

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ СТАТИКИ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

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 данной работе представлена математическая модель и алгоритм численного решения системы уравнений статики нематического жидкого кристалла, которая выведена из уравнений упрощенной динамической модели в рамках акустического приближения. Полученная система включает в себя: два уравнения для давления и касательного напряжения, описывающих поступательное движение; уравнение для угла поворота, в правую часть которого входит касательное напряжение (является аналогом закона Гука в теории упругости); уравнение теплопроводности, описывающее распределение температуры в жидком кристалле с учетом анизотропии, вызванной ориентацией молекул; систему определяющих уравнений, в которую входят перемещения, давление, касательное напряжение, температура и угол поворота. Уравнения для давления и касательного напряжения представляют собой условия Коши–Римана, которые приводят эти уравнения к задаче анализа комплексной переменной. Сведение задачи к неоднородному сингулярному интегральному уравнению позволило применить метод LU-разложения для его численного решения. Для постановки граничных условий применяется теорема Сохоцкого–Племеля. На основе предложенного алгоритма разработана программа, написанная на MATLAB, и проведена серия тестовых расчетов. Результаты демонстрируют работоспособность разработанного алгоритма и программы.

Ключевые слова: жидкий кристалл, статика, комплексный анализ, условия Коши–Римана, теорема Сохоцкого–Племеля.

Благодарности: работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (соглашение 075-02-2025-1606).

Для цитирования: Смолехо И. В. Алгоритм решения системы уравнений статики жидких кристаллов. *Успехи кибернетики*. 2025;6(4):114–120.

Поступила в редакцию: 25.09.2025.

В окончательном варианте: 01.11.2025.

ALGORITHM FOR SOLVING THE SYSTEM OF EQUATIONS DESCRIBING LIQUID CRYSTAL STATICS

I. V. Smolekho

*Institute of Computational Modeling, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Krasnoyarsk, Russian Federation*ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-9852-9310>, ✉ i_smol@icm.krasn.ru

Abstract: we present a mathematical model and algorithm for the numerical solution of the system of equations describing nematic liquid crystal statics. The model is derived from a simplified dynamic formulation within the acoustic approximation. The system includes two equations for pressure and shear stress describing translational motion; an equation for the rotation angle, whose right-hand side depends on shear stress (analogous to Hooke's law in elasticity); a heat conduction equation accounting for temperature distribution and the anisotropy caused by molecular orientation; and a system of determining equations for displacement, pressure, shear stress, temperature, and rotation angle.

The equations for pressure and shear stress satisfy the Cauchy–Riemann conditions, reducing the problem to a complex variable analysis. By further reducing it to a non-homogeneous singular integral equation, we applied the LU decomposition method for numerical solution. We used the Sokhotski–Plemelj theorem to impose boundary conditions. Based on this algorithm, we developed a MATLAB program and performed a series of test calculations. The results demonstrate the accuracy and efficiency of the proposed algorithm and implementation.

Keywords: liquid crystal, statics, complex analysis, Cauchy–Riemann conditions, Sokhotski–Plemelj theorem.

Acknowledgements: this work is supported by the Krasnoyarsk Mathematical Center, funded by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation as part of the Local Research and Education Center Development Initiative (Agreement 075-02-2025-1606).

Cite this article: Smolekho I. V. Algorithm for Solving the System of Equations Describing Liquid Crystal Statics. *Russian Journal of Cybernetics*. 2025;6(4):114–120.

Original article submitted: 25.09.2025.

Revision submitted: 01.11.2025.

Введение

Жидкие кристаллы (ЖК) — это уникальное состояние вещества, которое сочетает в себе свойства как жидкостей, так и кристаллов [1, 2]. Молекулы в жидких кристаллах обладают упорядоченной ориентацией, но при этом могут легко перемещаться. Они обладают высокой чувствительностью к внешним воздействиям, таким как электрические поля, температура и механические напряжения. Жидкие кристаллы наиболее широко известны благодаря ЖК-дисплеям, которые повсеместно используются в экранах телевизоров, мониторов и смартфонов и других устройствах отображения, обработки и хранения информации. Под действием электрического поля молекулы меняют ориентацию, что позволяет управлять прозрачностью и цветом каждого пикселя. Помимо дисплеев, жидкие кристаллы широко используются в медицине — например, в термографических индикаторах для визуализации распределения температуры на коже.

