arXiv:2305.01199v1 [math.NA] 2 May 2023

将心肌纤维建模为取向液晶

Nicol´as A Barnafi，Axel Osses

摘要

本文提出一种数学模型，用于描述心室心肌纤维的取向。这些纤维通常通过某些调和势函数的归一化梯度来计算，因此，我们的工作是寻找满足单位范数约束的这类向量场所满足的方程。所得方程属于向列液晶的 Frank-Oseen 理论，该理论为心肌纤维带来了丰富的数学性质，例如奇点的刻画。文献中现有的数值方法计算开销较大，对于从人类心脏获得的复杂几何结构也不够稳健，因此我们还提出了一种预条件投影梯度下降方案，在所测试的情形下可克服这些困难。所得模型进一步证实了近期关于软组织呈现液晶行为的实验观察，并为这种行为提供了准确的数学描述。

1 引言

心脏是人体的血液泵，在人的一生中始终运转。由于心脏位于胸廓内，涉及心脏的手术具有很强的侵入性，因此寻找诊断、规划和治疗心脏疾病的替代方法至关重要。计算资源的发展使得人们能够采用日益复杂的数学模型来描述个体化心脏（综述见 [NCC19] ），这些模型涵盖了许多不同尺度上的复杂机制：细胞膜上的离子动力学、心肌内的电势传播（心肌组织）、肌肉收缩，以及由所有这些要素协同作用所实现的血液循环 [TD18]。心脏的一项重要生理特性是心肌具有各向异性 [RS82], ，这种各向异性源于有序排列的纤维，并影响心脏的多种机制，例如变形和电导率。因此，对心肌纤维进行恰当描述是任何心脏数学模型的核心。

这些纤维最初是通过一种称为扩散张量磁共振成像（DT-MRI）的成像技术计算得出的，但这种技术成本高昂，且难以用于活体 患者 [ZBne]。为降低成本，研究者提出了称为基于规则的模型（RBM）的数学模型 [SSP$^+$69]。这些模型与心室纤维取向的测量结果吻合良好 [BBPT12], ，而心房基于规则的模型仍是一个活跃的研究领域 [KST$^+$11, PAF$^+$21, ZAS$^+$21]。这促使研究者探索心房纤维生成的其他研究方向，主要是通过数据同化 [RWS$^+$19, RHGP$^+$22]。

RBM通过操控一系列具有不同边界条件的调和势（即拉普拉斯方程的解）来构建纤维取向；这些调和势的梯度经过归一化后，再与组织学观察到的旋转相结合，从而得到沿纤维方向排列的标准正交基。尽管现有方法各不相同 [RLRB$^+$14, WK14, BBPT12, DSIB$^+$19]，但它们遵循相似的步骤，如[PAF$^+$21]所示：

1. 为网格几何提供充分的标记：心内膜（内壁）、心外膜（外壁）、基底部（顶部切面）和心尖（底部顶点）。2. 计算从心内膜到心外膜的距离，称为跨壁距离。其梯度给出跨壁方向。

3. 计算一个从心尖指向基底部、且与跨壁方向正交的方向，称为心尖-基底方向。4. 通过补充一个纵向（或横向）方向，利用跨壁方向和心尖-基底方向定义局部坐标系。5. 旋转计算得到的参考坐标系，使其与组织学观察相符，最终得到纤维方向 $\boldsymbol{f}$、交叉纤维方向 $\boldsymbol{n}$ 和片层方向 $\boldsymbol{s}$。

尽管这些步骤清晰明确，但其中仍隐藏着一些所有 RBM公式都固有的局限性：

- 纤维是通过调和函数的梯度计算得出的。从数值角度看，这意味着生成的纤维场可能不连续或不准确。这在右心室和心房等较薄的肌壁中尤为明显。

- 目前尚无已知的方程组能够描述纤维所满足的关系。这使得对纤维取向的定性行为进行数学分析变得困难。

- 单位向量插值的概念至关重要。在实际应用中，需要分别在心内膜和心外膜上对纵向进行两种不同的旋转，以便将这些被认为正确的不同边界旋转，按照诸如经壁距离这样的权重在组织内部进行插值。双心室情形更加复杂，因为必须决定如何组合室间隔（IVS）中的纤维场。 [BBPT12] 通过将取向解释为四元数，并采用计算机视觉领域成熟的单位四元数插值技术 [Sho85] ，获得心室间插值，从而绕开了这一问题。

第三点受到了最多关注，而前两点基本尚未得到解决。我们的目标是同时处理这三个问题，具体做法是计算出纤维所满足的偏微分方程（PDE）。由此得到的模型是 Frank-Oseen 理论所描述的一种向列液晶的特例（更多参考文献见 [Bal17] ），其定义为在整个区域内向量场的范数保持为单位范数的约束下，使其 H_0^1范数最小化。这在文献中也称为调和映射。尽管我们是从纯数学方法推导出液晶与活体组织之间的联系，但这一联系早已在文献中得到观察 [HC17], ，而且直到最近才针对心肌纤维得到观察 [AUJ22]。这不仅有力验证了我们的模型，也为 RBM 提供了有力验证。除 Frank-Oseen 理论外，还有埃里克森模型，它通过引入一个附加变量，能够更好地近似奇点。Frank-Oseen 理论和埃里克森理论都只考虑单轴液晶，而更一般的情形则更适合用朗道-德热纳框架描述。有关这些主题的更多详情，请参见 [MZ10, Bal17]。

在大多数情况下，Frank-Oseen方程解的存在性及其正则性已有充分研究 [Lin89]。此外，研究者也致力于对这些方程进行数值逼近，主要通过研究由一阶条件导出的鞍点问题 [HTW09, AEMM16, BB18, XFW21]。在液晶理论中，迄今考虑的几何形状都较为简单。这意味着现有数值求解器尚未经过复杂几何下的稳健性测试。事实上，我们将证明它们在此类条件下会失效，因此提出一种预条件投影梯度下降方案。我们的所有测试均表明，该方案稳健且达到最优，即使存在奇点也是如此。

本文结构如下：在第2节中，我们推导出针对抽象向量场的偏微分方程，并重点介绍其在我们应用中的主要性质。在阐释为何将 Frank-Oseen 模型用于心肌纤维之后，我们将所有用于 RBM 的向量场全面刻画为向列液晶。本节最后展示了许多重要的物理性质都可以通过解析方法证明，例如向量插值性质以及顶点奇异性的出现。在第3节中，我们说明如何在实践中实现模型中的非标准 Dirichlet条件，随后介绍用于求解所提出模型的预条件投影梯度下降策略。我们通过数值结果表明，它是

其结果比现有文献中提出的方法更加优化且稳健。在第 4 节中，我们通过以下测试对所提出的方法进行数值研究：(i) 比较将我们的方法用作基于势函数的纤维场的替代方案时的效果；(ii) 数值计算纤维场偏离向列液晶特性的可能程度；(iii) 收敛性研究，通过该研究验证 Aubin-Nitsche 技巧对我们模型的适用性；(iv) 在细长壁场景下，将我们的方法与标准方法进行比较；以及 (v) 一项简单的收缩测试，研究在力学模拟中使用我们模型的影响。在第 5 节中，我们回顾液晶中拓扑缺陷的相关理论，并探讨如何将其应用于心肌纤维领域。最后，在第 6 节中，我们总结本文工作并讨论未来可能的研究方向。

符号说明

考虑一个开、连通且边界为 Lipschitz 的集合 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$，其边界为 $\partial\Omega$，以及经典 Sobolev 空间 [Eva22]，其中的函数 $\mathrm{f}\colon \Omega \to \mathbb{R}$ 平方可积且其梯度平方可积，分别记为 $\mathrm{L}^2(\Omega)$ 和 $\mathrm{H}^1(\Omega)$，相应的经典范数记为 $\|\cdot\|_{L^2}(\Omega,\mathrm{X})$ 和 $\|\cdot\|_{H^1}(\Omega,\mathrm{X})$。对于标量、向量、矩阵和张量，我们分别使用不同字体 a、a、A 和 A，其 Frobenius 范数记为 $|\cdot|$。所有偏微分方程均按弱形式理解，即定义在对偶空间 $\left(\mathrm{H}^1(\Omega)\right)'$ 中，或根据边界条件定义在其他适当空间中。狄利克雷边界条件通过迹算子 $\gamma_D\colon \mathrm{H}^1(\Omega) \to \mathrm{H}^{1/2}(\partial\Omega)$ 定义，诺伊曼边界条件则通过法向导数迹算子 $\gamma_N\colon \mathrm{H}^1(\Omega) \to \mathrm{H}^{-1/2}(\partial\Omega)$ 定义，其形式上可写为 $\Gamma_N\mathrm{u} = \nabla\mathrm{u}\cdot\mathrm{N}$，其中 N 表示区域 Ω 的单位外法向量。对于边界的子集 Γ_D 上满足边界条件 $\mathrm{u} = \mathrm{g}$ 的函数，其空间记为 $\mathrm{H}^1_g(\Omega) := \{\mathrm{u} \in \mathrm{H}^1(\Omega) : \gamma_D\mathrm{u} = \mathrm{g} \text{ on } \Gamma_D\}$，其中 g 具有足够的正则性；为避免过多符号，$\Gamma_D$ 的含义将根据上下文确定。张量的梯度定义为 $(\nabla \mathrm{u}^{kl})_i = \partial_{x_i}\mathrm{u}^{kl}$，张量的散度按行计算，即 $(\mathrm{div}\,\mathrm{A})_i = \sum_j \partial_{x_j}\mathrm{A}^{ij}$，拉普拉斯算子则定义为 $\Delta := \mathrm{div}\,\nabla$。两个向量的外积定义为 $\mathrm{a}\otimes\mathrm{b} = \mathrm{a}\mathrm{b}^T$。泛函 Θ 在点 u 沿方向 v 的 Gâteaux 导数记为 $\mathrm{d}\Theta(\mathrm{u})[\mathrm{v}]$。最后，计算将采用爱因斯坦求和约定，即重复出现的指标表示求和，因此以下恒等式成立：$\mathrm{a}\cdot\mathrm{b} = \mathrm{a}_i\mathrm{b}_i$，$(\mathrm{AB})^{ij} = \mathrm{A}_{ik}\mathrm{B}^{kj}$。通常，在表示矩阵的向量分量时会省略其粗体符号，即 $(\mathrm{A})^{ij} = \mathrm{A}^{ij}$。

2 纤维模型

本节通过考察 RBM 模型中计算的各个势函数及其对应的向量场，推导所提出的模型。最后，我们将展示该模型的一些解析性质，这些性质对于将其用作 RBM 替代方案至关重要。我们仅关注左心室几何，如图1所示。该几何形状 Ω 的边界 $\Gamma := \partial\Omega$ 分为心内膜 $\Gamma_{\mathtt{endo}}$、心外膜 $\Gamma_{\mathtt{epi}}$ 和基底部 $\Gamma_{\mathtt{base}}$，使得 $\Gamma = \Gamma_{\mathtt{endo}} \cup \Gamma_{\mathtt{epi}} \cup \Gamma_{\mathtt{base}}$。在此分区中，我们未将心尖点 $\Gamma_{\overline{\mathtt{apex}}}$ 纳入其中；该点定义为左心室的最低点，对于形成其上的奇异性至关重要。

2.1 跨壁向量和心尖-基底部向量

计算纤维向量场的主要要素是跨壁向量和心尖-基底部向量，二者均通过调和势的归一化梯度计算得到。我们用以下抽象泊松问题表示这两个问题：求 ϕ，使得 $\phi \text{ in } H^1(\Omega)$ 满足

$$\begin{aligned} -\Delta\phi &= 0 && \text{in } \Omega, \\ \gamma_D\phi &= g_D && \text{on } \Gamma_D, \\ \gamma_N\phi &= 0 && \text{on } \Gamma_N, \end{aligned} \tag{1}$$

