Operations Research and Fuzziology 运筹与模糊学, 2023, 13(2), 884-891
Published Online April 2023 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/orf
https://doi.org/10.12677/orf.2023.132091

具有奇异势的Q-张量梯度流的尖锐界面极限

王晨晨

贵州大学数学与统计学院，贵州 贵阳

收稿日期：2023年3月2日；录用日期：2023年4月11日；发布日期：2023年4月18日

摘 要

本文考虑具有奇异势的Q-张量梯度流，利用匹配渐近展开方法，形式推导出各向同性–向列相尖锐界面极限。该模型包括液晶的指向矢场n的热流和界面上的跳跃条件，并且跳跃条件由平均曲率流决定。

关键词

液晶，具有奇异势的Q-张量梯度流，相变问题，尖锐界面极限

Sharp Interface Limit of Q-Tensor Gradient Flows with Singular Potential

Chenchen Wang

School of Mathematics and Statistics, Guizhou University, Guiyang Guizhou

Received: Mar. 2nd, 2023; accepted: Apr. 11th, 2023; published: Apr. 18th, 2023

Abstract

In this paper, we consider the Q-tensor gradient flow with singular potential and use the matching asymptotic expansion method to derive the isotropy-nematic sharp interface model formally. The model includes the heat flow of the directed vector field n of the liquid crystal and the jump condition on the interface, and the jump condition is determined by the mean curvature flow.

Keywords

Liquid Crystal, Q-Tensor Gradient Flow with Singular Potential, Phase Transition Problem, Sharp Interface Limit

文章引用: 王晨晨. 具有奇异势的 Q-张量梯度流的尖锐界面极限[J]. 运筹与模糊学, 2023, 13(2): 884-891.
DOI: 10.12677/orf.2023.132091

1. 引言

液晶是介于液体和固体的一种物质状态。液晶不仅具有液体的流动性和晶体的特殊光学性质，还有电磁场超敏反应，促使液晶在材料制造、生物医学等领域有着极高实用价值。根据液晶的材料不同可将液晶分为热致(Thermotropic)液晶和溶致(Lyotropic)液晶，再根据温度不同将热致液晶通常分为向列相(nematic)液晶、近晶相(sematic)液晶等。向列相是液晶相中最普遍的相，向列相分子具有长程定向排序的性质和局部各向异性，一般由刚性分子来描述。

向列相与各向同性之间的相变引起许多有趣的数学问题。描述向列相–各向同性界面有两种经典方法，一种是在分离向列相和各向同性相的界面上运用匹配的边界条件来控制，从而求解微分方程[1] [2]。另一种方法是使用相场模型[3] [4]。[5]研究了一维各向同性–向列相界面的静力学与动力学。对于高维的情况，通过渐近展开法，[6]导出了由平均曲率流演化的分离各向同性–向列相区域的界面。若考虑形式的 Landau-de Gennes 能量，其中弹性系数对各向同性–向列相界面的影响已有多项研究。[6]通过形式匹配渐进展开导出了强锚定条件下的尖锐界面极限。进一步，[7]严格证明了 Landau-de Gennes 理论框架下的 Nematic-Isotropic 尖锐界面极限以及非惯性 Beris-Edwards 模型与尖锐界面极限模型之间光滑解的收敛关系。

本文主要是围绕具有奇异势的 Q-张量梯度流讨论两相之间尖锐界面问题。Landau-de Gennes 理论是唯像的，而从 Osagar 分子理论推导出的新 Q-张量形式的能量泛函是基于微观统计物理，优点在于其自由能系数拥有很强的物理背景(更多细节请参考[8])。推导界面极限的思路主要参考[6]和[9]。向列相与各向同性之间的相变现象，可由相场变量(或序参量) Q 来描述，该序参量为分子指向分布函数 $f(\mathbf{x},\mathbf{m})$ 的对称迹零的二阶矩：

$$Q(\mathrm{x})=\int_{\mathbb{S}^2}\left(\mathbf{mm}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)f(\mathbf{x},\mathbf{m})\,\mathbf{dm},$$

