Моделирование ориентационной термоупругости в нематических жидких кристалла

DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-4-12

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРИЕНТАЦИОННОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

#### И. В. Смолехо

Институт вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск, Российская Федерация ORCID: http://orcid.org/0000-0002-9852-9310, ♠ i smol@icm.krasn.ru

Аннотация: в работе представлен анализ эффекта ориентационной термоупругости с применением двумерной упрощенной динамической модели жидкого кристалла в акустическом приближении. Предполагается, что эффект возникает при нагревании одной из границ прямоугольного жидкокристаллического слоя. При решении системы уравнений модели применяется метод двуциклического расщепления по пространственным переменным в сочетании с конечно-разностной схемой распада разрыва Годунова для уравнений акустики и схемы Иванова с контролируемой диссипацией энергии для уравнения теплопроводности. Использование такой комбинации конечно-разностных схем позволяет проводить расчеты связанных термомеханических процессов с одинаковыми шагами по времени и по пространству, удовлетворяющим условию Куранта-Фридрихса-Леви. Численный алгоритм реализован в виде параллельной программы, написанной на языке С++. Распараллеливание вычислений выполнено для компьютеров с графическими ускорителями NVIDIA по технологии CUDA. Проведены расчеты, демонстрирующие невозможность наблюдения эффекта переориентации молекул жидкого кристалла под действием температуры для представленной упрощенной модели в акустическом приближении. Однако воздействие температуры существенно влияет на давление и скорости. Сделано заключение, что при учете сил поверхностного натяжения этот эффект будет наблюдаться для используемой в работе модели.

Ключевые слова: жидкий кристалл, теплопроводность, динамика, технология CUDA.

*Благодарности*: работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (соглашение 075-02-2024-1378).

Для цитирования: Смолехо И. В. Моделирование ориентационной термоупругости в нематических жидких кристаллах. Успехи кибернетики. 2024;5(4):88–94. DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-4-12. Поступила в редакцию: 30.09.2024. В окончательном варианте: 25.10.2024.

## SIMULATION OF THE THERMAL ORIENTATION EFFECT IN NEMATIC LIQUID CRYSTALS

## I. V. Smolekho

Institute of Computational Modeling, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Krasnoyarsk, Russian Federation

ORCID: http://orcid.org/0000-0002-9852-9310, i\_smol@icm.krasn.ru

Abstract: this study analyzes the thermal orientation effect using a 2D simplified dynamic model of a liquid crystal with acoustic approximation. We assumed that the effect occurs when one of the boundaries of a rectangular liquid crystal layer is heated. To solve the system of equations, we used a two-cycle splitting method of splitting with respect to spatial variables in combination with a finite-difference scheme of Godunov gap decay for the acoustic equations and the Ivanov scheme with controlled energy dissipation for the heat conductivity equation. This combination of finite-difference methods enables the analysis of the thermomechanical processes with the same time and space steps satisfying the Courant-Friedrichs-Lewy criterion. We implemented the numerical algorithm as a parallel program in C++. For parallelization, we used NVIDIA graphic accelerators and CUDA technology. The analysis showed the impossibility of observing the re-orientation effect in liquid crystal molecules caused by temperature for the given simplified model with acoustic approximation. We concluded that when taking into account the surface tension forces, this effect will be observed in the model used.

Keywords: liquid crystal, thermal conductivity, dynamics, CUDA technology.

*Acknowledgements*: this work is supported by the Krasnoyarsk Mathematical Center and financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the Local Center for Mathematics Research and Education Initiative (Agreement No. 075-02-2024-1378).

Cite this article: Smolekho I. V. Simulation of the Thermal Orientation Effect in Nematic Liquid Crystals. Russian Journal of Cybernetics. 2024;5(4):88–94. DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-4-12.

Original article submitted: 30.09.2024. Revision submitted: 25.10.2024.