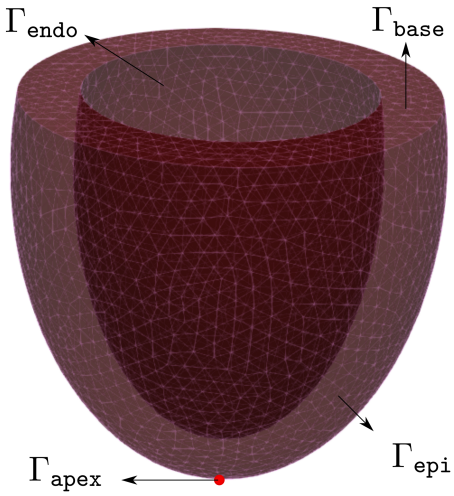


图1：理想化左心室几何所采用的几何形状。边界标记分别为心内膜（内壁）、心外膜（外壁）、基底部（顶部切面）和心尖（底部顶点）。

其中，g_D 在 Γ_D的每个连通分支中为常数。计算跨壁向量和心尖基底向量的步骤有两个，分别为

步骤1：通过采用适当的边界条件求解 (1)，计算势函数 ϕ 。对于跨壁势函数 $\phi_{\texttt{trans}}$，这意味着在心外膜上取值为 1，在心内膜上取值为 0。心尖-基底部势函数 $\phi_{\texttt{ab}}$ 则在心尖处取值为 0，在基底部处取值为 1。其余边界条件均为齐次诺伊曼边界条件。

步骤2：计算归一化梯度 $\boldsymbol{d}^{\phi} := \Pi_{\mathbb{S}^2}(\nabla\phi)$，其中 $\Pi_{\mathbb{S}^2}$ 表示投影到 $\mathbb{S}^2 := \{\boldsymbol{y} : |\boldsymbol{y}| = 1$ 中，几乎处处成立。

备注 1. 步骤*2*中一个非常重要的方面是，对于 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$，投影没有定义。正如我们将在下文进一步讨论的，一种可能的解决方案是考虑平滑投影，使得 $\Pi_{\mathbb{S}^2}\boldsymbol{0} = \boldsymbol{0}$。实践中最简单的解决方案是用以下方式近似该投影

$$\Pi^{\epsilon}_{\mathbb{S}^2} := \frac{\boldsymbol{y}}{\epsilon + |\boldsymbol{y}|},$$

其中 ϵ 是一个很小的数。

我们强调，除了已确立的实际应用之外，这些步骤并没有明确的数学目标。为说明这一点，我们首先指出，(1) 等价于求解以下极小化问题

$$\min_{\varphi \in H^1_{\Gamma_D}(\Omega)} \Psi(\nabla\varphi) := \frac{1}{2}\int_{\Omega} |\nabla\varphi|^2 \, dx.$$

在步骤 2 中，对梯度进行了归一化，因此能量变为常数：

$$\Psi\left(\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}\right) = \frac{1}{2}\int_{\Omega}\left|\frac{1}{|\nabla\varphi|}\nabla\varphi\right|^2 dx = \frac{|\Omega|}{2}.$$

不过，由 (1) 可对偏微分方程取梯度，并利用向量微积分恒等式 $\nabla\text{div} = \text{div}\,\nabla + \text{curl}\,\text{curl}$ 和 $\text{curl}\,\nabla = 0$，我们可得 $\nabla\phi$ 的每个分量也都是调和函数：

$$\text{div}\,\nabla(\nabla\phi) = \nabla\,\text{div}(\nabla\phi) - \text{curl}\,\text{curl}\,\nabla\phi = 0.$$

这意味着 $\nabla\phi$ 是以下极小化问题的极小化者：

$$\min_{\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{H}^1_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}}(\Omega)} \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla \boldsymbol{y}|^2\, dx,$$

其中，$\Gamma^{\boldsymbol{d}}$ 表示一个尚未定义的边界条件，我们将在第2.1.1节中对其进行刻画。受前述计算的启发，我们可以将前面的步骤改写为关于$\boldsymbol{d}^\phi$ 的形式：

步骤1'：计算满足以下极小化问题的向量场$\boldsymbol{d}$ ：

$$\min_{\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{H}^1_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}}(\Omega)} \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla \boldsymbol{y}|^2\, dx.$$

步骤2'：将归一化向量场计算为$\boldsymbol{d}^\phi := \Pi^\epsilon_{\mathbb{S}^2}(\boldsymbol{d})$。

在这一表述下，步骤1'和步骤2'不再相互矛盾。相反，它们可以被视为针对以下问题的投影梯度下降的第一次迭代：

$$\min_{\boldsymbol{d}\in\boldsymbol{H}^1_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}}(\Omega)\cap\mathbb{S}^2} \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla \boldsymbol{d}|^2\, dx. \tag{2}$$

这可以看作与贯壁向量场和心尖-基底向量场相关联的极小化原理；我们只需通过完善此前已建立的计算方法即可推导出该原理。问题（2）对应的欧拉-拉格朗日方程通过求一个$\boldsymbol{d}$ 向量场（属于$\boldsymbol{H}^1_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}}(\Omega)$ ）以及一个拉格朗日乘子 λ （属于$L^2(\Omega)$ ）来给出，使得

$$\begin{aligned} -\Delta\boldsymbol{d} + 2\lambda\boldsymbol{d} &= \boldsymbol{0} \quad \text{in}\,\Omega,\\ \boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{d} &= 1 \quad \text{in}\,\Omega. \end{aligned} \tag{3}$$

我们注意到，乘子满足 $\lambda = -\frac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{d}|^2$ [Bal17],，这可以由平衡方程推断得出。有趣的是，在完全锚定和单常数假设下，该问题与向列液晶的 Frank-Oseen方程相吻合 [Bal17]。对于接下来的分析，我们作出如下定义：

定义 1. 如果向量场 $\boldsymbol{d}$ 是 (2) 的极小化解，或者是满足 $\lambda = -\frac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{d}|^2$ 的系统 (3) 的解，我们就称其具有向列液晶（向列液晶）的行为，或简称为向列液晶。此定义独立于边界条件。

显然，前述定义可得以下引理：

引理1。 跨壁向量 $\boldsymbol{d}_{trans} := \nabla\phi_{trans}$ 和心尖基底向量 $\boldsymbol{d}_{ab} := \nabla\phi_{ab}$ 表现为向列液晶。

此外，我们定义了一个受载Frank-Oseen模型，其形式为

$$\begin{aligned} -\Delta\boldsymbol{d} + 2\lambda\boldsymbol{d} &= \boldsymbol{g} \quad \text{in}\,\Omega,\\ \boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{d} &= 1 \quad \text{in}\,\Omega. \end{aligned} \tag{4}$$

定义 2. 如果向量场 $\boldsymbol{d}$ 是系统 (4) 的解，我们就称其表现为受载向列液晶（*LNLC*），或简称为受载向列液晶，即 $\lambda = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{d} - |\nabla\boldsymbol{d}|^2\right)$。此定义独立于边界条件。

注 2. 如果$\boldsymbol{d}$ 是受载向列液晶，那么它就是以下问题的极小化解：

$$\min_{\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{H}^1_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}}(\Omega)\cap\mathbb{S}^2} \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla \boldsymbol{y}|^2\, dx - \int_\Omega \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{y}\, dx,$$

替换受载拉格朗日乘子后，得到以下方程：

$$-\Delta \boldsymbol{d} - |\nabla \boldsymbol{d}|^2 \boldsymbol{d} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{d} \otimes \boldsymbol{d})\boldsymbol{g}.$$

特别地，如果 $\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{d} = 0$，那么 $\lambda = -\frac{1}{2}|\nabla \boldsymbol{d}|^2$，与无负载情况下。

通过强调将势函数的梯度作为主要变量所带来的另一项优势，我们结束了对该模型的介绍。典型的心脏几何形状在心房和右心室处具有狭窄的壁，在许多情况下，其宽度最多只有一个网格单元（四面体或六面体）。在此类情形下，一阶势函数的梯度在单元内为常数，这意味着无法描绘组织中的任何旋转。即使壁厚包含两个单元，如此粗略的几何形状描述也可能从离散化的角度导致严重的精度不足。在我们的公式中，如果使用一个单元描述组织壁，就可以精确施加边界条件，因此不会出现这一问题。

2.1.1 变换边界条件

在本节中，我们将全面刻画边界条件和边界 $\Gamma^{\boldsymbol{d}}$。为此，我们分别考察如何变换式 (1) 中的狄利克雷边界条件和诺伊曼边界条件。

诺伊曼边界条件。诺伊曼边界条件表示为

$$\nabla \phi \cdot \boldsymbol{N} = \boldsymbol{d}^{\phi} \cdot \boldsymbol{N} = 0,$$

这意味着，势函数的诺伊曼边界条件会转化为向量场的法向狄利克雷边界条件。我们将该条件及其对应的边界记为

$$\boldsymbol{d}^{\phi} \cdot \boldsymbol{N} = 0, \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{N}}.$$

该边界条件还必须补充切向上的行为。为此，我们将切向投影定义为 $\Pi_{\boldsymbol{\tau}} := \boldsymbol{I} - \boldsymbol{N} \otimes \boldsymbol{N}$，由此得到边界条件

$$\Pi_{\boldsymbol{\tau}}[\nabla \boldsymbol{d}]\boldsymbol{N} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{N}}.$$

注 3. 有人或许会疑问，令切向导数为齐次是否恰当。实际上，我们这样选择只是为了简化问题。

狄利克雷边界条件。在这种情况下，我们可以对边界条件求导，得到梯度的切向表示。为避免引入微分几何中的记号，我们只考察狄利克雷边界条件的一个连通分支，该条件由 $\phi = g_D$ 给出，定义在 Γ_D 上，并将切向量定义为 $\boldsymbol{\tau}_1$ 和 $\boldsymbol{\tau}_2$。利用这些切向量，我们可以形式化地计算狄利克雷边界条件的切向导数：

$$\nabla_{\boldsymbol{\tau}} \phi = \sum_i (\nabla \phi \cdot \boldsymbol{\tau}_i)\boldsymbol{\tau}_i = \sum_i (\nabla g_D \cdot \boldsymbol{\tau}_i)\boldsymbol{\tau}_i = \boldsymbol{0},$$

其中最后一个等式成立，因为g_D 是常数。由此我们得出结论，即

$$\nabla_{\tau} \phi = \sum_i (\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{\tau}_i)\boldsymbol{\tau}_i = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{N} \otimes \boldsymbol{N})\boldsymbol{d} = 0,$$

结合单位范数约束，可得以下定义：

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{N}, \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{\tau}}.$$

心尖边界条件。心尖基底函数对于获得心尖奇异性至关重要，这是通过在 $\Gamma_{\texttt{apex}}$ 上施加 $\phi = 0$、在 $\Gamma_{\texttt{base}}$ 上施加 $\phi = 1$ 来实现的。心尖处的边界条件在理论上并不严谨，因为它施加于单个点；但在患者特异性几何结构中，其他自动化方法均未能奏效。因此，我们将此条件转化为向量问题的另一种奇异条件。在归一化之前，我们可以将分析限制在心尖周围的一个小球内，$\boldsymbol{x}_0$，，此处的解为 $\boldsymbol{d}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0$。为对该函数进行归一化，我们考虑一个平滑投影算子，其定义为

$$\Pi_\epsilon(\boldsymbol{d})(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \boldsymbol{d}(\boldsymbol{x})/|\boldsymbol{d}(\boldsymbol{x})| & \boldsymbol{x} \in [B(\boldsymbol{x}_0, \epsilon)]^c \\ \alpha \boldsymbol{d}(\boldsymbol{x}) & \boldsymbol{x} \in B(\boldsymbol{x}_0, \epsilon) \end{cases},$$

其中 α 使函数连续，且 ϵ 足够小。在离散情形下，该投影算子同样可以良好定义，只需令 ϵ 小于网格中最短的单元边。考虑 $\epsilon \to 0$ 可知，极限投影算子为

$$\Pi_\infty(\boldsymbol{d})(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \boldsymbol{d}(\boldsymbol{x})/|\boldsymbol{d}(\boldsymbol{x})| & \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_0 \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 \end{cases}.$$

