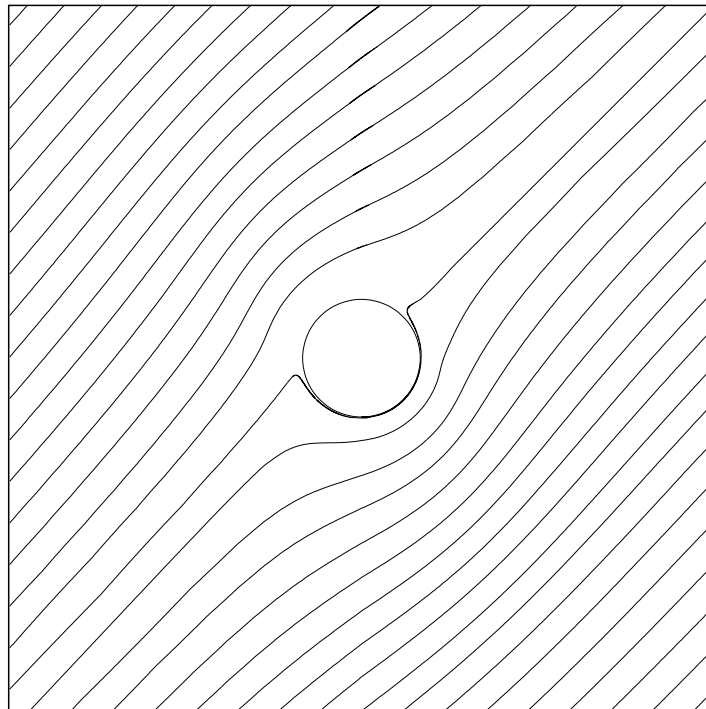


Das dreidimensionale Stokesproblem bei
geschwindigkeitsgekoppelten nematischen
Direktorfeldern



Wissenschaftliche Arbeit von Dipl.Phys. Dieter Ventzki
Göppingen, Gustav-Adolfstraße 22

Oktober 2004

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Theoretische Basis	9
1.1 Die vollständigen Leslie-Ericksen-Gleichungen	9
1.2 Umformulierung der Impulsbilanz	12
1.3 Die dreidimensionale Drehimpulsbilanz	14
1.4 Die Inkompressibilitätsbedingung	18
1.5 Normierung des Gleichungssystems	19
1.6 Anfangs- und Randbedingungen	22
1.7 Stokessche Kräfte und Momente	24
1.8 Das Prinzip der minimalen freien Energie	28
2 Numerische Realisierung	31
2.1 Angewandte numerische Methoden	31
2.1.1 Finite Differenzen	31
2.1.2 Das Newton-Gauß-Seidel Verfahren	31
2.1.3 Methode der künstlichen Kompressibilität zur Druckberechnung	32
2.1.4 Der Polaritäts-Check beim Rechnen mit Direktorfeldern.	33
2.2 Programmstruktur	34
2.2.1 Programm-Modifikation Nematische Zelle	36
2.3 Feste Randbedingungen und extrapolierte Randwerte	37
2.4 Bestimmung der Winkelgeschwindigkeit	38
3 Ergebnisse	41
3.1 Simulationen mit Igeldefektdipolen	43
3.2 Simulationen mit Saturndisklinationen	54
3.3 Direktor- und Geschwindigkeitsfelder	60
4 Zusammenfassung und Ausblick	81
A Ergänzende Berechnungen zum Kapitel 1	87
A.1 Gradient und Divergenz eines Vektorfeldes.	88
A.2 Die Deformationsrate.	89

A.3 Die Direktor-Änderungsrate.	89
A.4 Die Divergenz des Spannungstensors.	91
A.5 Das statische Molekularfeld.	92
A.6 Das viskose Molekularfeld.	93
A.7 Dynamischer Anteil des elastischen Spannungstensors	94
A.8 Zum Oberflächenintegral des Spannungstensors	94
B Blockdiagramm zur Programmstruktur <i>g3Ddrag.c</i>	97
Abbildungsverzeichnis	106
Literaturverzeichnis	106

Einleitung

Der Autor hatte bei seiner am 31.08.1998 abgegebenen Diplomarbeit[16] Brownsche Bewegungen von Wasserblasen in nematischen Emulsionen mit Methoden der numerischen Simulation untersucht. Um diese Wasserblasen bilden sich in nematischer Umgebung aus topologischen Gründen charakteristische Defekte des Direktorfeldes aus, die von Lubensky, H.Stark et al.[5] beschrieben wurden. Dabei handelt es sich um den sogenannten Igeldefekt-Dipol, bei welchem ein hyperbolischer Punktdefekt den im Blasenmittelpunkt zentrierten radialen Defekt in einem festen Abstand begleitet. Daneben beobachtet man bei kleineren Blasendurchmessern auch sogenannte Saturndisklinationen. Hierbei handelt es sich um einen ringförmigen Liniendefekt in der Äquatorialebene. Die Aufgabe bestand darin, unter Annahme eines geschwindigkeitsunabhängigen Direktorfeldes zunächst die Geschwindigkeits- und Druckfelder zu gewinnen, um mit deren Hilfe durch Integration die Stokesche Reibungskraft zu bestimmen. Wie bekannt benötigt man die Stokeskraft, um die Diffusionskonstante der Brownschen Bewegung zu berechnen. Durch die Annahme eines konstanten Direktorfeldes konnte die Aufgabe auf ein lineares Problem reduziert werden. Es war dadurch möglich, sich bei der Untersuchung auf zwei Anströmrichtungen, parallel und senkrecht zur Defektachse, zu beschränken und alle anderen Strömungsrichtungen als Superposition der beiden Hauptrichtungen aufzufassen. Es hat sich im nachhinein bestätigt, dass für Ericksenzahlen < 0.1 die vereinfachende Linearisierung des Problems hinreichend genaue Ergebnisse liefert.

In einem ersten Verallgemeinerungsschritt hat der Autor mit einer wissenschaftlichen Arbeit am Institut für Theoretische und Angewandte Physik an der Universität Stuttgart vom November 2000[17] die Entkoppelung des Geschwindigkeits- und Direktorfeldes aufgehoben und für den Fall der achsparallelen Anströmung untersucht. Damit wurde es notwendig, die vollständigen Leslie-Ericksengleichungen numerisch zu lösen. Dies war nur möglich mit einer Umformulierung der Impulsbilanz, bei welcher die elastische Energiedichte aus dem elastischen Spannungstensor separiert und einem renormierten Druck zugeschlagen wurde. Als wichtigste Erkenntnis dieser Arbeit stellte sich heraus, dass der hyperbolische Punktdefekt mit wachsenden Ericksenzahlen entgegen der Anströmrichtung wandert, also bei Anströmung in positiver z -Richtung von der Kugel weg, in negativer Richtung zur Kugel hin. Die effektive Viskosität nimmt im ersten Fall deutlich zu, im zweiten Fall nimmt sie ab. Außerdem bleiben Direktorfeld und Iteration bei Anströmung in negativer z -Richtung auch bei hohen Ericksenzahlen um $ER = 30$

stabil, während die Stabilität der Iteration in positiver Richtung auf $ER \approx 10$ begrenzt war.

In der hier vorgelegten Arbeit werden weitere Verallgemeinerungen vorgestellt und die dabei gewonnenen Ergebnisse und Daten den Fragestellungen zugeordnet, die in der Realität von Interesse sind. Hierfür waren die Rechnerprogramme der ersten beiden Arbeiten zu erweitern und zu modifizieren. Im einzelnen waren die folgenden Anforderungen zu erfüllen:

- Programmierung der dreidimensionalen Feldberechnung bei gekoppeltem Geschwindigkeits-, Druck- und Direktorfeld mit Berechnung der Komponenten der Stokeskraft, den sich daraus ergebenden effektiven Viskositäten und des Restmomentes um die y -Achse.
- Verallgemeinerung des Anströmwinkels κ auf alle denkbaren Winkel zwischen $-\frac{\pi}{2}$ und $+\frac{\pi}{2}$. Wegen der nicht linearen Beziehung der Variablen kann der Tensor der effektiven Viskosität nicht mehr einfach durch lineare Rechnung[16, S.78] aus den zwei Hauptachsenwerten η_{\perp} und η_{\parallel} gebildet werden.
- Bei nicht achsparalleler Anströmung muss das Restmoment um die y -Achse durch eine additive Wirbelströmung auf der Kugeloberfläche auf Null kompensiert werden, um stationäres Gleichgewicht herzustellen[14].
- Die Beschränkung auf ein endliches Gebiet wird bei allen nicht achsparallelen Anströmrichtungen aufgehoben.
- Durch eine Modifizierung des Hauptprogramms ist die Einwirkung eines äußeren Feldes auf sphärische Partikel parallel zur den Platten einer nematischen Zelle zu simulieren.

Bei der Auswertung der Simulationsläufe interessiert zunächst die Bestimmung der Ericksenzahlen, innerhalb derer stabile Konvergenz der Iteration und damit stabile Feldkonfigurationen zu erwarten sind. Unsere Überlegungen gelten nicht allein für Wasserblasen. Sie beziehen sich auf alle Arten von sphärischen Partikeln in nematischer Umgebung, z.B. auf Dispersionen von Metallstäuben. Aufschlussreich ist hierfür die Berechnung der Ericksenzahl als einer Funktion des Dichteunterschiedes zwischen Wirtsflüssigkeit und Partikel und des Partikeldurchmessers[13]. Nematische Fluide haben Dichten in der Größenordnung von Wasser (5CB: $\rho = 1.02 \text{ g/cm}^3$). Folglich erwartet man bei Wasser-in-Nemat-Emulsionen sehr kleine Ericksenzahlen. Bei Dispersionen mit Goldstaub sieht dies ganz anders aus. Hier sind Ericksenzahlen > 10 noch realistisch.

Bewegungen der sphärischen Partikel gegenüber ihrem nematischen Umfeld erwarten wir bei Einwirkung eines äußeren Feldes, in der Regel des Gravitationsfeldes. Auch durch molekulare Stöße eingeleitete Brownschen Bewegungen vollziehen sich - in vereinfachter Betrachtungsweise - unter den Bedingungen Stokescher Reibung. In allen Fällen, in denen die Bewegungsrichtung und damit die Reibungskraft zunächst nicht parallel zur Defektachse verläuft, ist das Erreichen des Gleichgewichts von bewegender Kraft und Stokescher Reibung unter zwei Szenarien vorstellbar:

- Der Winkel zwischen Defektachse und Bewegungsrichtung bleibt konstant, weil für die Defektconfiguration kein Rotationsfreiheitsgrad um die y -Achse besteht. Das Drehmoment um die y -Achse wird Null, weil eine Drehung der Kugel eine additive Wirbelströmung induziert, die sich der ebenen Anströmung überlagert[14].
- Ist jedoch ein solcher Freiheitsgrad gegeben, wird das Restmoment M_y den Defekt in die energetisch günstigste Position drehen, in der auch das Moment zu Null wird. Es sei vorweggenommen, dass dieser Fall nur bei achsparalleler Anströmung eintritt, bei Igeldefektdipolen vorzugsweise in Richtung der negativen z -Achse.

Beide Szenarien sind im Abschnitt "Ergebnisse" an hand der gewonnenen Daten zu diskutieren.

Kapitel 1

Theoretische Basis

Nach der Behandlung des linearisierten Stokesproblems[16] und der Lösung des nicht linearen Problems bei achsparalleler Anströmung[17] soll im folgenden die Rechnung auf den dreidimensionalen Fall bei beliebiger Anströmrichtung parallel zur x - z -Ebene und größere Ericksenzahlen¹ verallgemeinert werden. Auch diesmal steht die Lösung der vollständigen Leslie-Ericksen-Gleichungen im Vordergrund, die sich allerdings etwas umständlicher gestaltet, weil beim dreidimensionalen Fall zwei weitere Variable mitgenommen werden müssen. Der Symmetriebruch in Bezug auf die x - y -Ebene erfordert eine Erweiterung des Gebietes vom Quadranten zur Hemisphäre. Er verursacht zudem bei allen Anströmrichtungen außer jener parallel zur Defektachse² eine additive Wirbelströmung auf der Kugeloberfläche zur Kompensation des Restmomentes um die y -Achse. Diese geht einher mit der Rotation des sphärischen Teilchens bei konstanter Winkelgeschwindigkeit ω_y . Die Randbedingungen auf der Kugeloberfläche sind entsprechend zu modifizieren. Wie im zweidimensionalen Fall wird das als Anfangsbedingung für die numerische Iteration benötigte statische Direktorfeld vorab aus einem geeigneten Ansatzfeld mit Hilfe der Euler-Lagrange-Gleichung auf minimale elastische Energiedichte optimiert.

1.1 Berechnung der Felder mit den vollständigen Leslie-Ericksen-Gleichungen

Die Leslie-Ericksen-Gleichungen sind die fundamentalen Bewegungsgleichungen für anisotrope nematische Fluide und entsprechen insoweit der Navier-Stokes-Gleichung für isotrope reibungsbehaftete Flüssigkeiten. Die Inkompressibilitätsbedingung verlangt wie im isotropen Fall, dass die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes verschwindet. Die dritte Gleichung unseres Systems ist eine Folge der in Nematiten auftretenden Scherviskositäten

¹Die Ericksenzahl beschreibt das Verhältnis von viskosen zu elastischen Kräften in Flüssigkristallen: $ER = \eta a v/K$. Dabei bedeutet η die (isotrope) Viskosität $\alpha_4/2$, a ist eine charakteristische Abmessung, hier der Kugelradius und v ist der Betrag der Anströmgeschwindigkeit. K bezeichnet die Elastische Konstante des Nematiten in Ein-Konstanten-Näherung.

²Bei Saturndisklinationen gilt auch bei Anströmung senkrecht zur Defektachse $M_y = 0$

und der Forderung, dass im stationären Fall die elastischen und viskosen Drehimpulsdichten an jedem Punkt des Gebietes gegeneinander aufgehoben sein müssen. Diese Forderung ist immer erfüllt, wenn Kollinearität zwischen dem Direktorfeld \mathbf{n} und dem Molekularfeld \mathbf{h} gegeben ist. \mathbf{h} setzt sich aus Beiträgen des elastischen und des viskosen Molekularfeldes zusammen. Kollinearität ist dann gegeben, wenn das Kreuzprodukt $\mathbf{\Gamma}$ aus \mathbf{n} und \mathbf{h} verschwindet.

