

Simulação Numérica de Escoamentos Tri-dimensionais de Cristais Líquidos Nemáticos Sujeitos a um Forte Campo Magnético

Pedro A. Cruz , **Murilo F. Tomé**

Departamento de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP

13560-970, São Carlos, SP, Brasil

E-mail: pedro@icmc.usp.br, murilo@icmc.usp.br.

Resumo: *Neste trabalho, apresentamos um método numérico para resolver as equações dinâmicas tri-dimensionais de Ericksen-Leslie para cristais líquidos nemáticos sujeitos a um forte campo magnético. As equações são resolvidas por uma técnica de diferenças finitas baseada na metodologia GENSMAC introduzida por Tomé et al. [13, 14]. O método numérico apresentado é então validado pela comparação da solução numérica com a solução analítica para um escoamento tri-dimensional estacionário entre duas placas paralelas sujeito a um forte campo magnético.*

Palavras-chave: *Escoamento tri-dimensional, Equações de Ericksen-Leslie, Cristais líquidos nemáticos, Diferenças finitas.*

1 Introdução

Os cristais líquidos são materiais recentes com propriedades fascinantes e de grande impacto tecnológico. A descoberta do primeiro cristal líquido deve-se ao botânico austríaco Friedrich Reinitzer em 1888. As extraordinárias potencialidades tecnológicas dos cristais líquidos só foram evidenciadas há pouco mais de trinta anos. O estudo do escoamento em cristais líquidos nemáticos é muito importante principalmente na produção de displays (LCDs). A teoria básica que descreve a dinâmica dos cristais líquidos nemáticos é a “Ericksen-Leslie dynamic theory”, desenvolvida por Ericksen e Leslie [6, 9, 10] na década de sessenta.

Vários estudos que tratam do escoamento de cristais líquidos nemáticos podem ser encontrados na literatura (ver [2, 3, 4, 7, 8, 11]). Em trabalhos como [8] as investigações de escoamentos em nemáticos são realizadas através do estudo das equações governantes que descrevem seu comportamento hidrodinâmico. Em outros trabalhos, como por exemplo, Pieranski e Guyon [11], as investigações são realizadas através de resultados experimentais. Devido a complexidade das equações governantes, soluções analíticas para escoamentos de cristais líquidos nemáticos são difíceis de se obter. Consequentemente, métodos numéricos se tornam uma importante ferramenta para resolver estas equações em três dimensões. No entanto, apesar disso, existem poucos trabalhos que tratam da solução numérica dessas equações (ver [2, 3, 4, 7]).

O objetivo deste trabalho é desenvolver um método de diferenças finitas para resolver as equações dinâmicas de Ericksen-Leslie em três dimensões sujeitas a um forte campo magnético. Se o campo magnético é suficientemente forte então o diretor estará fixo; isto significa que as equações governantes para o diretor podem ser desprezadas.

2 Equações Dinâmicas de Ericksen-Leslie

Na ausência dos termos inerciais da equação do diretor, as equações dinâmicas de Ericksen-Leslie para cristais líquidos nemáticos para escoamentos incompressíveis isotérmicos podem ser expressas como (conforme Stewart [12]):

- Restrição do diretor e Equação de conservação de massa:

$$n_i n_i = 1 \quad \text{e} \quad v_{i,i} = 0; \quad (1)$$

- Equação de conservação de quantidade de movimento:

$$\rho \dot{v}_i = \rho F_i - (p + w_F)_{,i} + \tilde{g}_j n_{j,i} + G_j n_{j,i} + \tilde{t}_{ij,j}; \quad (2)$$