这表明，向量问题在心尖处的边界条件应为 $\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0}$ on $\Gamma_{\texttt{apex}}$。

所得模型。因此，跨壁向量场和心尖-基底向量场的极小化问题定义在以下空间中：

$$\boldsymbol{H}^1_{\Gamma_D^{\boldsymbol{d}}}(\Omega) \coloneqq \{\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{H}^1(\Omega) : \boldsymbol{y} = \boldsymbol{N} \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{\tau}},\ \boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{N}}\}, \text{ and}$$

$$\boldsymbol{H}^1_{\Gamma_D^{\boldsymbol{d}},0}(\Omega) \coloneqq \{\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{H}^1(\Omega) : \Pi_{\boldsymbol{\tau}} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{\tau}},\ \boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{N}}\}.$$

注释 4. 在测试函数空间中，我们考虑了条件 $\Pi_{\boldsymbol{\tau}} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$，而不是 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$。这样可以避免一些技术性问题，即测试函数无法嵌入 $\mathbb{S}^2$ 中。

由此得到的极小化问题如下：

$$\min_{\boldsymbol{d} \in \mathcal{V}} \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla d|^2 \, dx, \tag{5}$$

其中 $\mathcal{V}$ 定义为

$$\mathcal{V} \coloneqq \boldsymbol{H}^1_{\Gamma_D^{\boldsymbol{d}}}(\Omega) \cap \mathbb{S}^2.$$

利用它，我们可以将跨壁向量和基底至心尖向量$\boldsymbol{d}_{\texttt{trans}}$ 和$\boldsymbol{d}_{\texttt{ab}}$计算为 Frank-Oseen 问题的极小解，这完全刻画了它们作为向列液晶的行为。我们在第 4 节中通过数值方法进行计算。

2.1.2 横向向量和纤维场

横向向量由$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{d}_{\texttt{trans}} \times \boldsymbol{d}_{\texttt{ab}}$给出。纤维场通过跨壁距离计算，方法是对纤维相对于跨壁方向的夹角进行插值。为此，我们考虑一个随跨壁方向变化的角度 $\alpha(\phi_{\texttt{trans}}) = \phi_{\texttt{trans}} \alpha_{\texttt{endo}} + (1 - \phi_{\texttt{trans}})^{\alpha_{\texttt{epi}}}$，并结合基变换和旋转，如下所示：

$$\boldsymbol{B} = [\boldsymbol{d}\ \boldsymbol{d}_{\texttt{ab}}\ \boldsymbol{d}_{\texttt{trans}}], \quad \boldsymbol{R}(\phi_{\texttt{trans}}) = \begin{bmatrix} \cos\alpha(\phi_{\texttt{trans}}) & -\sin\alpha(\phi_{\texttt{trans}}) & 0 \\ \sin\alpha(\phi_{\texttt{trans}}) & \cos\alpha(\phi_{\texttt{trans}}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

纤维场最终定义为$\boldsymbol{f}(\phi_{\texttt{trans}}) \coloneqq \boldsymbol{Q}(\phi_{\texttt{trans}})\boldsymbol{d}$，其中$\boldsymbol{Q}(\phi_{\texttt{trans}}) = \boldsymbol{B}\boldsymbol{R}(\phi_{\texttt{trans}})\boldsymbol{B}^T$。此时自然会想到$\boldsymbol{d}$ 或$\boldsymbol{f}$ 是否表现得像向列液晶，答案是它们表现得像受载向列液晶。下面两个引理将证明这一点。

引理 2。 考虑两个正交的向列液晶 $\boldsymbol{d}_{trans}$ 和 $\boldsymbol{d}_{ab}$，其来自 (3)的拉格朗日乘子分别为 λ_{trans} 和 λ_{ab}。然后，横向矢量场 $\boldsymbol{d}$，定义为乘积 $\boldsymbol{d} = \boldsymbol{d}_{trans} \times \boldsymbol{d}_{ab}$，其行为类似于受载向列液晶，其中外力为

$$\boldsymbol{F} = 2[\boldsymbol{d}_{trans}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{ab}]_{\ell,j}\epsilon_{k\ell i} - 2[\boldsymbol{d}_{trans}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{trans}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{ab}]_m[\boldsymbol{d}_{ab}]_n.$$

特别是，$\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{d} = 0$。

证明。 首先注意，由于$\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}$ 和$\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}$ 正交，因此有：

$$[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{i,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_i + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_i[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{i,j} = 0.$$

我们首先利用 $|\nabla \boldsymbol{d}|^2$ 的范数，其中 $d_{i,j} = ([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j})\epsilon_{mni}$ 以及恒等式 $\epsilon_{mni}\epsilon_{pqi} = \delta_{mp}\delta_{nq} - \delta_{mq}\delta_{np}$：

$$\begin{aligned}
|\nabla \boldsymbol{d}|^2 &= d_{i,j}d_{i,j} \\
&= ([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j})\epsilon_{mni}([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{p,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_q + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_p[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{q,j})\epsilon_{pqi} \\
&= ([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j})([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{p,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_q + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_p[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{q,j})(\delta_{mp}\delta_{nq} - \delta_{mq}\delta_{np}) \\
&= ([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j})([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j} \\
&\qquad - [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_n[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{m,j}) \\
&= [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j} - [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_n[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{m,j}) \\
&\qquad + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j}([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j} - [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_n[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{m,j}) \\
&= [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j} - [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m \\
&\qquad + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j} - [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_n[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{m,j} \\
&= |\nabla[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]|^2 + |\nabla[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]|^2 - 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n,
\end{aligned}$$

这意味着

$$-\frac{1}{2}|\nabla \boldsymbol{d}|^2 = \lambda_{\mathtt{trans}} + \lambda_{\mathtt{ab}} + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n.$$

然后，我们计算向量 $\boldsymbol{d}$ 的拉普拉斯算子：

$$\begin{aligned}
(\operatorname{div}\nabla \boldsymbol{d})_i &= (\operatorname{div}\nabla(\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} \times \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}))_i \\
&= (\nabla(\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} \times \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}))_{ij,j} \\
&= (\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} \times \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}})_{i,jj} \\
&= ([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_k[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_\ell\epsilon_{k\ell i})_{,jj} \\
&= ([\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,jj}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_\ell + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{\ell,j} + [\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_k[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{\ell,jj})\epsilon_{k\ell i} \\
&= (2(\lambda_{\mathtt{trans}} + \lambda_{\mathtt{ab}})[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_k[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_\ell + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{\ell,j})\epsilon_{k\ell i} \\
&= 2(\lambda_{\mathtt{trans}} + \lambda_{\mathtt{ab}})[\boldsymbol{d}]_i + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{\ell,j}\epsilon_{k\ell i} \\
&= 2\left(-\frac{1}{2}|\nabla \boldsymbol{d}|^2\right)[\boldsymbol{d}]_i + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{\ell,j}\epsilon_{k\ell i} - 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n d_i,
\end{aligned}$$

由此我们恢复了构造乘子所需的 $|\nabla \boldsymbol{d}|^2$ 项。我们得到了一个载荷力

$\boldsymbol{F} = 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{\ell,j}\epsilon_{k\ell i} + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n$，其中我们注意到 $\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{d} = 0$:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{d} &= f_i d_i \\
&= -2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{l,j}\epsilon_{kli}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_p[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_q\epsilon_{pqi} \\
&= -2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{l,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_p[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_q(\delta_{kp}\delta_{lq} - \delta_{kq}\delta_{lp}) \\
&= -2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n - 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_{l,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_l[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_k \\
&= -2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{m,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{n,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_m[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_n + 2[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{k,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_l[\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]_{l,j}[\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}]_k \\
&= 0.
\end{aligned}$$

通过设定 $\lambda := -\frac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{d}|^2$，并注意到 $|\boldsymbol{d}| = 1$、$\lambda = -\frac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{d}|^2 + \boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{d}$，以及前面的计算可以写成如下形式，即完成证明。

$$-\Delta\boldsymbol{d} + 2\lambda\boldsymbol{d} = \boldsymbol{F}.$$

□

本节最后一步是证明 $\boldsymbol{f} := \boldsymbol{Q}\boldsymbol{d}$，其中$\boldsymbol{d}$ 是受载向列液晶，其载荷$\boldsymbol{F}$ 满足$\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{d} = 0$。那么，$\boldsymbol{f}$ 也是受载向列液晶。我们将在下述引理中证明这一结果，为此需要一个技术性假设。

引理 3. 考虑一个向列液晶$\boldsymbol{d}$，其拉格朗日乘子为 λ，且外力为$\boldsymbol{F}$，满足$\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{d} = 0$。再考虑一个旋转张量$\boldsymbol{Q}$，满足

$$\left([\Delta\boldsymbol{Q}]^T\boldsymbol{Q} - \boldsymbol{Q}^T[\Delta\boldsymbol{Q}]\right) : \boldsymbol{d}\otimes\boldsymbol{d} = 0. \tag{6}$$

那么，向量场$\boldsymbol{f} := \boldsymbol{Q}\boldsymbol{d}$表现为一个受载向列液晶，其拉格朗日乘子为 $\lambda_f := -\frac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{f}|^2$，外力则为 –

$$\boldsymbol{S}_i = -Q_{ik,jj}d_k + Q_{ik}F_k - 2Q_{ik,j}d_{k,j} - Q_{im,j}Q_{in,j}Q_{ip}d_m d_n d_p - 2Q_{im,j}d_m d_n d_{n,j}.$$

特别地，有$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{f} = -\frac{1}{2}\left([\Delta\boldsymbol{Q}]^T\boldsymbol{Q} - \boldsymbol{Q}^T[\Delta\boldsymbol{Q}]\right) : \boldsymbol{d}\otimes\boldsymbol{d} = 0$。

证明。 我们需要进行以下计算:

$$0 = \Delta(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q})_{ij} = (Q_{ki}Q_{kj})_{,ll} = Q_{ki,ll}Q_{kj} + 2Q_{ki,l}Q_{kj,l} + Q_{ki}Q_{kj,ll}.$$

现在我们计算梯度范数:

$$\begin{aligned}
|\nabla\boldsymbol{f}|^2 &= f_{i,j}f_{i,j} \\
&= (Q_{im}d_m)_{,j}(Q_{in}d_n)_{,j} \\
&= (Q_{im,j}d_m + Q_{im}d_{m,j})(Q_{in,j}d_n + Q_{in}d_{n,j}) \\
&= |\nabla\boldsymbol{d}|^2 + Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n + Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j} + Q_{im}Q_{in,j}d_{m,j}d_n \\
&= |\nabla\boldsymbol{d}|^2 + Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n + 2Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j} \\
&= |\nabla\boldsymbol{d}|^2 - \frac{1}{2}\left(Q_{im,jj}Q_{in} + Q_{im}Q_{in,jj}\right)d_m d_n + 2Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j},
\end{aligned}$$

并且与之前一样，我们计算$\boldsymbol{f}$的拉普拉斯算子:

$$\begin{aligned}
(\Delta\boldsymbol{f})_i = (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{d})_{i,jj} &= Q_{ik,jj}d_k + Q_{ik}d_{k,jj} + 2Q_{ik,j}d_{k,j} \\
&= Q_{ik,jj}d_k + (\boldsymbol{Q}[\Delta\boldsymbol{d}])_i + 2Q_{ik,j}d_{k,j} \\
&= Q_{ik,jj}d_k + 2\lambda f_i - (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{F})_i + 2Q_{ik,j}d_{k,j} \\
&= Q_{ik,jj}d_k + 2\left(\lambda - Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n - 2Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j}\right)f_i \\
&\qquad - (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{F})_i + 2Q_{ik,j}d_{k,j} + (Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n + 2Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j})Q_{ip}d_p,
\end{aligned}$$