Nachdem wir uns nicht mehr nur auf kleine Ericksenzahlen beschränken, dürfen wir die Divergenz des elastischen Spannungstensors in der Impulsbilanz nicht mehr ignorieren. Wir können somit ein vollständiges Gleichungssystem für das verallgemeinerte Stokesproblem in nematischer Umgebung angeben:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= \operatorname{div} (\boldsymbol{\sigma}' + \boldsymbol{\sigma}^d - p\mathbf{I}) = 0 \\ \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 \\ \mathbf{\Gamma} &= \mathbf{n} \times (\mathbf{h}^d(\mathbf{n}) - \mathbf{h}'(\mathbf{n}, \mathbf{v})) = 0. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Hierin bedeuten

$\boldsymbol{\sigma}$	vollständiger Spannungstensor
$\boldsymbol{\sigma}'$	viskoser Spannungstensor
$\boldsymbol{\sigma}^d$	elastischer Spannungstensor
p	Druck(statischer + dynamischer Anteil)
\mathbf{v}	Vektor des Geschwindigkeitsfeldes
\mathbf{n}	Vektor des Direktorfeldes
$\mathbf{\Gamma}$	Drehmomentdichte
\mathbf{h}^d	Vektor des elastischen Molekularfeldes
\mathbf{h}'	Vektor des viskosen Molekularfeldes

Mit den sieben fundamentalen Gleichungen 1.1 lassen sich die sechs Unbekannten $v_\rho, v_\theta, v_\phi, p, \Theta, \Phi$ ohne Überbestimmtheiten berechnen. $\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}$ ist ein dreidimensionaler Vektor, dessen drei Komponentengleichungen die Geschwindigkeitskomponenten liefern. Die Divergenz der Geschwindigkeit ist dagegen ein Skalar. Mit ihr berechnet man den Druck mit Hilfe der Methode der künstlichen Kompressibilität[16; S.47; 2.2.3][9]. Die dritte Gleichung ermöglicht es, den Direktortiltwinkel Θ und den Direktorazimutwinkel Φ zu bestimmen. Der Direktor ist ein Einheitsvektor der Länge 1. Deswegen genügen diese zwei Variablen zur eindeutigen Lagebestimmung in einem sphärischen Koordinatensystem - mit Ausnahme der Polarität, die bekanntlich in Direktorfeldern ununterscheidbar ist. Die drei Direktorkomponenten n_ρ, n_θ, n_ϕ sind ausschließlich von Θ und Φ abhängige Größen, die das System nicht überbestimmen können.

Bei höheren Geschwindigkeiten ist zu fragen, ob die Bedingung für schleichende Strömung: Reynoldszahl $R \ll 1$ noch erfüllt ist und damit die linke Seite der Navier-Stokes-Gleichung gleich Null gesetzt werden darf. Im Vorgriff auf die Ergebnisse dieser Arbeit kann diese

Frage für realistisch zu erwartende Ericksenzahlen bejaht werden. Bei $ER = 30$, Material 5CB ($\eta = \frac{\alpha_4}{2} = 0.374$; $K = 4.7 \cdot 10^{-7}$) und einem Kugelradius von $a = 1\mu m$ ergibt sich eine Geschwindigkeit von $\approx 0.38 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$. Setzt man die Dichte $\rho_d \approx 1.0$ erhält man für die Reynoldszahl

$$R = \frac{v a \rho_d}{\eta} = \frac{0.38 \cdot 10^{-4} \cdot 1.0}{0.374} \approx 10^{-4}. \quad (1.2)$$

Die Bedingung für schleichende Strömung ist somit gut erfüllt.

Die in den Gleichungen 1.1 vorkommenden Tensoren und Vektoren sind aus der Literatur[3][16] bekannt. Sie seien ohne Herleitung angegeben.

Viskoser Spannungstensor:

$$\sigma'_{ij} = \alpha_1 n_i n_j n_k n_l A_{kl} + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_j n_k A_{ik} + \alpha_6 n_i n_k A_{jk}. \quad (1.3)$$

Hierin sind die Leslie-Koeffizienten $\alpha_1 \dots \alpha_6$ dynamische Viskositäten[3, P.206], welche die Anisotropie des nematischen Materials beschreiben. N_i ist der Vektor der Direktoränderungsrate in Bezug auf die Strömung

$$N_i = \frac{\partial n_i}{\partial t} + v_j \partial_j n_i - \frac{1}{2} [\text{rot } \mathbf{v} \times \mathbf{n}]_i. \quad (1.4)$$

Bei stationärer Strömung verschwindet die lokale Zeitableitung des Direktors, jedoch nicht die konvektive Ableitung $v_j \partial_j n_i$.

Der Tensor A_{ij} ist der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten, der auch als Deformationsrate bezeichnet wird

$$A_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i v_j + \partial_j v_i). \quad (1.5)$$

Auch der elastische Spannungstensor ist bekannt, siehe [3; S.152 3.5.2][16; S.27 1.81]:

$$\sigma^d_{ij} = -\frac{\partial f_d}{\partial (\partial_i n_k)} \partial_j n_k. \quad (1.6)$$

In Gl. 1.6 bedeutet f_d die Franksche Verzerrungsenergiedichte, in Ein-Konstantenäherung gegeben durch

$$f_d = \frac{1}{2} K (\partial_j n_i)^2. \quad (1.7)$$

Mit Gl. 1.7 vereinfacht sich der elastische Spannungstensor zu $\sigma^d_{ij} = -K (\partial_i n_k) (\partial_j n_k)$.

Schließlich brauchen wir noch die Definitionen des elastischen und des viskosen Molekularfeldes. Das erstere ergibt sich aus der Euler-Lagrange-Gleichung der freien Verzerrungsenergiedichte[3; S.107-3.1.3.4][16; S.24-1.70] zu

$$h_i^d = -\frac{\partial f_d}{\partial n_i} + \partial_j \left(\frac{\partial f_d}{\partial (\partial_j n_i)} \right). \quad (1.8)$$

Das viskose Molekularfeld leitet man aus den Materialgleichungen her[3; S.206-5.1.4.3][16; S.31-1.101]:

$$h'_i = \gamma_1 N_i + \gamma_2 n_j A_{ij} \quad \text{mit} \quad \gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad ; \quad \gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (1.9)$$

Die für die numerische Rechnung benötigten expliziten Berechnungen der Größen $\sigma'_{ij,j}$, N_i und A_{ij} in Kugelkoordinaten sind im Anhang A dieser Arbeit dokumentiert. Ebenso ist die dreidimensionale Berechnung des elastischen und viskosen Molekularfeldes h_i^d und h'_i im Anhang A nachzulesen.

1.2 Umformulierung der Impulsbilanz

Bei der numerischen Berechnung der Impulsbilanz 1.1 stellte sich schon während der Lösung des auf achsparallele Anströmung beschränkten Problems[17] heraus, dass die nun notwendige Einbeziehung der Divergenz des elastischen Spannungstensors bei einigen Ericksenzahlen zu nicht beherrschbaren Instabilitäten führte. Ausschlaggebend war hierbei der Umstand, dass bei der Bildung von $\sigma_{ij,j}^d$ der Gradient des Direktors in der dritten Ordnung vorkommt. In Ein-Konstantennäherung schreibt man mit der Produktregel

$$\sigma_{ij,j}^d = -K(n_{k,ij}n_{k,j} + \underbrace{n_{k,i}n_{k,jj}}_{=0}). \quad (1.10)$$

In der Nähe von Defekten kann durch die lokal großen Direktorgradienten, noch dazu in der dritten Potenz, die Divergenz des elastischen Spannungstensors so große Werte annehmen, dass die sich verstärkenden numerischen Ungenauigkeiten zur Instabilität der Iteration führen. Dies hängt davon ab, an welcher Stelle des Gitters der Defekt lokalisiert ist. Je nach dem kommt es bei der Bildung von Differenzenquotienten zu einem glättenden und damit stabilisierenden oder durch Verstärkung der Rauigkeit destabilisierenden Effekt. Auch bei der dreidimensionalen Verallgemeinerung war dieser Sachverhalt zu beachten. Deshalb konnte die seinerzeit von Holger Stark vorgeschlagene Rechnung in ihrer koordinatenfreien Darstellung wie unter [17] beschrieben übernommen werden.

Wir erinnern wir uns, dass sich im hydrostatischen Fall $v_\infty = 0$ der statische Druck p^o gegen die elastische Energiedichte f_d aufhebt, wenn keine weiteren Volumenkräfte einwirken.[3; S.154 3.107]. Nachdem Druck, Energiedichte und Spannungstensor von gleicher Dimension sind, ist es möglich, die elastische Energiedichte aus dem elastischen Spannungstensor herauszurechnen und mit dem Gesamtdruck zu einem renormierten Druck \tilde{p} zusammenzufassen. Mit diesem Kunstgriff gelingt es, aus dem elastischen Spannungstensor einen Restterm zu isolieren, in welchem der Direktorgradient nur noch in zweiter Ordnung vorkommt. Damit ist die - nach wie vor vollständige - Impulsbilanz problemlos numerisch zu behandeln. Die Herleitung dieses Restterms zeigt die folgende

Rechnung:

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^d &= \partial_j \sigma_{ij}^d \\
&= \partial_j \left(-\frac{\partial f_d}{\partial(\partial_j n_k)} \partial_i n_k \right) \\
&= -\left(\partial_j \frac{\partial f_d}{\partial(\partial_j n_k)} \right) \partial_i n_k - \frac{\partial f_d}{\partial(\partial_j n_k)} \partial_i \partial_j n_k.
\end{aligned} \tag{1.11}$$

Die Kollinearität des (Gesamt-)Molekularfeldes mit dem Direktorfeld, siehe dritte Gl. 1.1, lässt sich äquivalent auch mit dem Lagrange-Multiplikator λ beschreiben:

$$h_k^d - h'_k = \lambda n_k. \tag{1.12}$$

Mit dieser Beziehung 1.12 und mit 1.8 und 1.9 kann man für $h_k^d = \lambda n_k + h'_k$ den Ausdruck 1.8 gleichsetzen und erhält so durch triviale Umformung

$$\partial_j \frac{\partial f_d}{\partial(\partial_j n_k)} = \frac{\partial f_d}{\partial n_k} + h'_k + \lambda n_k. \tag{1.13}$$

Eingesetzt in Gl.1.11 ergibt dies

$$\partial_j \sigma_{ij}^d = -\left(\frac{\partial f_d}{\partial n_k} + h'_k + \lambda n_k \right) \partial_i n_k - \frac{\partial f_d}{\partial(\partial_j n_k)} \partial_i \partial_j n_k. \tag{1.14}$$

Gl. 1.14 lässt sich weiter vereinfachen, weil

$$n_k \partial_i n_k = \frac{1}{2} \partial_i (n_k^2) = \frac{1}{2} \partial_i (1) = 0 \tag{1.15}$$

ist und wegen der Kettenregel

$$\partial_i f_d(n_k, \partial_j n_k) = \frac{\partial f_d}{\partial n_k} \partial_i n_k + \frac{\partial f_d}{\partial(\partial_j n_k)} \partial_i \partial_j n_k \tag{1.16}$$

gilt. Indem wir Gl. 1.16 in Gl. 1.14 einbringen, erhalten wir die Divergenz des elastischen Spannungstensors in einer Form, die nur noch Ableitungen von n_k in zweiter Ordnung enthält:

$$\partial_j \sigma_{ij}^d = -\partial_i f_d + h'_k \partial_i n_k \tag{1.17}$$

und damit schreiben wir die Impulsbilanz

$$\partial_j \sigma_{ij} = -\partial_i \underbrace{(p + f_d)}_{\tilde{p}} + h'_k \partial_i n_k + \partial_j \sigma'_{ij} = 0. \tag{1.18}$$

Wir bezeichnen $\tilde{p} = p + f_d$ als den renormierten Druck. Er ist vermindert um den statischen Anteil des elastischen Spannungstensors. \tilde{p} errechnet sich in bekannter Weise aus der Bedingung $\operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0$ nach der Methode der künstlichen Kompressibilität[16; S.47; 2.2.3][8].

Allerdings ist die Geschwindigkeit \mathbf{v} jetzt vom variablen Direktorfeld abhängig. Der neue Term an Stelle des elastischen Spannungstensors steht für dessen dynamisch bedingten Rest:

$$h'_k \partial_i n_k = (\gamma_1 N_k + \gamma_2 A_{kl} n_l) \partial_i n_k. \quad (1.19)$$

Die für die numerische Rechnung benötigte Darstellung von Gl. 1.19 in Kugelkoordinaten ist im Anhang A nachzulesen.

Die Divergenz des Spannungstensors $\partial_j \sigma_{ij}$ ist ein Vektor mit den Komponenten $i = \rho, \theta, \phi$. Demnach liefert die modifizierte Impulsbilanz Gl. 1.18 drei numerisch stabile Relaxationsgleichungen für v_ρ, v_θ und v_ϕ .

1.3 Die dreidimensionale Drehimpulsbilanz

Die dreidimensionale Drehimpulsbilanz führt zu den Relaxationsgleichungen des Direktor-Tiltwinkels Θ und des Direktor-Azimutwinkels Φ :

$$\Gamma_j = \mathbf{n} \times \mathbf{h} = \mathbf{n} \times (\mathbf{h}^d - \mathbf{h}')_i = 0. \quad (1.20)$$

\mathbf{h}^d ist wie bekannt das statische Molekularfeld. Das viskose Molekularfeld haben wir in Gl. 1.9 definiert:

$$h'_i = \gamma_1 N_i + \gamma_2 n_j A_{ij}. \quad (1.21)$$

N_i ist der Vektor der Direktoränderungsrate und A_{ij} der symmetrische Tensor des Geschwindigkeitsgradienten (Deformationsrate).

$$N_i = \frac{\partial n_i}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) n_i + \frac{1}{2} [\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{v}]_i. \quad (1.22)$$

$\frac{\partial n_i}{\partial t} = 0$ gilt nur im stationären Fall !

$$h'_i = \gamma_1 \frac{\partial n_i}{\partial t} + \gamma_1 (\mathbf{v} \nabla) n_i + \frac{\gamma_1}{2} [\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{v}]_i + \gamma_2 n_j A_{ij}. \quad (1.23)$$

Wir können auch vereinfacht schreiben:

$$h'_i = \gamma_1 \frac{\partial n_i}{\partial t} + \tilde{h}'_i, \quad (1.24)$$

wobei wir \tilde{h}'_i als *stationäres viskoses Molekularfeld* bezeichnen:

$$\tilde{h}'_i = \gamma_1 (\mathbf{v} \nabla) n_i + \frac{\gamma_1}{2} [\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{v}]_i + \gamma_2 n_j A_{ij}. \quad (1.25)$$

Die Bedingung der Gleichung 1.20 ist in folgenden Fällen immer erfüllt:

- Das Molekularfeld \mathbf{h} ist überall Null. Also heben sich viskoses und statisches Molekularfeld an jedem Punkt des Gebietes gegenseitig auf. Wie sich zeigt, ist diese Bedingung nur im stationären Fall erfüllt.

- Das Molekularfeld $\mathbf{h} \neq 0$ ist an jedem Punkt des Gebietes parallel zum Direktor \mathbf{n} . Da jedoch der parallele Vektor \mathbf{h} an jedem Punkt beliebige Längen annehmen kann, gibt es unendlich viele Vektorfelder \mathbf{h} , die diese Bedingung erfüllen. Eine eindeutige Lösung ist somit in diesem Fall nicht zu erwarten.
- Der Fall $\mathbf{n} = 0$ scheidet definitionsgemäß aus, da der Betrag des Direktors als Einheitsvektor stets Eins ist.

Wir betrachten zunächst den allgemeinen Fall $\mathbf{h} \neq 0$, aber kollinear zum Direktor \mathbf{n} und untersuchen, ob und unter welchen Bedingungen stationäres Verhalten möglich ist. Wir gehen von der Euler-Lagrange-Gleichung der Gesamtenergie aus, welche diese minimiert und damit das Molekularfeld $\mathbf{h} = \mathbf{h}^d - \mathbf{h}'$ definiert:

$$h_i = -\frac{\partial f}{\partial n_i} + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial_{n_i} j)} \right) = \lambda(\mathbf{r}) n_i. \quad (1.26)$$

h_i	gesamtes Molekularfeld mit elastischem und viskosem Beitrag
f	gesamte Energiedichte $f = f_d - f'$
f_d	elastische Energiedichte
f'	viskose Energiedichte
$\lambda(\mathbf{r})$	Lagrange-Multiplikator

Mit 1.12 und 1.25 kann man das Molekularfeld auch so beschreiben:

$$h_i = h_i^d - \gamma_1 \frac{\partial n_i}{\partial t} - \tilde{h}'_i = \lambda(\mathbf{r}) n_i. \quad (1.27)$$

Hierin ist \tilde{h}'_i das in 1.25 definierte stationäre viskose Molekularfeld.