#### Введение

Жидкие кристаллы — это вещества, сочетающие в определенном диапазоне температур оптическую анизотропию кристаллов с молекулярной подвижностью жидкостей, что является важнейшим свойством этих систем [1, 2]. Молекулы жидкого кристалла ориентированы таким образом, чтобы придать веществу некоторую форму, однако при этом присутствует еще и свойство текучести. В зависимости от начальной ориентации жидкие кристаллы бывают нематические, смектические и холестерические. В данной работе рассматриваются нематические жидкие кристаллы, молекулы которых расположены параллельно друг другу. Этот тип является наиболее распространенным, поскольку он лучше всего иллюстрирует двойственную природу жидких кристаллов и благодаря этому имеет широкий спектр применений, начиная от технологий отображения информации и заканчивая оптическими устройствами и датчиками. При использовании в ЖК-дисплеях жидкие кристаллы помогают регулировать яркость экрана путем изменения напряженности электрического поля, действующего на кристалл. Также их ориентация чувствительна к изменению температуры. При нагревании эти вещества переходят в более упорядоченное состояние, которое может быть использовано, например, для хранения данных, при охлаждении жидкие кристаллы возвращаются в свое первоначальное состояние, то есть данные могут быть стерты и записаны заново. Датчики на основе жидких кристаллов используются для измерения температуры, а также для биохимического анализа. Жидкие кристаллы продолжают вызывать интерес благодаря контролируемым оптическим и электрооптическим свойствам. Исследования в этой области продолжаются, и разрабатываются новые приложения, поэтому жидкие кристаллы будут играть важную роль в современных постоянно развивающихся технологиях.

В настоящее время существует динамическая модель Эриксена и Лесли [3, 4], основанная на законах сохранения, учитывающая поступательное и вращательное движения, а также течение жидких кристаллов. Но она оказалась слишком сложной для численной реализации, так как включает в себя большое число уравнений и параметров, которые необходимо определять экспериментально, что не всегда является возможным. В связи с этим появилась необходимость в разработке упрощенных моделей, позволяющих более детально описать и исследовать протекающие в жидких кристаллах процессы. В одной из своих работ С. И. Трашкеев и А. В. Бритвин [5] экспериментально исследовали влияние температуры на ориентацию молекул жидкого кристалла и пришли к выводу, что их воспри-имчивость к тепловым потокам аналогична взаимодействию с электромагнитными полями. Однако в экспериментах использовалась обкладка с существенно отличающимся коэффициентом объемного расширения. Вероятно, что эффект переориентации молекул связан с тепловым расширением обкладки, а не с воздействием теплового потока.

В данной работе представлен анализ эффекта ориентационной термоупругости, возникающего при нагревании границы горизонтального слоя жидкого кристалла с помощью упрощенной двумерной модели в акустическом приближении, учитывающей механические, температурные и электрические воздействия в динамике [6].

## Математическая модель жидкого кристалла в акустическом приближении

Уравнения модели, позволяющей исследовать поведение жидких кристаллов при термомеханическом и электрическом воздействиях, получены из интегральных законов сохранения энергии, импульса и момента импульса на основе теории континуума Коссера [7] с помощью неравенства Клазиуса—Дюгема. В двумерном случае модель включает в себя уравнения:

поступательного движения  $v_{1_t} = -p_{x_1} - q_{x_2} + f_1$ ,  $\rho v_{2_t} = q_{x_1} - p_{x_2} + f_2$ , (1)

моментных напряжений  $\mu_{1_t} = \gamma \omega_{x_1}, \quad \mu_{2_t} = \gamma \omega_{x_2},$  (3)

угла поворота 
$$\theta_t = \omega,$$
 (4)

состояния для давления

 $p_{t} = -\kappa(v_{1_{x_{1}}} + v_{2_{x_{2}}}) + \beta T_{t}, \qquad q_{t} = \alpha(v_{2_{x_{1}}} - v_{1_{x_{2}}}) - 2\alpha(\omega + q/\eta),$  (5)