其中序张量 Q 的物理限制为其特征值需满足以下条件：

$$\lambda_i(Q)\in\left(-\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right),\quad 1\le i\le 3.$$

由能量达到极值时所发生的相变，相变区域可用一个光滑的过渡区域来模拟，在过渡区域外呈两种相，序参量在不同相的取值不同。

我们引入从 Osagar 分子理论推导出的 Q 张量形式的能量泛函[8]：

$$\mathcal{F}(Q,\nabla Q)=\mathcal{F}_b(Q)+\mathcal{F}_e(Q,\nabla Q),$$

体积能 $\mathcal{F}_b(Q)$ 和弹性能 $\mathcal{F}_e(Q,\nabla Q)$ 为

$$\mathcal{F}_b(Q)=\int\left(-\ln Z_Q+Q:B_Q-\frac{\alpha}{2}|Q|^2\right)\mathbf{dx}$$

$$\mathcal{F}_e(Q,\nabla Q)=\frac{\varepsilon}{2}\int\left\{L_1|\nabla Q|^2+L_2\left(\partial_i(Q_{ik})\partial_j(Q_{jk})+\partial_i(Q_{jk})\partial_j(Q_{ik})\right)\right\}\mathbf{dx},$$

其中 L_1,L_2 为弹性系数，Z_Q 为

DOI: 10.12677/orf.2023.132091

$$Z_Q = \int_{\mathbb{S}^2} \exp\left(B_Q : \mathbf{mm}\right) \mathrm{d}\mathbf{m}.$$

以及我们将能量泛函的一阶变分表示为

$$\frac{\delta \mathcal{F}_b(Q)}{\delta Q} = B_Q - \alpha Q =: \mathcal{J}(Q)$$

$$\left(\frac{\delta \mathcal{F}_e(Q)}{\delta Q}\right)_{ij} = -\left(L_1 \Delta Q_{ij} + L_2\left(Q_{ik,jk} + Q_{jk,ik}\right)\right) =: \mathcal{L}(Q),$$

2. Bingham 封闭近似与体积能的临界点

在从分子理论推导 Q-张量模型过程中，需要用有限个力矩来封闭密度分布函数 f，这时就需要选择一个良好的封闭近似。[8]选取 Bingham 封闭近似来保证能量耗散，并且重构非负的分布函数，还可以减少计算量。以下为 Bingham 封闭近似的数学描述：

给定 $Q \in \mathbb{Q}_{phy} = \left\{Q \mid \lambda_i(Q) \in \left(-\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right), 1 \le i \le 3\right\}$，求 $B_Q \in \mathbb{Q}$，使得

$$\int_{\mathbb{S}^2} \left(\mathbf{mm} - \frac{1}{3}\mathbf{I}\right) \frac{\exp\left(B_Q : \mathbf{mm}\right)}{\int_{\mathbb{S}^2} \exp\left(B_Q : \mathbf{m}'\mathbf{m}'\right) \mathrm{d}\mathbf{m}'} \mathrm{d}\mathbf{m} = Q.$$

关于 Bingham 封闭近似的一些性质，可参考[8]。基于分子理论的 Q-张量模型的体积能密度函数为

$$F_{\text{bulk}}(Q) \triangleq -\ln Z_Q + B_Q : Q - \frac{1}{2}\alpha |Q|^2,$$

则体积能的临界点满足

$$\frac{\partial F_{\text{bulk}}(Q)}{\partial Q} = B_Q - \alpha Q = 0.$$

命题 1 ([8], [10])：令 η 为方程的解，

$$\frac{3\mathrm{e}^{\eta}}{\int_0^1 \mathrm{e}^{\eta\tau^2} \mathrm{d}\tau} = 3 + 2\eta + \frac{\eta^2}{\alpha}. \tag{1}$$

