



复杂流体的 高效数值计算

陈锐 著

FUZA LIUTI DE GAOXIAO SHUZHJ JISUAN



北京邮电大学出版社
www.buptpress.com

内 容 简 介

本书是关于复杂流体的学术专著,主要介绍了向列相液晶和近晶相(Smectic-A)液晶模型、相场囊泡薄膜模型、相场移动接触线模型、相场磁流体模型、相场达西流模型,以及可压流体的柱对称模型。本书给出了每个模型的数学物理方程,分析了相关的离散数值格式,并通过数值模拟实验验证了离散数值格式的合理性和高效性。本书层次分明,深入浅出,可供理工科学生自学,也可供从事科学计算的科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

复杂流体的高效数值计算 / 陈锐著. -- 北京:北京邮电大学出版社, 2021. 7

ISBN 978-7-5635-6440-8

I. ①复… II. ①陈… III. ①流体—数值计算 IV. ①O351

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2021)第 145511 号

策划编辑:彭 楠 责任编辑:王小莹 封面设计:七星博纳

出版发行:北京邮电大学出版社

社 址:北京市海淀区西土城路 10 号

邮政编码:100876

发行部:电话:010-62282185 传真:010-62283578

E-mail: publish@bupt.edu.cn

经 销:各地新华书店

印 刷:北京九州迅驰传媒文化有限公司

开 本:720 mm×1 000 mm 1/16

印 张:14.5

字 数:290 千字

版 次:2021 年 7 月第 1 版

印 次:2021 年 7 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-5635-6440-8

定价:68.00 元

· 如有印装质量问题,请与北京邮电大学出版社发行部联系 ·

前 言

复杂流体广泛地存在于人们的生活当中,如人们喝的牛奶、吃的果酱以及人身体中的血液等。这些流体往往具有很多复杂性质以及多尺度性质。针对用偏微分方程组来描述的复杂流体数学模型,我们设计满足能量关系的数值计算格式,分析格式的稳定性,计算并分析数值结果。书中数据都是经数学模型无量纲化处理的,所以没有单位。

本书中研究的内容主要包含以下三点。

(1) 向列相液晶:对向列相液晶分子的微观缺陷问题,应用多尺度复杂流体模型,用有限差分做离散,构建半隐格式,该格式满足一定的离散能量关系,得到了与实验相吻合的数值结果。在数值实验中,研究了两个重要参数对整个系统的影响,并应用复值函数描述了液晶分子中的缺陷,探索了这些缺陷在剪切流作用下的动力学特性,这和实验观察的结论一致。应用能量不变二次型(IEQ)方法,构造出满足能量递减的数值格式,并且通过若干数值实验验证了 IEQ 方法的收敛性。

(2) 红细胞-囊泡:针对红细胞在血管中运动的相场囊泡的多尺度耦合模型,构建了解耦的能量稳定的数值计算格式,在空间的离散上运用了有限元方法,把一个复杂四阶的微分方程问题转化为两个解耦的二阶椭圆问题求解,同时证明该计算格式满足严格的能量关系。在数值模拟上也得到了和实验结果相一致的数值结果。

(3) 两相不相融流体:对两相不相融流体之间的移动接触线问题,运用相场近似的方法构建了数学模型,针对这个模型建立了有效的数值格式,并且证明了该数值格式是能量稳定的。利用两相不相融流体加上不可压磁流体,得到了两个新的复杂流体模型。针对这两个流体模型,分别采用能量不变二次型方法和尺度辅助函数(SAV)方法,设计出了时间二阶的数值格式,这些格式都是能量稳定的。通过大量的数值实验,验证出这些格式的收敛性和能量稳定性。针对相场方程,使用了一套新的方法[改进的能量不变二次型(IIEQ)方法]来构造能量稳定的数值格式。该方法能够保证原始能量的稳定性。通过数值实验,我们验证出该方法的能量稳定性和收敛性。

