关于向列相液晶缺陷数值方法的研究

王艺

摘要

液晶是处于液体和晶体之间的一种物质状态。它因分子位置无序而表现出液体的流动性，又因分子指向有序，也保持了晶体的各向异性。液晶作为一种特殊的软物质，外界的微小改变就能改变其宏观性质，因而有很大的实用价值。它已经被广泛而成功的应用到生活和工业中，尤其在显示成像领域。向列相液晶是分子呈长棒状的、位置无序、指向趋于平行的一种液晶，它是目前流动性最好的液晶。液晶的缺陷是指液晶分子排列不连续的地方，它是液晶研究中的重要课题。描述向列相液晶的基于连续介质理论的模型主要有向量模型和张量模型。但是，由于模型里含有较多的耦合的非线性项以及一些限制条件（不可压缩条件、球面限制），使其数值求解极具挑战性。

研究向列相液晶的一个著名向量模型是 Ericksen-Leslie 模型, 因为其原本模型的复杂性，所以绝大多数关于 Ericksen-Leslie 模型数值方法的研究是针对其简化之后的模型，这一定程度上造成了一些数值结果与物理实验现象不相符。另外，因为向量指向 $\boldsymbol{n}$ 不具有像 Q-张量那样能够自然地反映液晶分子的首尾对称性、双轴性等优点，使得在描述向列相液晶缺陷方面，Q-张量模型更具有优势。尽管如此，在无缺陷存在的情形下，Ericksen-Leslie 模型（向量模型）和 Beris-Edwards 模型（Q-张量模型）在理论上是一致的。基于此，本文对向列相液晶缺陷的数值方法展开研究。本文的工作主要分为两部分：

第一部分对一般的 Ericksen-Leslie 模型数值方法进行研究。针对一般的 Ericksen-Leslie 模型，提出在矩形区域的上下边界满足狄利克雷边界条件、左右边界满足周期边界条件的一阶解耦合的时间半离散格式。该格式利用稳定化技巧保证了数值格式的稳定性；并且通过适当的数值分析，对模型中耦合的非线性项进行了线性化、拟线性化处理。此格式在空间方面采用混合有限元方法进行离散。最后，模拟一个有物理实验背景的“roll cells”现象的算例，观察到和实验相一致的结果，验证了算法的有效性。

第二部分主要针对 Beris-Edwards 模型的数值方法展开研究。首先, 证明其满足连续的能量耗散率和极大值原理。其次，对无量纲化后的模型利用稳定化技巧进行设计，得到时间一阶的耦合的半离散数值格式，并证明其满足离散能量耗散率。空间离散方面采用混合有限元方法，达到其收敛精度。最后，在数值结果部分，先验证算法的有效性，然后通过与液晶缺陷相关的数值算例, 讨论 Q-张量满足不同边界条件 (狄利克雷边界条件、诺依曼边界条件) 时对液晶缺陷运动形态的影响。对“roll cells”物理现象进行了大量的数值模拟实验，尤其对 Q-张量模型中一些唯象参数的选取进行了讨论。通过与一般的

Ericksen-Leslie 模型比较，我们发现 Beris-Edwards 模型得到了更丰富的数值结果。在小结中，给出了解耦合的数值格式及其满足离散能量耗散率的证明。