- Equação de conservação de momento angular:

$$\left(\frac{\partial w_F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial w_F}{\partial n_i} + \tilde{g}_i + G_i = \lambda n_i, \quad (3)$$

onde $v_i = v_i(x, t)$ é o campo de velocidade, F_i é a força externa por unidade de massa, ρ é a densidade, $p = p(x, t)$ é a pressão e $w_F = w_F(x, t)$ é a densidade de energia elástica para os nemáticos. G_i é a força externa generalizada (relacionada com o momento externo κ por unidade de massa pela relação $\rho\kappa = d \times G$). Adotando-se uma aproximação constante para as constantes elásticas, a densidade de energia elástica pode ser escrita como [12]

$$w_F = \frac{1}{2} K \|\nabla \mathbf{d}\|^2 = \frac{1}{2} K n_{i,j} n_{i,j}, \quad (4)$$

onde $K > 0$ é uma constante elástica. A função escalar λ é um multiplicador de lagrange que pode ser avaliado tomando o produto escalar da Eq. (3) com n_i . As equações constitutivas para o tensor das tensões viscosas \tilde{t}_{ij} e o vetor \tilde{g}_i são

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ij} = & \alpha_1 n_k A_{kp} n_p n_i n_j + \alpha_2 N_i n_j + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 A_{ij} \\ & + \alpha_5 n_j A_{ik} n_k + \alpha_6 n_i A_{jk} n_k, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\tilde{g}_i = -\gamma_1 N_i - \gamma_2 A_{ip} n_p, \quad (6)$$

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \geq 0, \quad (7)$$

$$\gamma_2 = \alpha_3 + \alpha_2 = \alpha_6 - \alpha_5, \quad (8)$$

$$A_{ij} = \frac{1}{2} (v_{i,j} + v_{j,i}), \quad (9)$$

$$N_i = \dot{n}_i - W_{ij} n_j, \quad W_{ij} = \frac{1}{2} (v_{i,j} - v_{j,i}), \quad (10)$$

onde $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_6$ são as viscosidades de Leslie, A_{ij} é o tensor taxa de deformação, W_{ij} é o tensor vorticidade, N_i é o fluxo co-rotacional temporal do diretor n_i . Frequentemente denomina-se γ_1 como viscosidade rotacional e γ_2 como coeficiente de torção. O tensor das tensões viscosas \tilde{t}_{ij} é em geral não-simétrico.

O tensor das tensões para cristais líquidos nemáticos é dado por

$$t_{ij} = -p\delta_{ij} - K n_{p,j} n_{p,i} + \tilde{t}_{ij}. \quad (11)$$

3 Equações Governantes

Considere o escoamento tri-dimensional entre duas placas paralelas de um cristal líquido nemático. Um forte campo magnético $\mathbf{H} = H(0, \sin \phi_0, \cos \phi_0)$ (ϕ_0 ângulo constante) é aplicado através do canal tal que o diretor pode ser considerado fixo em uma direção constante (paralelo a campo aplicado) em todo o fluido. Quando o diretor está fixo no espaço por um forte campo magnético, esta condição nos permite desprezar o efeito da elasticidade em uma primeira aproximação. O diretor n_i e a velocidade v_i podem ser escritos da forma

$$n_i = (0, \sin \phi_0, \cos \phi_0), \quad v_i = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)) \quad (12)$$

em que ϕ_0 é o ângulo de orientação do diretor, determinado pela direção do campo magnético. A restrição Eq. (1) é claramente satisfeita nestas circunstâncias.

3.1 Equações dinâmicas adimensionais

Consideramos escoamento cartesiano e empregamos a mudança de variáveis

$$x_i = L\hat{x}_i, \quad v_i = U\hat{v}_i, \quad t = LU^{-1}\hat{t}, \quad p = \rho U^2 \hat{p}, \quad \tilde{t}_{ij} = \eta \hat{S}_{ij}, \quad (13)$$

onde L , U e η denotam valores de referência para comprimento, velocidade e viscosidade, respectivamente. Nesse trabalho utilizamos $\eta = \frac{1}{2}\alpha_4$.