При изучении равновесного состояния жидких кристаллов часто применяется статическая модель Озеена–Франка [3, 4], основанная на вариационном принципе минимизации потенциальной энергии. Данная модель рассматривает исключительно вращательные степени свободы молекул, не учитывая их поступательное движение и связанные с ним механические напряжения. Такой подход ограничивает область применения модели узким кругом задач. В частности, не позволяет анализировать изменение ориентации молекул в слое жидкого кристалла, вызванное температурными воздействиями.

Для описания динамики жидких кристаллов Эриксоном и Лесли [5, 6] была разработана модель, основанная на законах сохранения, учитывающая течение и вращательные степени свободы материала. Она может быть применима и при решении статических задач. Однако нелинейные уравнения этой модели чрезвычайно сложны, кроме того, модель содержит ряд параметров и функций, значения которых могут быть определены только экспериментальным путем, что создает существенные ограничения для ее использования. Эти особенности делают прямую численную реализацию модели крайне сложной, требующей разработки специализированных алгоритмов и значительных вычислительных ресурсов. Таким образом, для исследования поведения жидких кристаллов требуется применение приближенных упрощенных моделей.

В работе [7] предложена упрощенная динамическая модель, описывающая механические, температурные и электрические воздействия. Уравнения модели получены из законов сохранения энергии, импульсов и момента импульсов и включают в себя уравнения поступательного и вращательного движений, уравнение для угла поворота, уравнение теплопроводности, а также уравнения состояния для давления и напряжений. В ее основе лежит теория обобщенного континуума Коссера [8]. При этом жидкокристаллическая среда рассматривается как акустическая среда с вращающимися частицами. С помощью этой модели был исследован эффект Фредерикса [9], заключающийся в переориентации молекул под действием внешнего электрического поля. Если напряженность электрического поля превышает некоторое пороговое значение, то молекулы жидкого кристалла развернутся вдоль его действия. Также был исследован аналогичный эффект для температуры — эффект ориентационной термоупругости [10], который не удалось наблюдать с использованием предложенной модели. Вероятно, для его проявления необходимо учитывать силы поверхностного натяжения. В данной работе приведена статическая модель жидкого кристалла, с помощью которой в дальнейшем будет исследоваться эффект ориентационной термоупругости.

Вывод уравнений статики

Из определяющих уравнений динамики [7] получим уравнения статики ЖК, для этого положим производные по времени равными нулю. Кроме того, проинтегрируем по t уравнения для моментных напряжений, а также уравнения состояния для давления и касательного напряжения. В результате получаются следующие уравнения статики:

1. Уравнения, связывающие давление и касательное напряжение, представляют собой условия Коши–Римана:

$$p_x + q_y = 0, \quad -q_x + p_y = 0.$$

Их выполнение является необходимым и достаточным условием аналитичности в рассматриваемой области комплексной функции $F(z) = q + ip$, где $z = x + iy$ — комплексная переменная, и гарантируют, что функция $f(z)$ имеет производную в каждой точке области. Таким образом давление p представляет собой действительную часть $f(z)$, а касательное напряжение — мнимую.

2. Продифференцируем уравнения для моментных напряжений

$$\mu_1 = \gamma (\theta - \theta_0)_x, \quad \mu_2 = \gamma (\theta - \theta_0)_y$$

по переменным x и y соответственно. Дальнейшая подстановка в

$$2q + \mu_{1,x} + \mu_{2,y} = 0$$

приводит к уравнению, которое является аналогом закона Гука в теории упругости, устанавливая связь между деформацией (углом поворота) и напряжением (касательным напряжением):

$$\Delta(\theta - \theta_0) = -\frac{2q}{\gamma}.$$

3. Уравнение теплопроводности описывает распределение температуры в жидком кристалле с учетом анизотропии, вызванной ориентацией молекул:

$$(\mathfrak{a}_{11} T_x + \mathfrak{a}_{12} T_y)_x + (\mathfrak{a}_{12} T_x + \mathfrak{a}_{22} T_y)_y = 0,$$