и касательного напряжения

теплопроводности

$$\rho c T_{t} = \left( \mathbf{x}_{11} T_{x_{1}} + \mathbf{x}_{12} T_{x_{2}} \right)_{x_{1}} + \left( \mathbf{x}_{12} T_{x_{1}} + \mathbf{x}_{22} T_{x_{2}} \right)_{x_{2}} \beta T(v_{1_{x_{1}}} + v_{2_{x_{2}}}) + 2 q^{2} / \eta + H, \tag{6}$$

$$\mathbf{x}_{11} = \mathbf{x}_{\parallel} \cos^2 \theta \ + \mathbf{x}_{\perp} \sin^2 \theta, \qquad \mathbf{x}_{12} = (\mathbf{x}_{\parallel} - \mathbf{x}_{\perp}) \sin \theta \cos \theta, \qquad \mathbf{x}_{22} = \mathbf{x}_{\parallel} \sin^2 \theta + \mathbf{x}_{\perp} \cos^2 \theta.$$

Здесь  $v_1$  и  $v_2$  — компоненты вектора скорости,  $\omega$  — угловая скорость,  $\theta$  — угол поворота молекул, p — давление, q — касательное напряжение,  $\mu_1$  и  $\mu_2$  — моментные напряжения, T — температура,  $\rho$  — плотность, J — момент инерции,  $\kappa$  — модуль объемного сжатия,  $\alpha$  — модуль упругого сопротивления вращению,  $\beta$  — коэффициент теплового расширения,  $\gamma$  — модуль упругого сопротивления изменению кривизны,  $\eta$  — коэффициент вязкости, H — интенсивность источников тепла, c — удельная теплоемкость.  $\mathfrak{w}_{\parallel}$  и  $\mathfrak{w}_{\perp}$  — коэффициенты теплопроводности в направлении ориентации молекул жидкого кристалла и в поперечном направлении различны благодаря анизотропии ЖК.  $f_1$ ,  $f_2$  и m — объемные силы и момент сил, обусловленные воздействием электрического поля, которые не учитываются при исследовании термодинамического эффекта, поскольку не влияют на изменение температуры. Алгоритм электрического воздействия представлен, например, в [8].

## Вычислительный алгоритм

Рассматривается область жидкого кристалла в виде прямоугольника размерами  $lx_1$  и  $lx_2$  в направлениях  $x_1$  и  $x_2$  соответственно. Конечно-разностная сетка состоит из совокупности узлов:

$$R_{i_1 i_2}^i = \{ (t_i, x_{1_{i_1}}, x_{2_{i_2}}) : t_i = i \Delta t, \quad x_{1_{i_1}} = i_1 \Delta x_1, \quad x_{2_{i_2}} = i_2 \Delta x_2, \\ i = 0, \dots, Nt, \quad i_1 = 0, \dots, Nx_1, \quad i_2 = 0, \dots, Nx_2 \},$$

Здесь  $\Delta x_1$  и  $\Delta x_2$  — шаги в направлениях  $x_1$  и  $x_2$  такие, что  $x_{1_{i_1}} \in (0, l_{x_1}), x_{2_{i_2}} \in (0, l_{x_2}), \Delta t$  — шаг по времени t, Nt — количество шагов по времени,  $Nx_1$  и  $Nx_2$  — количество ячеек конечно-разностной сетки в направлениях  $x_1$  и  $x_2$ , задаются произвольно. В начальный момент времени в этой области задаются нулевые значения для всех величин, кроме  $\theta = \theta_0$ , и  $T = T_0$ . Граничные условия представлены в терминах давления, скоростей, напряжений и температуры. Нагрузка на границе может действовать постоянно либо заданное количество шагов по времени. Система уравнений (1)-(6) является гиперболической по Фридрихсу, поэтому постановка задачи Коши корректна. При решении системы (1)-(6) используется метод двуциклического расщепления по пространственным переменным, предполагающий, что на каждом шаге по времени происходит пять последовательных стадий. На 1-й и 5-й стадиях на разных полушагах по времени решается одномерная подсистема уравнений, зависящая от  $x_1$ :

$$\rho v_{1_{t}} = -p_{x_{1}}, \quad p_{t} = -\kappa v_{1_{x_{1}}} + \beta T_{t}, \quad \rho v_{2_{t}} = q_{x_{1}},$$

$$q_{t} = \alpha v_{2_{x_{1}}}, \quad J \omega_{t} = \mu_{1_{x_{1}}}, \quad \mu_{1_{t}} = \gamma \omega_{x_{1}},$$
(7)

$$\rho c T_{t} = h_{1_{x_{1}}} - \beta T v_{1_{x_{1}}}, \quad h_{1} = \mathfrak{x}_{11} T_{x_{1}} + \mathfrak{x}_{12} T_{x_{2}}. \tag{8}$$