其中我们构造了乘子 $\lambda_f = -\frac{1}{2}|\nabla f|^2$，并得到了外力

$$-\boldsymbol{S} = Q_{ik,jj}d_k - (\boldsymbol{QF})_i + 2Q_{ik,j}d_{k,j} + (Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n + 2Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j})Q_{ip}d_p.$$

其在$\boldsymbol{f}$上的投影为

$$\begin{aligned}
-\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{f} &= Q_{ik,jj}d_k Q_{ip}d_p - (\boldsymbol{QF})_i(\boldsymbol{Qd})_i + 2Q_{ik,j}d_{k,j}Q_{ip}d_p + Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n + 2Q_{im,j}Q_{in}d_m d_{n,j} \\
&= Q_{ik,jj}d_k Q_{ip}d_p + 2Q_{ik,j}d_{k,j}Q_{ip}d_p + Q_{im,j}Q_{in,j}d_m d_n - 2Q_{im}Q_{in,j}d_m d_{n,j} \\
&= Q_{ik,jj}d_k Q_{ip}d_p + Q_{ik,j}Q_{ip,j}d_k d_p \\
&= \frac{1}{2}\left(Q_{ik,jj}Q_{ip} - Q_{ik}Q_{ip,jj}\right)d_k d_p.
\end{aligned}$$

与前一种情况一样，我们看到，当$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{f} = 0$时，纤维场$\boldsymbol{f}$恰好是一个受载向列液晶；而这成立当且仅当

$$\left([\Delta\boldsymbol{Q}]^T\boldsymbol{Q} - \boldsymbol{Q}^T[\Delta\boldsymbol{Q}]\right) : \boldsymbol{d}\otimes\boldsymbol{d} = 0,$$

即假设 (6)。证明至此结束。 □

计算向量场$\boldsymbol{f}$的主要难点在于，我们需要一个沿壁厚方向变化的权重，才能得到一个对已知边界值进行插值的显式旋转矩阵。幸运的是，Frank-Oseen 方程自然给出了一种向量插值方法，我们将在第 2.2 节中对其进行解析证明。在实践中，这意味着，为避免计算整个区域内的$\boldsymbol{Q}$，一种高效的做法是将表达式$\boldsymbol{Qd}$用作边界条件（此处$\boldsymbol{Q}$的值已知），并考虑一个满足 $[\Delta\boldsymbol{Q}]^T\boldsymbol{Q} - \boldsymbol{Q}^T[\Delta\boldsymbol{Q}] \perp \boldsymbol{d}\otimes\boldsymbol{d}$的 Frank-Oseen 问题。这说明了引理 3 在实践中的重要性。我们将在第 4 节验证这一假设，并在第 2.2 节解析证明单位向量插值性质。需要强调的是，假设 (6) 不应被解读为 Frank-Oseen 方程的缺陷，而应视为 RBM 产生向列液晶所需满足的假设，这与物理观测结果相符。

2.2 Frank-Oseen 模型作为一种单位向量插值方法

本节旨在说明，Frank-Oseen 方程会产生与四元数插值中相同的向量旋转；在 RBM 中，这些向量旋转取代了权重函数的作用。我们给出三个示例：(i) 一个一维模型，在其中我们解析地推导出标准四元数插值公式——球面线性插值（slerp）——；(ii) 一个二维情形，展示 Frank-Oseen 理论产生顶点奇异性的机制；(iii) 一个具有更复杂空间相互作用的数值示例，其中我们展示插值速度会根据边界条件呈现非线性变化。

2.2.1 一维区域中的球面线性插值

我们将分析限定在一维情形。为此，我们设纤维场具有如下形式$\boldsymbol{f} = (u, v, 0) =: (\boldsymbol{d}, 0)$，并且沿$y$轴和$z$轴保持恒定。这样，式 (3) 就转化为区间$I = (0,1)$上的下列常微分方程组：

$$\begin{aligned}
-u'' + 2\lambda u &= 0 \quad \text{in } I, \\
-v'' + 2\lambda v &= 0 \quad \text{in } I, \\
u^2 + v^2 &= 1 \quad \text{in } I, \\
\boldsymbol{d}(0) &= \boldsymbol{a}, \\
\boldsymbol{d}(1) &= \boldsymbol{b},
\end{aligned} \tag{7}$$

对于给定的单位向量$\boldsymbol{a}$和$\boldsymbol{b}$，满足$\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}$。利用标准的常微分方程理论，我们提出如下形式的解

$$u(x) = C_1 \cos(\omega x) + C_2 \sin(\omega x),$$
$$v(x) = D_1 \cos(\omega x) + D_2 \sin(\omega x),$$

其中 $\lambda = -\frac{1}{2}\omega^2$。经过一些代数运算，第一个边界条件得出 $(C_1, D_1) = \boldsymbol{a}$，第二个边界条件得出 $(C_2, D_2) = [\sin(\omega)]^{-1}(\boldsymbol{b} - \cos(\omega)\boldsymbol{a})$。这意味着解可以写成

$$\boldsymbol{d} = [\sin(\omega)]^{-1}\left([\sin(\omega)\cos(\omega x) - \cos(\omega)\sin(\omega x)]\boldsymbol{a} + \sin(\omega x)\boldsymbol{b}\right),$$

利用 $\sin(\alpha - \beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\alpha)\sin(\beta)$，可将其化简为

$$\boldsymbol{d}(x) = \frac{\sin(\omega[1-x])}{\sin(\omega)}\boldsymbol{a} + \frac{\sin(\omega x)}{\sin(\omega)}\boldsymbol{b}. \tag{8}$$

这恰好就是四元数插值所用的公式，其中 ω 表示$\boldsymbol{a}$ 与$\boldsymbol{b}$之间的夹角，我们稍后将看到这一点。该公式也适用于 S^2 中元素的插值，以及单位四元数[Sho85]。最后，我们通过施加单位范数约束来计算 ω 的值：

$$\sin^2(\omega) = \sin^2(w[1-x]) + \sin^2(\omega x) + 2\sin(w[1-x])\sin(\omega x)\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\rangle.$$

注意，我们可以写成

$$\sin(\omega) = \sin(\omega - \omega x + \omega x) = \sin(\omega[1-x])\cos(\omega x) + \cos(\omega[1-x])\sin(\omega x),$$

结合单位范数约束，可得：

$$\sin(\omega x)\sin(\omega[1-x])\left(\cos(\omega) - \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\rangle\right) = 0.$$

由于该等式对每个x都成立，且 $\omega \neq 0$（除非$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$），因此我们得到

$$\cos\omega = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\rangle, \tag{9}$$

正如预期。这一基本结果证明了我们的论断，因为 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 都是单位向量。我们在图 2 中展示了这一结果，比较了给定两个边界向量时的插值向量场：(a) 拉普拉斯方程，(b) 归一化后的拉普拉斯方程，以及 (c) 式 (7) 中的 Frank-Oseen 解。特别需要注意的是，随意进行归一化可能会产生伪奇异性；事实上，为了计算 (b) 中的向量场，我们在归一化中加入了一个小常数 $\epsilon = 10^{-8}$，使用 $\Pi^{\epsilon}_{S^2}$。

引理 4。(7) 的解由(8)给出，其中 ω 由(9)给出。

注释 5. 我们注意到，只要向量场沿着垂直于该线段的方向保持恒定，前述分析和结论对于三维空间中的一维线段同样成立。

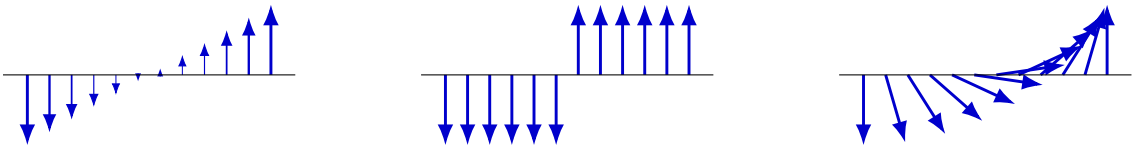
2.2.2 二维中的调和示例

现在我们考虑一个圆形区域 $\Omega = \{\boldsymbol{x} : |\boldsymbol{x}| \leq 1\}$ 以及由 Frank-Oseen方程给出的一个奇异解

$$\boldsymbol{d} = \frac{\boldsymbol{x}}{|\boldsymbol{x}|}.$$

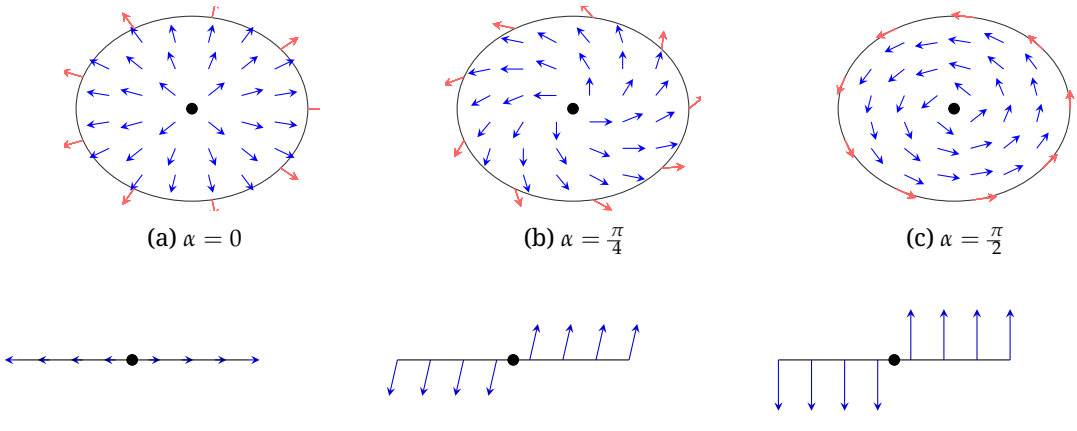
考虑一个常数 旋转矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 满足 $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$，那么向量 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{d}$ 仍然是 Fran 的一个解
k-Oseen 方程：

$$\boldsymbol{0} = \boldsymbol{Q}(-\Delta\boldsymbol{d} + \lambda\boldsymbol{d}) = -\Delta(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{d}) + \lambda(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{d}),$$



(a) 拉普拉斯。 (b) 归一化拉普拉斯。 (c) Frank-Oseen。

图 2：向量插值方案的比较。(a) 中，我们使用拉普拉斯方程对边界值进行插值。(a) 的解随后在 (b) 中进行归一化。(c) 中展示了 Frank-Oseen 方程的解。



(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{2}$

(d) $\alpha = 0$。 (e) $\alpha = \pi/4$。 (f) $\alpha = \pi/2$。

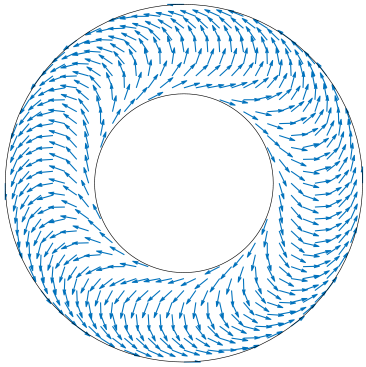
图 3：二维含奇异性的调和示例。第一行展示了著名的刺猬奇异解 (a)，以及将其分别旋转 $\pi/4$ 和 $\pi/2$ 后的结果，如 (b) 和 (c) 所示。第二行展示了一条穿过第一行各对应图形中心的直线。

其中单位范数约束自然得到满足，边界条件也需要相应旋转。我们注意到，在计算横向矢量场并随后将其旋转以计算纤维场时，这些计算在局部上等价于在心外膜上执行的计算。图 3 展示了奇异解、旋转后的解以及横向解，它们均由对奇异径向函数 $\boldsymbol{d}$ 进行旋转生成。此外，我们在图 3 的第二行展示了解在一条穿过原点的水平弧上的限制，并注意到，通过该线获得的向量插值是分段常数且不连续的，这与解析一维示例形成对比。