где

$$\mathfrak{a}_{11} = \mathfrak{a}_{\parallel} \cos^2 \theta + \mathfrak{a}_{\perp} \sin^2 \theta, \quad \mathfrak{a}_{12} = (\mathfrak{a}_{\parallel} - \mathfrak{a}_{\perp}) \sin \theta \cos \theta, \quad \mathfrak{a}_{22} = \mathfrak{a}_{\parallel} \sin^2 \theta + \mathfrak{a}_{\perp} \cos^2 \theta.$$

Сокращенная запись следующая:

$$\nabla(\mathfrak{a} \nabla T) = 0, \quad \mathfrak{a} = \mathfrak{a}(\theta).$$

4. Система неоднородных уравнений, связывающая перемещения, давление, касательное напряжение, температуру и угол поворота:

$$p = -\kappa(u_{1,x} + u_{2,y}) + \beta(T - T_0), \quad q = \alpha(u_{2,x} - u_{1,y}) - 2\alpha(\theta - \theta_0).$$

Здесь u_1 и u_2 — компоненты вектора перемещений, θ — угол поворота молекул, p — давление, q — касательное напряжение, μ_1 и μ_2 — моментные напряжения, T — температура, κ — модуль объемного сжатия, α — модуль упругого сопротивления вращению, β — коэффициент теплового расширения, γ — модуль упругого сопротивления изменению кривизны, \mathfrak{a}_{\parallel} и \mathfrak{a}_{\perp} — коэффициенты теплопроводности в направлении ориентации молекул жидкого кристалла и в поперечном направлении различны благодаря анизотропии ЖК.

Постановка задачи. Вычислительный алгоритм

Бесконечный слой жидкого кристалла толщиной h находится в равновесном состоянии. Уравнения движения представляют собой условия Коши–Римана аналитичности функции $F(z) = q(x,y) + ip(x,y)$ комплексной переменной $z = x + iy$. Схема возмущения слоя представлена на рис. 1.

На сторонах полосы C^+ и C^- ($C = C^+ \cup C^-$) заданы граничные условия

$$p(x, 0) = p^-(x), \quad q(x, 0) = q^-(x),$$

$$p(x, h) = p^+(x), \quad q(x, h) = q^+(x),$$

которые должны удовлетворять условиям равновесия внешних сил на сторонах слоя с учетом направлений обхода

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p^-(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} p^+(x) dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} q^-(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} q^+(x) dx,$$

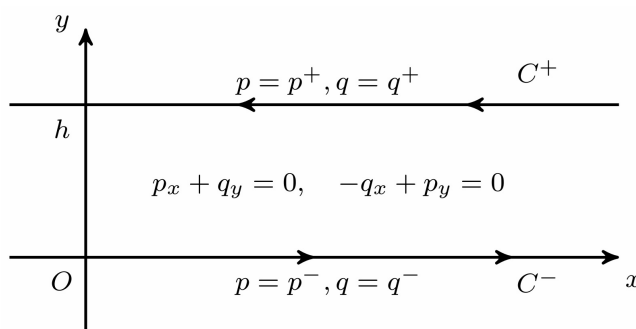


Рис. 1. Схема возмущения слоя

полученные с применением формулы Грина.

Построим поля напряжений в жидкокристаллической полосе, определив функцию $F(z)$ интегралом типа Коши:

$$F(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta) d\zeta}{\zeta - z},$$

где $f(\zeta)$ — некоторая функция на C , удовлетворяющая условию Гельдера. В развернутой форме

$$F(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta) d\zeta}{\zeta - z} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta) d\zeta}{\zeta + ih - z},$$

где комплекснозначные функции $f^\pm(\zeta)$ — это сужения $f(\zeta)$ на C^+ и C^- , $y \in (0, h)$. Для аналитической в полосе функции $F(z)$ должны выполняться граничные условия:

$$\lim_{z \rightarrow x} \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta) d\zeta}{\zeta - z} = q^-(x) + ip^-(x), \quad \lim_{z \rightarrow x+ih} \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta) d\zeta}{\zeta - z} = q^+(x) + ip^+(x).$$