本书在空间的离散上对向列相液晶运用了有限差分方法,对 Smectic-A 液晶模型(包含红细胞的血液和两相不相融流体)运用了有限元方法。由于两种方法得到的系数矩阵大部分都是对称的、稀疏的,所以在本书模型计算中采用的是共轭梯度法和预条件共轭梯度法。本书中的不可压复杂流体有一个共同点:都具有能量递减的规律。为了保证计算结果的合理性,在设计数值格式时,务必满足对应的能量关系。针对这些数值格式,我们给出了分析和数值计算,得到了一些与实验相吻合的数值结果。而针对柱对称区域上可压流体的欧拉方程,我们使用广义黎曼问题(GRP)格式,运用守恒性质来提出理论上的数值边界条件,并且在几何源项上运用界面方法来离散。若干数值案例说明了 GRP 格式的精度、高效性和可行性,并且说明了在中心处所提出的数值边界条件是非常有效的。

作者

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 复杂流体	1
1.1.1 向列相液晶	1
1.1.2 红细胞-囊泡	3
1.1.3 两相不相融流体	4
1.2 本书采用的主要计算方法	5
1.2.1 共轭梯度法	5
1.2.2 预条件共轭梯度法	6
1.3 本书的主要工作	7
1.4 本书的章节安排	8
第 2 章 液晶动力中缺陷的运动效应	10
2.1 背景介绍	10
2.2 “1+2”模型的简单案例	12
2.3 数值方法	13
2.4 数值结果和讨论	15
2.4.1 关键参数对系统的影响	15
2.4.2 关键参数对缺陷的影响	16
2.5 小结	31
第 3 章 Smectic-A 液晶模型的无条件能量稳定格式	32
3.1 背景介绍	32
3.2 Smectic-A 模型	34
3.3 二阶数值格式	36
3.3.1 Crank-Nicolson 格式	38
3.3.2 Adam-Bashforth 格式	42
3.4 数值模拟	46
3.4.1 案例 1:精度测试	46

3.4.2	案例 2:液晶层的运动	48
3.4.3	案例 3:剪切流中液晶层的振荡	51
3.4.4	案例 4:外加磁场下液晶层的锯齿特性	53
3.5	小结	56
第 4 章	相场囊泡薄膜模型的解耦能量稳定格式	57
4.1	背景介绍	57
4.2	相场囊泡薄膜模型	58
4.3	可替代的公式及其解耦能量稳定格式	60
4.3.1	可替代的公式和能量规律	60
4.3.2	解耦能量稳定格式	61
4.4	空间上的离散	66
4.4.1	弱形式	66
4.4.2	有限元近似	67
4.4.3	预条件处理	68
4.5	数值模拟	68
4.5.1	案例 1:精度测试	68
4.5.2	案例 2:小表面应力下的小细胞变形	69
4.5.3	案例 3:大表面应力下的小细胞变形	71
4.5.4	案例 4:不同表面应力下的离散能量	72
4.5.5	案例 5:一些长血管中的大细胞变形	72
4.6	小结	74
第 5 章	移动接触线模型的能量稳定格式	75
5.1	背景介绍	75
5.2	Navier-Stokes Allen-Cahn 模型	76
5.3	线性的、解耦的能量稳定数值格式	80
5.4	有限元空间离散	84
5.5	数值模拟	86
5.5.1	案例 1:精度测试	86
5.5.2	案例 2:不相融 Couette 流	87
5.5.3	案例 3:水滴的润湿与反润湿	88
5.5.4	案例 4:带孔洞区域中的水滴	91
5.6	小结	93
第 6 章	两相磁流体新模型的二阶能量稳定格式	94
6.1	背景介绍	94

6.2	在 IEQ 下的 CHiMHD 方程	97
6.3	解耦的 Crank-Nicolson 格式	98
6.4	Adam-Bashforth 格式	102
6.5	数值模拟	106
6.5.1	案例 1:精度测试	106
6.5.2	案例 2:旋节分相	107
6.5.3	案例 3:重力对流体的影响	109
6.5.4	案例 4:界面夹断	113
6.6	小结	115
第 7 章	不可压磁流体相场耦合模型的能量稳定数值方法	116
7.1	背景介绍	116
7.2	初始设置	118
7.3	MHD-CH 模型的弱形式	119
7.4	Crank-Nicolson 时间离散格式	121
7.4.1	MHD-CH 模型的非线性项的处理技巧	121
7.4.2	MHD-CH 模型半离散格式的能量稳定性	123
7.4.3	MHD-CH 模型半离散格式的误差估计	125
7.5	CH-MHD 模型的混合有限元方法	130
7.6	数值模拟	132
7.6.1	案例 1:精度测试	133
7.6.2	案例 2:能量递减和质量守恒	133
7.6.3	案例 3:重力对流体的作用	134
7.6.4	案例 4:界面夹断	137
7.6.5	案例 5:不相融的 Couette 流	138
7.7	小结	140
第 8 章	相场达西方程的二阶线性能量稳定数值格式	141
8.1	背景介绍	141
8.2	控制方程	142
8.3	时间半离散数值格式	143
8.3.1	二阶线性解耦 Crank-Nicolson 格式	144
8.3.2	BDF2 格式	148
8.3.3	SAV-BDF2 格式	152
8.4	数值模拟	155
8.4.1	案例 1:精度测试	155