Im nächsten Schritt ist der Lagrange-Multiplikator zu bestimmen:

$$\mathbf{h} = \lambda \mathbf{n} \quad | \quad \cdot \mathbf{n} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{h} \mathbf{n} = \lambda \underbrace{\mathbf{n}^2}_{=1}. \quad (1.28)$$

Weil \mathbf{h} jedoch parallel zu \mathbf{n} sein muss, gilt auch die geometrische Beziehung

$$\mathbf{h} \mathbf{n} = |\mathbf{h}| |\mathbf{n}| \cos 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = |\mathbf{h}| = \sqrt{h_\rho^2 + h_\theta^2 + h_\phi^2}. \quad (1.29)$$

Mit Gl. 1.27 und Gl. 1.29 ergibt sich als Bedingung für Gleichgewicht

$$\begin{aligned} \gamma_1 \frac{\partial n_i}{\partial t} &= h_i^d - \tilde{h}'_i - \lambda(\mathbf{r}) n_i \\ &= h_i^d - \tilde{h}'_i - \sqrt{h_\rho^2 + h_\theta^2 + h_\phi^2} n_i. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Der stationäre Fall ist aber definiert durch $\frac{\partial n_i}{\partial t} = 0$. $|\mathbf{h}| = \sqrt{h_i^2}$ muss dann ebenfalls Null werden, wenn sich an jedem Punkt des Gebietes die viskosen und elastischen Anteile des

Molekularfeldes aufheben sollen. Es gibt zwar unendlich viele Lösungen der Gleichung 1.30 mit $|\mathbf{h}| \neq 0$, aber das erfordert, dass auch $\frac{\partial n_i}{\partial t} \neq 0$ wird. Also sind solche Lösungen beschränkt auf nicht stationäre Fälle, die hier nicht zu untersuchen sind.

Damit schreibt man die vektorielle Bewegungsgleichung zur Berechnung der Relaxationsgleichungen für die Direktorwinkel Θ und Φ wie folgt:

$$\gamma_1 \begin{bmatrix} \frac{\partial n_\rho}{\partial t} \\ \frac{\partial n_\theta}{\partial t} \\ \frac{\partial n_\phi}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_\rho^d \\ h_\theta^d \\ h_\phi^d \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{h}'_\rho \\ \tilde{h}'_\theta \\ \tilde{h}'_\phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{h}_\rho \\ \tilde{h}_\theta \\ \tilde{h}_\phi \end{bmatrix} \Rightarrow 0. \quad (1.31)$$

\tilde{h}_i bedeutet hierin das *stationäre* Gesamtmolekularfeld.

Relaxationsgleichungen für Direktorwinkel Θ und Φ

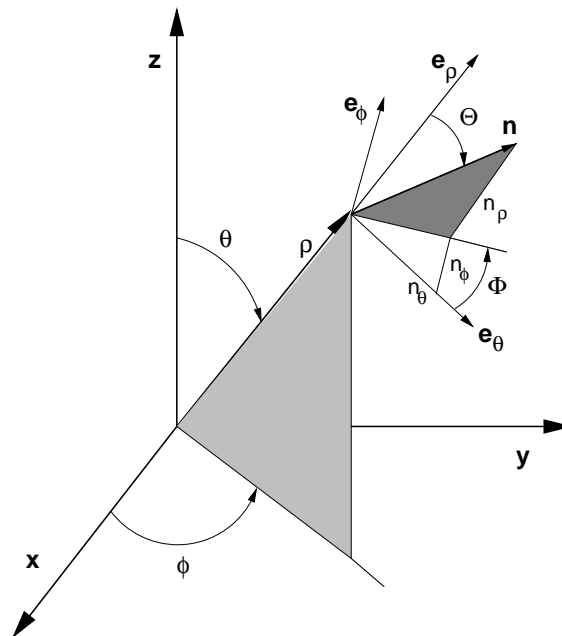


Abbildung 1.1: Sphärische Direktorkoordinaten mit Ortskoordinaten.

Die Koordinaten des Direktors ergeben sich als Funktionen der Direktorwinkel Θ und Φ bei $\|n\| = 1$ zu

$$\begin{aligned} n_\rho &= \cos(\Theta), \\ n_\theta &= \sin(\Theta) \cos(\Phi), \\ n_\phi &= \sin(\Theta) \sin(\Phi) \end{aligned} \quad (1.32)$$

und aus Abb. 1.1 folgt direkt:

$$\begin{aligned} \Theta &= \arctan \frac{\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}}{n_\rho}, \\ \Phi &= \arctan \frac{n_\phi}{n_\theta}. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Wir formulieren die Bewegungsgleichung für die Direktor-Tiltwinkel Θ durch Bildung der totalen Zeitableitung, wobei die Kettenregel zu beachten ist:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\partial \Theta}{\partial n_\rho} \frac{\partial n_\rho}{\partial t} + \frac{\partial \Theta}{\partial n_\theta} \frac{\partial n_\theta}{\partial t} + \frac{\partial \Theta}{\partial n_\phi} \frac{\partial n_\phi}{\partial t} \quad (1.34)$$

und unter Verwendung von Gl. 1.31:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\partial \Theta}{\partial n_\rho} \tilde{h}_\rho + \frac{\partial \Theta}{\partial n_\theta} \tilde{h}_\theta + \frac{\partial \Theta}{\partial n_\phi} \tilde{h}_\phi. \quad (1.35)$$

Die partiellen Ableitungen von Θ nach n_ρ , n_θ und n_ϕ errechnen sich aus der Gl. 1.33. Dabei benützen wir die Beziehung $n_\rho^2 + n_\theta^2 + n_\phi^2 = 1$:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial n_\rho} = \frac{1}{\underbrace{1 + \frac{n_\theta^2 + n_\phi^2}{n_\rho^2}}_{n_\rho^2}} \left(-\frac{\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}}{n_\rho^2} \right) = -\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}, \quad (1.36)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial n_\theta} = n_\rho^2 \frac{n_\theta}{n_\rho \sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}} = \frac{n_\rho n_\theta}{\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}} \quad (1.37)$$

und analog

$$\frac{\partial \Theta}{\partial n_\phi} = n_\rho^2 \frac{n_\phi}{n_\rho \sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}} = \frac{n_\rho n_\phi}{\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}}. \quad (1.38)$$

Mit den Gleichungen 1.35...1.38 schreiben wir die Relaxationsgleichung für Θ wie folgt:

$$\gamma_1 \frac{\partial \Theta}{\partial t} = F(\Theta(n_i)) = -\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2} \tilde{h}_\rho + \frac{n_\rho n_\theta}{\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}} \tilde{h}_\theta + \frac{n_\rho n_\phi}{\sqrt{n_\theta^2 + n_\phi^2}} \tilde{h}_\phi = 0. \quad (1.39)$$

Θ lässt sich aus Gl. 1.39 mit dem Newton-Gauss-Seidel-Verfahren numerisch berechnen:

$$\Theta_{neu} = \Theta_{alt} - \frac{F(\Theta)}{\frac{F(\Theta + \Delta\Theta) - F(\Theta)}{\Delta\Theta}}. \quad (1.40)$$

Auf die gleiche Weise lässt sich die Bewegungsgleichung für den Direktor-Azimutwinkel Φ berechnen:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial n_\rho} \tilde{h}_\rho + \frac{\partial \Phi}{\partial n_\theta} \tilde{h}_\theta + \frac{\partial \Phi}{\partial n_\phi} \tilde{h}_\phi. \quad (1.41)$$

Die partiellen Ableitungen von Φ nach n_ρ , n_θ und n_ϕ ergeben sich aus der Gl. 1.33.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_\rho} = \frac{\partial(\arctan \frac{n_\phi}{n_\theta})}{\partial n_\rho} = 0, \quad (1.42)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_\theta} = \frac{1}{1 + \frac{n_\phi^2}{n_\theta^2}} \left(-\frac{n_\phi}{n_\theta^2} \right) = -\frac{n_\phi}{n_\theta^2 + n_\phi^2}, \quad (1.43)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_\phi} = \frac{1}{1 + \frac{n_\phi^2}{n_\theta^2}} \left(\frac{1}{n_\theta} \right) = \frac{n_\theta}{n_\theta^2 + n_\phi^2}. \quad (1.44)$$

Mit den Gleichungen 1.41...1.44 erhält man die Relaxationsgleichung für Φ :

$$\gamma_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} = G(\Phi(n_i)) = -\frac{n_\phi}{n_\theta^2 + n_\phi^2} \tilde{h}_\theta + \frac{n_\theta}{n_\theta^2 + n_\phi^2} \tilde{h}_\phi = 0. \quad (1.45)$$

Hieraus wird Φ wie Θ mit dem Newton-Gauss-Seidel-Verfahren numerisch berechnet:

$$\Phi_{neu} = \Phi_{alt} - \frac{G(\Phi)}{\frac{G(\Phi + \Delta\Phi) - G(\Phi)}{\Delta\Phi}}. \quad (1.46)$$

1.4 Die Inkompressibilitätsbedingung als sechste Bestimmungsgleichung

Sie ergibt sich wie bekannt aus der Kontinuitätsgleichung, wenn die Dichte ρ_d konstant angenommen, d.h. deren Zeitableitung zu Null wird:

$$\rho_d \operatorname{div} \mathbf{v} = -\frac{d\rho_d}{dt} \implies \operatorname{div} \mathbf{v} = 0. \quad (1.47)$$

Um hieraus eine Relaxationsgleichung für den renormierten Druck \tilde{p} als der letzten noch verbliebenen Unbekannten zu gewinnen, benutzen wir das schon in der Diplomarbeit[16] des Autors angewandte Verfahren der künstlichen Kompressibilität[2][4][9]. Der Kunstgriff besteht darin, dass man zu Beginn der Iteration die Inkompressibilitätsbedingung zunächst aufhebt, um dann in fiktiven Zeitschritten in diese hinein zu relaxieren. So wird $\operatorname{div} \mathbf{v}$ eine Funktion der Dichte und damit des Druckes, weil man zeigen kann, dass sich letzterer bei kleinen Dichtefluktuationen linear mit der Dichte ändert. Die Relaxationsgleichung für den dynamischen Druck p , d.h. in unserem Falle für den renormierten Druck \tilde{p} , aus welchem der statische Anteil schon eliminiert wurde, lautet demnach $\operatorname{div} \mathbf{v}(\tilde{p}) = 0$.

1.5 Normierung des Gleichungssystems

Um Allgemeingültigkeit der Ergebnisse zu erreichen, müssen wir uns davon überzeugen, dass in allen Gleichungen dimensionslos gerechnet wird. Im folgenden soll dies - in gleicher Weise wie schon bei der achsparallelen Rechnung[17] - durch eine Dimensionsbetrachtung verifiziert werden. Dimensionslose Größen kennzeichnen wir hierbei durch einen Hut.

Zuerst sind die benötigten Variablen und Konstanten zu definieren. Dimensionen sind in eckigen Klammern angegeben. Leere eckige Klammern stehen für dimensionslose Ausdrücke.

Definitionen:

a_o	[cm]	Systemlängeneinheit			
a	[cm]	Kugelradius	$\hat{a} = \frac{a}{a_o} = 1$	[]	Kugelradius, normiert
r	[cm]	Radiuskoordinate	$\hat{r} = \frac{r}{a_o}$	[]	Radiuskoordinate, normiert
			$\rho = \frac{1}{\hat{r}}$	[]	reziproker Radius, normiert
v_∞	[$\frac{cm}{s}$]	Randgeschwindigkeit			
v	[$\frac{cm}{s}$]	lokale Geschwindigkeit	$\hat{v} = \frac{v}{v_\infty}$	[]	lokale Geschwindigkeit, normiert
			$\hat{v}_\infty = \frac{v_\infty}{v_\infty} = 1$	[]	Randgeschwindigkeit, normiert
η_o	[P]	Referenzviskosität (Poise)	$\eta_o = 1$	[P]	$1[P] = 1 [\frac{dyn \cdot s}{cm^2}]$
η	[P]	aktuelle Viskosität	$\hat{\eta} = \frac{\eta}{\eta_o}$	[]	Viskosität, normiert
K	[dyn]	Elastische Konstante			1-Konstanten-Näherung
			$\hat{\nabla} = \nabla a_o$	[]	Gradient, dimensionslos

Definition der Ericksenzahl - mit $a = a_o$:

$$ER = \frac{\eta v_\infty a}{K} = \hat{\eta} \frac{\eta_o v_\infty a_o}{K} \quad []. \quad (1.48)$$

Normierung der Elastischen Konstanten:

$$\hat{K} = \frac{K}{\eta_o v_\infty a_o} = \frac{\hat{\eta}}{ER} \quad []. \quad (1.49)$$

Normierung des Drucks $\tilde{p} [\frac{dyn}{cm^2}]$:

$$\hat{p} = \tilde{p} \frac{a_o}{v_\infty \eta_o} \quad []. \quad (1.50)$$

Impulsbilanz - Dimensionsbetrachtung

Wir schreiben hierzu die - vereinfachte - Struktur der Impulsbilanz im cgs-System auf und bemerken, dass die Divergenzbildung mit den Ableitungen nach den dimensionslosen Kugelkoordinaten ρ, θ, ϕ ohne Einfluß auf die Dimension der Gleichung ist. Wir erkennen, dass die Formulierung im cgs-System die Dimension eines Druckes $\frac{dyn}{cm^2}$ haben muss:

$$\operatorname{div} \left[-\tilde{p} \left[\frac{dyn}{cm^2} \right] - K [dyn] \nabla_i \mathbf{n} \nabla_j \mathbf{n} [cm^{-2}] + (\sim \eta \left[\frac{dyn s}{cm^2} \right] \nabla \mathbf{v} [s^{-1}]) \right] = 0 \quad \left[\frac{dyn}{cm^2} \right]. \quad (1.51)$$

Multipliziert man die Gleichung 1.51 mit dem Faktor $\frac{a_o}{v_\infty \eta_o} \left[\frac{cm^2}{dyn} \right]$, erhalten wir mit den Gl. 1.49, 1.50 und den oben angegebenen Definitionen die dimensionslose Impulsbilanz, in welcher nur noch dimensionslose Größen vorkommen:

$$\operatorname{div} \left[-\hat{p} - \hat{K} \hat{\nabla}_i \mathbf{n} \hat{\nabla}_j \mathbf{n} + (\sim \hat{\eta} \hat{\nabla} \hat{\mathbf{v}}) \right] = 0. \quad (1.52)$$

Aus Gleichung 1.52 leitet sich folgende Vorschrift für die numerische Rechnung ab:

- Statt der elastischen Konstanten aus der Literatur $K [dyn]$ ist in der numerischen Rechnung die normierte elastische Konstante $\hat{K} = \frac{\hat{\eta}}{ER}$ anzusetzen. In diesem Ausdruck ist $\hat{\eta}$ zwar dimensionslos, hat aber den Zahlenwert von $\eta [P]$.
- Will man den so berechneten dimensionslosen Druck \hat{p} auf den Druck in $\frac{dyn}{cm^2}$ \tilde{p} zurückrechnen, ist dieser mit dem Faktor $\frac{v_\infty \eta_o}{a_o}$ zu multiplizieren.
- Um die Geschwindigkeit $\hat{\mathbf{v}}$ im cgs-System darzustellen, ist diese mit $v_\infty \left[\frac{cm}{s} \right]$ hochzurechnen.
- Mit Hilfe von Gl. 1.48 überlegt man sich, wie die normierten Stokeskräfte und - Momente ins cgs-System umzurechnen sind. Seien \hat{F}, \hat{M} die mit \hat{K} berechneten normierten Größen, so gilt

$$ER \cdot K = \eta v_\infty a \sim F [dyn] \quad (1.53)$$

$$F = \hat{F} \eta v_\infty a \quad (1.54)$$

$$M = \hat{M} \eta v_\infty a^2 \quad (1.55)$$

$$\eta = \hat{\eta} \frac{\alpha_4}{2} \eta_o. \quad (1.55)$$

v_∞, a und η werden nach unserer Definition auf Seite 19 mit dem Wert im cgs-System angesetzt. $\frac{\alpha_4}{2} \eta_o$ ist definiert als die isotrope Viskosität des nematischen Mediums. Hierbei ist α_4 einer der sechs Leslie-Koeffizienten, mit welchen die viskosen Eigenschaften einer nematischen Substanz eindeutig beschrieben sind, näheres hierzu in [3, P.206].