При решении уравнений (7) применяется конечно-разностная схема распада разрыва Годунова [9] типа «предиктор-корректор». На шаге «предиктор» используются следующие уравнения на характеристиках:

$$dx_{1} = \pm \sqrt{\kappa/\rho} dt : dI_{1}^{\pm} = 0, \quad I_{1}^{\pm} = p \pm v_{1}\sqrt{\kappa\rho}$$

$$dx_{1} = \pm \sqrt{\alpha/\rho} dt : dI_{2}^{\pm} = 0, \quad I_{2}^{\pm} = q \pm v_{2}\sqrt{\alpha\rho}$$

$$dx_{1} = \pm \sqrt{\gamma/J} dt : dI_{3}^{\pm} = 0, \quad I_{3}^{\pm} = \mu_{1} \pm \omega\sqrt{\gamma J},$$
(9)

позволяющие определить значения с дробными индексами на боковых гранях ячеек конечноразностной сетки в плоскости  $x_1$ , t, целые индексы относятся к внутренним узлам сетки  $i_1 = 2, \dots, Nx_1$ :

$$v_{1_{i_{1}-1/2}} = \frac{I_{1,i_{1}-1}^{+} - I_{1,i_{1}}^{-}}{2\sqrt{\rho\kappa}}, \quad p_{i_{1}-1/2} = \frac{I_{1,i_{1}-1}^{+} + I_{1,i_{1}}^{-}}{2}, \quad v_{2_{i_{1}-1/2}} = \frac{I_{2,i_{1}}^{+} - I_{1,i_{1}-1}^{-}}{2\sqrt{\rho\alpha}},$$

$$q_{i_{1}-1/2} = \frac{I_{2,i_{1}}^{+} + I_{2,i_{1}-1}^{-}}{2}, \quad \omega_{i_{1}-1/2} = \frac{I_{3,i_{1}}^{+} - I_{3,i_{1}-1}^{-}}{2\sqrt{\gamma J}}, \quad \mu_{1_{i_{1}-1/2}} = \frac{I_{3,i_{1}}^{+} + I_{3,i_{1}-1}^{-}}{2}.$$

$$(10)$$

В граничных узлах эти значения находятся из граничных условий. Затем уравнение теплопроводности (7) решается с применением конечно-разностной схемы Иванова [10], используемой при решении задач динамики твердых тел, пластин и оболочек. Идея метода заключается в выполнении закона сохранения энергии на дискретном уровне. Рассмотрим расширенную систему:  $\rho \, c \, T_t = \bar{h}_{x_m}, \, h = \bar{x} \, \bar{T}_{x_m} + g$ , где неизвестные функции  $\bar{T} \neq T$  и  $\bar{h} \neq h$ . Для этой системы выполняется уравнение баланса энергии

$$\frac{\rho c}{2} T_{tt} + \alpha (\bar{T}_{x_m})^2 = \bar{h}_{x_m} (T - \bar{T}) + \bar{T}_{x_m} (h - \bar{h}) + (\bar{T}\bar{h})_{x_m} - g \bar{T}_{x_m}, \tag{11}$$

которое преобразуется в диссипативное неравенство:

$$\frac{\rho c}{2} T_{tt} + \varepsilon (\bar{T}_{x_m})^2 \leqslant (\bar{T}\bar{h})_{x_m} - g \bar{T}_{x_m}.$$

Замыкающие уравнения расширенной системы принимают вид:

$$\begin{bmatrix} T - \bar{T} \\ h - \bar{h} \end{bmatrix} = -D \begin{bmatrix} \bar{h}_{x_m} \\ \bar{T}_{x_m} \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix},$$

где D — положительно определенная матрица. Дискретный аналог расширенной системы — это шаг «корректор» конечно-разностной схемы:

$$\rho c \frac{T^{i} - T_{i}}{\Delta t/2} = \frac{h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{m}}, \quad h_{i} = \mathfrak{E} \frac{T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{m}} + g_{i}.$$
(12)