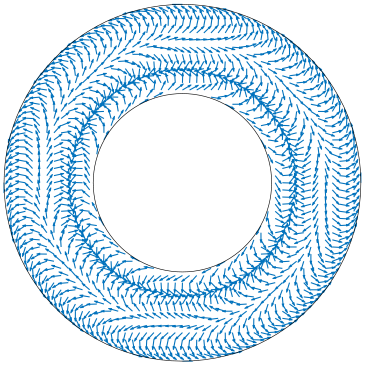
2.2.3 向量插值中的局部极小值

本节给出一些局部极小值的示例。对于第 2.2.2 节所示的旋转示例，还可以通过解析方法找到其他解，但其能量更高。利用引理 3，不难看出，函数 $\boldsymbol{u}(r,\theta) := \boldsymbol{Q}^{\alpha(r)}\boldsymbol{d}_0(\theta)$ 是一个向列液晶，其分量定义如下：

$$Q_{\alpha(r)} := \begin{bmatrix} \cos(\alpha(r)) & -\sin(\alpha(r)) \\ \sin(\alpha(r)) & \cos(\alpha(r)) \end{bmatrix}, \boldsymbol{d}_0(\theta) := \begin{bmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos\theta \end{bmatrix}.$$



(a) π的旋转角。



(b) 3π的旋转角。

图4：局部极小值展示，其中（a）展示了对于 $\alpha_0 = \pi$表现如一维示例的解。（b）展示了解可能出现额外旋转的情况，其中旋转变为 2π 的点已在几何形状（a）中用蓝色圆环标出。

我们考虑一个内半径和外半径均为 $0 < \rho < R$ 的环域中的这个问题，边界条件为外侧旋转角为 0、内侧旋转角为 α_0。经过一些初等计算，我们得到 $\alpha(r) = \alpha_0 \log(r/R) \log(\rho/R)$。图4展示了旋转角为 π 和 3π 时该问题的解。

3 求解方法与数值近似

本节的内容包括两个方面。一方面，我们展示如何使用Nitsche技巧对法向分量施加边界条件。另一方面，我们提出一种预条件投影梯度下降法，用于求解Frank-Oseen方程。因此，我们全面介绍了如何在实践中实现该模型。本节中，我们用 $\mathbb{P}_k$ 表示k阶有限元空间。所有数值测试均使用Firedrake库[RHM+16] 完成，并采用HYPRE中的代数多重网格实现BoomerAMG [FY02]。

3.1 施加边界条件 $\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{N} = 0$

复杂几何无法显式计算法向量 $\boldsymbol{N}$，因此施加这一条件并非易事。我们采用 Nitsche技巧来实现这一点 [Ste95], , 并将在下文中为此模型推导该方法。我们注意到，这与 Navier-Stokes 方程中使用的滑移边界条件非常相似 [Vr86], , 而 [GS21] 中提供了基于 Nitsche 方法的公式。

定义函数空间

$$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{N}} = \{\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{H}^1(\Omega) : \boldsymbol{y} = \boldsymbol{N} \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{\tau}}\}, \qquad \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{0}} = \{\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{H}^1(\Omega) : \boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{\tau}}\},$$

利用这些函数空间，我们现在对拉普拉斯算子进行分部积分，其中 $\boldsymbol{d}$ 属于$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{N}}$，测试函数 $\boldsymbol{v}$属于$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{0}}$:

$$-\int_\Omega \Delta \boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{v}\, dx = \int_\Omega \nabla \boldsymbol{d} : \nabla \boldsymbol{v}\, dx - \int_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{N}}} \boldsymbol{v} \cdot ([\nabla \boldsymbol{d}]\boldsymbol{N})\, ds = \int_\Omega \nabla \boldsymbol{d} : \nabla \boldsymbol{v}\, dx - \int_{\Gamma^{\boldsymbol{d}}_{D,\boldsymbol{N}}} \boldsymbol{v} \cdot ([\boldsymbol{N} \otimes \boldsymbol{N}][\nabla \boldsymbol{d}]\boldsymbol{N})\, ds,$$

其中第二个等式来自诺伊曼边界条件 $\Pi_{\boldsymbol{\tau}}[\nabla \boldsymbol{d}]\boldsymbol{N} = \boldsymbol{0}$。将 $\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{N} = 0$ 重新表述为 $[\boldsymbol{N} \otimes \boldsymbol{N}]\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0}$，为保持该形式的对称性和椭圆性，我们考虑以下

附加项：

$$\int_{\Gamma^d_{D,N}} ([\boldsymbol{N}\otimes\boldsymbol{N}]\boldsymbol{d})\cdot([\nabla\boldsymbol{v}]\boldsymbol{N})\;ds, C\sum_{T\in\mathcal{T}_h}\int_T h_T^{-1}(\boldsymbol{d}\cdot N)(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N})\,ds,$$

其中， $\mathcal{T}_h$ 表示几何剖分，T 是网格中的每个单元，h_T 是单元直径。这些项保证当$C > 0$ 足够大时 [Ste 95], 问题具有椭圆性。实践中，我们发现$C = 10$ 取某个值时可得到令人满意的结果。拉普拉斯算子的相应弱形式为

$$-\int_\Omega \Delta\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{v}\,dx = \int_\Omega \nabla\boldsymbol{d}:\nabla\boldsymbol{v}\,dx - \int_{\Gamma^d_{D,N}}([\boldsymbol{N}\otimes\boldsymbol{N}]\boldsymbol{v})\cdot([\nabla\boldsymbol{d}]\boldsymbol{N})\,ds + \int_{\Gamma^d_{D,N}}([\boldsymbol{N}\otimes\boldsymbol{N}]\boldsymbol{d})\cdot([\nabla\boldsymbol{v}]\boldsymbol{N})\;ds + C\sum_{T\in\mathcal{T}_h}\int_T h_T^{-1}(\boldsymbol{d}\cdot N)(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N})\,ds \qquad \forall\boldsymbol{v}\in\boldsymbol{V_0}. \quad (10)$$

3.2 求解策略

我们提出一种求解问题 (2) 的策略。正如我们将要展示的，针对一阶条件 (3) 的标准牛顿法求解器对初始条件并不稳健。为克服这一困难，我们采用预条件投影梯度下降 [WN99] , , 并证明该方法能够有效处理奇点和任意初始条件。鞍点形式的另一个缺点是，它要求使用满足 inf-sup 稳定性的离散空间 [BBF13]。这意味着向量必须始终采用至少二阶有限元进行逼近，如 [AEMM16]所示。 [AEMM16] 已证明鞍点形式下有限元逼近的收敛性，但对于极小化问题 (2)，类似的逼近结果尚未建立。

备注 6. 对鞍点形式的批评略显不公。通过采用适当的稳定化项或设计 *Uzawa* 方案，可以避免使用高阶离散化。不过，这两种情况都需要将拉格朗日乘子作为额外变量进行计算，这使模型的计算开销超出必要程度。

我们考虑一个初始猜测，它由向量 $\boldsymbol{d}^0$ 给出，并满足 $|\boldsymbol{d}^0| = 1$ 在整个区域内成立。注意，式 (2) 中定义的 Ψ 的梯度为

$$d\Psi(\boldsymbol{d}) = -\Delta\boldsymbol{d},$$

其中未考虑单位范数约束的影响。回忆一下，$\lambda = -\frac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{d}|^2$，式 (2) 的残差为

$$d\widetilde{\Psi}(\boldsymbol{d}) = -\Delta\boldsymbol{d} - |\nabla\boldsymbol{d}|^2\boldsymbol{d},$$

这是一个难题，因为它不仅是非线性的，而且 $-|\nabla\boldsymbol{d}|^2$ 的负号还破坏了椭圆性。因此，我们将采用一种受拟牛顿法启发的投影梯度下降，在计算雅可比矩阵近似时~使用 $d\Psi$ 代替 $d\Psi$ ，因为前者是一个理解充分的算子。我们在算法1中给出了由此得到的算法。以下几点值得说明：

- 鉴于我们考虑的是可能存在奇点的奇异解，可通过在奇点处进行网格自适应来轻松提高方法的精度；在这些位置， $|\nabla\boldsymbol{d}|$ 趋于无穷大。
- 我们发现，以 $\|d\widetilde{\Psi}(\boldsymbol{d}^{k+1})\|_{\ell^2} \leq 10^{-8}\|d\,\widetilde{\Psi}(\boldsymbol{d}^0)\|_{\ell^2}$ 的相对梯度范数作为收敛判据，可获得令人满意的结果，其中 $\|\boldsymbol{a}\|_{\ell^2} := {}^1{}_N\sqrt{\sum_i a^2{}_i}$。
- 预条件器 $\boldsymbol{P}$ 应当是拉普拉斯算子 $d\Psi$的良好近似。为此，我们考虑采用多重网格预条件器的作用，该方法已知具有最优性 [Sch99]。
- 雅可比矩阵是约束问题的拉普拉斯算子，而不是海森矩阵。尽管这有些违背直觉，但我们发现这种方法优于标准方法，因为它避免了不必要的矩阵重新组装。

算法1 预条件投影梯度下降算法。

1：输入：初始点 d^0, 容差 tol 和最大迭代次数 maxit 2：设置误差 $=1$、$\mathrm{k}=0$、$\mathrm{d}^k=\mathrm{d}^0$3：当误差 $>$ tol 且 $\mathrm{k}<$ maxit 时执行 4：计算 $\delta\mathrm{d}^k$, 使得 $\mathrm{P}\delta\mathrm{d}^k=-\mathrm{d}\,\widetilde{\Psi}(\mathrm{d}^{k-1})$ 5：更新当前解 $\hat{}\mathrm{d}^k=\mathrm{d}^{k-1}+\delta\mathrm{d}^k$6：将当前解投影回解空间 $\mathrm{d}^k=\mathit{\Pi}^{\epsilon}_{\mathrm{S}^2}(\hat{}\mathrm{d}^k)$ 7：误差 $=\|\mathrm{d}\widetilde{\Psi}(\mathrm{d}^k)\|_{\ell^2}$，$\mathrm{k}=\mathrm{k}+1$8：结束循环 9：返回解 $\mathrm{d}=\mathrm{d}^k$

- 我们选择只使用预条件器的作用，而不为增量方程使用完整的线性求解器。根据我们的经验，非线性问题通常不需要高精度地求解切线问题，因为过度求解线性化问题并不能改善原始非线性问题 [BPS22, BHPS22]。这一选择的另一个好处是，我们移除了所有与线性求解器相关的参数，从而降低了我们的方法对参数调优的敏感性。

- Ψ 和 Ψ 均被视为采用式（10）中的 Nitsche技巧进行近似。

鉴于我们将使用该求解器处理复杂几何和边界条件，我们希望求解器始终能够得出解，即具有鲁棒性。因此，我们在两种情形下将该求解器与先进的求解器 [XFW21] 进行比较：一种是针对不同的初始条件对两个边界向量进行插值，另一种是尝试求解带有奇异性的問題。所考察的求解器基于鞍点形式（3），由一个用于增广拉格朗日形式的牛顿–克雷洛夫方法构成，并采用了修改后的雅可比矩阵。预条件器采用分块多重网格。对于增广拉格朗日参数，我们使用其建议值 10^6。为了更好地了解两种求解器在复杂度上的差异，我们列出了用于配置各求解器的 PETSc 选项。

本节最后研究自由度数量增加时求解器的性能，以判断其是否适用于高性能计算环境。本节中的所有测试均在单位正方形 $\Omega=(0,1)^2$ 上进行。

对初始条件的敏感性。 我们在左边界设置 $\boldsymbol{d}=(0,-1)$，在右边界设置 $\boldsymbol{d}=(0,1)$，并在顶部和底部设置齐次诺伊曼边界条件。对于 $\theta\in[0,2\pi]$，我们考虑初始向量 $\boldsymbol{d}^0=(\cos\theta,\sin\theta)$，并在图 5 中绘制非线性迭代次数；网格离散化为每边 20 个单元。缺失的点表示求解器未能收敛，这种情况仅发生在整体式 Newton-Krylov 求解器中。事实上，对于所考虑的所有角度，我们的方法都能收敛；使用一阶和二阶有限元时，迭代次数之间没有显著差异。