Drehimpulsbilanz - Dimensionsbetrachtung

Ausgangspunkt ist die Gleichung 1.9. Es ist nachzuweisen, dass diese in cgs-Größen ausgedrückt, die Dimension $\frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$ haben, um die Umrechnung mit demselben Faktor $\frac{a_o}{v_\infty \eta_o}$ wie in den Gln. 1.51 auf 1.52 vornehmen zu können:

$$\Gamma = \mathbf{n} [] \times (\mathbf{h}^d - \mathbf{h}') \left[\frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2} \right] = 0. \quad (1.56)$$

Untersuchen wir zunächst \mathbf{h}^d :

$$h_j^d = -\frac{\partial f_d}{\partial n_j} + \partial_i \left(\frac{\partial f_d}{\partial (\partial_i n_j)} \right). \quad (1.57)$$

Ableitungen nach dimensionslosen Variablen, hier n_j , ändern die Dimension nicht. Im zweiten Term kompensieren sich die Ortsableitungen in Zähler und Nenner gegenseitig, so dass auch dieser Differentialoperator dimensionsneutral ist. Nachdem f_d die Franksche Energiedichte mit $\left[\frac{\text{dyn cm}}{\text{cm}^3} \right]$ ist, sind wir zur Umrechnung mit dem erwähnten Faktor berechtigt und die elastischen Energie transformiert sich wie folgt:

$$f_d = \frac{K}{2} (\nabla \mathbf{n})^2 \quad | \cdot \frac{a_o}{v_\infty \eta_o} \Rightarrow \hat{f}_d = \frac{\hat{K}}{2} (\hat{\nabla} \mathbf{n})^2. \quad (1.58)$$

Bleibt noch die Frage zu beantworten, ob wir auch das viskose Molekularfeld mit dem gleichen Faktor in die dimensionslose Form überführen können:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}' &= \gamma_1 \mathbf{N} + \gamma_2 \mathbf{A} \mathbf{n} \\ &= \hat{\gamma}_1 \eta_o \left(v_\infty \hat{\mathbf{v}} \frac{\hat{\nabla}}{a_o} \mathbf{n} + \frac{1}{2} (\mathbf{n} \times [\frac{\hat{\nabla}}{a_o} \times v_\infty \hat{\mathbf{v}}]) \right) \\ &\quad + \hat{\gamma}_2 \eta_o \left(\sim \frac{\hat{\nabla}}{a_o} (v_\infty \hat{\mathbf{v}}) \mathbf{n} \right) \quad | \cdot \frac{a_o}{\eta_o v_\infty} \\ \Rightarrow \hat{\mathbf{h}}' &= \hat{\gamma}_1 \left(\hat{\mathbf{v}} \hat{\nabla} \mathbf{n} + \frac{1}{2} (\mathbf{n} \times [\hat{\nabla} \times \hat{\mathbf{v}}]) \right) + \hat{\gamma}_2 (\hat{\nabla} \hat{\mathbf{v}}) \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Gleichung 1.59 enthält nur dimensionslose Größen. Aus Gleichung 1.58 ist zu schließen, dass auch das statische Molekularfeld \mathbf{h}^d dimensionslos wird, wenn wir die elastische Konstante K durch die normierte elastische Konstante $\hat{K} = \frac{\hat{\eta}}{ER}$ ersetzen.

Diese Regel gilt wie gezeigt überall da, wo in der Numerik die elastische Konstante erscheint. Man erkennt, dass über diese Konstante \hat{K} die Ericksenzahl in die numerische Rechnung eingebunden ist.

1.6 Anfangs- und Randbedingungen

Anfangsbedingungen des Geschwindigkeits- und Druckfeldes

In den folgenden Rechnungen und Betrachtungen gehen wir ausschließlich von dimensionslosen Größen aus. Vereinfachend verzichten wir deshalb auf die Kennzeichnung durch Hut.

Vor Beginn der Relaxation sind alle Geschwindigkeitskomponenten und der Druck im gesamten Gebiet auf Null zu setzen.

Anfangsbedingungen des Direktorfeldes

Die Bulk-Werte Θ , Φ des statisch mit der Euler-Lagrange-Gleichung ins Minimum der elastischen Energie relaxierte Direktorfeldes liefern die Anfangswerte für die dynamische Rechnung. Jedoch sind die statisch berechneten Θ - und Φ -Werte auf dem äußeren Rand des Gebietes und auf der Kugeloberfläche (homöotrope Verankerung!) während der Relaxation als *Randbedingungen* festzuhalten.

Randbedingungen im Unendlichen bzw. auf dem äußeren Rand des Gebietes

Da wir beliebige Anströmrichtungen parallel zur x - z -Ebene zulassen, geht der Anströmwinkel zur negativen x -Achse κ in die Randbedingungen der Geschwindigkeit ein. κ kann Werte zwischen $+\frac{\pi}{2}$ (Strömung in positiver z -Richtung) bis $-\frac{\pi}{2}$ (Strömung in negativer z -Richtung) annehmen. Bei $\kappa = 0$ besteht senkrechte Anströmung (parallel zur x -Achse.)

Aus Symmetriegründen muss $v_y = 0$ sein.

Bei homogener Strömung gilt:

$$\begin{aligned} v_x &= v_\infty \cos \kappa \\ v_z &= v_\infty \sin \kappa \\ \tilde{p} &= 0. \end{aligned} \tag{1.60}$$

v_∞ ist hierbei die ungestörte Geschwindigkeit am äußeren Rand des Gebietes.

Transformation der RB in Kugelkoordinaten ergibt [1; S.565]

$$\begin{aligned} v_\rho &= v_\infty (\cos \kappa \sin \theta \cos \phi + \sin \kappa \cos \theta) \\ v_\theta &= v_\infty (\cos \kappa \cos \theta \cos \phi - \sin \kappa \sin \theta) \\ v_\phi &= -v_\infty \cos \kappa \sin \phi. \end{aligned} \tag{1.61}$$

Randbedingungen auf der Kugeloberfläche

Allgemein gilt für reibungsbehaftete Flüssigkeiten, dass die Relativgeschwindigkeit an Grenzflächen Null sein muss, also gilt an der Oberfläche eines sphärischen Teilchen ohne Drehimpuls:

$$\begin{aligned} v_\rho &= 0 \\ v_\theta &= 0 \\ v_\phi &= 0. \end{aligned} \tag{1.62}$$

Dieser Fall ist bei achsparalleler Anströmung $\kappa = \pm\frac{\pi}{2}$ gegeben, bei der aus Symmetriegründen kein Drehmoment um die y -Achse auftreten kann. Bei der Saturndisklination trifft dies auch, anders als beim Igeldefektdipol, für die Anströmung in x -Richtung ($\kappa = 0$) zu.

In allen anderen Fällen besteht gegenüber einer um κ geschwenkten Ebene durch die y -Achse keine Symmetrie der Defektstruktur und folglich gibt es immer ein Restmoment M_y , wenn die Kugel noch nicht rotiert ($\omega_y = 0$), aber die Winkelbeschleunigung $\partial_t \omega_y \neq 0$ ist. Mit dem Drehimpulssatz lässt sich dies zeigen:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{L}}{dt} &= \frac{d(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\omega})}{dt} = \mathbf{M}; \quad \mathbf{J} \text{ konstant} \\ \mathbf{J} \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} &= \mathbf{M} \end{aligned} \tag{1.63}$$

Hierin ist \mathbf{L} der Drehimpuls, \mathbf{J} das Trägheitsmoment, welches für ein sphärisches Partikel als konstant angenommen werden darf.

Man erkennt aus Gl.1.63, dass für eine konstante Winkelgeschwindigkeit mit $\partial_t \omega_y = 0$ das Drehmoment M_y Null werden muss. Wir haben demzufolge eine zunächst noch unbekannte Winkelgeschwindigkeit ω_y des kugelförmigen Partikels anzunehmen, bei der das Drehmoment verschwindet[14]. Die näherungsweise Bestimmung von ω_y geschieht im Zuge der numerischen Auswertung durch iterative Rechenläufe und Interpolation. Dabei wird das Drehmoment M_y als Funktion von ω_y ermittelt und die Nullstelle gesucht.

Für die Randbedingungen auf der Kugeloberfläche haben wir die Geschwindigkeitskomponenten in Kugelkoordinaten als Funktion von ω_y zu bestimmen. Wir gehen von der kinematischen Beziehung für die Umfangsgeschwindigkeit aus:

$$\mathbf{v} = [\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}] \quad \text{mit} \quad |\mathbf{r}| = |\hat{\mathbf{r}}| = 1. \tag{1.64}$$

In unserem Fall gilt speziell

$$\boldsymbol{\omega} = \omega \mathbf{e}_y = \omega_y (\mathbf{M} \rightarrow 0). \tag{1.65}$$

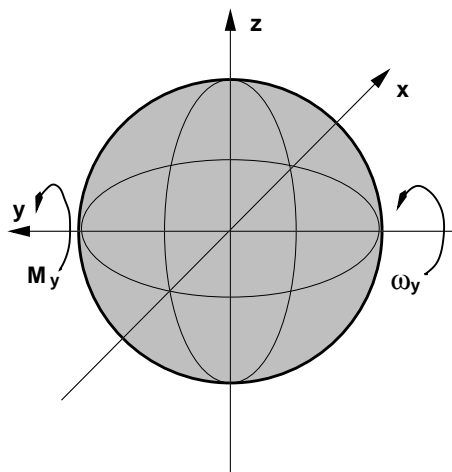


Abbildung 1.2: Drehbewegung des sphärischen Partikels um die y -Achse. Wenn M_y gegen Null geht, wird ω_y maximal und umgekehrt. Beide Größen haben die gleiche - negative - Drehrichtung.

In kartesischer Koordinatenbasis schreibt man

$$\mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{e}_r = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{bmatrix}; \quad \mathbf{e}_\theta = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \phi \\ \cos \theta \sin \phi \\ -\sin \theta \end{bmatrix}; \quad \mathbf{e}_\phi = \begin{bmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.66)$$

$\omega \mathbf{e}_y = \boldsymbol{\omega}_y$ muss in Kugelkoordinaten transformiert werden. Es gilt

$$\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_r = \sin \theta \sin \phi; \quad \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_\theta = \cos \theta \sin \phi; \quad \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_\phi = \cos \phi. \quad (1.67)$$

Damit wird

$$\boldsymbol{\omega}_y = \omega_y \mathbf{e}_y = \omega_y \begin{bmatrix} \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \sin \phi \\ \cos \phi \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{e}_r = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.68)$$

So erhalten wir mit dem Kreuzprodukt

$$\mathbf{v}(\boldsymbol{\omega}_y) = \omega_y [\mathbf{e}_y \times \mathbf{e}_r] |\mathbf{r}|; \quad |\mathbf{r}| = 1. \quad (1.69)$$

die gesuchten Randbedingungen auf der Kugeloberfläche in sphärischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} v_\rho &= 0 \\ v_\theta &= \omega_y \cos \phi \\ v_\phi &= -\omega_y \cos \theta \sin \phi. \end{aligned} \quad (1.70)$$

1.7 Stokessche Kräfte und Momente

Aus Geschwindigkeitsfeld und geschwindigkeitsgekoppeltem Direktorfeld lassen sich Reibungskräfte und -Drehmomente berechnen, die auf das sphärische Teilchen wirken.

Im Prinzip ist es möglich, den Betrag der Reibungskraft in Anströmrichtung mit Hilfe des Volumenintegrals der Dissipation als Skalar zu berechnen. Dies Verfahren wurde bei den vorangegangenen Arbeiten des Autors[16; S.48][17; S.20] und bei[9] angewandt. Eine Bestimmung der Krafrichtung ist damit nur durch Bildung des Widerstandstensors und beschränkt auf kleine Ericksenzahlen möglich. Drehmomente lassen sich damit nicht errechnen. Diese sind jedoch bei der Struktur des Direktorfeldes zu erwarten. Besser eignet sich das Oberflächenintegral des Spannungstensors, welches erlaubt, Kräfte und Momente vektoriell, d.h. ihre Komponenten in x -, y - und z -Richtung zu berechnen. Deshalb werden wir das letztgenannte Verfahren anwenden.

Es hat sich auch herausgestellt, dass beide Verfahren nur im isotropen Grenzfall und im Falle der achsparallelen Anströmung vergleichbare Ergebnisse liefern. Bei allen anderen Anströmwinkeln κ ergeben sich inakzeptable Unterschiede, die mit einer Verfeinerung des Gitters noch zunehmen. Das Oberflächenintegral ist, wie man leicht einsieht, vom Nahfeld der Kugel dominiert. Das Integrationsgebiet selbst enthält keine Defekte. Dagegen kann man durch Auflisten der numerischen Volumenintegration zeigen, dass hier die größten Beiträge vom Fernfeld beigesteuert werden. Die Theorie verlangt trotz dieses strukturellen Unterschiedes kompatible Ergebnisse bezüglich des Betrags der Reibungskraft. Im isotropen Grenzfall erfüllt das numerisch berechnete Oberflächenintegral diese Forderung mit einem Fehler von -1.34% auf den analytisch berechneten Wert. Das Volumenintegral weicht um $+0.74\%$ vom Sollwert ab. Die Zahlen gelten für das gebräuchliche Gitter $65 \times 65 \times 65$. Im Unterschied zum vorliegenden Problem ist das isotrope Feld jedoch frei von Defekten. Auf die Frage nach den Ursachen der großen Differenzen im anisotropen Fall gibt es plausible Antworten:

- Im Gegensatz zum Oberflächenintegral wird im Gebiet des Volumenintegrals über Defekte hinweg integriert, die in analytischer (wenn auch nicht in numerischer) Betrachtungsweise Singularitäten sind. In Defektnähe treten große Gradienten auf.
- Die Koppelung von Direktor-, Geschwindigkeits- und Druckfeld verstärkt den Einfluss von Defekten. Denn im Spannungstensor des linearisierten Problems wurde nur über drei Geschwindigkeitsvariable integriert. Das Direktorfeld mit seinen Defekten wurde damals konstant angenommen.
- In Kugelferne mit seinem überproportionalen Beitrag zum Volumenintegral wirkt sich die nicht lineare Kopplung der Felder offenbar in unkalkulierbarer Weise negativ auf das Rechenergebnis aus.
- Schon de Gennes weist in seinem Standard-Lehrbuch *The Physics of Liquid Crystals*[3] auf S. 209 darauf hin, dass die Konsequenzen der Leslie-Ericksen-Gleichungen wegen ihrer Komplexität nur für einfache makroskopische Flüsse untersucht sind oder nur für kleine Abweichungen vom voll ausgerichteten Zustand ("for small deviations from fully aligned state"). Auch betont er die Notwendigkeit, Disklinationen und Defekte sorgfältig zu eliminieren. Dieser Forderung entspricht in unserem Fall nur das Oberflächenintegral.