A densidade de energia elástica é desprezada devido ao forte campo magnético. A condição de incompressibilidade Eq. (1) e as equações de momento linear (2) podem então serem expressas, respectivamente como

$$u_{i,i} = 0, \quad (14)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\tilde{p}_{,i} - (u_j u_i)_{,j} + \frac{1}{Re} (S_{ij,j}), \quad (15)$$

em que $Re = \frac{\rho UL}{\eta}$ é o número de Reynolds. As equações (14)–(15) formam o conjunto completo de equações dinâmicas e devem ser resolvidas sujeitas a condições de contorno em ordem para encontrar as soluções para p e u_i .

4 Método Numérico

Para resolver as equações (14)–(15) primeiramente escrevemos as componentes do tensor S_{ij} da seguinte maneira:

$$S_{ij} = \frac{1}{Re} \left[(u_{i,j} + u_{j,i}) + \Phi_{ij} \right] \quad (16)$$

em que as funções Φ_{ij} são chamadas tensor das tensões não newtoniano, e são dadas por

$$\Phi_{ij} = \alpha_1 n_k A_{kp} n_p n_i n_j + \alpha_2 N_i n_j + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_5 n_j A_{ik} n_k + \alpha_6 n_i A_{jk} n_k, \quad (17)$$

onde as viscosidades foram adimensionalizadas por η .

Assim, a equação (15) pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\tilde{p}_{,i} - (u_j u_i)_{,j} + \frac{1}{Re} ((u_{i,j})_{,j} + \Phi_{ij,j}). \quad (18)$$

Portanto, para simular o escoamento de um cristal líquido nemático sujeito a um forte campo magnético, temos que resolver as equações (14) e (18) em conjunto com as equações (17) para as variáveis u_i , p e as componentes do tensor não newtoniano Φ_{ij} , respectivamente.

4.1 Condições de Contorno

Para resolver as equações (14) e (18) é necessário impor condições de contorno para o campo de velocidades. Para os contornos rígidos empregamos a condição no-slip $u_i = 0$ enquanto que nas entradas de fluido (inflows) a velocidade normal é especificada por $u_\nu = U_{inf}$ e as velocidades tangenciais são especificadas $u_{\mu_1} = u_{\mu_2} = 0$, onde ν denota a direção normal ao contorno e μ_1 e μ_2 denotam as respectivas direções tangenciais. Nas saídas de fluido (outflows) a condição de Neumann $\frac{\partial u}{\partial \nu} = 0$ é adotada.

4.2 Procedimento Numérico

Assume-se que, no instante de tempo t_n , o campo de velocidades $u_i(x_k, t_n)$ é conhecido e que as condições de contorno para a velocidade são conhecidas. Para calcular o campo de velocidades $u_i(x_k, t_{n+1})$, a pressão $p(x_k, t_{n+1})$ e o tensor $\Phi_{ij}(x_k, t_{n+1})$ procedemos da seguinte maneira:

Passo 1: Utilizando os valores de $u_i(x_k, t_n)$ calculamos $\Phi_{ij}(x_k, t_n)$.

Passo 2: Calculamos o campo de velocidades intermediárias $\tilde{u}_i(x_k, t_{n+1})$ de

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} = -(u_j u_i)_{,j} + \frac{1}{Re} [(u_{i,j})_{,j} + \Phi_{ij,j}] \quad (19)$$

com $\tilde{u}_i(x_k, t_n) = u_i(x_k, t_n)$ e usando as mesmas condições para a velocidade $u_i(x_k, t_n)$.

Passo 3: Resolvemos a equação de Poisson

$$\psi_{,ii}(x_k, t_{n+1}) = \tilde{u}_{i,i}(x_k, t_{n+1}). \quad (20)$$

Passo 4: Calculamos o campo de velocidades

$$u_i(x_k, t_{n+1}) = \tilde{u}_i(x_k, t_{n+1}) - \psi_{,i}(x_k, t_{n+1}). \quad (21)$$

Passo 5: Determinamos o campo de pressão $p(x_k, t_{n+1})$

$$p(x_k, t_{n+1}) = \frac{\psi(x_k, t_{n+1})}{\delta t}. \quad (22)$$

Passo 6: Calculamos as componentes do tensor não newtoniano $\Phi_{ij}(x_k, t_{n+1})$ da equação (17).