В развернутом виде с учетом направлений обхода контура C для $\varepsilon > 0$:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta) d\zeta}{\zeta - (x + i\varepsilon)} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta) d\zeta}{\zeta + ih - (x + i\varepsilon)} \right) = \\ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta) d\zeta}{\zeta - x - i\varepsilon} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta) d\zeta}{\zeta - x + ih} = q^-(x) + ip^-(x), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta) d\zeta}{\zeta - (x + ih - i\varepsilon)} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta) d\zeta}{\zeta + ih - (x + ih - i\varepsilon)} \right) = \\ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta) d\zeta}{\zeta - x - ih} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta) d\zeta}{\zeta - x + i\varepsilon} = q^+(x) + ip^+(x). \end{aligned}$$

В этих формулах пределы

$$I^-(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta) d\zeta}{\zeta - x - i\varepsilon} \quad \text{и} \quad I^+(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta) d\zeta}{\zeta - x + i\varepsilon}$$

вычисляются по формулам Сохоцкого–Племеля, связывающим граничные значения интеграла с главным значением по Коши. В задаче для полосы применяется следующий вариант теоремы:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\epsilon} = \mp i\pi f(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x}.$$

При этом

$$I^-(x) = \frac{1}{2}f^-(x) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta)d\zeta}{\zeta - x}, \quad I^+(x) = -\frac{1}{2}f^+(x) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta)d\zeta}{\zeta - x}.$$

Таким образом, граничные условия задачи приводятся к двум интегральным уравнениям относительно неизвестных функций $f^-(\zeta)$ и $f^+(\zeta)$:

$$\frac{1}{2}f^-(x) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta)d\zeta}{\zeta - x} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta)d\zeta}{\zeta - x + ih} = q^-(x) + ip^-(x),$$

$$\frac{1}{2}f^+(x) - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^+(\zeta)d\zeta}{\zeta - x} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f^-(\zeta)d\zeta}{\zeta - x - ih} = q^+(x) + ip^+(x).$$

Численное решение интегральных уравнений

Заменим пределы интегрирования на $-A$ и A , где $A \rightarrow \infty$. На отрезке $[-A, A]$ введем сдвинутые друг относительно друга сетки $x_j = -A + j\Delta x$ (границы ячеек) и $\zeta_{k-1/2} = -A + (K - 1/2)\Delta x$ (центры ячеек), где $\Delta x = 2A/N$ — шаг сетки, N — количество ячеек. Интегралы по отрезку $[-A, A]$ аппроксимируем по формуле прямоугольников с центральным узлом, например,

$$\int_{-A}^A \frac{f^\pm(\zeta)d\zeta}{\zeta - x_j} \approx \frac{\Delta x}{2} \sum_{k=1}^N \frac{f^\pm(x_k) + f^\pm(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} - x_j}.$$

В итоге получаем систему уравнений для определения неизвестных функций $f^\pm(x_j)$:

$$\frac{1}{2}f^-(x) + \frac{\Delta x}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{f^-(x_k) + f^-(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} - x_j} - \frac{\Delta x}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{f^+(x_k) + f^+(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} - x_j + ih} = q^-(x) + ip^-(x),$$

$$\frac{1}{2}f^+(x) - \frac{\Delta x}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{f^+(x_k) + f^+(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} - x_j} + \frac{\Delta x}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{f^-(x_k) + f^-(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} - x_j - ih} = q^+(x) + ip^+(x).$$

При решении системы применяется метод LU -разложения. Затем вычисляется функция $F(z)$, действительная часть которой представляет собой касательное напряжение q , а мнимая — давление p :

$$F_j = \frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{f^-(x_k) + f^-(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} - z_j} - \frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{f^+(x_k) + f^+(x_{k-1})}{\zeta_{k-1/2} + ih - z_j}.$$

Результаты расчетов

Программная реализация описанного алгоритма выполнена на MATLAB. Рассматривался прямоугольный ЖК-слой размерами 200×40 мкм. Давление на границе задается следующим образом:

$$p^\pm = p_0 \left(\frac{\zeta}{a} + 1 \right)^2 \left(\frac{\zeta}{a} - 1 \right)^2,$$

где p_0 — некоторая константа, определяющая масштаб давления. Нагрузка действует в центре границы с радиусом a , который варьируется в исследовании. Функция получена с применением метода разделенных разностей Ньютона, является гладкой колоколообразной функцией с максимумом в точке $\zeta = 0$. Это означает, что давление плавно возрастает от крайних точек зоны нагружения $\pm a$ до максимального значения p_0 в центре. Проведены расчеты для двух задач. На рис. 2 слева радиус приложенного давления 25 мкм, справа — 90 мкм. На рис. 3 представлены линии уровня давления, на рис. 4 — линии уровня касательного напряжения. В результате среднее значение давления и касательного напряжения в объеме ЖК-слоя на рисунках справа будет значительно выше, чем слева.