Bei den geforderten beliebigen Anströmrichtungen in der x - z -Symmetrieebene reicht es aus, die Kraft-Komponenten F_x , F_z und das Moment M_y mit dem Oberflächenintegral zu bestimmen. Wegen der x - z -Symmetrie müssen die Größen F_y , M_x und M_z immer Null werden. Aus den Kräften lassen sich durch einfache Umrechnung die dazugehörigen effektiven Viskositäten als Vergleichsgrößen zur isotropen Viskosität bestimmen, ebenso die resultierende Stokeskraft \mathbf{F}_d mit der auf diese bezogene effektive Viskosität η_β durch geometrische Addition von F_x und F_z . Ausgehend von der bekannten Formel für die Stokessche Reibung isotroper Flüssigkeiten in normierter Schreibweise

$$\hat{F}_{d_{iso}} = 6 \pi \hat{\eta} \hat{a} \hat{v}_\infty \quad (1.71)$$

erkennt man, dass man durch Division der normierten anisotropen Stockeskraft \hat{F}_i mit $6 \pi \hat{a} \hat{v}_\infty$ eine - dimensionslose - Viskosität erhält:

$$\hat{\eta}_{eff}[] = \frac{\hat{F}_i}{6 \pi \hat{a} \hat{v}_\infty}; \quad \hat{a} = \hat{v}_\infty = 1. \quad (1.72)$$

Durch Multiplikation von Gl. 1.72 mit $\eta_o = 1[P]$ bekommt man den dimensionsbehafteten Wert mit dem gleichen Betrag

$$\eta_{eff}[P] = \eta_o \frac{\hat{F}_i}{6 \pi \hat{a} \hat{v}_\infty} = \frac{F_i}{6 \pi}. \quad (1.73)$$

Man sieht aus den Gln. 1.72 und 1.85, dass die effektive Viskosität im Gegensatz zur dimensionsbehafteten Stokeskraft F_i unabhängig von der tatsächlichen Randgeschwindigkeit v_∞ und vom tatsächlichen Kugelradius a ist. Siehe hierzu auch Abschnitt 1.5. Anders als bei Rechnungen mit dem Volumenintegral ließ sich mit dem Oberflächenintegral des Spannungstensors ein konsistentes und plausibles Ergebnistableau gewinnen.

Berechnung von Reibungskraft und Drehmoment mit dem Oberflächenintegral des Spannungstensors

Der Vektor der Stokesschen Reibungskraft ist durch das Integral des Spannungstensors über die Kugeloberfläche und das Reibungsmoment durch das Oberflächenintegral über dem Kreuzprodukt von Kugelradius und Spannungstensor:

$$F_i = \int \mathbf{e}_i \sigma_{ij} df_j; \quad M_i = \int r [\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_i] \sigma_{ij} df_j; \quad r = 1; \quad i = r, \theta, \phi \quad (1.74)$$

Das Flächenelement auf der Kugeloberfläche ist gegeben durch

$$df_j = +\mathbf{e}_r df = +\mathbf{e}_r \sin \theta d\theta d\phi; \quad (1.75)$$

Der Spannungstensor setzt sich aus statischen und dynamischen Beiträgen zusammen:

$$\boldsymbol{\sigma} = \underbrace{-p^o \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}^d}_{\text{statischer Teil}} \quad \underbrace{-\tilde{p} \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}'}_{\text{dynamischer Teil}} \quad (1.76)$$

Der statische Anteil liefert keinen Beitrag zur Stokeskraft, weil im statischen Fall keine Strömung stattfindet, welche Reibungskräfte bewirken könnte. \tilde{p} ist der dynamische Druckanteil (1.18). Er ist bei der Berechnung der Stokeskraft ebenso zu berücksichtigen wie der viskose Spannungstensor. Bei der Berechnung von Reibungskräften und -Momenten ist nur der viskose Spannungstensor mitzunehmen, weil er alleine die notwendigen tangentialen Kräfte auf die Kugeloberfläche aufbringen kann.

Wenden wir uns der Berechnung der Stokeskräfte F_x, F_z zu und betrachten zuerst den Beitrag des viskosen Spannungstensors σ'_{ij} . Mit den Gleichungen 1.74, 1.75 und der Einstein-Summenkonvention schreiben wir

$$F'_i = + \int \mathbf{e}_i \sigma'_{ir} \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad i = r, \theta, \phi. \quad (1.77)$$

Wir berechnen diese Gleichung in kartesischen Koordinaten mit den umdefinierten Einheitsvektoren der Gl. 1.66

$$\begin{aligned} F'_x &= \int (\sin \theta \cos \phi \sigma'_{rr} + \cos \theta \cos \phi \sigma'_{\theta r} - \sin \phi \sigma'_{\phi r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi; \\ F'_z &= \int (\cos \theta \sigma'_{rr} - \sin \theta \sigma'_{\theta r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Die Komponente F'_y muss, wie schon erwähnt, aus Symmetriegründen verschwinden.

Den Druckanteil des dynamischen Spannungstensors $-\tilde{p}\delta_{ij}$ und df_j (Gl. 1.75) berechnen wir mit den kartesisch definierten Einheitsvektoren Gl. 1.66

$$\begin{aligned} F_x^D &= - \int \sin^2 \theta \cos \phi \tilde{p} \, d\theta \, d\phi; \\ F_z^D &= - \int \sin \theta \cos \theta \tilde{p} \, d\theta \, d\phi. \end{aligned} \quad (1.79)$$

F_y^D ist wieder aus Symmetriegründen Null.

Also lauten die Komponenten der Stokeschen Reibungskraft

$$\begin{aligned} F_x &= F'_x + F_x^D; \\ F_z &= F'_z + F_z^D. \end{aligned} \quad (1.80)$$

Die Berechnung des Drehmomentes verläuft in gleicher Weise durch Einsteinsummen der Gleichungen 1.74, 1.75. Für das Integral des Kreuzproduktes von Radius und viskosem Spannungstensor schreibt man

$$M_i = \int r [\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_i] \sigma'_{ir} \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad r = 1; \quad i = r, \theta, \phi \quad (1.81)$$

Mit den Kreuzprodukten der Einheitsvektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_r &= 0 \\ \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta &= +\mathbf{e}_\phi \\ \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\phi &= -\mathbf{e}_\theta \end{aligned} \quad (1.82)$$

ergibt sich

$$M_i = \int (\mathbf{e}_\phi \sigma_{\theta r} - \mathbf{e}_\theta \sigma_{\phi r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (1.83)$$

Mit \mathbf{e}_θ und \mathbf{e}_ϕ in kartesischen Koordinaten - Gln. 1.66 - erhalten wir als Ergebnis

$$\begin{aligned} M_x &= - \int (\sin \phi \sigma_{\theta r} + \cos \theta \cos \phi \sigma_{\phi r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\ M_y &= + \int (\cos \phi \sigma_{\theta r} - \cos \theta \sin \phi \sigma_{\phi r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\ M_z &= + \int \sin^2 \theta \sigma_{\phi r} \, d\theta \, d\phi \end{aligned} \quad (1.84)$$

M_x und M_z werden aus Symmetriegründen Null, so dass nur M_y für unser weiteres Vorgehen übrig bleibt.

Weitere Details der Berechnung finden sich im Anhang A.

1.8 Das Prinzip der minimalen freien Energie

In der Einleitung wurde darauf hingewiesen, dass das Erreichen eines stationären Gleichgewichtes bei zunächst beliebigem Anströmwinkel κ unter zwei Szenarien vorstellbar ist:

- *Szenario A:* Der Anströmwinkel κ ist eine Zwangsbedingung der Defektkonfiguration. Es besteht kein Rotationsfreiheitsgrad um die y -Achse. Das dabei auftretende Drehmoment um diese Achse wird durch eine Wirbelströmung auf Null kompensiert.
- *Szenario B:* Die Zwangsbedingung $\kappa = \textit{konstant}$ wird aufgehoben. Das Defektsystem sucht sich einen neuen Gleichgewichtszustand nach dem *Prinzip der minimalen freien Energie* [15, Abschnitt 7.1, S.109-111].

Die thermodynamische Definition der freien Energie ist lautet:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= U - TS \\ &\text{oder in differentieller Form:} \\ d\mathcal{F} &= dU - TdS - SdT \end{aligned} \quad (1.85)$$

U steht für die innere Energie, T für die absolute Temperatur und S für die Entropie. Bei isothermen Prozessen entfällt der Term SdT und es gilt dann

$$d\mathcal{F} = dU - TdS \quad (1.86)$$

Die freie Energie hat die Bedeutung eines Arbeitspotentials bei konstanter Temperatur[15, S.111]. Es gilt für die verfügbare mechanische Arbeit

$$\mathcal{W} \leq \Delta \mathcal{F} \quad (1.87)$$

Betrachtet man nur stationäre Prozesse, so bleibt die innere Energie unverändert, also

$$\frac{dU}{dt} = 0; \quad \Rightarrow \quad \frac{d\mathcal{F}}{dt} = -T \frac{dS}{dt} \quad (1.88)$$

Die Gleichung 1.88 ist identisch mit der *Grundgleichung der Nematodynamik*, die als die Bewegungsgleichung der Entropie definiert ist.[3; S.200, S.203][16;1.60, 1.96]

$$\begin{aligned} T \frac{dS}{dt} &= -\frac{d}{dt} \int \left[\frac{1}{2} \rho_d v^2 + f_0 + f_d \right] d^3r \\ &= \int \boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{A} + \mathbf{h}' \cdot \mathbf{N} d^3r = \mathbf{F}_d \mathbf{v}_\infty. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Wir identifizieren die im System gespeicherte freie Energie/Zeiteinheit mit

$$-\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int \{ \boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{A} + \mathbf{h}' \cdot \mathbf{N} \} d^3r = \frac{d\mathcal{W}}{dt} \quad (1.90)$$

und integrieren Gl. 1.89 über der Zeiteinheit $t_o = 1$:

$$\mathcal{W}_\kappa(t_o) = \mathbf{F}_d \mathbf{s}(t_o) = T S(t_o) = -\mathcal{F}(t_o). \quad (1.91)$$

\mathcal{W}_κ ist gleich der bei einem vorgegebenen Anströmwinkel gespeicherten freien Energie. Beim *Übergang zum Szenario B* wird die Zwangsbedingung $\kappa = \textit{konstant}$ und damit die Stationarität des Systems vorübergehend aufgehoben, bis das System einen neuen stationären Gleichgewichtszustand beim Winkel κ_o gefunden hat, für welchen gilt:

$$\mathcal{W}_{GG}(\kappa_o) \leq \mathcal{W}_\kappa \quad (1.92)$$

$$\mathcal{W}_{GG}(\kappa_o) = -\mathcal{F}_{min} \quad \textbf{Prinzip der minimalen freien Energie.} \quad (1.93)$$

Es wird sich herausstellen, dass die freie Energie immer bei achsparalleler Anströmung und zwar in beiden Richtungen, d.h. bei $\kappa = \pm \frac{\pi}{2}$ ein lokales Minimum durchläuft. Demnach ist die freie Energie als Arbeitspotential bei isothermen Bedingungen[15, S.111] als ein Doppelmuldenpotential aufzufassen, bei welchem sich die Defektachse immer achsparallel in positiver oder negativer z -Richtung ausrichten wird. Eine einfache Symmetrieüberlegung sagt uns, dass bei der Saturndisklination infolge der Symmetrie zur x - y -Ebene die beiden Potentialmulden gleich tief sein müssen. Beim Igeldefektdipol erwarten wir auf Grund der gebrochenen x - y -Symmetrie unterschiedlich tiefe Potentialmulden. Die sich hieraus ergebenden Konsequenzen werden wir im dritten Kapitel noch im Detail erörtern.

Da sich das Dissipationsintegral in Gl. 1.89 als Volumenintegral in der praktischen numerischen Umsetzung, wie im Abschnitt 1.7, S. 25 gezeigt, als nicht brauchbar erwiesen hat, wird im weiteren Verlauf der Abhandlung die freie Energie stets über die geleistete Arbeit $\mathcal{W}_\kappa = \mathbf{F}_d \mathbf{v}_\infty t_o$ bestimmt.

Kapitel 2

Numerische Realisierung

2.1 Angewandte numerische Methoden

2.1.1 Finite Differenzen

In allen Relaxationsschleifen müssen zuerst die benötigten partiellen Ableitungen der übergebenen Variablen nach der Methode der finiten Differenzen gebildet werden. Diese Methode darf man als bekannt voraussetzen. Sie ist in der Diplomarbeit[16] ausführlich dargestellt. Deshalb hier nur eine Kurzfassung:

Sei $a[i][j][k]$ eine beliebige Feldvariable $n_\alpha[i][j][k]$, $v_\alpha[i][j][k]$ oder $p[i][j][k]$. Die Indices α, β stehen für eine der Kugelkoordinaten ρ, θ und ϕ . Diese sind an die Gitterindices $[i], [j][k]$ gekoppelt. Dann gelten im bulk als Näherungen für erste und zweite partielle Ableitungen die symmetrischen Differenzenquotienten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial a[i][j][k]}{\partial \alpha} &= \frac{a[i+1][j][k] - a[i-1][j][k]}{\Delta_\alpha}, \\ \frac{\partial^2 a[i][j][k]}{\partial \alpha^2} &= \frac{a[i+1][j][k] + a[i-1][j][k] - 2a[i][j][k]}{\Delta_\alpha^2}, \\ \frac{\partial^2 a[i][j][k]}{\partial \alpha \partial \beta} &= \frac{a[i+1][j+1][k] - a[i-1][j+1][k] - a[i+1][j-1][k] + a[i-1][j-1][k]}{4\Delta_\alpha \Delta_\beta}.\end{aligned}\tag{2.1}$$

In diesem Beispiel ist α mit dem Indes $[i]$, β mit dem Indes $[j]$ gekoppelt. Es ist jedoch jede andere mögliche Zuordnung der Indices zu α und β erlaubt.

Mit den Variablen und ihren so gebildeten Ableitungen lassen sich in den folgenden Rechnungen die benötigten Differentialoperatoren und die zu relaxierenden Funktionen bilden.