Для более краткой записи отсутствуют индексы второго направления, верхние индексы соответствуют текущему шагу по времени, нижние — предыдущему,  $\Delta x_m$ ,  $h_i$  и  $\alpha$  — шаги по пространству, потоки со смешанными производными и коэффициент теплопроводности в зависимости от направления  $x_1$  и  $x_2$ . Величины  $g_i$  вычисляются через значения с предыдущего шага по времени явно, включают в себя смешанные производные с коэффициентом  $\alpha_{12}$ . Решение строится с шагом по времени  $\Delta t/2$ , как это требуется для стадий расщепления. Дискретный аналог уравнения (11) выглядит следующим образом:

$$\begin{split} \rho \, c \, \frac{(T^i)^2 - (T_i)^2}{\Delta t} + & \, \, \mathbf{æ} \bigg( \frac{T_{i + \frac{1}{2}} - T_{i - \frac{1}{2}}}{\Delta x_m} \bigg)^2 = \frac{h_{i + \frac{1}{2}} - h_{i - \frac{1}{2}}}{\Delta x_m} \bigg( \frac{T^i + T_i}{2} - \frac{T_{i + \frac{1}{2}} + T_{i - \frac{1}{2}}}{2} \bigg) \, + \\ & + \, \frac{T_{i + \frac{1}{2}} - T_{i - \frac{1}{2}}}{\Delta x_m} \bigg( h_i - \frac{h_{i + \frac{1}{2}} + h_{i - \frac{1}{2}}}{2} \bigg) + \frac{(Th)_{i + \frac{1}{2}} - (Th)_{i - \frac{1}{2}}}{\Delta x_m} - g_i \, \frac{T_{i + \frac{1}{2}} - T_{i - \frac{1}{2}}}{\Delta x_m}. \end{split}$$

Замыкающие уравнения примут вид:

$$\begin{bmatrix} T^{i} + T_{i} - T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}} \\ 2h_{i} - h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} = \frac{-2D}{\Delta x_{m}} \begin{bmatrix} h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}} \\ T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}} \end{bmatrix}.$$

Для простоты используется матрица D с одним ненулевым элементом со свободным параметром d:  $D_{11} = d - \Delta t/c \, \Delta x_m \geqslant 0$ , так как схема аппроксимирует уравнение теплопроводности только с

малыми элементами этой матрицы. Замыкающие уравнения с учетом подстановки второго уравнения в системе (11) принимают вид:

$$T_{i} - \frac{T_{i+\frac{1}{2}} + T_{i-\frac{1}{2}}}{2} = -d \frac{h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}}}{2}, \quad g_{i} + \mathfrak{x}_{i} \frac{T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{m}} = \frac{h_{i+\frac{1}{2}} + h_{i-\frac{1}{2}}}{2}.$$

Уравнения для потоков тепла получены путем сложения и вычитания замыкающих уравнений:

$$d h_{i\pm\frac{1}{2}} = d \, \mathbf{x}_i \, \frac{T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_m} \pm \frac{T_{i+\frac{1}{2}} + T_{i-\frac{1}{2}}}{2} \pm T_i + d \, g_i.$$

Соотношение шага «предиктор» для температуры, которая в каждом направлении вычисляется с помощью метода трехточечной прогонки:

$$-\left(\frac{d\,\mathbf{x}_i}{\Delta x_m} - \frac{1}{2}\right)T_{i+\frac{1}{2}} + \left(1 + \frac{d\left(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_{i-1}\right)}{\Delta x_m}\right)T_{i-\frac{1}{2}} - \left(\frac{d\,\mathbf{x}_{i-1}}{\Delta x_m} - \frac{1}{2}\right)T_{i-\frac{3}{2}} = T_i + T_{i-1} + d\left(g_i - g_{i-1}\right).$$