则

$$B_Q - \alpha Q = 0,\ B_Q = \eta\left(\mathbf{nn} - \frac{1}{3}\mathbf{I}\right), \quad \mathbf{n} \in \mathbb{S}^2.$$

存在一个临界点 $\alpha^* > 0$ 使得

1) 当 $\alpha < \alpha^*$，$\eta = 0$ 为方程(1)的唯一解；
2) 当 $\alpha = \alpha^*$，除 $\eta = 0$ 之外，方程(1)存在另一个解 $\eta = \eta^*$；
3) 当 $\alpha > \alpha^*$，除 $\eta = 0$ 外，(1)还有 $\eta_1 > \eta^* > \eta_2$ 两个解。

命题 2 ([11], [12])：选取 $\eta = \eta_1$，令 $A_k = \int_0^1 x^k \mathrm{e}^{\eta x^2} \mathrm{d}x$。当 $\eta > \eta^*$，

$$3A_2^2 + 2A_0A_2 - 5A_0A_4 > 0,\ 6A_2 - 5A_4 - A_0 > 0.$$

并且定义

$$S_2 = \frac{3A_2 - A_0}{2A_0}, \quad S_4 = \frac{1}{8A_0}\left(35A_4 - 30A_2 + 3A_0\right).$$

若 $B_{Q_0}=\alpha Q_0$，我们有

$$Q_0=S_2\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right),\quad B_0\equiv B_{Q_0}=\eta\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right).$$

3. 线性化算子

本小节引入线性化算子，它在后续推导中起到重要作用。

对于给定的指向矢 $\mathbf{n}(t,\mathbf{x})$，在局部临界点 $Q_0=S_2\left(\mathrm{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)$（即 $\mathcal{J}(Q_0)=0$）处的线性化算子 $\mathcal{J}'(Q_0)=0$ 表示为

$$\mathcal{J}'(Q_0)(Q)=\psi_1\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)(\mathbf{nn}:Q)+\psi_2\left(\mathbf{nn}\cdot Q+Q\cdot\mathbf{nn}-\frac{2}{3}\mathbf{I}(\mathrm{nn}:Q)\right)+(\psi_3-\alpha)Q,$$

其中系数 $\psi_i\,(1\le i\le 3)$ 可唯一确定，具体见[8]中(4.6)。

将 $\left\langle\mathcal{J}''(Q_0)(Q_1),Q_2\right\rangle$ 表示为

$$\left\langle\mathcal{J}''(Q_0)(Q_1),Q_2\right\rangle=:\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left(\mathcal{J}'(Q_0+\varepsilon Q_1)Q_2-\mathcal{J}(Q_0)Q_2\right).$$

直接计算可得

$$\begin{aligned}\left\langle\mathcal{J}''(Q_0)(Q_1),Q_2\right\rangle=&\,\psi_2\left(Q_1(\mathbf{nn}:Q_2)+\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)(Q_1:Q_2)\right)\\&+\frac{\psi_2}{S_2}\left(Q_1\cdot Q_2+Q_2\cdot Q_1-\frac{2}{3}\mathbf{I}(Q_1:Q_2)\right).\end{aligned}\tag{2}$$

观察[11]中命题 6 可知

命题 3： 若 $Q_0=S_2\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)$ 为局部临界点，则线性化算子 $\mathcal{J}(Q_0)$ 的核空间为：

$$\ker\mathcal{J}'(Q_0)=\left\{\mathbf{nn}^\perp+\mathbf{n}^\perp\mathbf{n}:\mathbf{n}^\perp\in\mathbb{V}_{\mathbf{n}}\right\}$$

其中 $\mathbb{V}_{\mathbf{n}}:=\left\{\mathbf{n}\in\mathbb{R}^3|\ \mathbf{n}^\perp\cdot\mathbf{n}=0\right\}$。

4. 尖锐界面极限

考虑 Q^ε 的梯度方程:

$$\partial_t Q^\varepsilon=\frac{\delta\mathcal{F}^\varepsilon(Q,\nabla Q)}{\delta Q^\varepsilon}=-\frac{1}{\varepsilon^2}\mathcal{J}(Q^\varepsilon)-\mathcal{L}(Q^\varepsilon)\tag{3}$$

