

Simulación de Cristales Líquidos

Juan Vicente Gutiérrez-Santacreu

Juan Vicente Gutiérrez-Santacreu (juanvi@us.es)
Universidad de Sevilla

Abstract. Los cristales líquidos son estados de la materia intermedios entre sólido y líquido. Estos estados se describen mediante la posición y la orientación de las moléculas que los componen. El más simple de ellos es el llamado cristal líquido nemático cuyas moléculas poseen cierta orientación pero no posición, es decir, las moléculas se mueven libremente mientras están orientadas hacia una dirección preferencial.

En esta charla presentaremos un método de elementos finitos de bajo orden para la aproximación de las ecuaciones de Ericksen-Leslie que modelan la dinámica de flujos de cristales líquidos nemáticos. Las incógnitas de estas ecuaciones son la velocidad, la presión y la orientación de las moléculas. En particular, estamos interesados en desarrollar un algoritmo que preserve la ley de energía asociada al modelo continuo, y además desacople el cálculo de todas las incógnitas. La verificación de la ley de energía se logra gracias a introducir una variable auxiliar asociada la orientación, lo que supone un coste computacional adicional, que es deseable evitar. El desacoplamiento se logra en dos pasos. Primero, a nivel diferencial, aplicando técnicas de tipo paso fraccionario o proyección para desacoplar la presión, la velocidad y la orientación junto con su variable auxiliar. Segundo, a nivel algebraico, para reescribir el sistema de ecuaciones lineal satisfecho por la orientación y su variable auxiliar en términos de la orientación únicamente. Con ello evitamos el cálculo de dicha variable auxiliar haciendo más eficiente el esquema y de modo que satisfaga la ley de energía.