^n)\|^2. \quad (3.12)$$

(3.6) 和 λq^{n+1} 做内积, 得

$$\frac{\lambda \varepsilon^2}{4\delta t} (\|q^{n+1}\|^2 - \|q^n\|^2 + \|q^{n+1} - q^n\|^2) = \lambda \left(d^n \frac{d^{n+1} - d^n}{\delta t}, q^{n+1} \right). \quad (3.13)$$

整合 (3.8–3.13), 得

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda}{\gamma} \|W\|^2 + \frac{\lambda}{2\delta t} (\|\nabla d^{n+1}\|^2 - \|\nabla d^n\|^2 + \|\nabla (d^{n+1} - d^n)\|^2) + \frac{\lambda\varepsilon^2}{4\delta t} (\|q^{n+1}\|^2 - \|q^n\|^2 \\ & + \|q^{n+1} - q^n\|^2) + \frac{1}{2\delta t} (\|u^{n+1}\|^2 - \|u^n\|^2 + \|\tilde{u}^{n+1} - u^n\|^2) + \nu \|\nabla (\tilde{u}^{n+1})\|^2 \\ & + \frac{\delta t}{2} (\|\nabla p^{n+1}\|^2 - \|\nabla p^n\|^2) + \frac{\lambda}{\varepsilon^2} \|d^{n+1} - d^n\|^2 = 0. \end{aligned} \quad (3.14)$$

该定理得证.

令 T_h 是在 Ω 上网格大小为 h 的拟一致剖分, X_h 和 Y_h 分别是 $H_0^1(\Omega)$ 和 $H^1(\Omega)$ 的有限元近似, 记 $M_h = Y_h \cap L_0^2(\Omega) := \{q_h \in Y_h; \int_{\Omega} q_h dx = 0\}$, 若 X_h 和 M_h 分别是速度场和压力场的稳定近似空间, 则一定存在一个常数 C 使得

$$\sup_{u_h \in X_h} \frac{(\nabla \cdot u_h, q_h)}{\|u_h\|^2} \geq C \|q_h\|_{L^2}^2, \forall q_h \in M_h. \quad (3.15)$$

现给出 (3.3–3.6) 的全离散格式, 对任意 $(\psi_h, v_h, g_h, m_h, \varphi_h) \in Y_h \times X_h \times X_h \times Y_h \times Y_h$, 求解 $(d_h^{n+1}, q_h^{n+1}, \tilde{u}_h^{n+1}, p_h^{n+1}, u_h^{n+1}) \in Y_h \times Y_h \times X_h \times M_h \times X_h$, 使得

Step 1:

$$\begin{cases} (W_h, \psi_h) + \gamma (\nabla d_h^{n+1}, \nabla \psi_h) + \gamma (q_h^{n+1} d_h^n, \psi_h) + \left(\frac{\gamma}{\varepsilon^2} (d_h^{n+1} - d_h^n), \psi_h \right) = 0, \\ \left(\frac{\tilde{u}_h^{n+1} - u_h^n}{\delta t}, v_h \right) + \nu (\nabla \tilde{u}_h^{n+1}, \nabla v_h) + (B(u_h^n, \tilde{u}_h^{n+1}), v_h) + (\nabla p_h^n, v_h) \\ + \frac{\gamma}{\lambda} ((\nabla d_h^n)^T W_h, v_h) = 0, \end{cases} \quad (3.16)$$

其中, $W_h = \frac{d_h^{n+1} - d_h^n}{\delta t} + \tilde{u}_h^{n+1} \cdot \nabla d_h^n$.

Step 2:

$$(\nabla \cdot \tilde{u}_h^{n+1}, g_h) + (\Delta (p_h^{n+1} - p_h^n), g_h) = 0. \quad (3.17)$$

Step 3:

$$\begin{cases} (u_h^{n+1} - \tilde{u}_h^{n+1}, g_h) + \delta t (\nabla (p_h^{n+1} - p_h^n), g_h) = 0, \\ (\nabla \cdot u_h^{n+1}, m_h) = 0. \end{cases} \quad (3.18)$$

Step 4:

$$\frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{q_h^{n+1} - q_h^n}{\delta t}, \varphi_h \right) = \left(d_h^n \frac{d_h^{n+1} - d_h^n}{\delta t}, \varphi_h \right). \quad (3.19)$$

全离散格式保持半离散格式的能量稳定, 不再详细赘述.

4 数值模拟

本小节中, 借助 FreeFem 进行数值模拟来验证本文所提离散格式的有效性. 相关程序代码可参考文献 [16–18]. 使用 P_1 函数空间近似 Y_h , 对于 $Y_h \times X_h$ 取 $P1 \times P1b$ 混合有限元空间近.