当 ε 很小时，存在一个宽为 ε 的过渡区。光滑界面 $\Gamma(t)$ 将区域分成两块 $\Omega_\pm$，在 Ω_+ 中呈向列相，在 Ω_- 呈各向同性相。我们可以对解 Q 在远离相变区域时进行外展开，在相变区域内进行内展开。

4.1. 外展开

我们在 $\Omega_\pm$ 中，对 Q^ε 进行形式展开：

$$Q^\varepsilon(t,x)=Q_\pm^{(0)}(t,x)+\varepsilon Q_\pm^{(1)}(t,x)+\varepsilon^2 Q_\pm^{(2)}(t,x)+\cdots.$$

由泰勒展开可得

$$\mathcal{J}(Q^\varepsilon)=\mathcal{J}\left(Q_\pm^{(0)}\right)+\varepsilon\mathcal{J}'\left(Q_\pm^{(0)}\right)Q_\pm^{(1)}+\varepsilon^2\left(\mathcal{J}'\left(Q_\pm^{(0)}\right)Q_\pm^{(2)}+\frac{1}{2}\left\langle\mathcal{J}''\left(Q_\pm^{(0)}\right)Q_\pm^{(1)},Q_\pm^{(1)}\right\rangle\right)+O(\varepsilon^3)$$

将以上展开式代入方程(2.1)，再根据 $\varepsilon^{-1},\varepsilon^{0},\varepsilon^{1}$ 进行整理得到以下相应两个方程：

$$O\left(\varepsilon^{-1}\right):\quad \mathcal{J}\left(Q_{\pm}^{(0)}\right)=0, \tag{4}$$

$$O(1):\quad \mathcal{J}'\left(Q_{\pm}^{(0)}\right)Q_{\pm}^{(1)}=0, \tag{5}$$

$$O(\varepsilon):\quad \partial_t Q_{\pm}^{(0)}=\mathcal{L}Q_{\pm}^{(0)}-\mathcal{J}'\left(Q_{\pm}^{(0)}\right)\left(Q_{\pm}^{(2)}\right)-\frac{1}{2}\left\langle \mathcal{J}''\left(Q_{\pm}^{(0)}\right)Q_{\pm}^{(1)},Q_{\pm}^{(1)}\right\rangle . \tag{6}$$

一方面由定义可知，(4)等同于 $Q_{\pm}^{(0)}$ 是临界点，由命题 1 可知 $Q_{+}^{(0)}=S_2\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right),Q_{-}^{(0)}=0$。并且容易推出

$$Q_{-}^{(0)}=Q_{-}^{(1)}=\cdots=0$$

另一方面由方程(5)可知，$Q_{+}^{(0)}\in\ker\mathcal{J}'\left(Q_{+}^{(0)}\right)$。则由命题 3 可知

$$Q_{+}^{(1)}(t,x)=\mathbf{n}(t,x)\mathbf{n}(t,x)^{\perp}+\mathbf{n}(t,x)^{\perp}\mathbf{n}(t,x),\quad \mathbf{n}(t,x)^{\perp}\in\mathbb{V}_{\mathbf{n}}.$$

为了在方程(6)中 $Q_{+}^{(2)}$ 的可解性，需要

$$\partial_t Q_{\pm}^{(0)}-\mathcal{L}Q_{\pm}^{(0)}+\mathcal{J}'\left(Q_{\pm}^{(0)}\right)\left(Q_{\pm}^{(2)}\right)\perp\ker\mathcal{J}'\left(Q_{+}^{(0)}\right)$$