8.4.2	案例 2:粗粒化现象	157
8.4.3	案例 3:旋转的 HS 细胞	158
8.4.4	案例 4:重力对 HS 细胞的影响	160
8.4.5	案例 5:界面分离	162
8.5	小结	163
第 9 章 基于改进的能量不变二次型方法构造的相场方程的稳定格式		164
9.1	背景介绍	164
9.2	控制方程	165
9.3	IEQ 数值格式	166
9.3.1	等价的偏微分方程系统及其能量规律	166
9.3.2	一阶 IEQ 格式(IEQ1)	167
9.3.3	一阶 IIEQ 格式(IIEQ1)	168
9.3.4	IIEQBDF2 格式	171
9.4	数值模拟	175
9.4.1	案例 1:精度测试	175
9.4.2	案例 2:2 个正方形和 2 个正方体	176
9.4.3	案例 3:多个小球的融合	179
9.4.4	案例 4:相分离现象	181
9.5	小结	183
第 10 章 在二维柱区域下欧拉方程的 GRP 格式		184
10.1	背景介绍	184
10.2	欧拉方程的 GRP 格式简介	185
10.3	数据重构	189
10.3.1	梯度计算	189
10.3.2	限制器	190
10.4	中心处的边界条件	190
10.5	数值模拟	193
10.5.1	案例 1:Noh 问题	193
10.5.2	案例 2:Sedov-Taylor Blast Wave 问题	195
10.5.3	案例 3:球爆炸问题	197
10.6	小结	199
参考文献		200

第1章 绪 论

1.1 复 杂 流 体

20世纪以前,人们针对经典的流体力学主要研究了牛顿流体的运动规律和应用,而在近代,人们已经开始从事新的流体力学的研究,其主要标志之一便是把研究对象从牛顿流体拓展到复杂流体。在生活中我们经常见到复杂流体(Complex Fluids),如工业生产的钢水、火山喷发的岩浆、人们刷门用的油漆等。复杂流体有很多不同于经典牛顿流体的独特特性。复杂流体不再是单一的物质,流体中往往有很多介质或者其他流体。复杂流体是在两相或者多相之间共存的混合物。在学术上和现代工业上人们对复杂流体做了大量的研究,主要包括质量的传输过程、流体的动力特性,以及复杂流体的物理特性。复杂流体有很多的物理特性:

- (1) 流体内部颗粒的碰撞和悬浮;
- (2) 润湿和反润湿的界面现象;
- (3) 多相流和相变过程。

复杂流体也有多尺度性质,复杂流体的宏观行为不仅仅取决于流体的本身,还取决于流体内部其他介观物质的作用。在现代学术和现代工业等领域上,构建数学模型,给出合适的计算方法,进而描述复杂流体的宏观行为,有着非常重要的科学意义。

本书研究的重点是针对前人建立好的复杂流体模型,设计满足能量关系的计算方法。以下主要介绍三种复杂流体:向列相液晶(Nematic Liquid Crystal)、红细胞-囊泡(Red Blood Cell-Vesicle)和两相不相融流体(Two Phase Immiscible Fluids)。这三种复杂流体将作为本书的研究和数值计算的对象。

1.1.1 向列相液晶

向列相液晶(Nematic Liquid Crystal)也叫作丝状相液晶,是液晶中最常见的液晶相。Nematic这个词源于希腊语nema,意思是线或者丝。向列相液晶中的分子排列方向取决于指向矢,指向矢可以是任何物质,如磁场、电场或者流场。向列相液晶还可以按照分子之间的相对取向来做进一步的分类,如近晶相液晶和胆甾