Завершающий шаг стадии расщепления — шаг «корректор» схемы Годунова. Искомые величины с уже найденной температурой в правой части вычисляются по формулам:

$$\rho \frac{\bar{v}_1 - v_1}{\Delta t} = \frac{p_{i_1} - p_{i_1 - 1}}{2\Delta x_1}, \quad \rho \frac{\bar{v}_2 - v_2}{\Delta t} = \frac{q_{i_1} - q_{i_1 - 1}}{2\Delta x_1}, \quad \frac{\bar{p} - p}{\Delta t} = -\kappa \frac{v_{1_{i_1}} - v_{1_{i_1 - 1}}}{2\Delta x_1} + \beta \frac{\bar{T} - T}{\Delta t},$$

$$\frac{\bar{q} - q}{\Delta t} = \alpha \frac{v_{2_{i_1}} - v_{2_{i_1 - 1}}}{2\Delta x_1}, \quad J \frac{\bar{\omega} - \omega}{\Delta t} = \frac{\mu_{1_{i_1}} - \mu_{1_{i_1 - 1}}}{2\Delta x_1}, \quad \frac{\bar{\mu}_1 - \mu_1}{\Delta t} = \gamma \frac{\omega_{i_1} - \omega_{i_1 - 1}}{2\Delta x_1}.$$

Величины с чертой обозначают значения на текущем шаге по времени, без черты — на предыдущем. Индексы по второму направлению  $i_2 - 1/2$  для краткости записи упущены. В конечных разностях по времени также упущены индексы  $i_1 - 1/2$ ,  $i_2 - 1/2$ . На 2-й и 4-й стадиях происходит решение аналогичных уравнений акустики (13) и уравнения теплопроводности (14) для направления  $x_2$ :

$$\rho v_{1,t} = -q_{,x_2}, \quad \rho v_{2,t} = -p_{,x_2}, \quad p_{,t} = -k v_{2,x_2} + \beta T_{,t},$$

$$q_{,t} = -\alpha v_{1,x_2}, \quad \dot{j} \omega_{,t} = \mu_{x_2,x_2}, \quad \mu_{2,t} = \gamma \omega_{x_2},$$
(13)

$$c T_{t} = h_{2,x_{2}} - \beta T v_{2,x_{2}}, \quad h_{2} = \mathfrak{x}_{12} T_{x_{1}} + \mathfrak{x}_{22} T_{x_{2}}.$$
 (14)

На 3-й стадии уравнения  $J\,\omega_t=2\,q,\;\theta_t=\omega,\;q_t=-2\,\alpha(\omega+q/\eta),\;\rho\,c\,T_t=2\,q^2/\eta$  решаются в соответствии со схемой Кранка–Николсон:

$$J\frac{\bar{\omega}-\omega}{\Delta t}=2\,\frac{\bar{q}+q}{2},\quad \frac{\bar{\theta}-\theta}{\Delta t}=\frac{\bar{\omega}+\omega}{2},\quad \frac{\bar{q}-q}{\Delta t}=-2\,\alpha\bigg(\frac{\bar{\omega}+\omega}{2}+\frac{\bar{q}+q}{2\,\eta}\bigg),\quad \rho\,c\,\frac{\bar{T}-T}{\Delta t}=\frac{(\bar{q}+q)^2}{2\,\eta}.$$

### Результаты расчетов

Программная реализация описанного алгоритма выполнена с применением технологии параллельного программирования CUDA [11] и зарегистрирована в Роспатенте (свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2018666773).

Численные расчеты проведены для жидкого кристалла 5ЦБ, параметры для которого были взяты в [12]. Рассматривался прямоугольный ЖК-слой размерами  $200 \times 80$  мкм. Размер конечноразностной сетки при этом составляет  $640 \times 256$  ячеек. В начальный момент времени ненулевыми заданы только  $T_0 = 297$  К и  $\theta = \pi/2$ . На верхней границе температура задана следующим образом:  $T = T_0 + T'e^{-4(x_i - x_c)^2/x_r^2}$ , где T' — некоторая константа,  $x_c$  — центр приложения нагрузки,  $x_r$  — радиус действия нагрузки. Середина верхней границы с радиусом 50 мкм нагревается в течение 18 пс, как показано на рис. 1, затем граница становится свободной от нагрузок. На рис. 2 показано, как распространяются и отражаются волны давления, начиная от области приложения нагрузки. На рис. 3 представлено векторное поле скоростей. Скорости меняются в соответствии с изменением давления. Касательное напряжение, угловая скорость, а также моменты в этом случае равны нулю. Угол поворота остается без изменений за счет отсутствия касательных напряжений. Таким образом, в рамках