成立，由式(2)直接有

$$\left\langle \mathcal{J}''\left(Q_{+}^{(0)}\right)Q_{+}^{(1)},Q_{+}^{(1)}\right\rangle=2\psi_2\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)+2\frac{\psi_2}{S_2}\left(\mathbf{nn}+\mathbf{n}^{\perp}\mathbf{n}^{\perp}-\frac{2}{3}\mathbf{I}\right)\perp\ker\mathcal{J}'\left(Q_{+}^{(0)}\right) \tag{7}$$

所以，我们仅需要以下等式成立

$$\left(\partial_t Q_{+}^{(0)}-\mathcal{L}Q_{+}^{(0)}\right):\left(\mathbf{nn}^{\perp}+\mathbf{n}^{\perp}\mathbf{n}\right)=0,\forall\mathbf{n}\in\mathbb{V}_{\mathbf{n}} \tag{8}$$

类似[9]中引理 3.2 的证明，则式(8)可推导出以下指向矢 $\mathbf{n}$ 的演化方程：

$$\mathbf{n}\times\left(2S_2^2\mathbf{n}_t+\mathbf{h}\right)=0,$$

其中 $\mathbf{h}=-\frac{\delta E(\mathbf{n},\nabla\mathbf{n})}{\delta\mathbf{n}}$，$E(\mathbf{n},\nabla\mathbf{n})$ 为 Oseen-Frank 能，其定义如下：

$$E=\frac{k_1}{2}(\nabla\cdot\mathbf{n})^2+\frac{k_2}{2}\left(\mathbf{n}\cdot(\nabla\times\mathbf{n})\right)^2+\frac{k_3}{2}\left|\mathbf{n}\times(\nabla\times\mathbf{n})\right|^2+\frac{k_2+k_4}{2}\left(\mathrm{tr}(\nabla\mathbf{n})^2-(\nabla\cdot\mathbf{n})^2\right),$$

它的弹性系数分别为

$$k_1=k_3=2\left(L_1+L_2\right)S_2^2,\quad k_2=2L_1S_2^2,\quad k_4=L_2S_2^2.$$

若令 $L_1=1,L_2=0$，则弹性系数变为

$$k_1=k_3=2S_2^2,\quad k_2=2S_2^2,\quad k_4=0,$$

代入能量泛函及它的一阶变分便得

$$E=S_2^2\left|\nabla\mathbf{n}\right|^2,\mathbf{h}=-2S_2^2\Delta\mathbf{n}.$$

4.2. 内展开

接下来将 $\mathbf{Q}^{\varepsilon}$ 在相变过度区域进行展开，并定义 φ 为符号距离且 $z=\frac{\varphi(t,x)}{\varepsilon}$，则我们有

$$Q^{\varepsilon}(t,x)=\tilde{Q}^{(0)}(t,x,z)+\varepsilon\tilde{Q}^{(1)}(t,x,z)+\varepsilon^{2}\tilde{Q}^{(2)}(t,x,z)+\cdots.$$

分别代入可直接得到

$$Q_{t}^{\varepsilon}=\varepsilon^{-1}\varphi_{t}\tilde{Q}_{z}^{(0)}+\varphi_{t}\tilde{Q}_{z}^{(1)}+\tilde{Q}_{t}^{(0)}+O(\varepsilon),$$
$$\mathcal{L}Q^{\varepsilon}=\varepsilon^{-2}\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(0)}\right)+\varepsilon^{-1}\left(\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(1)}\right)+\mathcal{B}_{1}\left(\nabla\varphi,\nabla_{x}\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right)+\mathcal{B}_{2}\left(\nabla^{2}\varphi,\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right)\right)+O(1),$$
$$\mathcal{J}\left(Q^{\varepsilon}\right)=\mathcal{J}\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)+\varepsilon\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}^{(1)}+\varepsilon^{2}\left(\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}^{(2)}+\frac{1}{2}\left\langle\mathcal{J}''\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}^{(1)},\tilde{Q}^{(1)}\right\rangle\right)+O\left(\varepsilon^{3}\right),$$