奇异性近似。 该测试的设置与前一个测试类似。不同之处在于，顶部和底部的边界条件也为狄利克雷边界条件，其值分别为 $\boldsymbol{d}=(-1,0)$ 和 $\boldsymbol{d}=(1,0)$。这迫使几何形状中心出现奇异性，如图7所示。我们针对图6中的初始条件进行了相同的敏感性分析，并注意到鞍点模型在任何测试点上都未能收敛。我们还要强调，使用每边20个单元意味着点 $(0.5,0.5)$ 在模型中被准确纳入，这进一步增加了该测试的难度。事实上，迭代次数远高于前一种情况，但尽管如此，所提出的求解器仍能够使用一阶有限元对所有初始条件求解该问题。有趣的是，二阶单元并非如此，其中有3个点处求解器发生振荡，直到达到允许的最大迭代次数。我们注意到，所提出的策略仍然具有

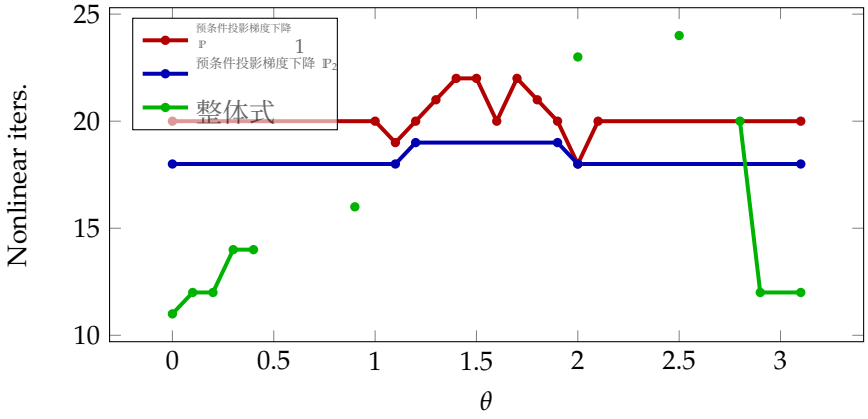


图 5：**对初始条件的敏感性**。采用一阶和二阶有限元的预条件投影梯度下降（PPGD），以及使用 $[\mathbb{P}_2]^k \times \mathbb{P}_1$ 有限元离散化的鞍点问题整体式求解所需的非线性迭代次数。缺失的数据点表示非线性求解器未能收敛。

尚有改进空间，因为我们没有使用任何稳定化技术，例如松弛或线搜索。不过，值得注意的是，鞍点方法与我们的方法在性能上的这种差异源于两点：第一点是前一项测试中表现出的鲁棒性不足，但第二个也是最重要的原因在于我们如何处理单位约束。整体式方法在定义不明确的点处会变得奇异，而我们的平滑投影过程对所有向量都有良好定义。

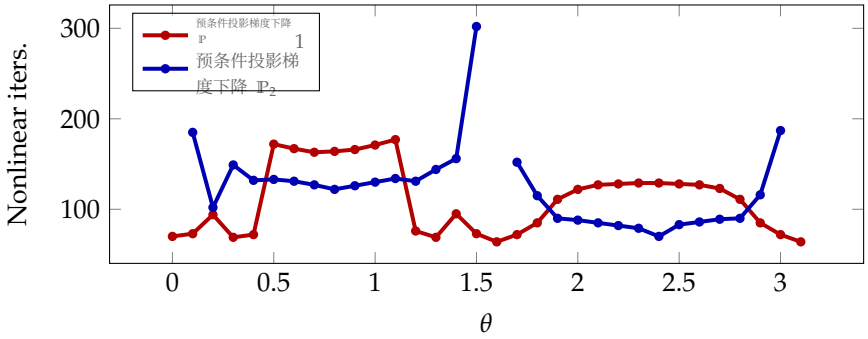


图6：**奇异性近似**。采用一阶和二阶有限元的预条件投影梯度下降（PPGD），以及采用 $[\mathbb{P}_2]^k \times \mathbb{P}_1$ 有限元离散化的鞍点问题整体式求解所需的非线性迭代次数。缺失的数据点表示非线性求解器未能收敛。

最优性。 我们回到第一个测试，此时针对自由度数量进行敏感性分析，并固定 $\theta = 0$。我们在图8中展示了一阶和二阶有限元的结果，可以看出，该方法在大约超过300万个自由度的范围内仍基本保持最优。尽管迭代次数略有增加，但随着自由度数量呈指数增长，这种增加可以忽略不计。我们注意到，求解器中的所有运算都适合并行化，因为所需的运算只有三种：第一种是残差组装，第二种是向量运算，最后一种是预条件器的作用。第一种运算在 Firedrake 中通过以下方式生成：

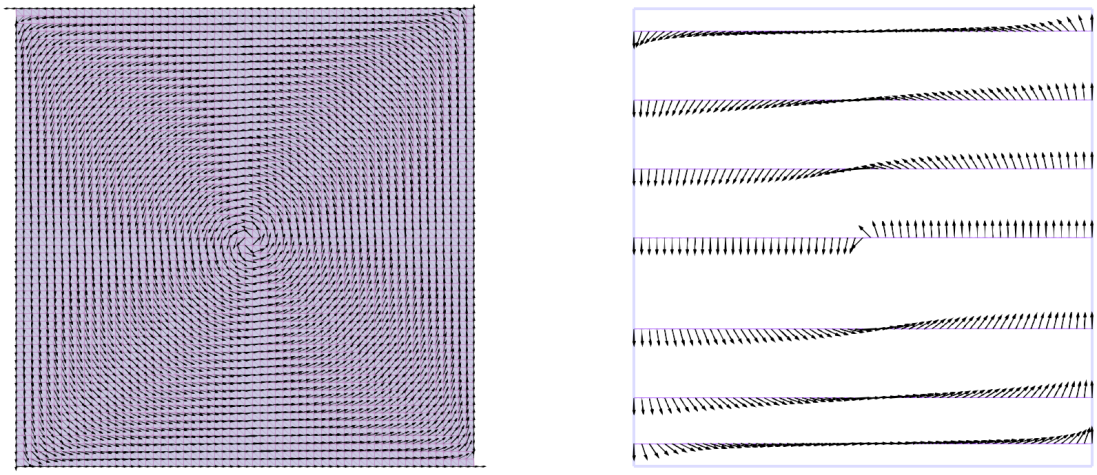


图7：（a）使用我们提出的方法求解一个会产生奇异性的问题所得的解。（b）从（a）的解中取直线 $y = \{0.05、0.15、0.3、0.5、0.65、0.8、0.95\}$ 的切片，以显示二维问题中的旋转速度。

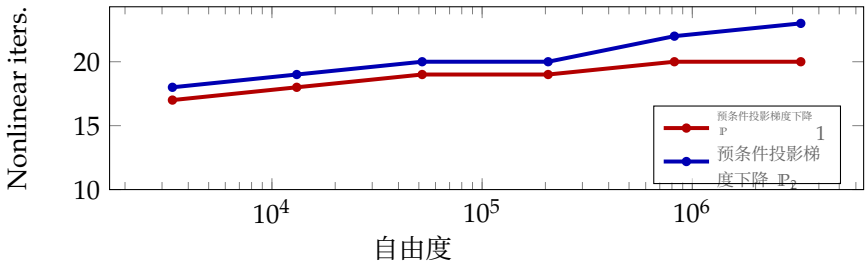


图8：对于不同数量的自由度（从3K到3.2M），使用一阶和二阶有限元的预条件投影梯度下降（PPGD）所需的非线性迭代次数。

自动生成代码，该代码会针对给定问题在执行时进行编译，从而实现出色的性能 [RMM+12]。第二种运算依赖于 BLAS-1 运算，这些运算经过了高度优化 [LHKK79]，最后一种运算取决于 BoomerAMG 的可扩展性，而其可扩展性已得到充分验证 [FY02]。

4 数值测试

本节使用算法1对我们的模型进行数值研究，并将其与标准的基于势函数的方法进行比较。为此，我们设计了五项测试。在第一项测试中，我们展示如何利用模型生成左心室的纤维场，并将结果与基于势函数的方法进行比较。在第二项测试中，我们计算假设（6）中的向列误差项 $S \cdot f$，以验证该假设是否成立。在第三项测试中，我们研究该方法的数值收敛性。更具体地说，我们验证 Aubin-Nitsche 估计成立，这意味着我们的方法呈二次收敛，与之相对，标准方法呈线性收敛。在第四项测试中，我们展示模型对机械收缩基准测试的影响。

4.1 左心室的应用

我们将按照第2节中概述的步骤进行。对于每个步骤，我们都会展示采用所提出的向量表述得到的对应结果。

跨壁距离和向量。 跨壁势 $\phi_{\mathtt{trans}}$ 的模型由公式 (1) 给出，并满足边界条件

$$\phi_{\mathtt{trans}} = 1 \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{endo}}, \quad \phi_{\mathtt{trans}} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{epi}}, \quad \nabla \phi_{\mathtt{trans}} \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{base}}.$$

在向量模型中，这可以重新表述为寻找一个满足以下边界条件的向列液晶向量 $\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}$

$\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} = -\boldsymbol{N}$ 在 $\Gamma_{\mathtt{endo}}$ 上，$\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} = \boldsymbol{N}$ 在 $\Gamma_{\mathtt{epi}}$ 上，$\boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} \cdot \boldsymbol{N} = \boldsymbol{0}$ 在 $\Gamma_{\mathtt{base}}$ 上，$\Pi_{\boldsymbol{\tau}}[\nabla \boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}]\boldsymbol{N} = \boldsymbol{0}$ 在 $\Gamma_{\mathtt{base}}$ 上。

我们强调，在 t 在向量表述中，我们不计算跨壁距离，因为这并非必要。

Ap心尖基底向量。势函数 $\phi_{\mathtt{ab}}$ 的模型由边界条件给出

$$\phi_{\mathtt{ab}} = 1 \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{apex}}, \quad \phi_{\mathtt{ab}} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{base}}, \quad \nabla \phi_{\mathtt{ab}} \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{elsewhere},$$

其中， $\Gamma_{\mathtt{apex}}$ 是代表心尖的单个节点。在向量设定中，利用第2.1.1节中关于奇异性的计算，我们得到

$$\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}} = \boldsymbol{N} \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{base}}, \quad \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{apex}}, \quad \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}} \cdot \boldsymbol{N} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } (\Gamma_{\mathtt{base}} \cup \Gamma_{\mathtt{apex}})^c, \quad \Pi_{\boldsymbol{\tau}}[\nabla \boldsymbol{d}]\boldsymbol{N} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } (\Gamma_{\mathtt{base}} \cup \Gamma_{\mathtt{apex}})^c.$$

所得的心尖基底向量必须与跨壁向量正交，即 $\boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}} \leftarrow \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}} - \langle \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}, \boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} \rangle \boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}}$。

横向向量、纤维和交叉纤维。横向向量只需取前两个 $\boldsymbol{d} := \boldsymbol{d}_{\mathtt{trans}} \times \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}$ 的叉积即可。在势框架中，通过跨壁距离对角度进行插值来计算纤维场，具体方法见第2节，由此得到 $\boldsymbol{f}(\phi_{\mathtt{trans}}) := \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}(\phi_{\mathtt{trans}})\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{d}$。在向量设定中，我们可以改为将旋转后的场作为边界条件，从而在假设 (6) 下求解 Frank-Oseen 系统，其边界条件为

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}(1)\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{d} \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{endo}}, \quad \boldsymbol{f} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}(0)\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{d} \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{epi}}, \quad [\nabla \boldsymbol{f}]\boldsymbol{N} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma_{\mathtt{base}}.$$

我们研究了第 4.2 节中项 $\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{f}$ 的影响。我们强调，组织内部边界条件的插值由 Frank-Oseen 模型自动处理。随后可将交叉纤维方向计算为 $\boldsymbol{d}_{\mathtt{cross}} = \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}} - \langle \boldsymbol{d}_{\mathtt{ab}}, \boldsymbol{f} \rangle \boldsymbol{f}$。交叉纤维向量和跨壁向量通常分别称为片层 $\boldsymbol{s}$ 方向和法向 $\boldsymbol{n}$ 方向。