相液晶 (Cholesteric Liquid Crystal), 如图 1.1 所示。近晶相液晶也叫作层状相液晶, 其液晶分子一层一层地排列。根据每一层液晶分子排列相对上一层的倾斜角度的不同, 近晶相液晶又可以分为近晶 A 相和近晶 C 相两种^[8]。胆甾相液晶也叫作手性向列相液晶。由于这种类型的液晶是首先在胆固醇衍生物里发现的, 所以叫作胆甾相液晶。此类液晶分子也是层状相, 层内分子相互平行, 沿层的法线方向排列成螺旋状结构。

液晶具有特殊的物理化学性质, 尤其对电磁场、温度都很有敏感性。液晶既有流体的动力学性质, 又有结晶的光学性质, 所以在 20 世纪中期开始被广泛地应用在电子产品的显示技术上。

液晶缺陷(Defects)是液晶分子中常见的一种排列方式。其主要表现在液晶分子的排列在某些位置上出现了不连续现象, 也就是有奇异点的出现。这就如同人的指纹、头顶的发丝都会出现一些奇异点。液晶缺陷存在着不同强度, 现在能够观察到的稳定的液晶缺陷是强度为 $s = \pm 1$ 和 $s = \pm 1/2$ 的缺陷, 如图 1.2 所示。

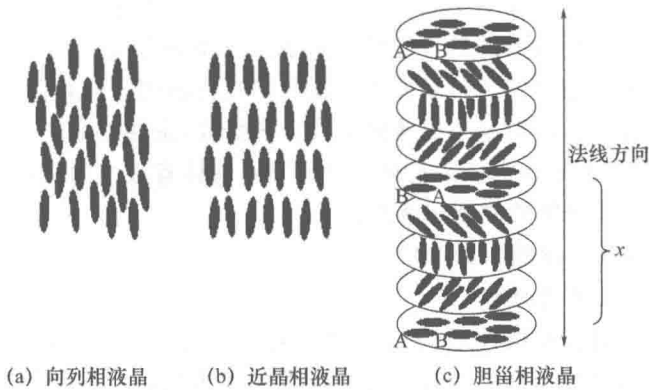


图 1.1 液晶实例

(本图摘自网页 <http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/anisotropy/liquidcrystals.php>.)

在 20 世纪, 针对液晶动力的理论研究许多科学家已经有了很多成果。这里包括 Ericksen-Leslie(EL) 理论^[66,110]、张量模型^[17,167,168]和棒状模型^[54,87,190]。根据 Ericksen-Leslie 理论, 可以推导出含有能量规律的非线性耦合方程。该模型有很好的适定性, 许多数学家研究该模型的解, 包括数值解^[57,70,144,147,150,153,154,226,227,246,249,255]和理论分析^[143,145,152]。张树鹏^[255]等人对于该模型给出了一个简化的模型——“1+2”模型, 用谱方法对该模型进行离散计算, 得出了空间是一维的数值结果, 探究了相关参数对整个系统的影响。白奇川^[249]等人对该模型设计了满足能量关系的 Crank-Nicolson 有限差分格式, 得出了一些数值结果。本书的部分计算是以简化的“1+2”模型为基础的。

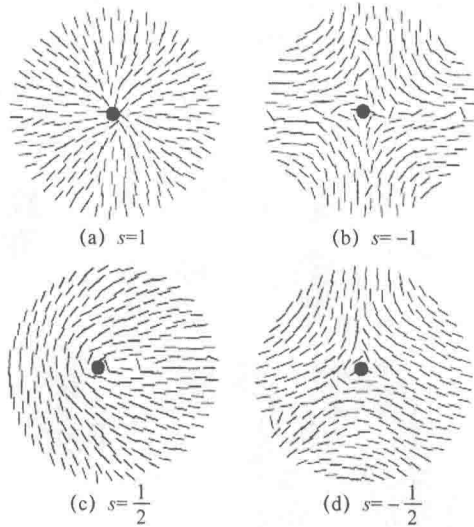


图 1.2 液晶缺陷示例

(本图摘自网页 <http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/liquid-crystals/defects.php>.)