其中

$$\left(\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}\right)\right)_{kl}=L_{1}\tilde{Q}_{kl}\left|\nabla\varphi\right|^{2}+L_{2}\left(\tilde{Q}_{km}\partial_{m}\varphi\partial_{l}\varphi+\tilde{Q}_{lm}\partial_{m}\varphi\partial_{k}\varphi\right),$$
$$\left(\mathcal{B}_{1}\left(\nabla\varphi,\nabla_{x}\tilde{Q}\right)\right)_{kl}=2L_{1}\partial_{i}\tilde{Q}_{kl}\partial_{i}\varphi+L_{2}\left(\partial_{m}\tilde{Q}_{km}\partial_{l}\varphi+\partial_{l}\tilde{Q}_{km}\partial_{m}\varphi+\partial_{m}\tilde{Q}_{lm}\partial_{k}\varphi+\partial_{k}Q_{lm}\partial_{m}\varphi\right),$$
$$\left(\mathcal{B}_{1}\left(\nabla\varphi,\nabla_{x}\tilde{Q}\right)\right)_{kl}=2L_{1}\partial_{i}\tilde{Q}_{kl}\partial_{i}\varphi+L_{2}\left(\partial_{m}\tilde{Q}_{km}\partial_{l}\varphi+\partial_{l}\tilde{Q}_{km}\partial_{m}\varphi+\partial_{m}\tilde{Q}_{lm}\partial_{k}\varphi+\partial_{k}\tilde{Q}_{lm}\partial_{m}\varphi\right).$$

则由方程(3)可知，$\varepsilon^{-2},\varepsilon^{-1}$ 所对应的方程分别为

$$O\left(\varepsilon^{-2}\right):-\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(0)}\right)+\mathcal{J}\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)=0 \tag{9}$$

$$O\left(\varepsilon^{-1}\right):-\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(0)}\right)+\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}^{(1)}=-\varphi_{t}\tilde{Q}_{z}^{(0)}+\mathcal{B}_{1}\left(\nabla\varphi,\nabla_{x}\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right)+\mathcal{B}_{2}\left(\nabla^{2}\varphi,\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right). \tag{10}$$

我们假设当 $z\to\infty$ 时有

$$\tilde{Q}^{(0)}(t,x,z)\to Q_{\pm}^{(0)}(t,x)$$
$$\tilde{Q}_{z}^{(0)}(t,x,z)\to 0,\quad \tilde{Q}_{z}^{(1)}(t,x,z)\to 0.$$

对方程(10)两端与 $\tilde{Q}_{z}^{(0)}$ 作内积，其左端由 $\mathcal{J}\left(Q_{\pm}^{(0)}\right)=0$ 和方程(9)，并在 $(-\infty,+\infty)$ 上分部积分可得

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(1)}\right)+\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}^{(1)}\right):\tilde{Q}_{z}^{(0)}\mathrm{d}z\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\left(\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(1)}\right):\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right)+\left(\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}_{z}^{(0)}:\tilde{Q}^{(1)}\right)\right)\mathrm{d}z\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\mathcal{A}\left(\nabla\varphi,\tilde{Q}_{zz}^{(0)}\right)-\mathcal{J}\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\right):\tilde{Q}_{z}^{(1)}\mathrm{d}z+\left(\left(\mathcal{J}\left(Q_{+}^{(0)}\right):Q_{+}^{(1)}\right)-\left(\mathcal{J}\left(Q_{-}^{(0)}\right):Q_{-}^{(1)}\right)\right)\\&=0.\end{aligned} \tag{11}$$

由 φ 与 z 无关，则方程(11)右端可化简为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\varphi_{t}\tilde{Q}_{z}^{(0)}+\mathcal{B}_{1}\left(\nabla\varphi,\nabla_{x}\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right)+\mathcal{B}_{2}\left(\nabla^{2}\varphi,\tilde{Q}_{z}^{(0)}\right)\right):\tilde{Q}_{z}^{(0)}\mathrm{d}z=-c\varphi_{t}+\nabla\cdot\left(A\nabla\varphi\right), \tag{12}$$