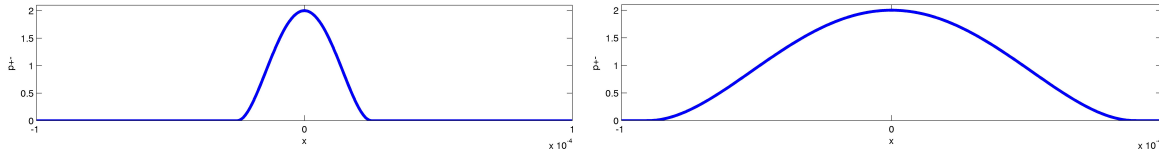


Рис. 2. Давление p^\pm на верхней и нижней границах при $a = 25$ мкм (слева) и при $a = 90$ мкм (справа)

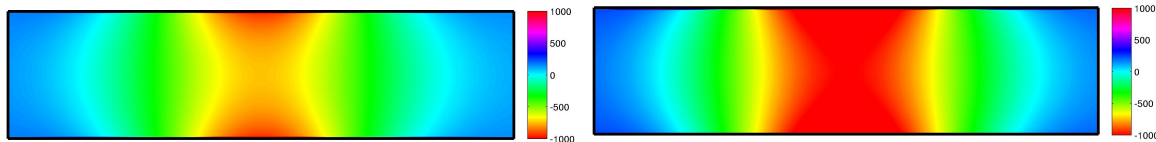


Рис. 3. Линии уровня давления p при $a = 25$ мкм (слева) и при $a = 90$ мкм (справа)

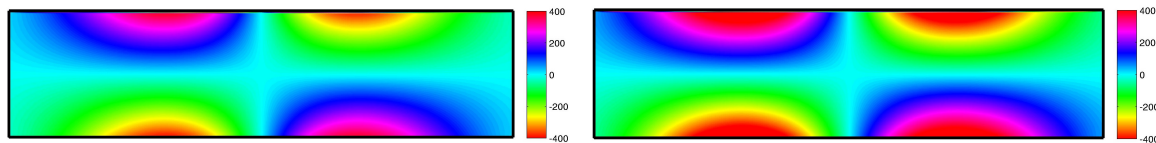


Рис. 4. Линии уровня касательного напряжения q при $a = 25$ мкм (слева) и при $a = 90$ мкм (справа)

Проведенное моделирование наглядно иллюстрирует, как размер области приложения нагрузки на границе влияет на перераспределение давления и касательного напряжения в ЖК-слое.

Заключение

В настоящей работе представлена статическая модель жидкокристаллической среды, уравнения которой выведены из упрощенной динамической модели в акустическом приближении. Предложен алгоритм численного решения уравнений движения, основанный на комплексном анализе и численных методах. Использование уравнений Коши–Римана позволило свести систему к задаче анализа комплексных функций. Проведены расчеты, демонстрирующие работоспособность алгоритма и программы. В дальнейшем планируется решить оставшиеся уравнения и учесть силы поверхностного натяжения для исследования эффекта ориентационной термоупругости.

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. Frank F. C. On the Theory of Liquid Crystals. *Discuss. Faraday Soc.* 1958;25:19–28.
4. Oseen C. W. The Theory of Liquid Crystals. *Trans. Faraday Soc.* 1933;29(140):883–899.
5. Ericksen J. L. Conservation Laws for Liquid Crystals. *Trans. Soc. Rheol.* 1961;5:23–34. DOI: 10.1122/1.548883.

6. Leslie F. M. Some Constitutive Equations for Liquid Crystals. *Arch. Ration. Mech. Anal.* 1968;28:265–283. DOI: 10.1007/BF00251810.
7. Садовский В. М., Садовская О. В., Смолехо И. В. Моделирование динамики жидкого кристалла под действием слабых возмущений. *ПМТФ.* 2021;62(1):193–206.
8. Cosserat E. Théorie des Corps Déformables. *Chwolson's Traité Physique.* 1909:953–1173.
9. 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.
10. 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.