4.3 Aproximação por diferenças finitas

As equações contidas no procedimento descrito na seção anterior são resolvidas pelo método de diferenças finitas como segue. Uma malha deslocada é empregada. As velocidades u , v e w são armazenadas nas faces da célula enquanto as outras quantidades escalares e demais grandezas são armazenadas no centro da célula (ver Figura 1).

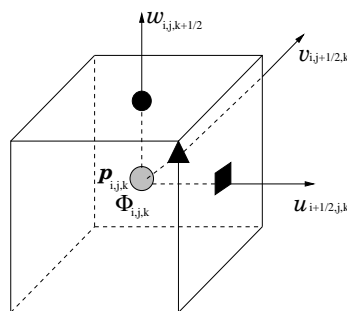


Figura 1: Célula típica 3D.

As equações de conservação de momento (18) são resolvidas pelo método de Euler explícito. As derivadas espaciais na equação de conservação de momento são discretizadas nos pontos $((i+\frac{1}{2})\delta x, j\delta y, k\delta z)$, $(i\delta x, (j+\frac{1}{2})\delta y, k\delta z)$ e $(i\delta x, j\delta y, (k+\frac{1}{2})\delta z)$. Os termos envolvendo o gradiente de pressão, o divergente do tensor não newtoniano são aproximados por diferenças centrais.

5 Validação do Método Numérico

As equações descritas na seção 4 foram implementadas no código Freeflow3D (ver Castelo [1]). O método numérico foi validado através da simulação do escoamento entre duas placas paralelas. Consideramos que a distância entre as placas é D , a largura das placas é $L = 5D$ e o comprimento das placas é $C = 10D$ como mostrado na Figura 2. Nas paredes laterais (fictícias), adotamos as seguintes condições:

$$u = 0, \quad v_{,y} = w_{,y} = 0. \quad (23)$$

Para este escoamento, pode ser mostrado que as soluções analíticas para o campo de velocidades são expressas sucintamente em termos das viscosidades de Miesowicz como [12]:

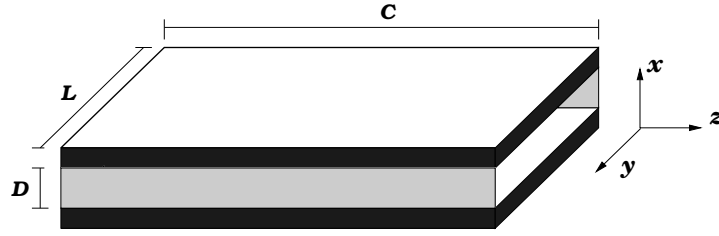


Figura 2: Definição do domínio do escoamento para a simulação do escoamento tri-dimensional entre duas placas paralelas. As paredes cinzas representam paredes laterais fictícias.

$$v(x) = -\frac{(\eta_3 - \eta_1)}{2\eta_3\eta_1} \sin \phi_0 \cos \phi_0 \mathcal{A} x(D - x), \quad (24)$$

$$w(x) = -\frac{(\eta_1 \sin^2 \phi_0 + \eta_3 \cos^2 \phi_0)}{2\eta_3\eta_1} \mathcal{A} x(D - x), \quad (25)$$

onde

$$\eta_1 = \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6) \text{ e } \eta_3 = \frac{1}{2}\alpha_4. \quad (26)$$

A pressão é dada por

$$p = p(z) = \mathcal{A} z + p_0, \quad p_0 \text{ constante.} \quad (27)$$

Estas soluções foram confirmadas experimentalmente por Pieranski and Guyon [11].