其中

$$\begin{aligned}&c(t,x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\tilde{Q}_{z}^{(0)}(t,x,z)\right|^{2}\mathrm{d}z\\&A_{kl}(t,x)=L_{1}c(t,x)\delta_{kl}+L_{2}\int^{+\infty}\tilde{Q}_{km,z}^{(0)}(t,x,z)\tilde{Q}_{ml,z}^{(0)}(t,x,z)\mathrm{d}z.\end{aligned},$$

结合左端(11)与右端(12)可得方程

$$c\varphi_{t}-\nabla\cdot\left(A\nabla\varphi\right)=0. \tag{13}$$

若令 $L_{1}=1,L_{2}=0$，则方程(13)变为：

$$c\varphi_{t}-\nabla\cdot\left(c\nabla\varphi\right)=0\text{，} \tag{14}$$

并且 $\tilde{Q}^{(0)}$ 满足

$$-\tilde{Q}^{(0)}_{zz}+\mathcal{J}\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)=0. \tag{15}$$

若(15)的解为单轴 $S_2(z)\left(\mathbf{n}(t,x)\mathbf{n}(t,x)-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)$，则 $S_2(z)$ 满足以下隐式方程

$$-S_2''(z)+F\left(S_2(z)\right)=0, S_2(-\infty)=0, S_2(+\infty)=S_2,$$

其中 $F\left(S_2(z)\right)$ 为 $S_2(z)$ 的隐函数。

因此 $c(t,\mathbf{x})$ 与 $(t,\mathbf{x})$ 无关，方程(14)可简化为平均曲率流[12]：

$$\varphi_t-\Delta\varphi=0 \tag{16}$$

并且由符号距离满足 $|\nabla\varphi|^2=1$，对(10)利用(16)可得

$$-\tilde{Q}^{(1)}_{zz}+\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\tilde{Q}^{(1)}=2\nabla\varphi\cdot\nabla\tilde{Q}^{(0)}_{z}. \tag{17}$$

为推导出界面跳跃条件，我们定义算子 $L_I\overset{\text{def}}{=}-\partial_{zz}+\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)$，记 L_I^* 为算子 L_I 的伴随算子。由(11)可知 $\tilde{Q}^{(0)}_z\in\ker L_I^*$，运用微分算子 $\frac{\partial}{\partial\mathbf{n}}$ 作用(17)可得

$$\begin{aligned}0&=\partial_{\mathbf{n}}\left(\tilde{Q}^{(0)}_{zz}+\mathcal{J}\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\right)\\&=\left(\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\right)_{zz}+\mathcal{J}'\left(\tilde{Q}^{(0)}\right)\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\\&=L_I\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\end{aligned}$$

则 $\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\in L_I^*$。我们再用式(17)与 $\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}$ 作乘积并在 $(-\infty,+\infty)$ 上积分得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}L_I\left(\tilde{Q}^{(1)}\right)\cdot\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\mathrm{d}z=\int_{-\infty}^{+\infty}2\left(\nabla\varphi\cdot\nabla\tilde{Q}^{(0)}_z\right)\cdot\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\mathrm{d}z$$

可直接得到

$$0=\int_{-\infty}^{+\infty}2\left(\nabla\varphi\cdot\nabla\tilde{Q}^{(0)}_z\right)\cdot\partial_{\mathbf{n}}\tilde{Q}^{(0)}\mathrm{d}z \tag{18}$$