2.1.2 Das Newton-Gauß-Seidel Verfahren

Nachdem auch diese Methode in der Literatur[7] hinreichend beschrieben wurde, soll hier nur die Anwendung auf Impulsbilanz und Drehimpulsbilanz behandelt werden. Ausgangs-

punkt ist das Newtonverfahren zur Bestimmung der Nullstelle einer Funktion:

$$x_{neu} = x_{alt} - \frac{f(x_{alt})}{\frac{\partial f}{\partial x}(x_{alt})}. \quad (2.2)$$

Angewandt auf die Impulsbilanz(1.18)

$$\partial_j \sigma_{ij} = -\partial_i \underbrace{(p + f_d)}_{\tilde{p}} + h'_k \partial_i n_k + \partial_j \sigma'_{ij}. \quad (2.3)$$

erhält man drei Relaxationsgleichungen für die Geschwindigkeitskomponenten v_ρ , v_θ und v_ϕ

$$v_{\rho_{neu}} = v_{\rho_{alt}} - \frac{[\partial_j \sigma_{ij}(v_\rho, v_\theta, v_\phi)]_\rho}{\frac{[\partial_j \sigma_{ij}(v_\rho + \Delta v_\rho)]_\rho - [\partial_j \sigma_{ij}(v_\rho)]_\rho}{\Delta v_\rho}}; \quad (2.4)$$

$$v_{\theta_{neu}} = v_{\theta_{alt}} - \frac{[\partial_j \sigma_{ij}(v_\rho, v_\theta, v_\phi)]_\theta}{\frac{[\partial_j \sigma_{ij}(v_\theta + \Delta v_\theta)]_\theta - [\partial_j \sigma_{ij}(v_\theta)]_\theta}{\Delta v_\theta}} \quad (2.5)$$

$$v_{\phi_{neu}} = v_{\phi_{alt}} - \frac{[\partial_j \sigma_{ij}(v_\rho, v_\theta, v_\phi)]_\phi}{\frac{[\partial_j \sigma_{ij}(v_\phi + \Delta v_\phi)]_\phi - [\partial_j \sigma_{ij}(v_\phi)]_\phi}{\Delta v_\phi}}. \quad (2.6)$$

Genau so verfährt man bei der Drehimpulsbilanz, um Direktortiltwinkel und Direktorazimutwinkel zu berechnen (siehe Gln. 1.40, 1.46):

$$\Theta_{neu} = \Theta_{alt} - \frac{F(\Theta)}{\frac{F(\Theta + \Delta\Theta) - F(\Theta)}{\Delta\Theta}}; \quad \Phi_{neu} = \Phi_{alt} - \frac{G(\Phi)}{\frac{G(\Phi + \Delta\Phi) - G(\Phi)}{\Delta\Phi}}. \quad (2.7)$$

Im Nenner der Residuen, Gln. 2.4 und 2.7 werden jeweils um ein Δ -Maß, Größenordnung $1.0e-5 - 1.0e-4$ "verrüttelte" Funktionswerte zur Bildung der Differenzenquotienten benötigt. Mit diesen Verrückungen werden in der Relaxationsschleife jene Hilfsvariablen bestimmt, mit welchen die numerischen Ableitungen im Nenner der Residuen zu berechnen sind. Im Nenner der dazu benötigten Differenzenquotienten stehen immer die global definierte Δ -Konstanten, welche bei der Berechnung der erwähnten Hilfsvariablen verwendet wurden. Siehe hierzu auch [17; S.31],[7, S.863ff]

2.1.3 Methode der künstlichen Kompressibilität zur Druckberechnung

Das Verfahren wurde in den vorhergehenden Arbeiten des Autors[16][17] ausführlich beschrieben und deshalb beschränken wir uns auf eine mehr globale Darstellung. Die Methode ist seit den Anfängen der Computerphysik bekannt und wurde erstmals 1967 von Chorin[2] für die Navier-Stokes Gleichung viskoser isotrope Fluide beschrieben. Auch Ruhwandl/Terentjev[9] und Heuer/Kneppe/Schneider[4] verwenden die Methode.

Der Grundgedanke besteht darin, daß man zu Beginn der Iteration die Inkompressibilitätsbedingung vorübergehend aufhebt, um am Ende der Relaxation wieder zu ihr zurückzukehren. Wir schreiben zunächst statt der Inkompressibilitätsbedingung $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$ die vollständige Kontinuitätsgleichung

$$\rho_d \operatorname{div} \mathbf{v} = -\frac{d\rho}{dt}. \quad (2.8)$$

Wir treffen ferner die Annahme, daß sich die Dichte ρ_d in der Umgebung von $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$ annähernd linear zum Druck verhält:

$$p = \tilde{c}^2 \rho_d. \quad (2.9)$$

Hierin ist \tilde{c}^2 ein positiver Proportionalitätsfaktor mit der physikalischen Bedeutung der Schallgeschwindigkeit. Mit wenigen Rechenschritten[16][17] gewinnt man aus diesem Ansatz die Relaxationsgleichung des Druckes

$$p_{neu} = p_{alt} - \frac{1}{c^2} \operatorname{div} \mathbf{v} \Delta t \quad \text{mit } c^2 = \frac{1}{\rho_d \tilde{c}^2}. \quad (2.10)$$

In dieser Gleichung ist $\frac{\Delta t}{c^2}$ ein konstanter Faktor, für welchen ein Richtwert berechnet werden kann:[7; S.855]

$$\Delta t_{N-dim} \leq \frac{\Delta \rho}{\sqrt{N}|v|} \Rightarrow \Delta t_{3-dim} = \frac{\Delta \rho}{\sqrt{3}|v|}; \quad \rho = \frac{1}{r}. \quad (2.11)$$

wobei N für die Anzahl der Dimensionen und $|v|$ für die größte Ausbreitungsgeschwindigkeit im System steht, die mit der Schallgeschwindigkeit identisch ist. In der praktischen Anwendung sollte man $\Delta t/c^2$ möglichst groß wählen, um eine rasche Konvergenz der Iteration zu erreichen. Überschreitet man jedoch eine obere Schranke, wird das Verfahren instabil[9; S.5206]. Den günstigsten Wert für $|v| = \tilde{c}$ kann man nur durch probieren herausfinden. In unserem Fall ergab sich für die dreidimensionale nicht lineare Rechnung ein brauchbarer Wert bei $\tilde{c} = 10.0$.

2.1.4 Der Polaritäts-Check beim Rechnen mit Direktorfeldern.

[17] Bekanntlich sind in einem nematischen Direktorfeld die Richtungen \mathbf{n} und $-\mathbf{n}$ ununterscheidbar, d. h. der Einheitsvektor des Direktors hat keine Pfeilspitze. Bei der mathematischen Formulierung lässt es sich aber nicht vermeiden, dass auch der Vektor des Direktors mit einer eindeutigen Richtung beschrieben wird, obwohl dies physikalisch nicht zutrifft. Dieser Umstand wird bei der Bildung von Differenzenquotienten dann zu Fehlern führen, wenn an bestimmten Stellen des Gitters im Verlauf der Rechnung der Vektor des Direktors im Bezug auf seinen Nachbarn das Vorzeichen und damit seine Richtung um den Winkel π ändert. Dann nämlich liefert der Differenzenquotient der Komponenten sprunghaft völlig andere Werte.

Man erkennt einen solchen fatalen Vorzeichenfehler am negativen Skalarprodukt des Referenzvektor $\mathbf{n}_{i,j,k}$ mit einem beliebigen Nachbarvektor $\mathbf{n}_{(i\cup j\pm 1),(j\cup k\pm 1),(k\cup i\pm 1)}$. Der Fehler ist jedoch leicht zu heilen, wenn man vor Bildung des Differenzenquotienten die Vorzeichen der Komponenten des Nachbarvektors wechselt, *wobei dieser Wechsel nur temporär für die jeweils anstehende Rechenoperation gelten darf!*. Änderte man bleibend die Richtung des Nachbarvektors, würde sich der Richtungswechsel wellenartig durch das Gitter fortpflanzen - mit unkontrollierbaren Auswirkungen auf das Rechenergebnis.

Deshalb ist es notwendig, bei jedem Schleifendurchlauf und für jede Indexkonfiguration alle neun mal zwei Nachbar-Direktoren (in gleichgerichteter und gegenläufiger Richtung!) eines Referenz-Direktors $n_{\rho(ref)}[i][j][k]$, $n_{\theta(ref)}[i][j][k]$, $n_{\phi(ref)}[i][j][k]$ mit drei mal achtzehn Hilfskomponenten $n_{\rho(H)}$, $n_{\theta(H)}$, $n_{\phi(H)}$ darzustellen. Mit diesen Hilfskomponenten werden folgende Operationen ausgeführt:

- Polaritäts-Check durch Bildung des Skalarproduktes $(n_{\rho(ref)}n_{\rho(H)} + n_{\theta(ref)}n_{\theta(H)} + n_{\phi(ref)}n_{\phi(H)}) < 0$?
- Wenn das Skalarprodukt < 0 ist, bedeutet dies, dass der Winkel der (richtungsbehafteten) Nachbarvektoren $> \frac{\pi}{2}$ ist und ein Polaritätswechsel notwendig wird. Folge: VZ-Wechsel der Komponenten des Hilfsvektors $n_{\rho(H)}$, $n_{\theta(H)}$ und $n_{\phi(H)}$.
- Bildung aller Differenzenquotienten für n_{ρ} , n_{θ} und n_{ϕ} mit Hilfe der vorzeichenbereinigten Hilfskomponenten und den Referenz-Direktorkomponenten.

Die Muster der überschriebenen Hilfsvariablen, d.h. die eigentlichen Nachbardirektoren des Referenzdirektors, bleiben bei dieser Operation bezüglich ihres Vorzeichens unverändert.

Den Polaritätscheck benötigt man in allen Schleifen des Programms, in welchen Ableitungen des Direktors zu berechnen sind.

2.2 Programmstruktur

Das C-Programm *g3Ddrag.c* zur Berechnung der nicht linear gekoppelten Geschwindigkeits- Druck- und Direktorfelder sowie der daraus resultierenden Komponenten der Stokesschen Reibungskraft, deren Reduktion auf effektive Viskositäten und die Berechnung des Restmomentes um die y -Achse bedient sich im Wesentlichen der gleichen Methoden wie bei der zweidimensionalen Lösung des Problems[17], allerdings in einem erweiterten Rahmen. Das Gleichungssystem der Leslie-Ericksengleichungen basiert auf sechs statt zuvor 4 Variablen. Zu den Variablen v_{ρ} , v_{θ} , p , Θ kommt der Direktor-Azimutwinkel Φ und die dritte Geschwindigkeitskomponente v_{ϕ} hinzu.

Da wir beliebige Anströmrichtungen zulassen, geht der Anströmwinkel κ in die Rechnung ein. Wir sind mit dem 3D-Programm in der Lage, sowohl achsparallele, senkrechte und jede beliebige andere Anströmrichtung bei Winkeln κ zwischen $\frac{\pi}{2}$ und $-\frac{\pi}{2}$ zu bearbeiten.

Diese Erweiterung bringt es mit sich, dass Symmetrie bezüglich der y - z -Ebene - außer im Falle der achsparallelen Strömung - nicht mehr besteht. Also reicht es nicht, einen Quadranten zu betrachten. Das Gebiet unserer Rechnung ist eine Hemisphäre mit Radius $\rho = 1$. Die einzige verbliebene Symmetrie-Ebene ist die x - z -Ebene, welche unser Gebiet begrenzt.

Bei der Berechnung der Randwerte ist zu beachten, dass die auf der x - z -Ebene verwendete quadratische Extrapolation auf der Singularität der z -Achse keine brauchbaren Ergebnisse liefern kann. Deshalb haben wir auf der z -Achse, $\theta = 0$, $\theta = \pi$ in der x - z -Ebene, $\phi = 0$, $\phi = \pi$ die Randwerte für Θ und v_θ durch Mittelwertbildung der zur z -Achse diametralen Nachbarwerte ermittelt. Diese diametralen Nachbarwerte sind indirekt durch die an der x - z -Ebene gespiegelten Werte gegeben. Die Vektoren \mathbf{v} und \mathbf{n} müssen aus Symmetriegründen ortsfest in der x - z -Ebene liegen. Deshalb werden alle Randwerte auf der z -Achse mit Werten $\phi \neq 0, \pi$ durch Koordinatentransformation dieser ortsfesten Vektoren auf die jeweiligen ϕ -Wert gebildet, damit auf der z -Achse Eindeutigkeit besteht.

Die Struktur des Programms *g3Ddrag.c* ist detailliert mit einem Blockdiagramm im Anhang B dokumentiert. Das Programm besteht aus einem Definitions- und Initialisierungsteil, in welchem auch der Ansatz des Direktorfeldes mit einer zuvor definierten C-Funktion[5] *thdir* berechnet wird. In einer Vorschleife wird dieses Ansatzfeld ins Euler-Lagrange-Minimum der elastischen Energie relaxiert.

Die Hauptrelaxationsschleife ist eine 5-fache for-Schleife. Diese berechnet vorab den Polaritäts-Check des Direktorfeldes, danach alle benötigten partiellen ersten und zweiten Ortsableitungen der \mathbf{n} - und \mathbf{v} -Felder. Mit diesen werden die Divergenzen der Geschwindigkeit, des viskosen Spannungstensors und des Restterms des elastischen Spannungstensors gebildet. Das Newton-Gauss-Seidel-Verfahren ermittelt daraus den Druck und die drei Geschwindigkeitskomponenten.

Unter Verwendung der veränderten Werte für \mathbf{v} und p wird das viskose und elastische Molekularfeld berechnet und mit diesem die Relaxationsgleichungen für Direktortiltwinkel Θ und Azimutwinkel Φ bestimmt. Die eigentliche Feldberechnung ist damit abgeschlossen. Es folgen jedoch noch unter derselben Zählerschleife die Berechnung der Randwerte auf der x - z -Ebene durch quadratische Extrapolation, derjenigen auf der z -Achse in der oben erläuterten Weise und schließlich die Berechnung der Druckrandwerte auf der Kugeloberfläche durch lineare Extrapolation.

In einem gesonderten Block werden nach Abschluss der Relaxation alle Output-Dateien mit Hilfe der nun vollständig vorliegenden Feldvariablen geschrieben.

Abschließend werden in einer 3-fachen for-Schleife das Volumenintegral der Dissipation sowie in einer 2-fachen for-Schleife das Oberflächenintegral der Stokeskraft und des Restmomentes berechnet und die Ergebnisse über Terminal und die Datei *vfelderg* ausgegeben.

2.2.1 Programm-Modifikation Nematische Zelle

Für die (vereinfachte) Simulation der Verhältnisse in einer nematischen Zelle bei Einwirkung einer homogenen äußeren Feldkraft wie der Gravitation auf das sphärische Partikel wurde die Programm-Modifikation *h3Ddrag.c* entwickelt. Die begrenzenden Platten der Zelle, parallel und symmetrisch angeordnet zur x - y -Ebene, befinden sich dabei in einem vorzugebenden Abstand dc . Es wird angenommen, dass sich durch die homöotrope Verankerung der nematischen Moleküle auf den Plattenoberflächen ein Igeldefektdipol mit einer Defektachse senkrecht zu den Plattenoberflächen ausbildet und dass sich das sphärische Teilchen in der Zelle parallel zu den Platten unter dem Einfluss der Feldkraft und der Stokeschen Reibung gleichförmig bewegt. Diesem Zustand äquivalent ist eine ortsfeste Kugel und eine sich mit der Geschwindigkeit v_∞ bewegende Zelle, bestehend aus Fluid *und* begrenzenden Platten. Demnach gibt es an der Grenze Platte/Fluid keine Relativgeschwindigkeit und keine Reibung. Für die Simulation genügt es daher vorzugeben, dass für alle z -Werte $> \frac{dc}{2}$ und alle z -Werte $< -\frac{dc}{2}$ gelten muss:

in der Vorschleife zur Direktorfeld-Relaxation ins statische ELG-Minimum

$$n_z = 1.0 \quad n_x = n_y = 0$$

in der Hauptschleife zur Berechnung der Felder

$$\begin{aligned} n_z &= 1.0 & n_x &= n_y = 0 \\ v_x &= 1.0 & v_y &= v_z = 0 & p &= 0 \end{aligned}$$

Die Ausdehnung der Zelle in x - und y -Richtung wird als unbegrenzt angenommen, d.h. rechnerisch wird wie in den anderen Simulationen $\rho = 1.0e-7$ gesetzt.