Pode ser verificado que as componentes do tensor das tensões não newtoniano são dados por:

$$\Phi^{xx} = \Phi^{yy} = \Phi^{yz} = \Phi^{zy} = \Phi^{zz} = 0, \quad (28)$$

$$\Phi^{xy} = \frac{1}{2}(\alpha_2 + \alpha_5) [\sin^2 \phi_0 (v_{,x}) + \sin \phi_0 \cos \phi_0 (w_{,x})], \quad (29)$$

$$\Phi^{xz} = \frac{1}{2}(\alpha_2 + \alpha_5) [\cos^2 \phi_0 (w_{,x}) + \sin \phi_0 \cos \phi_0 (v_{,x})], \quad (30)$$

$$\Phi^{yx} = \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_6) [\sin^2 \phi_0 (v_{,x}) + \sin \phi_0 \cos \phi_0 (w_{,x})], \quad (31)$$

$$\Phi^{zx} = \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_6) [\cos^2 \phi_0 (w_{,x}) + \sin \phi_0 \cos \phi_0 (v_{,x})]. \quad (32)$$

Para simular esse problema foram utilizados os seguintes dados: $D = 0.1\text{m}$, $U = 0.00955\text{m.s}^{-1}$ e $g_x = g_y = g_z = 0$. Os parâmetros físicos específicos são viscosidade ($\mu = \frac{1}{2}\alpha_4 = 0.0413\text{Pa.s}$), a densidade ($\rho = 1088\text{kg m}^{-3}$) e o ângulo do campo magnético ($\phi_0 = 30^\circ$). Com estes dados obtivemos $Re = \frac{\rho U D}{\mu} = 25.158354$.

Para demonstrar a convergência do método numérico apresentado nesse trabalho, esse problema foi simulado em três malhas distintas até atingir o regime permanente. Na primeira malha $\delta x = \delta y = \delta z = 0.01\text{m}$ ($10 \times 50 \times 100$ células), na segunda malha $\delta x = \delta y = \delta z = 0.005\text{m}$ ($20 \times 100 \times 200$ células) e na terceira malha $\delta x = \delta y = \delta z = 0.004\text{m}$ ($25 \times 125 \times 250$ células). Usando estes dados o código simulou o escoamento tri-dimensional entre duas placas até $t = 200\text{s}$. A Figura 3 mostra as linhas de nível das componentes da velocidade v e w em $t = 200\text{s}$. Podemos observar na Figura 3 que as linhas de nível estão todas paralelas indicando que o estado estacionário foi atingido.

Para mostrar quantitativamente que a convergência foi alcançada o erro relativo da solução numérica $\Pi_{numerica}$ foi calculada nas três malhas pela equação

$$E(\Pi) = \sqrt{\frac{\sum_{i,j} (\Pi_{analitica} - \Pi_{numerica})^2}{\sum_{i,j} (\Pi_{analitica})^2}}. \quad (33)$$