1.1.2 红细胞-囊泡

红细胞是动物和人的血液中最常见的细胞之一,不仅具有免疫功能,还是通过血液运输氧气和二氧化碳的最主要媒介。红细胞既没有细胞核,也没有线粒体,只能通过葡萄糖合成能量。红细胞在运输二氧化碳时呈暗紫色,而在运输氧气时呈鲜红色。红细胞在老化之后,会被体内的白细胞分解掉。

囊泡是由生物膜组成的囊状结构,而生物膜由具有双层结构的脂质分子构成。该脂质分子有亲水端和疏水端,由于疏水端具有疏水性,可尽量避免与水溶液接触,因此这些大量的脂质分子在水溶液中自动组装成封闭的结构。生物膜在生物中有着很重要的作用,具有离子迁移,免疫识别等生物功能。所以在医学上,囊泡可以用来作为药物的载体。由于囊泡存在亲水微区和疏水微区,所以囊泡具有同时运载水溶药物和水不溶药物的能力。针对囊泡的这一生物特性,人们常常用它作为缓释剂,以更好地发挥药效。本书所研究的红细胞就属于囊泡,囊泡是一个封闭系统,如果只考虑其表面的张力作用,那囊泡在呈球状结构时达到表面积最小,从而表面能达到最低。然而,实验观察到的囊泡结构并非我们所预想的那样,最具有代表性的便是人类红细胞的双凹蝶形结构,如图 1.3 所示。

很多科学家对此问题进行不断地探索研究。在 20 世纪 70 年代,物理学家通过实验观察和理论分析得出,决定囊泡结构的主要因素是囊泡的自然曲率。1973 年,物理学家 Helfrich 根据向列相液晶与类脂膜的相似性,从 Frank 弹性自由能

出发,得到了囊泡结构的自发曲率模型。杜强等人^[58-61]基于这种模型,通过相场近似的一套办法,推导出关于相场的弯曲弹性能(Bending Elastic Energy),然后通过能量变分和一般的 Fick 定律,得到了一个相场模型,最后将其和不可压流体耦合,来模拟简单囊泡的变形。本书的部分工作是以该相场囊泡模型为基础的。

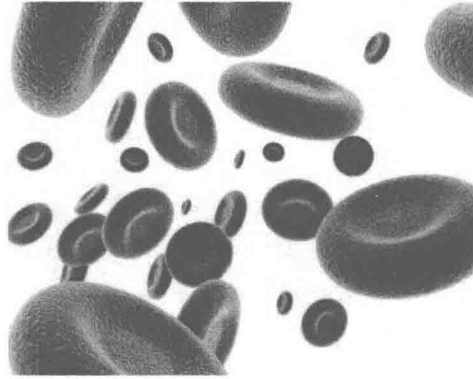


图 1.3 实验中观察到的人类红细胞的双凹碟形结构

(本图摘自网页 <http://www.mdhealth.com/Low-Red-Blood-Cell-Count.html>。)

1.1.3 两相不相融流体

两相不相融流体(Two Phase Immiscible Fluids)是指一个系统拥有两种流体,且互不相融。两相不相融流体之间会形成一个分层界面,当流体的分层界面接触到固体界面时,由于张力的作用,流体分层界面和固体界面会形成一个夹角,我们把它叫作接触角(Contact Angle),而对于连接流体分层界面和固体界面的线,我们把它叫作接触线(Contact Line),如图 1.4 所示。由于在这个系统中,存在着三种相——流体 1、流体 2 和固体,所以每两种相之间都会存在着应力 γ 、 γ_1 、 γ_2 。其中 γ 是流体 1 和流体 2 之间的应力, γ_1 是流体 1 与固体之间的应力, γ_2 是流体 2 与固体之间的应力。根据力的平衡,在水平方向有 Young's 方程成立^[47-48]:

$$\gamma \cos \theta_s + \gamma_2 - \gamma_1 = 0 \tag{1-1}$$

其中 θ_s 为接触角。

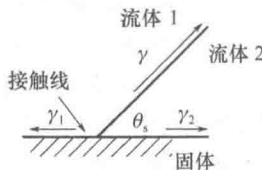


图 1.4 两相不相融流体与固体界面的接触线和 Young's 方程

在自然界中,存在着很多关于接触线的现象,如荷叶上液滴的润湿现象、在玻璃上水银的反润湿现象等。当接触角 $\theta_s = 0^\circ$ 时,这就是完全润湿现象;当 $\theta_s = \pi$ 时,这就是反润湿现象;当 $0^\circ < \theta_s < \pi$ 时,这就是微润湿现象。上述三种现象示意图如图 1.5 所示。