2.3 Feste Randbedingungen und extrapolierte Randwerte

	RB - fest vorgegeben		RW - zu berechnen	
			$x - z$ -Ebene	
	Abstand ∞	Kugeloberfläche	pos.Halbebene	neg.Halbebene
Index	$i = 1$	$i = I$	$k = 1$	$k = K$
Gitter-Variable	$\rho = 0$ ($\varepsilon=1.0e-7$)	$\rho = 1.0$	$\phi = 0$	$\phi = \pi$
Θ	Θ , statisch ELG-relaxiert		quadratisch extrapoliert (IPOL)	
Φ	0.0		0.0	$-\pi$
p	0	lin. extrap.	quadr.extrap.	quadr.extrap.
v_ρ	$v_\infty \cos \kappa \sin \theta \cos \phi$ $+v_\infty \sin \kappa \cos \theta$	0.0	quadr.extrap.	quadr.extrap.
v_θ	$v_\infty \cos \kappa \cos \theta \cos \phi$ $-v_\infty \sin \kappa \sin \theta$	$\omega_y \cos \phi$	quadr.extrap.	quadr.extrap.
v_ϕ	$-v_\infty \cos \kappa \sin \phi$	$-\omega_y \cos \theta \sin \phi$	0.0 Symmetrie	0.0 Symmetrie
	RW auf z -Achse ($j = 1$: positive Richtung; $j = J$: negative Richtung)			
	auf der x - z -Ebene $k = 1 \vee k = K$		$k \neq 1 \wedge k \neq K$: über Koordinatentransformation ¹	
Index	$j = 1$	$j = J$	$j = 1$	$j = J$
Variable	$\theta = 0$	$\theta = \pi$	$\phi \neq 0 \neq \pi$	
Θ	$(\Theta[i][2][k]-\Theta[i][2][K-k+1])/2$	$(\Theta[i][J-1][k]-\Theta[i][J-1][K-k+1])/2$	$\arctan \frac{\sqrt{n_\theta^2[i][j][k]+n_\phi^2[i][j][k]}}{n_\rho[i][j][k]}$ für $j=1$ und $j=J$	
Φ	$-\phi$	$+\phi$	$-\phi$	$+\phi$
p	$(p[i][2][k]+p[i][2][K-k+1])/2$	$(p[i][J-1][k]+p[i][J-1][K-k+1])/2$	$p[i][1][1]$	$p[i][J][1]$
v_ρ	$(v_\rho[i][2][k]+v_\rho[i][2][K-k+1])/2$	$(v_\rho[i][J-1][k]+v_\rho[i][J-1][K-k+1])/2$	$v_\rho[i][1][1]$	$v_\rho[i][J][1]$
v_θ	$(v_\theta[i][2][k]-v_\theta[i][2][K-k+1])/2$	$(v_\theta[i][J-1][k]-v_\theta[i][J-1][K-k+1])/2$	$v_\theta[i][1][1] \cos \phi$	$v_\theta[i][J][1] \cos -\phi$
v_ϕ	0.0	0.0	$-v_\theta[i][1][1] \sin \phi$	$-v_\theta[i][J][1] \sin -\phi$
n_ρ	$\cos \Theta[i][1][k]$	$\cos \Theta[i][J][k]$	$n_\rho[i][1][1]$	$n_\rho[i][J][1]$
n_θ	$\sin \Theta[i][1][k]$	$\sin \Theta[i][J][k]$	$n_\theta[i][1][1] \cos \phi$	$n_\theta[i][J][1] \cos -\phi$
n_ϕ	0.0	0.0	$-n_\theta[i][1][1] \sin \phi$	$-n_\theta[i][J][1] \sin -\phi$

¹Die Werte für $k=1$ und $k=K$ sind ortsfest und werden auf die variable Koordinate $\phi = \phi(k)$ umgerechnet

2.4 Bestimmung der Winkelgeschwindigkeit ω_y im stationären Gleichgewicht

Um die Winkelgeschwindigkeit ω_y des sphärischen Teilchens zu bestimmen, bei der kein Restmoment M_y mehr auftritt, führt man mehrere Simulationsläufe mit unterschiedlichen Winkelgeschwindigkeiten ω_y durch. Aus errechneten Funktionswerten von $M_y = M_y(\omega_y)$ gewinnt man durch lineare Interpolation bzw. Extrapolation die gesuchte Nullstelle. Dabei bedienen wir uns der folgenden einfachen Interpolationsformel:

$$\omega_{neu} = \omega_2 - \frac{M_{y2} \cdot (\omega_2 - \omega_1)}{M_{y2} - M_{y1}} \quad (2.12)$$

Bei genauem Hinsehen entpuppt sich diese Beziehung als die linearisierte Newtonsche Näherungsformel zur Berechnung der Nullstellen einer Funktion. Diese lässt sich mit Hilfe elementarer Geometrie leicht herleiten. Die Grafik 2.1 zeigt die im Regelfall annähernd lineare Abhängigkeit des Restmomentes M_y von der Winkelgeschwindigkeit ω_y des sphärischen Partikels. Die verwendeten Daten zeigt Tabelle 2.2.

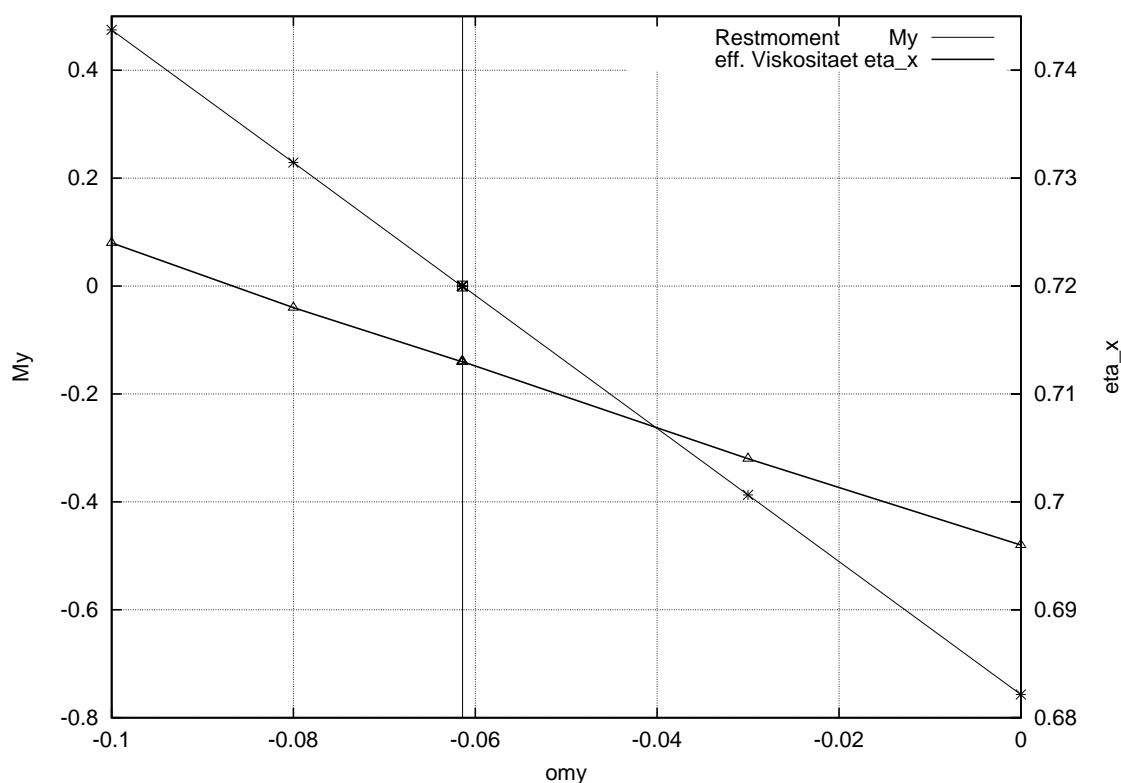


Abbildung 2.1: Bestimmung der Nullstelle des Restmomentes M_y bei senkrechter Anströmung ($\kappa = 0$). Die Abszisse ist die Winkelgeschwindigkeit ω_y . Die Ericksenzahl ER betrug in diesem Fall $1.0e-7$. Außerdem ist die effektive Viskosität in x -Richtung aufgetragen.

Winkelgeschwindigkeit ω_y , Restmoment M_y und eff. Viskosität η_x		
ω_y	M_y	η_x
0	-0.7571	0.696
-0.03	-0.3874	0.704
-0.061443	+7.e-6	0.713
-0.0615	+7.09e-4	0.713
-0.08	+0.2286	0.718
-0.1	+0.4748	0.724

Tabelle 2.2: Zur Ermittlung der Winkelgeschwindigkeit ω_y , bei welcher das Restmoment M_y verschwindet, bestimmt man die Nullstelle von $M_y = M_y(\omega_y)$. Der Anströmwinkel κ ist Null \Rightarrow Strömung in x -Richtung. Ericksenzahl konstant $ER = 1.0e-7$. Die effektive Viskosität η_x steigt mit dem Betrag der Winkelgeschwindigkeit um 4.0%. (Die effektive Viskosität η_z bleibt Null.).

Das hier beschriebene Verfahren der linearen Inter-/Extrapolation funktioniert im unteren und mittleren Bereich der untersuchten Ericksenzahlen zufriedenstellend. Bei größeren Ericksenzahlen und zunehmender Nichtlinearität stößt die Methode an Grenzen der Genauigkeit und erfordert ggf. zusätzliche empirische Suche nach dem optimalen ω_y -Wert.

Kapitel 3

Ergebnisse

Wie in der Einleitung erwähnt, gibt es zwei unterschiedliche Szenarien, unter denen das Erreichen eines stationären Zustandes mit Stokescher Reibung denkbar ist, je nachdem ob wir einen Rotationsfreiheitsgrad des den sphärischen Partikel begleitenden topologischen Defektes zulassen oder nicht. Im folgenden werden wir beim Fehlen eines Rotationsfreiheitsgrades vom *Szenario A* sprechen, beim Vorliegen desselben von *Szenario B*. In ungestörter nematischer Umgebung und ohne nennenswerte Wechselwirkung mit anderen Systemen wird man *Szenario B* erwarten dürfen, jedoch nicht z.B. in einer dünnen nematischen Zelle, welche relativ starre topologische Strukturen vorgibt. Wie der Fall des molekularen Stoßes bei Brownschen Bewegungen einzuordnen ist, wird sich ohne Experiment kaum klären lassen. Beides ist denkbar: ein träges Verhalten der Defektstruktur bei gleichzeitiger Rotation des Partikels (*Szenario A*) oder ein Einschwenken der Defektachse in ein energetisches Minimum (*Szenario B*). Werden dagegen die in der Einleitung zu [16] beschriebenen aus Wasserblasen mit Igeldefektdipolen gebildeten Ketten senkrecht oder schräg zur Defektachse angeströmt, kann man einen Rotationsfreiheitsgrad des Defektes wohl verneinen, es sei denn, die Kette richtet sich als ganzes nach der Stömungsrichtung aus. Die Ergebnisse unserer Rechnung erlauben beide Betrachtungsweisen,

Den Ergebnistabellen entnehmen wir, dass die Intervalle der Ericksenzahlen, in denen die Numerik in stabile Zustände relaxiert, unterschiedlich groß sind. Am stabilsten verhielt sich diese bei achsparalleler Anströmung des Igeldefektdipols in negativer z -Richtung. Hier konvergierte die Rechnung noch bei Ericksenzahlen $ER = 50$. Bei achsparalleler Anströmung in positiver z -Richtung, bei hierzu senkrechter Anströmung und bei Anströmwinkeln $0 < \kappa < +\frac{\pi}{2}$ reichte der Stabilitätsbereich bis zur Ericksenzahl $ER = 3$. Erwartungsgemäß war auch im Sektor negativen Anströmwinkel κ die Relaxation bei $ER = 3$ stabil. Man darf wohl davon ausgehen, dass mit zunehmendem Einschwenken der Anströmrichtung auf die negative z -Achse, $\kappa \rightarrow -\frac{\pi}{2}$, sich der stabile Bereich in Richtung $ER \rightarrow 50$ ausdehnt. Dies wurde aber nicht im Einzelnen durch Simulationen belegt.

Saturndisklinationen waren in allen Anströmrichtungen recht unproblematisch. In achsparalleler Richtung wurde ein uneingeschränkt stabiler ER -Wert von 15 erreicht, der

für fast alle denkbaren Fälle ausreicht. Bis $ER = 25$ sah man immer noch konvergente Relaxationen, allerdings bei lokalen Störungen der Felder, siehe Seiten 55, 55 und 77. Bei senkrechter Anströmung lag diese engere Grenze bei $ER = 4$, brauchbare Ergebnisse gab es noch bis $ER = 20$.

Solche Störungen zeigten sich in Grafiken von Direktorfeldern, später auch in solchen von Geschwindigkeitsfeldern, siehe Abschnitt 3.3, S.77. Es ist zu vermuten, dass die zunehmenden numerischen Auflösungserscheinungen im Prinzip die physikalische Realität abbilden, d.h. dass ab bestimmten Grenz-Ericksenzahlen die nematischen Strukturen zusammenbrechen, analog zum Phasenübergang von laminarer zu turbulenter Strömung bei isotropen Fluiden.

Abschätzung der realistisch zu erwartenden Ericksenzahlen. [13]

Um zu beurteilen, welchen Bereich an Ericksenzahlen wir anwendungsbezogen durch unsere Rechnung abdecken sollten, betrachten wir den Fall der Feldeinwirkung auf unsere Partikel durch Gravitation. Im stationären Zustand sind Schwerkraft, Auftrieb und Stokesche Reibung gegeneinander ausgeglichen:

$$F_d = 6 \pi \eta_{eff} a v_\infty = \Delta \rho g a^3 \frac{4}{3} \pi. \quad (3.1)$$

Hierin ist $\Delta \rho$ die Dichtedifferenz zwischen der Dichte des Partikels und der Dichte des nematischen Fluids (bei 5CB:= $1.02g/cm^3$): $\Delta \rho = \rho_{Kugel} - \rho_{Nem}$. g ist die Erdbeschleunigung. Aus Gl. 3.1 gewinnen wir

$$v_\infty = \Delta \rho g a^2 \frac{2}{9 \eta_{eff}}. \quad (3.2)$$

Hieraus berechnet man die Eriksenzahl als Funktion des Kugelhalbmessers und der Dichtedifferenz zu

$$ER = ER(a, \Delta \rho) = \frac{v_\infty a \eta_{eff}}{K} = \frac{2g}{9K} a^3 \Delta \rho. \quad (3.3)$$

Für Radien von kugligen Teilchen ist ein Bereich von $a = 1.0e-4..1.0e-3[cm]$ wohl eine realistische Vorgabe. Wir berechnen den Vorfaktor $\frac{2g}{9K}$ mit der Elastizitätskonstanten für 5CB in 1-Konstanten-Näherung $K = 4.7e-7$ zu $4.64e8$ und erhalten folgende Eckwerte ER :

Wasser in Nematem Emulsion:	$\Delta \rho = -0.02[\frac{g}{cm^3}]$	$a = 1.0e-4[cm]$	$ER \approx 1.0e-5$
		$a = 1.0e-3[cm]$	$ER \approx 1.0e-2$
Gold in Nematem Dispersion:	$\Delta \rho = 18.2[\frac{g}{cm^3}]$	$a = 1.0e-4[cm]$	$ER \approx 0.8e-2$
		$a = 1.0e-3[cm]$	$ER \approx 8.4$

Diese Überlegungen gelten nicht ohne weiteres für andere äußere Felder, z.B. Magnetfelder, die auf ferromagnetische Partikel wirken. Bei entsprechenden Feldstärken können hier auch wesentlich größere Eriksenzahlen auftreten.