将 $\tilde{Q}^{(0)}=S_2(z)\left(\mathbf{nn}-\frac{1}{3}\mathbf{I}\right)$ 代入(18)简单计算后便推出

$$\nabla\varphi\cdot\nabla\mathbf{n}=0.$$

这样，对于 Γ 上的单位法向量 ν，以及尖锐界面 $\Gamma(t)$ 由平均曲率流(16)决定，推导出了 $\mathbf{n}$ 在尖锐界面上满足黎曼条件：

$$\nu\cdot\nabla\mathbf{n}=0,\quad\forall\mathbf{x}\in\Gamma(t),$$

将外展开与内展开结合，我们就可以从(3)得到 Q-张量梯度流的尖锐界面模型：

$$\begin{aligned}&\mathbf{n}_t-\Delta\mathbf{n}=|\nabla\mathbf{n}|^2\mathbf{n},\forall\mathbf{x}\in\Omega^+(t),\\&\nu\cdot\nabla\mathbf{n}=0,\forall\mathbf{x}\in\Gamma(t).\end{aligned} \tag{19}$$

5. 结语

本文从具有奇异势的 Q-张量梯度流出发，当 ε 足够小时，对梯度方程运用渐进匹配展开法。在过渡区域外进行外展开，在过渡区域内进行内展开，推导出具有奇异势的 Q-张量梯度流的尖锐界面模型，其中包括液晶指向矢 $\mathbf{n}$ 的演化方程以及界面跳跃条件。

参考文献

[1] Fried, E. (2008) Sharp-Interface Nematic-Isotropic Phase Transitions with Flow. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **190**, 227-265. https://doi.org/10.1007/s00205-007-0107-z

[2] Cermelli, P., Fried, E. and Gurtin, M.E. (2004) Sharp-Interface Nematic-Isotropic Phase Transitions without Flow. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **174**, 151-178. https://doi.org/10.1007/s00205-004-0334-5

[3] Qian, T. and Sheng, P. (1998) Generalized Hydrodynamic Equations for Nematic Liquid Crystals. *Physical Review E*, **58**, 7475-7485. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.58.7475

[4] Berti, A., Berti, V. and Grandi, D. (2013) A Thermodynamic Approach to Isotropic-Nematic Phase Transitions in Liquid Crystals. *Meccanica*, **48**, 983-991. https://doi.org/10.1007/s11012-012-9647-x

[5] De Gennes, P.G. (1971) Short Range Order Effects in the Isotropic Phase of Nematics and Cholesterics. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, **12**, 193-214. https://doi.org/10.1080/15421407108082773

[6] Fei, M., Wang, W., Zhang, P. and Zhang, Z. (2015) Dynamics of the Nematic-Isotropic Sharp Interface for the Liquid. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, **75**, 1700-1724. https://doi.org/10.1137/140994113

[7] Fei, M., Wang, W., Zhang, P., *et al*. (2018) On the Isotropic-Nematic Phase Transition for the Liquid Crystal. *Peking Mathematical Journal*, **1**, 141-219. https://doi.org/10.1007/s42543-018-0005-3

[8] Han, J., Luo, Y., Wang, W., *et al*. (2015) From Microscopic Theory to Macroscopic Theory: A Systematic Study on Modeling for Liquid Crystals. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **215**, 741-809. https://doi.org/10.1007/s00205-014-0792-3

[9] Wang, W., Zhang, P. and Zhang, Z. (2013) Rigorous Derivation from Landau-de Gennes Theory to Ericksen-Leslie Theory. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, **47**, 127-158. https://doi.org/10.1137/13093529X

[10] Wang, W., Zhang, P. and Zhang, Z. (2012) The Small Deborah Number Limit of the Doi-Onsager Equation to the Ericksen-Leslie Equation. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **68**, 1326-1398. https://doi.org/10.1002/cpa.21549

[11] Liu, H., Zhang, H. and Zhang, P. (2005) Axial Symmetry and Classification of Stationary Solutions of Doi-Onsager Equation on the Sphere with Maier-Saupe Potential. *Communications in Mathematical Sciences*, **3**, 201-218. https://doi.org/10.4310/CMS.2005.v3.n2.a7

[12] Li, S., Wang, W. and Zhang, P. (2015) Local Well-Posedness and Small Deborah Limit of a Molecular-Based *Q*-Tensor System. *Discrete and Continuous Dynamical Systems—Series B*, **20**, 2611-2655. https://doi.org/10.3934/dcdsb.2015.20.2611