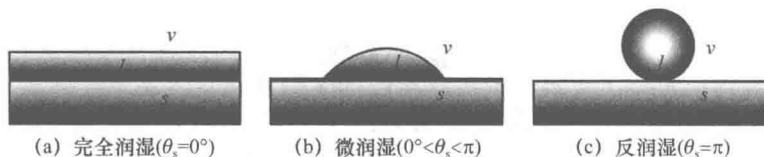


图 1.5 完全润湿、微润湿和反润湿现象

很多科学家对这个问题做了很多研究工作。其中钱铁铮等人^[181-183]对这个问题提出了两个模型:分子水动力模型和连续性水动力模型。分子水动力模型是从分子的角度出发,考虑各个分子之间的相互作用力得到的模型。而连续性水动力模型是从相场近似的角度出发,通过经典的相场方程(Allen-Cahn 型和 Cahn-Hilliard 型)和 Navier-Stokes 方程的耦合,得到的一个满足能量关系的非线性耦合模型。但是在这个模型里面,不能再对 Navier-Stokes 方程应用无滑动边界条件,否则会在接触线上出现非物理不连续的速度。因此,研究者们对接触线问题提出了更精确的边界条件:一般的 Navier 边界条件和关于相场函数的动态边界条件。

1.2 本书采用的主要计算方法

本书对一些满足能量关系的不可压复杂流体模型都构造了满足能量关系的数值格式,对向列相液晶模型、相场方程采用了有限差分格式,对近晶相液晶模型、相场囊泡模型和关于接触线的连续性水动力模型以及磁流体模型采用了有限元逼近。在整个离散中,大部分会产生一个对称正定的稀疏矩阵。在本书模型的计算中,主要用到了两种迭代方法:共轭梯度法(Conjugate Gradient Method)和预条件共轭梯度法(Preconditioned Conjugate Gradient Method)。

1.2.1 共轭梯度法

共轭梯度法通常解决的系数矩阵是大型的、稀疏的、对称正定的矩阵。考虑这样一个方程 $Ax = b$, 其中矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是一个对称正定的矩阵, $b \in \mathbf{R}^n$ 是一个已知向量。因此,求解这个方程相当于求解如下的极小值问题:

$$A\bar{x} = b \Leftrightarrow J(\bar{x}) = \min_{x \in \mathbf{R}^n} \frac{1}{2} x^T A x - x^T b \quad (1-2)$$

让我们来考虑极小化过程。假设已知 x_k 、搜索方向 p_k 和残差 r_k ，那么 x_{k+1} 可以通过式(1-3)得到：

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \tag{1-3}$$

其中 α_k 是步长因子。 α_k 是这样选取的，为了让 $f(x_k + \alpha_k p_k) = \min_{\alpha} J(x_k + \alpha p_k)$ ，经过简单的计算，得到了

$$\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k} \tag{1-4}$$

并且在这一步的残差可以由式(1-5)得到：

$$r_{k+1} = b - A x_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \tag{1-5}$$

下一个搜索方向 p_{k+1} 满足 $(p_{k+1}, A p_k) = 0$ ，

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \tag{1-6}$$

其中

$$\beta_k = -\frac{r_{k+1}^T A p_k}{p_k^T A p_k} \tag{1-7}$$

可以验证 $r_i^T r_j = 0, p_i^T A p_j = 0, i \neq j$ 。

共轭梯度法的主要运算法则如下。

第一步：选取初值 x_0 ，计算初始残差 $r_0 = b - A x_0$ ，并令初始搜索方向 $p_0 = r_0, k=0$ 。

第二步：计算 $\alpha_k = (r_k^T r_k) / (p_k^T A p_k), x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \beta_k = (r_{k+1}^T r_{k+1}) / (r_k^T r_k), p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$ 。