首先, 在单位圆 $\Omega = \{(x, y) : x^2 + y^2 < 1\}$ 上计算 $T = 0.1$ 时 L^2 范数意义下的误差和收敛率, 计算公式如下

$$E_{u_h} = \|u_{h_i}^t - u_{h_{i+1}}^t\|_{L^2}, \quad E_{u^t} = \|u_h^{t_i} - u_h^{t_{i+1}}\|_{L^2},$$

$$R_{u_h} = \frac{\log(E(u_{h_i})/E(u_{h_{i+1}}))}{\log(h_i/h_{i+1})}, \quad R_{u^t} = \frac{\log(E(u^{t_i})/E(u^{t_{i+1}}))}{\log(t_i/t_{i+1})},$$

其中, E_{u_h} 代表计算变量 u 时, 当时间网格固定时由空间网格取值不同造成的空间误差 (可简记为空间误差); E_{u^t} 代表计算变量 u 时, 当空间网格固定时由时间网格取值不同造成的时间误差 (简记为时间误差). R_{u_h} 代表变量 u 的空间误差收敛速率; R_{u^t} 代表变量 u 的空间误差收敛速率. 时间区间限定为 $[0, 0.1]$, 初值为

$$u_0 = 0, \quad q_0 = \frac{(d^0)^2 - 1}{\varepsilon^2}, \quad p_0 = \frac{\lambda}{2} |\nabla d_0|^2 + \frac{\lambda \varepsilon^2}{4} q_0^2,$$

$$d_0 = (\sin(a), \cos(a)), \quad a = \pi(x^2 + y^2)^2.$$

其他参数设定为 $\gamma = \lambda = \nu = 1, \varepsilon = 0.05$.

表 1 利用 (3.16-3.19) 计算产生的数值结果 ($h = 1/64$)

δt	E_{d^t}	R_{d^t}	E_{u^t}	R_{u^t}	E_{p^t}	R_{p^t}
0.0125	0.0476206	-	0.000272922	-	0.0881279	
0.0625	0.0248925	0.935873	0.000143444	0.928001	0.0461008	0.934809
0.03125	0.0126949	0.971468	7.43651e-05	0.94779	0.0233511	0.981303

表 2 利用 (3.16-3.19) 计算产生的数值结果 ($\delta t = 0.001$)

h	E_{d_h}	R_{d_h}	E_{u_h}	R_{u_h}	E_{p_h}	R_{p_h}
1/32	0.0692471	-	0.000809027	-	0.0945234	
1/64	0.0167182	2.05033	0.000145129	2.47885	0.0271367	1.80043
1/128	0.0039783	2.0712	3.35663e-05	2.11225	0.0083825	1.69479

表 1 表明本文所构建的数值格式求解所得的 d, u 和 p 时间误差在 L^2 范数意义下具有一阶精度. 由表 2 可以得出该格式得出的 d, u 的空间误差在 L^2 范数意义下的收敛速度是二阶, p 的收敛率为 1.5.

其次, 在正方形区域 $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ 上验证所提出格式的能量稳定性以及描述液晶中的缺陷、分子分布规律的准确性. 定义 Ericksen-Leslie 方程的离散能量为:

$$E = \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_h(t)\|^2 + \frac{\lambda}{2} \|\nabla \mathbf{d}_h(t)\|^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} q_h(t)^2. \quad (4.1)$$

E 代表模型中涉及到的总能量, 其中, $E_u = \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_h(t)\|^2$ 表示动能, $E_d = \frac{\lambda}{2} \|\nabla \mathbf{d}_h(t)\|^2$ 表示弹性. 修正后的能量为:

$$E_{app} = E(u^{n+1}, d^{n+1}, q^{n+1}) + \frac{\delta t}{2} \|\nabla p^{n+1}\|^2 \quad (4.2)$$

时间为 $T = 1$, 参数取 $\lambda = \gamma = \nu = 1$, $\varepsilon = 0.05$, $h = 2^{-5}$, $\delta t = 0.001$. 初始条件取:

$$\mathbf{u}_0 = 0, \quad q_0 = \frac{(d^0)^2 - 1}{\varepsilon^2}, \quad p_0 = \frac{\lambda}{2} |\nabla d_0|^2 + \frac{\lambda \varepsilon^2}{4} q_0^2,$$

$$\mathbf{d}_0 = \tilde{\mathbf{d}} / \sqrt{|\tilde{\mathbf{d}}|^2 + \varepsilon^2}, \quad \tilde{\mathbf{d}} = (x^2 + y^2 - 0.25, y)^T.$$