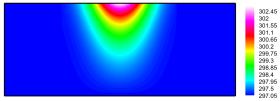
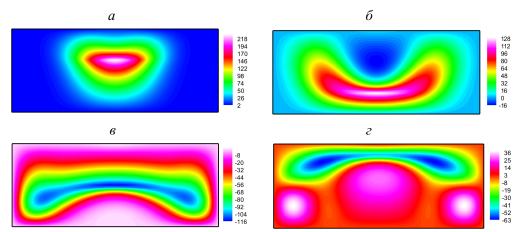
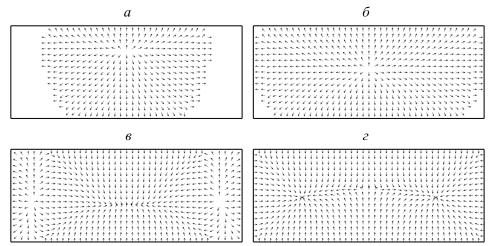


Рис. 1. Нагревание части верхней границы: линии уровня температуры Т, [К]



**Рис. 2.** Нагревание части верхней границы: линии уровня давления p, [н $\Pi$ a] (a — 9 nc, б — 18 nc, в — 36 nc, г — 45 nc)



**Рис. 3.** Нагревание части верхней границы: векторное поле скоростей  $(a-9\ nc,\ b-18\ nc,\ b-36\ nc,\ c-45\ nc)$ 

описанной модели невозможно переориентировать молекулы нематического жидкого кристалла только за счет воздействия температуры.

## Заключение

В результате анализа сделан вывод о невозможности наблюдения эффекта ориентационной термоупругости с использованием упрощенной динамической модели в акустическом приближении без учета сил поверхностного натяжения. Выдвинута гипотеза, что при наличии сил поверхностного натяжения ориентация молекул изменится при нагревании границы жидкокристаллического слоя.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Blinov L. M. *Structure and Properties of Liquid Crystals*. Heidelberg New York Dordrecht London: Springer; 2011. 439 p. DOI: 10.1007/978-90-481-8829-1
- 2. Gennes P. G. de, Prost J. *The Physics of Liquid Crystals*. New York: Oxford University Press; 1993. 597 p.

- 3. Ericksen J. L. Conservation Laws for Liquid Crystals. *Trans. Soc. Rheol.* 1961;5:23–34. DOI: 10.1122/1.548883.
- 4. Leslie F. M. Some Constitutive Equations for Liquid Crystals. *Arch. Ration. Mech. Anal.* 1968;28:265–283. DOI: 10.1007/BF00251810.
- 5. Трашкеев С. И., Бритвин А. В. Термоориентационный эффект в нематическом жидком кристалле. *Журн. техн. физ.* 2011;81(6):1–7.
- 6. Садовский В. М., Садовская О. В., Смолехо И. В. Моделирование динамики жидкого кристалла под действием слабых возмущений. *ПМТФ*. 2021;62(1):193–206.
- 7. Cosserat E. Théorie des Corps Déformables. Chwolson's Traité Physique. 1909; 2nd ed.: 953-1173.
- 8. Smolekho I. V. Analysis of the Unstable State of a Nematic Liquid Crystal Based on a Simplified Dynamic Model. *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics.* 2024;17(2):272–281.
- 9. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я. и др. *Численное решение многомерных задач газовой динамики*. Москва: Наука; 1976. 400 с.
- 10. Иванов Г. В., Волчков Ю. М., Богульский И. О. и др. *Численное решение динамических задач упругопластического деформирования твердых тел.* Новосибирск: Сиб. унив. изд-во; 2002. 352 с.
- 11. Farber R. *CUDA Application Design and Development*. Amsterdam Boston London New York Oxford Paris San Francisco Singapore Sydney Tokyo: Elsevier; 2011. 315 p.
- 12. Skarp K., Lagerwall S., Stebler B. Measurement of hydrodynamic parameters for nematic 5CB. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1980;60(3):215–236. DOI 10.1080/00268948008072401.