我们在图9中展示了所得的纤维场，以及势函数公式与 Frank-Oseen 公式之间的差异；该差异通过两个向量场之间的夹角进行测量，表示为

$$\mathtt{angle} = \left| \arccos \langle \boldsymbol{f}_{\mathtt{pot}}, \boldsymbol{f}_{\mathtt{FO}} \rangle \right|, \tag{11}$$

其中，$\boldsymbol{f}_{\mathtt{pot}}$ 表示使用势函数方法得到的解，而 $\boldsymbol{f}_{\mathtt{FO}}$ 表示使用 Frank-Oseen 模型得到的解。对于跨壁向量场，误差非常小，最大不超过 14°。心尖-基底向量场再次大致重合，主要差异出现在心尖附近，奇异性正是在此处产生的。纤维场误差呈现出更复杂的结构，因此我们放大了色条的分辨率。尽管组织内部的误差很小，最大约为 30°，但误差主要集中在心尖附近，与心尖-基底向量场的情况相同。

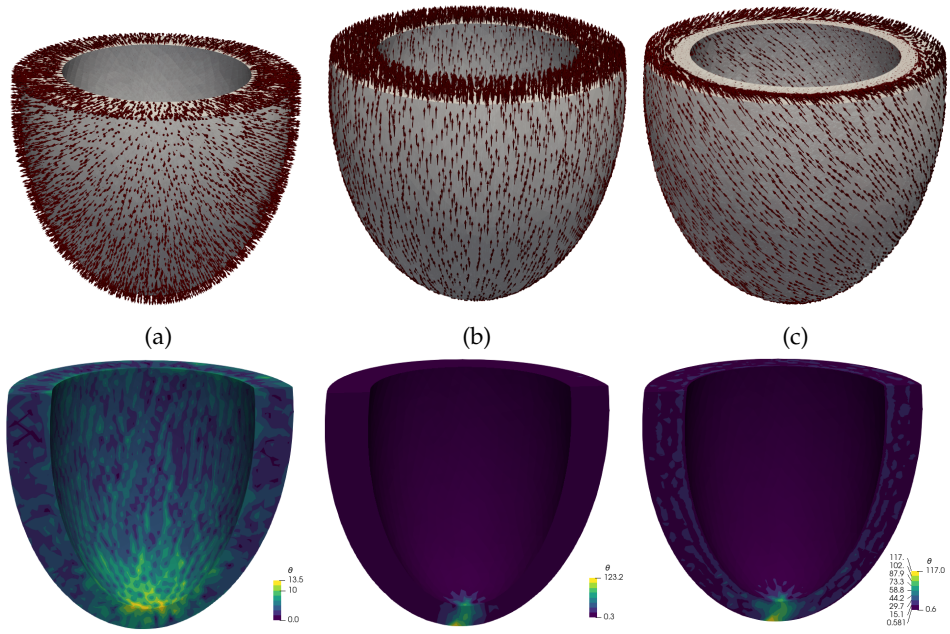


图9：在左心室几何中，将其计算为向列液晶后得到的向量场。误差由（11）给出。（a）跨壁向量场，（b）心尖-基底向量场，（c）纤维向量场，（d）以度为单位的跨壁误差，（e）以度为单位的心尖-基底误差，（f）以度为单位的纤维误差。

4.2 强迫项 $S \cdot f$ 的影响

为了在不使用权重 $\phi_{\mathtt{trans}}$的情况下计算纤维场$\boldsymbol{f}$，我们需要假设$\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{f} = 0$，如式（6）所示。为探究这一要求是强要求还是弱要求，我们计算了 Ω 中的这一量，并将其绘制在图10中，可以看到该量与机器误差相当。为避免公式过于复杂，我们使用 $\mathbb{P}_2$ 元素计算了解，因此拉普拉斯项按构造并不为零；令人惊讶的是，计算得到的该项确实接近机器精度。我们推测该项实际上为零，但仍有待证明。

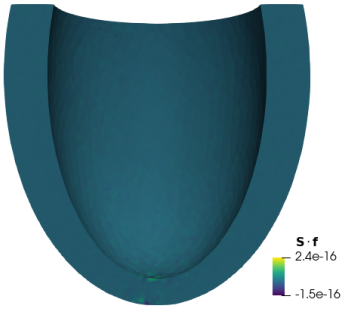


图10：由控制纤维向量场 $\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{f}$ 的方程产生的强迫向量投影 $\boldsymbol{f}$。

4.3 收敛阶

我们模型的一个重要实际优势是，它将所需变量（即纤维）作为主变量。在 RBM 表述中，心肌纤维通过势函数的梯度计算，暂将其记为 $\boldsymbol{d}_{\mathtt{RBM}} \coloneqq \nabla \phi$。此类方案中有限元近似的收敛性由势函数 ϕ 来衡量，而众所周知，该势函数呈线性收敛 [QV08]:

$$\|\boldsymbol{d}^h_{\mathtt{RBM}}\|_{L^2} = \|\nabla \phi^h\|_{L^2} \leq \|\phi^h\|_{H^1} \leq Ch,$$

其中，$d^h_{\mathtt{RBM}}, \phi^h$ 表示连续函数 $\boldsymbol{d}_{\mathtt{RBM}}, \phi$ 的有限元近似。对于采用我们的方法计算得到的纤维场，该估计仍然成立，我们将其记为 $\boldsymbol{d}_{\mathtt{FO}}$:

$$\|\boldsymbol{d}^h_{\mathtt{FO}}\|_{H^1} =\leq Ch,$$

但两种方法的主要区别在于能否使用 Aubin-Nitsche 技术，该技术可得出 L^2 范数的收敛性:

$$\|\boldsymbol{d}^h_{\mathtt{FO}}\|_{L^2} \leq Ch^2.$$

换言之，我们的方法实现的是二次收敛，而非线性收敛。我们通过在二维方形几何中检验问题 (7) 的收敛性，数值验证了该估计成立。图11展示了自由度约为 130 000 以内的结果，可以清楚地观察到二次收敛。

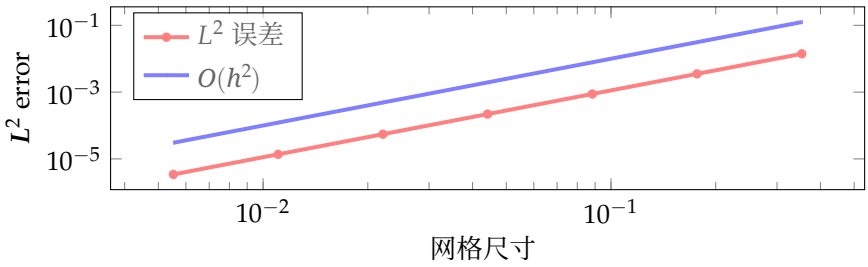


图11：关于网格尺寸的 Frank-Oseen 问题有限元近似$\boldsymbol{L}^2$ 误差。

4.4 心尖位移对比

最后，我们研究了采用两种纤维生成模型对心脏力学模拟的影响。鉴于两种方法差异最大的部位是心尖，我们研究了基准收缩问题 [LGA+15] 中的心尖位移。基准测试的详情见所提供的参考文献；图12（a-c）展示了0、0.1和0.2秒时的变形。图12（d）展示了心尖位移的大小，可以看出两种方法之间存在明显差异。具体而言，Frank-Oseen 模型得到的心尖位移约减少了25%。这是因为我们的方法能够计算出奇异性，并将奇异点处的解设为$\mathbf{0}$，而标准方法则会在心尖处计算出一个任意向量，从而产生人为的主动收缩力。

5 心脏纤维中的拓扑缺陷

我们介绍一些关于 Frank-Oseen 方程解中奇点存在的重要观点。本节引用的所有结果及其他细节均可见于 [Bal17, TS17]。

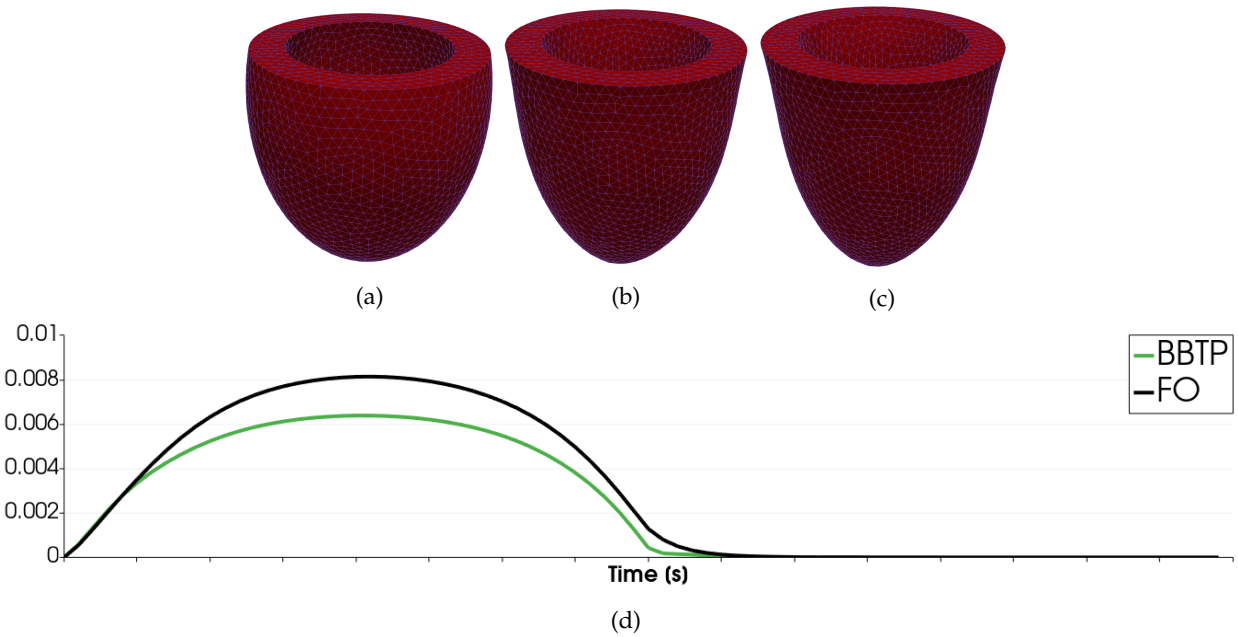


图12：基底部边界条件均匀时的基准收缩：(a) $t = 0.0$ 秒，(b) $t = 0.1$ 秒，以及 (c) $t = 0.3$ 秒。我们还展示了使用我们的模型（FO）和基于势函数的模型（BBTP）得到的心尖位移 (d)。

向列液晶可能出现各种奇点，即晶体取向的梯度无界变化的区域，这意味着 $\lambda \to \infty$。奇点可用一种称为拓扑荷的量来表征，而文献 [TS17] 已对二维中的拓扑缺陷进行了全面表征。然而，我们的问题 (2) 满足单常数假设，因此问题大为简化。对于我们的情况，有两个基本结果：(i) 在单常数情形下，奇点集由有限个点构成 [SU82]；(ii) 超出单常数假设时，奇点集的一维豪斯多夫测度为零 [HKL88]。请注意，豪斯多夫测度是一种外测度；也就是说，至少从直观上看，在这种情况下，奇点集至多可视为一个可数点集，而不是一条线。

第2节的推导表明，在单常数假设下，心肌纤维的行为类似于向列液晶，这意味着我们预期解中至多会出现一组离散的奇点。在 [AUJ22]，中，作者通过分析 DT-MRI 图像的法向轴切片表明，心脏存在两种奇点。第一种是众所周知的左心室心尖周围的螺旋取向，通常使用 RBM 重建；它确实是一个点缺陷，如图13所示。第二种是一条线，它产生三种不同的主要取向，称为 -1/2 指数的向错。这种情况出现在心室与室间隔的交界处。非整数指数的奇点不会出现在 Frank-Oseen 和 Ericksen 这类具有方向偏向性的模型中，而需要使用更一般的模型，例如 Landau-De Gennes。在这种情况下，Frank-Oseen 中向量场的光滑性会通过“逃逸”到第三维来避免奇点。