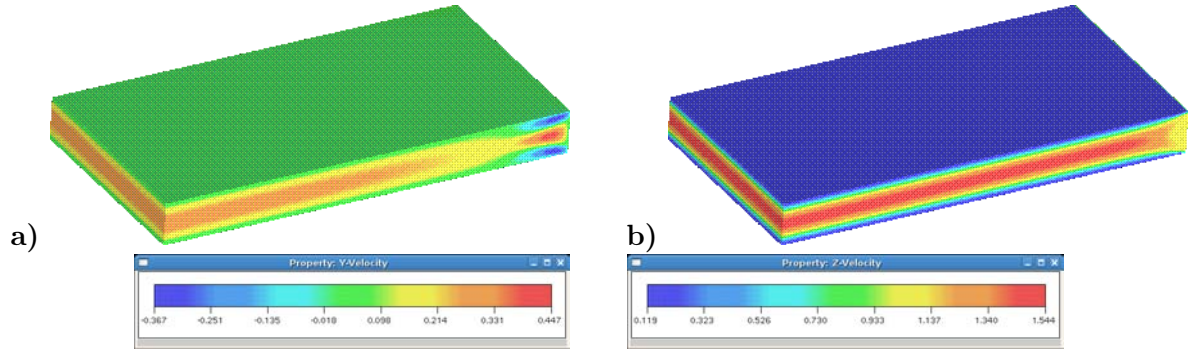


Figura 3: Linhas de nível para v (a) e w (b) em $t = 200s$.

Os erros foram calculados no plano yz para $y = 0.25m$ e $z = (1.0 - 3\delta z)m$. Os valores dos erros relativos foram obtidos nas três malhas e mostrados na Tabela 1.

	M1	M2	M3
$E(v)$	6.2609×10^{-2}	4.8532×10^{-2}	3.1622×10^{-2}
$E(w)$	1.5588×10^{-2}	5.2912×10^{-3}	4.2912×10^{-3}

Tabela 1: Erros relativos calculados para a validação do método numérico.

A Tabela 1 mostra os erros entre a solução analítica e a numérica utilizando os resultados numéricos obtidos das simulações e as equações (24) e (25). Podemos observar na Tabela 1 o decaimento dos erros com o refinamento da malha, demonstrando a convergência do método numérico apresentado nesse trabalho.

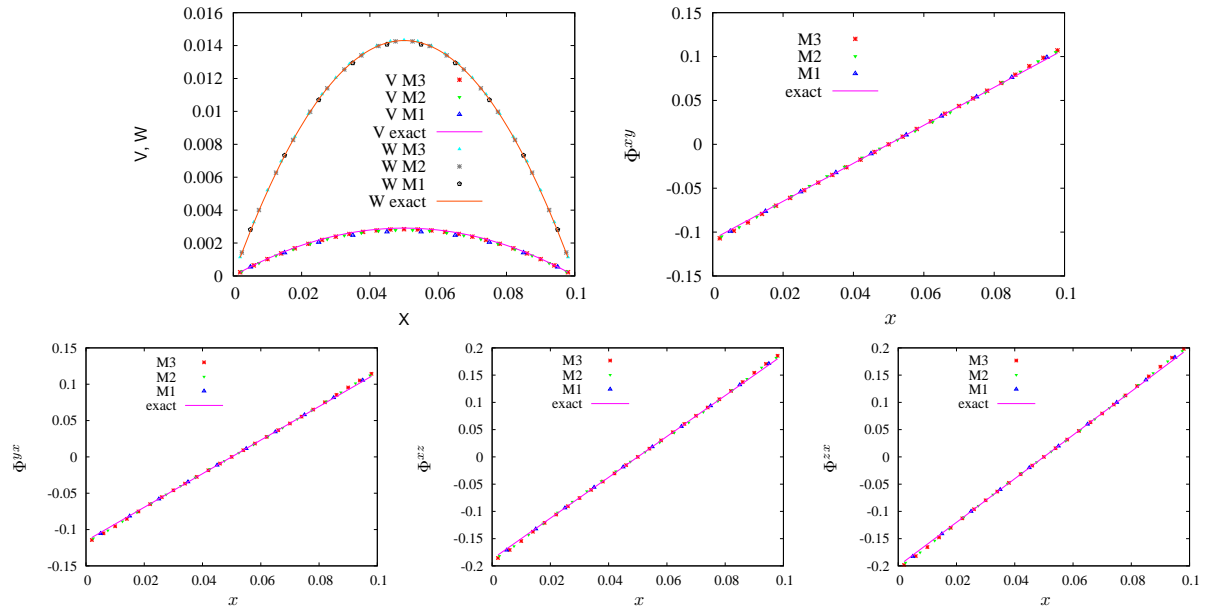


Figura 4: Comparação entre as soluções analíticas e numéricas no plano yz para $y = 0.25m$ e $z = (1.0 - 3\delta z)m$. Componentes da velocidade v e w , tensores Φ_{xy} , Φ_{yz} , Φ_{xz} e Φ_{zx} respectivamente.