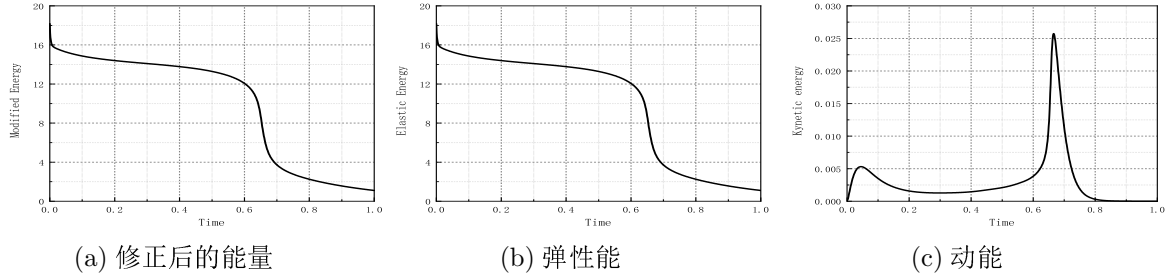


图 1 能量演化图

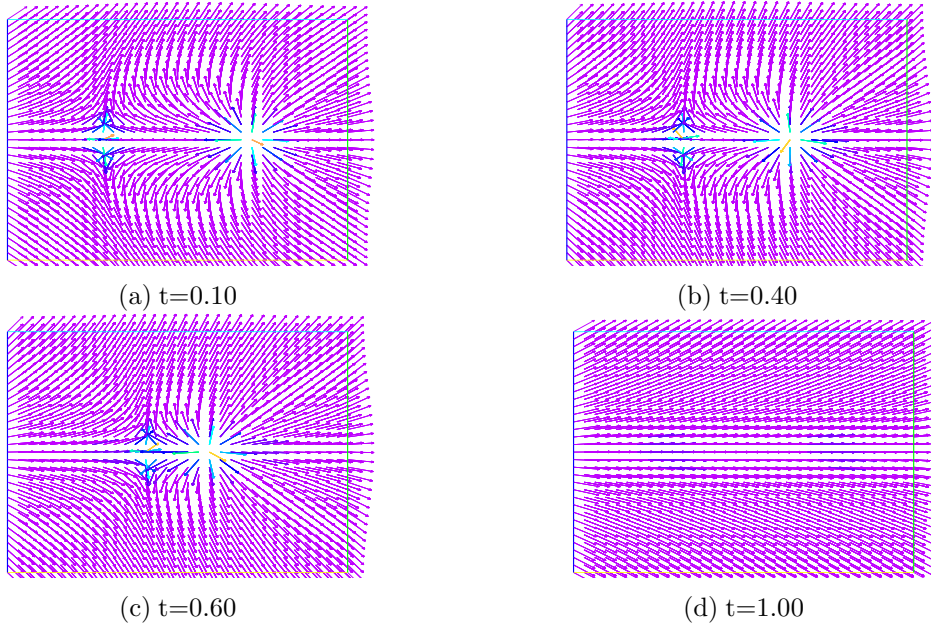


图 2 方向场演化图

图 1 详细反映了各能量在湮灭过程中的变化, 其中 (a) 验证了所提格式的能量稳定性. 图 2 和图 3 分别描述了在奇点湮灭过程中的方向场和速度场的变化, 说明所提格式可以准确描述液晶中的缺陷、分子分布规律. 结合图 1、图 2 以及图 3, 可以看出弹性能和总能量在湮灭的时候骤减, 而动能在湮灭时刻达到最大.

5 结论与展望

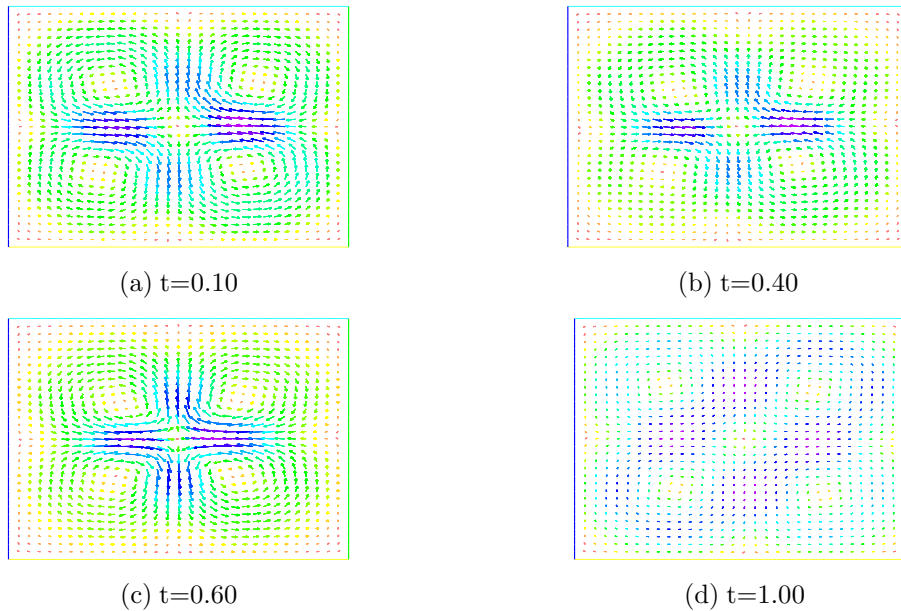


图 3 速度场演化图

本文提出了求解 Ericksen-Leslie 模型的一阶精度、线性稳定的数值格式, 分析并验证了该格式的稳定性及有效性. 在未来的研究中, 可以结合多重网格或自适应网格进一步提高计算效率、精度.