6 讨论与结论

在这项工作中，我们推导出一种用于计算纤维基的新模型，它会在人类心室中产生各向异性。该模型可视为该纤维偏微分方程，其计算从 RBM 开始。

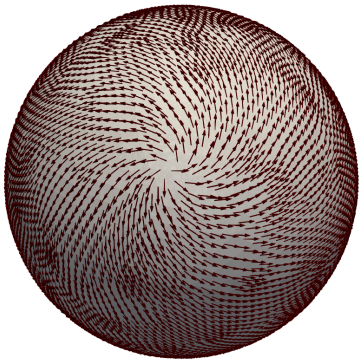


图13：左心室心尖处的螺旋状奇点。

并得到了在单常数假设下用于模拟向列液晶的方程。与传统方法相比，这种方法在计算上更具挑战性，因为它需要求解一个约束非线性偏微分方程，但相应地，它能得到准确得多的纤维场。我们还设计了一种预条件投影梯度下降求解器，适用于广泛的情形，具有高效、稳健且可扩展的特点，但其理论性质仍有待探索。与现有基于鞍点形式的方法相比，这种方法似乎更适合作为黑箱求解器使用。从物理角度来看，该模型可视为活体组织各向异性的首个数学模型，这一现象近期已在实验中得到观察 [HC17, AUJ22]。这为未来研究开辟了可能性：其他纤维结构也可以在这一框架下建模，例如骨骼肌、真皮，甚至分子层面的 DNA [SXLL18]。

鉴于第5节所述的考量，我们指出，该模型对左心室以外的心脏模拟并不适用。这是因为 Frank-Oseen 引入了方向偏置，不允许出现非整数奇点。事实上，这正是 [BBPT12] 开发一种临时技术的目的，该技术称为*bislerp*，旨在提供一种不受向量方向影响的四元数插值技术。在液晶理论中，描述此类行为的自然数学框架是使用无向张量$f \otimes f$而非向量f；无向张量是 Landau-De Gennes理论中Q张量理论的核心。将这一框架应用于人类心脏的大规模模拟，将是我们未来工作的主要目标。

致谢

NAB 获得了 Centro de Modelamiento Matematico (CMM)、Proyecto Basal FB210005 以及 ANID、Proyecto 3230326 的支持。AO 的经费来自 ANID-Fondecyt 1201311、1231404、CMM FB210005 Basal-ANID、FONDAP/15110009、Math-Amsud MATH190008、DO (ANID) DO210001，以及 Millennium Science Initiative Programs NCN19-161 和 ICN2021-004。

参考文献

[AEMM16] JH Adler、DB Emerson、SP MacLachlan 和 TA Manteuffel。液晶平衡的约束优化。*SIAM*科学计算期刊，38:B50–B76，1 2016年。[AUJ22] J Auriau、Y Usson 和 P-S Jouk。心脏肌肉结构的向列手性液晶结构：向错与拓扑奇点。心血管发育与疾病杂志，9:371，10 2022年。[Bal17] JM Ball。液晶及其缺陷，第1–46页。Springer InternationalPublishing，9 2017年。

[BB18] FPA Beik 和 M Benzi。源自液晶指向矢建模的鞍点系统的块预条件子。Calcolo，55，9 2018年。[BBF13] D Boffi、F Brezzi 和 M Fortin。混合有限元方法及其应用，第44卷。Springer，2013年。[BBPT12] JD Bayer、RC Blake、G Plank 和 NA Trayanova。一种用于为计算心脏模型赋予心肌纤维取向的新型基于规则的算法。《生物医学工程年鉴》，40：2243–2254，10 2012年。[BHPS22] NA Barnafi、NMM Huynh、LF Pavarino 和 S Scacchi。双域方程隐式时间离散化的稳健并行非线性求解器分析与数值验证。arXiv预印本 arXiv:2209.05193，2022年。[BPS22] NA Barnafi、LF Pavarino 和 S Scacchi。用于非线性弹性的并行非精确牛顿–克雷洛夫和拟牛顿求解器。《应用力学与工程中的计算机方法》，400：115557，10 2022年。[DSIB+19] R Doste、D Soto-Iglesias、G Bernardino、A Alcaine、R Sebastian、S Giffard-Roisin、M Sermesant、A Berruezo、D Sanchez-Quintana 和 O Camara。一种在含流出道的心脏双心室几何结构中模拟心肌纤维取向的基于规则的方法。《生物医学工程数值方法国际期刊》，35：e3185，4 2019年。[Eva22] LC Evans。《偏微分方程》，第19卷。美国数学学会，2022年。[FY02] RD Falgout 和 UM Yang。hypre：一个高性能预条件子库。载于《国际计算科学会议》，第632–641页。Springer，2002年。[GS21] I Gjerde 和 L Scott。带滑移边界条件的 Navier–Stokes方程的Nitsche方法。《计算数学》，91：597–622，11 2021年。[HC17] LS Hirst 和 G Charras。活体组织中的液晶。《自然》，544：164–165，4 2017年。[HKL88] R Hardt、D Kinderlehrer 和 F-H Lin。约束变分原理极小化子中的稳定缺陷。载于《亨利·庞加莱研究所年刊 C辑：非线性分析》，第5卷，第297–322页。Elsevier，1988年。[HTW09] Q Hu、X-C Tai 和 R Winther。一种计算调和映射的鞍点方法。《SIAM数值分析杂志》，47：1500–1523，1 2009年。[KST+11] MW Krueger、V Schmidt、C Tob´on、FM Weber、C Lorenz、DUJ Keller、H Barschdorf、M Bur- dumy、P Neher、G Plank、K Rhode、G Seemann、D Sanchez-Quintana、J Saiz、R Razavi 和 O D¨ossel。在患者特异性几何结构中模拟心房纤维取向：一种半自动的基于规则的方法，第223–232页。Springer Berlin Heidelberg，2011年。[LGA+15] S Land、V Gurev、S Arens、CM Augustin、L Baron、R Blake、C Bradley、S Castro、A Crozier、M Favino、TE Fastl、T Fritz、H Gao、A Gizzi、BE Griffith、DE Hurtado、R Krause、X Luo、MP Nash、S Pezzuto、G Plank、S Rossi、D Ruprecht、G Seemann、NP Smith、J Sundnes、JJ Rice、N Trayanova、D Wang、Z Jenny Wang 和 SA Niederer。心脏力学软件验证：用于测试主动与被动材料行为的基准问题及其解。《皇家学会学报A辑：数学、物理与工程科学》，471：20150641，12 2015年。[LHKK79] CL Lawson、RJ Hanson、DR Kincaid 和 FT Krogh。用于Fortran的基础线性代数子程序。《ACM 数学软件汇刊》（TOMS），5(3)：308–323，1979年。

[Lin89] F-H Lin。向列液晶中缺陷的非线性理论；相变与流动现象。《纯粹与应用数学通讯》，42:789–814，9 1989年。[MZ10] A Majumdar 和 A Zarnescu。向列液晶的 Landau–De Gennes 理论：奥森–弗兰克极限及其拓展。《理性力学与分析档案》，196:227–280，4 2010年。[NCC19] SA Niederer、KS Campbell 和 SG Campbell。心脏力学数学模型发展的简史。《分子与细胞心脏病学杂志》，127:11–19，2 2019年。[PAF+21] R Piersanti、PC Africa、M Fedele、C Vergara、L Ded`e、AF Corno 和 AM Quarteroni。在心室和心房电生理仿真中对心肌纤维进行建模。《应用力学与工程中的计算机方法》，373:113468，1 2021年。[QV08] A Quarteroni 和 A Valli。偏微分方程的数值逼近，第 23 卷。施普林格科学，2008年。[RHGP+22] C Ruiz Herrera、T Grandits、G Plank、P Perdikaris、F Sahli Costabal 和 S Pezzuto。利用多个电解剖图，通过物理信息神经网络学习心脏纤维取向。《计算机辅助工程》，38:3957–3973，10 2022年。[RHM+16] F Rathgeber、DA Ham、L Mitchell、M Lange、F Luporini、ATT McRae、G-T Bercea、GR Markall 和 PHJ Kelly。Firedrake：通过组合抽象自动化有限元方法。《ACM 数学软件汇刊》（TOMS），43(3):1–27，2016年。[RLRB+14] S Rossi、T Lassila、R Ruiz-Baier、A Sequeira 和 AM Quarteroni。热力学一致的正交各向异性激活模型，用于刻画心脏电生物力学中的心室收缩期室壁增厚。《欧洲力学杂志——A辑：固体》，48:129–142，11 2014年。[RMM+12] F Rathgeber、GR Markall、L Mitchell、N Loriant、DA Ham、C Bertolli 和 PHJ Kelly。Pyop2：用于非结构网格上性能可移植仿真的高级框架。载于 2012 SC 配套会议：高性能计算、网络、存储与分析（SCC）。IEEE，11 2012年。[RS82] DE Roberts 和 AM Scher。组织各向异性对离体犬心肌细胞外电位场的影响。《循环研究》，50:342–351，3 1982年。[RWS+19] CH Roney、J Whitaker、I Sim、L O’Neill、RK Mukherjee、O Razeghi、EJ Vigmond、M Wright、MD O’Neill、SE Williams 和 SA Niederer。测量心房传导各向异性以估计传导速度和心房纤维方向的技术。《生物学与医学中的计算机》，104:278–290，1 2019年。[Sch99] J Sch¨oberl。原始变量中参数相关问题的多重网格方法。《数值数学》，84:97–119，11 1999年。[Sho85] K Shoemake。利用四元数曲线制作旋转动画。载于第 12 届年度会议。ACM Press，1985年。[SSP+69] DD Streeter、HM Spotnitz、DP Patel、J Ross 和 EH Sonnenblick。舒张期和收缩期犬左心室中的纤维取向。《循环研究》，24:339–347，3 1969年。[Ste95] R Stenberg。有限元方法中逼近边界条件的一些技术。《计算与应用数学杂志》，63(1-3):139–148，1995年。[SU82] R Schoen 和 K Uhlenbeck。调和映射的正则性理论。《微分几何杂志》，17(2):307–335，1982年。

[SXLL18] TB Saw、W Xi、B Ladoux 和 CT Lim。作为主动向列液晶的生物组织。《先进材料》，30:1802579，11 2018年。[TD18] GJ Tortora 和 BH Derrickson。《解剖学与生理学原理》。约翰·威立父子出版公司，2018年。[TS17] X Tang 和 JV Selinger。二维向列液晶中拓扑缺陷的取向。《软物质》，13:5481–5490，2017年。[Vr86] R Verf¨u rth。不可压纳维–斯托克斯方程的有限元逼近及滑移边界条件。《数值数学》，50:697–721，11 1986年。[WK14] J Wong 和 E Kuhl。利用泊松插值在人类心脏模型中生成纤维取向图。《生物力学与生物医学工程中的计算机方法》，17:1217–1226，8 2014年。[WN99] S Wright 和 J Nocedal。数值优化。施普林格科学，35(67-68):7，1999年。[XFW21] J Xia、PE Farrell 和 F Wechsung。向列相和胆甾相液晶奥森–弗兰克模型的增广拉格朗日预条件子。《*BIT*数值数学》，61:607– 644，6 2021年。[ZAS+21] T Zheng、L Azzolin、J S´anchez、O D¨ossel 和 A Loewe。用于在患者特异性心房模型中生成纤维取向和区域标注的自动化流程。《生物医学工程当前进展》，7:136–139，10 2021年。[ZBne] L Zhukov 和 AH Barr。基于扩散张量磁共振成像的心肌纤维重建。载于 *IEEE*可视化 *2003*。IEEE，None。