第三步：如果 $\|r_{k+1}\|_2 \geq \epsilon, k=k+1$ ，则返回第二步；否则输出 x_{k+1} 。

1.2.2 预条件共轭梯度法

预条件共轭梯度法是针对非对称的大型稀疏矩阵的一种计算方法。假设有这样的矩阵方程 $Ax = b$ ，矩阵 A 是非对称的稀疏矩阵，需要找到一个预条件矩阵 M ，其满足：①对称正定容易求出逆矩阵；②矩阵 $M^{-1}A$ 的条件数很小。这样的话，预条件系统 $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ 就能很快地用迭代方法计算出来。

这就是预条件共轭梯度法的基本思想，以下是该迭代方法的计算步骤。

第一步：选取初值 x_0 ，计算初始残差 $r_0 = b - A x_0$ ，求解 $M \bar{r}_0 = r_0$ ，并令初始搜索方向 $p_0 = \bar{r}_0, k=0$ 。

第二步：计算搜索步长 $\alpha_k = (\bar{r}_k^T r_k) / (p_k^T A p_k), x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \bar{M} r_{k+1} = r_{k+1}, \beta_k = (r_{k+1}^T r_{k+1}) / (r_k^T r_k), p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$ 。

第三步：如果 $\|r_{k+1}\|_2 \geq \epsilon, k=k+1$ ，则返回第二步；否则输出 x_{k+1} 。

在上面的计算步骤中，由 M 的对称正定性可知，计算 $M \bar{r}_{k+1} = r_{k+1}$ 时可以用预条件共轭梯度法求解。

1.3 本书的主要工作

本书的贡献之一是针对向列相液晶简化的“1+2”模型给出了满足能量关系的高效格式。本书针对该模型采用了半隐的有限差分格式,也就是对线性项做隐式处理,而对非线性项做显式处理。该计算格式在运算上有很高的效率,每一步都是用预条件共轭梯度法去计算对称正定的线性系统。由于 Crank-Nicolson 格式在非线性项采用隐式处理,直接求解比较困难,需要用到不动点迭代,所以半隐格式比 Crank-Nicolson 数值格式在计算上更高效,更容易执行。

本书的贡献之二是针对向列相液晶简化的“1+2”模型做出了二维的数值模拟。在数值实验中,本书探究了两个相关参数对整个系统的影响。本书发现,剪切率影响系统能量的稳定性,而翻转参数影响最后系统稳定能量的大小。除此之外,本书还研究了液晶缺陷在剪切流作用下的动力学性质,经过实验发现,强度的模 $|s|=1$ 时的缺陷是稳定的,而且两个带不同符号的缺陷会相互吸引,直到消失,而两个带相同符号的缺陷会相互排斥,直到稳定为止。本书的数值模拟与实验结果是吻合的。

本书的贡献之三是针对相场囊泡模型设计了满足能量关系的有限元格式。本书通过添加稳定项,把一个非线性的耦合系统离散成为一个解耦的、稳定的、线性的多步数值格式。本书还系统地证明了该数值格式满足对应的能量递减规律。除此之外,本书还解决了相场囊泡模型中的四阶方程。四阶方程如果直接用有限元计算将非常困难。本书通过加一项、减一项的技巧,把一个四阶的相场方程转化为两个二阶的椭圆问题,并且问题是解耦的,容易执行运算。

本书的贡献之四是针对相场囊泡模型给出了数值模拟。为了让计算结果合理,本书设计了该模型满足能量关系的数值格式。本书首先测试了该格式关于时间的精度,其结果是满足一阶精度的。本书还给出了在非规则区域上的囊泡的数值模拟,经过观察得出,囊泡在流体的作用下,经过管道的狭窄部位时,能够改变自己的形态,最后通过。本书还给出了离散的能量图,能量都是递减稳定的。本书最后模拟了红细胞穿过非规则区域的数值实验,结果与其他实验相吻合。

本书的贡献之五是针对连续性水动力模型设计了满足能量关系的有限元格式。本书用的是 Allen-Cahn 型的非守恒的相场方程,但是通过拉格朗日乘子的添加,让该相场方程守恒。本书通过稳定项的添加,把一个非线性的耦合系统离散成解耦的、稳定的、线性的多步数值格式,并证明该数值格式满足对应的能量递减规律。本书还给出了该格式的一阶精度测试。