参 考 文 献

- [1] Badia S, Guillén-González F, Gutiérrez-Santacreu J V. An overview on numerical analyses of nematic liquid crystal flows[J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2011, 18(3): 285–313.
- [2] Wang Wei, Zhang Lei, Zhang Pingwen. Modelling and computation of liquid crystals[J]. Acta Numerica, 2021, 30(2): 765–851.
- [3] Bao Xuelian, Chen Rui, Zhang Hui. Constraint-Preserving energy-stable scheme for the 2D simplified Ericksen-Leslie system[J]. Journal of Computational Mathematics, 2021, 39(1): 1–21.
- [4] Metzger S. A convergent finite element scheme for a fourth-order liquid crystal model[J]. IMA Journal of Numerical Analysis, 2022, 42(1): 440–486.
- [5] Cabrales R C, Guillén-González F, Gutiérrez-Santacreu J V. A time-splitting finite-element stable approximation for the Ericksen-Leslie equations[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2015, 37(2): B261–282.
- [6] Zhao J, Yang X F, Li J. Energy stable numerical schemes for a hydrodynamic model of nematic model of nematic liquid crystal[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2016, 38(5): 3264–3290.
- [7] Lin F H, Liu C. On existence of solutions for the Ericksen-Leslie system[J]. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 2000, 154(2): 135–156.
- [8] Becker R, Feng X, Prohl A. Finite element approximations of the Ericksen - Leslie model for nematic liquid crystal flow[J]. Siam Journal on Numerical Analysis, 2008, 46(4): 1704–1731.

- [9] Lin F, Liu C. Nonparabolic dissipative systems modeling the flow of liquid crystals[J]. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1995,48(5): 501–537.
- [10] Liu C, Walkington N J. Mixed methods for the approximation of liquid crystal flows[J]. *Journal of Multivariate Analysis*, 2010, 34(34): 1708–1726.
- [11] Walker, Shawn W. A finite element method for the generalized Ericksen model of nematic liquid crystals[J]. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2020, 54(4): 1181–1220.
- [12] Girault V, Guillén-González F. Mixed formulation, approximation and decoupling algorithm for a penalized nematic liquid crystals model[J]. *Mathematics of Computation*, 2011, 80(274): 781–819.
- [13] A S B, Francisco Guillén-González B, Juan Vicente Gutiérrez-Santacreu C. Finite element approximation of nematic liquid crystal flows using a saddle-point structure[J]. *Journal of Computational Physics*, 2011, 230(4): 1686–1706.
- [14] Guermond J L, Quartapelle L. On stability and convergence of projection methods based on pressure Poisson equation[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2015, 26(9): 1039–1053.
- [15] Parada S, Codina R, Baiges J. Development of an algebraic fractional step scheme for the primitive formulation of the compressible Navier-Stokes equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2021, 433(43): 110017.
- [16] HECHT F. New development in freeFEM++[J]. *Journal of Numerical Mathematics*, 2013. 20(3): 251–265.
- [17] Kim C, Jung M, Yamada T. FreeFEM++ code for reaction-diffusion equation-based topology optimization: for high-resolution boundary representation using adaptive mesh refinement[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2020, 62(1): 439–455.
- [18] Mahmud K R, Rhaman M M, Azad A. Numerical simulation and analysis of incompressible newtonian fluid flows using freeFEM++[J]. *Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences*. 2016, 26(1): 1–9.

THE FIRST ORDER, LINEAR AND ENERGY STABLE NUMERICAL SCHEME OF ERICKSEN-LESLIE EQUATION

HAN Yu-qian, NIU Li-fang, JIA Hong-en

(*College of Mathematics of Taiyuan University of Technology, Shanxi 030024, China*)

Abstract: The numerical solution of incompressible dynamic equations of liquid crystal flow is studied in this paper. A first order and decoupled numerical scheme is proposed by using the saddle point method and variational function. Through numerical simulation and theoretical analysis, it is concluded that the proposed method can accurately describe the defects and molecular distribution in liquid crystal and accord with the kinetic law. The content of solving liquid crystal dynamic model is enriched.

Keywords: nematic liquid crystal; saddle-point structure; finite element methods; incremental fractional-step method

2010 MR Subject Classification: 35Q35; 76A15