A Figura 4 mostra os valores numéricos e analíticos de $v(x)$, $w(x)$, Φ_{xy} , Φ_{yz} , Φ_{xz} e Φ_{zx} no plano yz para $y = 0.25m$ e $z = (1.0 - 3\delta z)m$. Podemos observar uma ótima concordância entre as soluções numéricas e analíticas.

6 Conclusões

Nesse trabalho foi apresentado um método numérico para resolver as equações dinâmicas tri-dimensionais de Ericksen-Leslie para cristais líquidos nemáticos sujeitos a um forte campo magnético. A validação foi realizada através da simulação de um escoamento entre duas placas paralelas. Os resultados obtidos foram comparados com a respectiva solução analítica e através do refinamento da malha o decaimento dos erros mostraram a convergência do método numérico. Resultados numéricos demonstrando a capacidade dessa nova técnica para resolver escoamentos tri-dimensionais de cristais líquidos nemáticos para vários ângulos do campo magnético podem ser encontrados em Cruz et al. [5].

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer o apoio financeiro dado pelas agências brasileiras: FAPESP (Proc. Nos. 04/16064-9, 07/07038-2) e CNPq (Proc. Nos. 304422/2007-0, 470764/2007-4).

Referências

- [1] Castelo A., Tomé M. F., Cuminato J. A., and S. McKee. Freeflow: An integrated simulation system for three-dimensional free surface flows, *Computing and Visualization in Science*, **2**, 199–210 (2000).
- [2] S. Chono and T. Tsuji, Numerical simulation of nematic liquid crystalline flows around a circular cylinder. *Mol. Liq. Cryst.*, 309, 217–236 (1998).
- [3] S. Chono, T. Tsuji and M. M, Denn, Spatial development of director orientation of tumbling nematic liquid crystals in pressure-driven channel flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 79, 515–527 (1998).
- [4] S. Chono, T. Tsuji and M. M, Denn, Numerical simulation of planar contraction flow of nematic liquid crystals. *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng.*, 60, 1944–1950 (1994).
- [5] P. A. Cruz, M. F. Tomé, I. W. Stewart and S. McKee, A numerical method for solving the dynamic three-dimensional Ericksen-Leslie equations for nematic liquid crystals subject to a strong magnetic field, Strathclyde Mathematics Research Report, No. 2, January 2009.
- [6] J.L. Ericksen, Conservation Laws for Liquid Crystals, *Trans. Soc. Rheol.*, **5**, 23–34 (1961).
- [7] H. Heuer and H. Knepe and F. Schneider, Flow of a Nematic Liquid Crystal Around a Cylinder, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **200**, 51–70 (1991).
- [8] J. T. Jenkins, Flows of Nematic Liquid Crystals, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **10**, 197–219 (1978).
- [9] F.M. Leslie, Some Constitutive Equations for Anisotropic Fluids, *Q. Jl. Mech. Appl. Math.*, **19**, 357–370 (1966).
- [10] F.M. Leslie, Some Constitutive Equations for Liquid Crystals, *Arch. Rat. Mech. Anal.*, **28**, 265–283 (1968).
- [11] P. Pieranski and E. Guyon, Transverse Effects in Nematic Flows, *Physics Letters*, **49A**, 237–238 (1974).
- [12] I.W. Stewart, *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals*, Taylor and Francis, London, 2004.
- [13] M. F. Tomé and S. McKee. GENSMAC: A computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics*, 110:171–186, 1994.
- [14] M.F. Tomé, N. Mangiavacchi, J.A. Cuminato, A. Castelo and S. McKee, A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **106**, 61–106 (2002).