本书的贡献之六是针对 Smectic-A 液晶模型、两相磁流体模型、相场达西方程等采用能量不变二次型方法(IEQ)和尺度辅助函数方法(SAV)设计了满足能量关

系的数值格式。本书通过大量的数值实验验证了该方法的高效性和对应的收敛精度,并且数值模拟了一些有趣的实验现象。

本书的贡献之七是针对二维柱对称区域下的欧拉方程设计了 GRP 格式。其中本书运用了守恒性质来提出理论上的数值边界条件,在几何源项上运用了界面方法来离散。本书通过若干数值算例来说明 GRP 格式的精度、高效性和可行性,并且说明了在中心处所提出的数值边界条件是非常有效的。

1.4 本书的章节安排

除了第 1 章以外,其余各章的安排如下。

第 2 章,研究向列相液晶中缺陷的运动效应。首先根据 Ericksen-Leslie 理论导出向列相液晶在流场下的非线性耦合系统;然后给出简化的“1+2”模型和对应的半隐差分格式;最后给出数值结果,研究两个重要参数对整个系统的影响,并研究液晶缺陷在剪切流作用下的运动特性。

第 3 章,研究层状相 Smectic-A 液晶水动力模型的数值格式设计。通过 IEQ 方法,引进辅助变量,得到等价的模型系统,对其构造满足能量关系的数值格式。我们不仅在理论上严格证明该格式的能量稳定性,而且通过数值实验验证了格式的稳定性。

第 4 章,研究相场囊泡模型的数值格式设计和数值计算。首先,介绍了前人应用的相场囊泡模型;其次,通过稳定项的添加,给出了该模型的解耦的、稳定的、线性的数值格式,系统地证明了该格式满足一定的能量关系;再次,介绍了四阶方程怎样转化两个二阶问题;最后,给出了实验结果并进行讨论。

第 5 章,研究连续性水动力相场模型的数值格式设计。首先介绍了接触线(MCL)问题,给出了经典的 Allen-Cahn 相场方程和流体方程的耦合系统;然后设计了解耦的、稳定的、线性的数值格式,并证明了该格式满足一定的能量关系;最后给出了该格式关于时间的一阶精度测试。

第 6 章,研究两相磁流体新模型(CHiMHD 模型)的数值格式设计。该模型描述了在磁场作用下导电流体的界面动力学。与尖锐界面方法相比,CHiMHD 模型有利于开发高阶数值格式和计算机程序。我们基于 IEQ 方法提出了两个线性的、解耦的、能量稳定的、时间二阶的数值格式。若干数值实验也验证了该格式的时间收敛精度和能量稳定性。

第 7 章,研究不可压磁流体相场耦合模型的数值格式设计。该模型包含了磁流体方程(MHD)和相场方程(Cahn-Hilliard)。该模型满足能量递减规律。因此我们通过 SAV 方法构造了能量稳定的数值格式。最后通过展示若干数值案例来验证所提出方法的绝对稳定性和收敛性。

第8章,研究相场达西方程(CHD)的数值格式设计。该模型包含了相场方程(Cahn-Hilliard)和达西方程。我们设计了两个基于IEQ方法的线性、解耦、能量稳定的二阶时间离散格式和基于SAV方法的二阶时间推进格式。最后我们进行了数值计算,以说明所提出方案的准确性,并研究了两相流体中粗粒化过程和界面不稳定性的模拟。

第9章,运用新的方法研究相场方程(Cahn-Hilliard)的数值格式设计。我们采用IIEQ方法来构造数值格式。这是因为传统的IEQ方法得出的数值格式只能保证修正能量稳定,但不能保证原始能量稳定。因此我们基于IIEQ方法设计了两个线性的、能量稳定的一阶和二阶时间离散格式。最后我们用数值结果来说明所提出格式的精度和能量稳定性。

第10章,研究在二维柱对称区域下欧拉方程的GRP格式。我们运用守恒性质来提出理论上的数值边界条件;并且在几何源项上运用界面方法来离散。我们严格推导了在中心处的数值边界条件。最后我们给出了若干案例来说明GRP格式的精度、高效性和可行性,并且说明了在中心处所提出的数值边界条件是非常有效的。