3.1 Simulationen mit Igeldefektdipolen

Senkrechte Anströmung - Szenario A.

Bei der Betrachtung von Igeldefektdipolen fällt auf, dass bei nicht rotierender Kugel für Strömungsrichtungen, die von der z -Richtung abweichen, durch die fehlende Symmetrie der oberen und unteren Hemisphäre ein Drehmoment um die y -Achse auftreten muss, welches ohne entsprechende mechanische Fixierung keinen stationären Gleichgewichtszustand zulässt. Eine solche mechanische Fixierung ist jedoch nur als Gedankenexperiment vorstellbar. In der Realität wird das Restmoment um die y -Achse nur dann verschwinden, wenn es zuvor das sphärische Teichen auf eine gleichförmige Winkelgeschwindigkeit um diese Achse beschleunigt hat, s. Abschnitt 1.6, Gl. 1.63. Dadurch wird der gleichförmigen Anströmung eine Wirbelströmung überlagert. Dieser Fall wird immer dann eintreten, wenn die Defektachse, in unserer Darstellung die z -Achse, keinen Rotationsfreiheitsgrad um die y -Achse und damit keine Möglichkeit besitzt, sich parallel zur Strömungsrichtung auszurichten. (*Szenario B*)

Bei allen in diesem Kapitel als dimensionlose Zahlen formulierten Ergebnissen muss man beachten, dass diese auf die jeweilige Ericksenzahl bezogen sind. Niedrigere dimensionlose Werte bedeuten deshalb nicht zwingend niedrigere Absolutwerte. Um Kräfte und Momente im cgs-System zu quantifizieren, muss man die dimensionslosen Größen mit den Gleichungen 1.53, 1.54 und 1.55 umrechnen, siehe Seite 20.

Den Rechnungen und Simulationen dieser Arbeit liegen die Materialkonstanten des nematischen Fluids 5CB zugrunde.

Anströmung in x -Richtung ohne M_y -Kompensation in Abhängigkeit von ER . $\kappa = 0$, $\omega_y = 0$			
ER	M_y	$\eta_x = \eta_\beta$	η_z
1.0e-7	-0.757	0.696	0.0
0.01	-0.757	0.696	-2.2e-5
0.1	-0.756	0.696	-2.2e-4
0.5	-0.736	0.695	-6.9e-4
1.0	-0.698	0.693	+6.1e-4
2.0	-0.667	0.691	+6.11e-3
3.0	-0.602	0.687	+1.26e-2

Tabelle 3.1: Igeldefektdipol: Restmomente M_y und effektive Viskositäten η_x, η_z in Abhängigkeit der Ericksenzahl ER bei mechanisch fixierter Kugel.

Betrachten wir vorab unser Gedankenexperiment, bei dem eine gegen Drehung mechanisch fixierte Kugel in x -Richtung angeströmt wird. Die Ergebnisse der Simulationen sind in

Tabelle 3.1 dargestellt.

Eine Diskussion der Tabellenwerte ergibt folgendes Bild:

- Wir erkennen ein relativ großes, entgegen dem Uhrzeigersinn gerichtetes Moment um die y -Achse, welches entgegen der Erwartung mit steigender Ericksenzahl von $ER \cong 0$ auf $ER = 3.0$ von 0.76 auf 0.60, also um $\approx 21\%$ abnimmt.
- Die effektive Viskosität - und damit die Stokeskraft in x -Richtung - ist fast konstant bei ≈ 0.7 , d.h. sie nimmt über das gesamte Intervall nur um 1.3% ab.
- Die Stokeskraft in z -Richtung ist vernachlässigbar und liegt innerhalb der Fehlergrenzen des numerischen Verfahrens.
- Die maximal mögliche Ericksenzahl, bei welcher noch stabile Relaxationen und Direktorfelder zu erzielen sind, liegt bei $ER \approx 3$ und damit auf gleichem Niveau wie bei den drehmomentkompensierten Simulationen, siehe nachstehende Tabelle 3.2.

Nach diesen Ergebnissen war klar, dass wegen der Größenordnung von M_y brauchbare Ergebnisse nur mit M_y -Kompensation durch Rotation des sphärischen Partikels mit ω_y vorgenommen werden können. Wie die Winkelgeschwindigkeit ω_y bestimmt wird, wurde in Abschnitt 2.4 beschrieben.

Tabelle 3.2 beschreibt das *Szenario A* für senkrechte Anströmung eines Igeldefektdipols, dessen Defektachse richtungsstabil in eine nematische Umgebung eingebunden ist. Eine solche Anordnung relaxiert ebenfalls bis zur Ericksenzahl $ER \approx 3$ in stabile Direktor- und Geschwindigkeitsfelder. Jenseits dieses Wertes beobachtet man zunehmend örtliche Instabilitäten und bald auch numerisch instabile Simulationsläufe.

Anströmung in x -Richtung mit M_y -Kompensation in Abhängigkeit von ER . $\kappa = 0$, $M_y \cong 0$				
ER	ω_y	$\eta_x = \eta_\beta$	η_z	M_y
1.0e-7	-0.061443	0.713	0.0	+7.e-6
0.01	-0.06148	0.713	0.0	-7.9e-5
0.1	-0.06140	0.713	-2.3e-4	-1.22e-4
0.2	-0.06078	0.713	4.7e-4	-3.38e-3
0.5	-0.05893	0.711	4.2e-4	-9.31e-4
0.8	-0.05708	0.709	1.63e-3	+7.47e-3
1.0	-0.05580	0.708	3.24e-3	+2.77e-3
2.0	-0.05182	0.705	1.21e-2	-2.93e-4
3.0	-0.05000	0.703	1.93e-2	-3.21e-4

Tabelle 3.2: Igeldefektdipol, Anströmung in x -Richtung ($\kappa = 0$): Winkelgeschwindigkeit der Kugel ω_y und effektive Viskosität η_x bei Minimierung des Restmomentes $M_y \rightarrow 0$ in Abhängigkeit der Ericksenzahl ER .

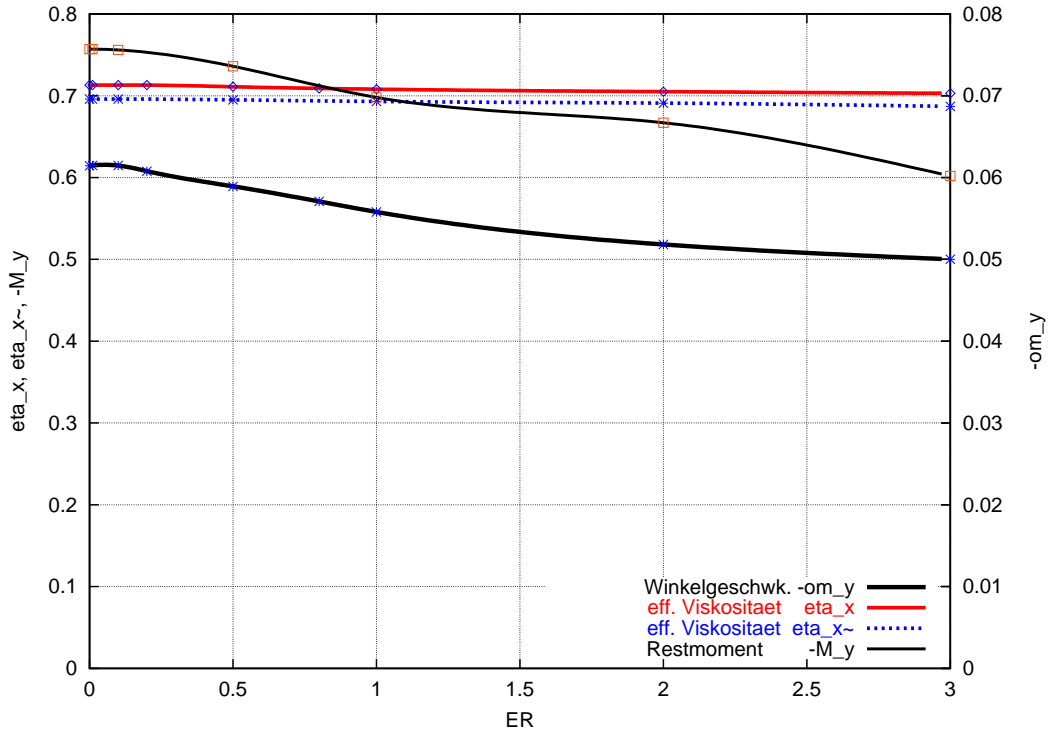


Abbildung 3.1: Igeldefektdipol: Anströmung senkrecht zur Defektachse, $\kappa = 0$ mit und ohne M_y -Kompensation, η_{x-} bedeutet fehlende M_y -Kompensation. Die kompensierte Viskosität η_x ist ebenso wie η_{x-} annähernd konstant über ER und ist zwischen 2.2% und 2.4% gegenüber dem unkompensierten Wert erhöht .

Im ER -Intervall $[0, 3.0]$ befinden sich praktisch alle Zustände von Wasser-in-Nematem Emulsionen und die Mehrzahl der Dispersionen von leichten Teilchen bis zu einer Dichte bis zu $\approx 3 \text{ g/cm}^3$, vergl. S.42.

In Abb. 3.1 sind die in den Tabellen 3.1 und 3.2 dokumentierten Ergebnisse über der Ericksenzahl aufgetragen. Die Winkelgeschwindigkeit $-\omega_y$ bezieht sich dabei auf den Fall der Drehmomentkompensation, das Drehmoment $-M_y$ beschreibt den Fall $\omega_y = 0$. An Hand der Zahlen der Tabelle 3.1 und 3.2 und der Grafik Abb. 3.1 fassen wir die wichtigen Sachverhalte zusammen:

- Zur Kompensation des Restmomentes M_y auf $\cong 0$ sind Winkelgeschwindigkeiten ω_y erforderlich, welche auf der Oberfläche des Partikels eine Tangentialgeschwindigkeit von $\approx 0.06 \dots 0.05 v_\infty$ verursacht. Mit zunehmendem ER sinkt $|\omega_y|$. Bei $ER = 3.0$ liegt $|\omega_y|$ um 23% unter dem Wert von $ER = 0$.
- Der degressive Verlauf des - unkompensierten - Restmomentes M_y über der Ericksenzahl zeigt eine auffallende Entsprechung zum degressiven Verlauf der Winkelgeschwindigkeit ω_y zur Kompensation desselben.

- Die Stokeskraft in x -Richtung (proportional zur effektiven Viskosität $\eta_x = \eta_\beta$) ist über ER fast konstant. Sie fällt entgegen der intuitiven Erwartung im Intervall $ER = [0, 3.0]$ um 1.4%. Im Unterschied dazu steigt η_β bei *achspareller Strömung in positiver z -Richtung* monoton um 6.2% an, *in negativer z -Richtung* fällt η_β um 3.7% s. S.52. Die Linie der kompensierten Stokeskraft verläuft parallel und um den Wert 0.016...0.017 erhöht zur Stokeskraft ohne Drehmomentkompensation. Der kompensationsbedingte Anstieg beträgt nur um 2.2...2.4%.
- In z -Richtung ist die Stokeskraft und damit die effektive Viskosität bis $ER = 1.0$ vernachlässigbar klein und liegt innerhalb der Grenzen des Verfahrens. Für $ER = 2.0...3.0$ ergibt sich jedoch aus η_z eine kleine Deviation $\delta = \kappa - \beta = -0.017... - 0.0275$ oder $-1.0^\circ... - 1.6^\circ$. Diese erzeugt eine kleine Drift in z -Richtung.
- Die Minimierung des Restmomentes M_y durch Interpolation/Extrapolation von ω_y , wie in Abschnitt 2.4 beschrieben, war mitunter rechenzeitaufwendig. Wir haben deshalb als vertretbare Näherung ein Restmoment von $|M_y| < 1.0e-2$ akzeptiert, s. S.39.

Die (dimensionslose) Stokeskraft ist bei senkrechter Anströmung im Bereich gültiger Ericksenzahlen nahezu unabhängig von dieser. Ein solches Ergebnis war nicht von vorneherein zu erwarten. Es bedeutet jedoch, dass bei vorgegebenem Teichenradius a und Leslie-Koeffizienten α_i die dimensionsbehaftete Stokeskraft proportional zur realen Geschwindigkeit zunimmt, s. Gl. 1.53, S.20.

Übergang zum Szenario B durch Einschwenken der Defektachse.

Betrachten wir einen Igeldefektdipol bei M_y -Kompensation und unterschiedlichen Anströmwinkel κ , erkennen wir in Tabelle 3.3, dass die freie Energie $-\mathcal{F}$ und die mechanische Arbeit der Stokeskraft \mathcal{W} bei senkrechter Anströmung $\kappa = 0$ maximal wird. Minima sehen wir bei $\kappa = +\frac{\pi}{2}$ und etwas ausgeprägter bei $\kappa = -\frac{\pi}{2}$, also bei Anströmung in negativer z -Richtung. Wie wir im Theorie-Kapitel, Abschnitt 1.8, S. 28f gesehen haben, ist das Zeitintegral der Dissipation gleich der im System gespeicherten freien Energie und - im isothermen Fall - auch gleich der mechanischen Arbeit. Lässt man dem System den Freiheitsgrad, sich auf den Zustand minimaler freier Energie einzustellen, wird es die Möglichkeit nutzen. Dabei wird das Moment M_y verschwinden. Dies tritt bei Anströmung in positiver und negativer z -Richtung ein, wobei die Energieminimierung in negativer z -Richtung ausgeprägter ausfällt, Tendenz mit zunehmender Ericksenzahl steigend. vergl. Tabelle 3.4.

Wie in Abschnitt 1.8 gezeigt, verlangt zwar die Theorie identische Ergebnisse für $-\mathcal{F}$ und \mathcal{W} , also zwischen dem Volumenintegral der Dissipation und dem Oberflächenintegral des Spannungstensors. Diese Forderung ist jedoch nur im isotropen Grenzfall und näherungsweise bei der achsparellen Anströmung erfüllt, hier für beliebige Ericksenzahlen, siehe Tabelle 3.4. Ansonsten sehen wir nicht akzeptable Diskrepanzen, deren Ursachen in Abschnitt 1.7, S. 25 hinreichend erörtert wurden. Die numerischen Werte von $-\mathcal{F}$

ergeben bei $\kappa \neq \pm \frac{\pi}{2}$ anders als \mathcal{W} keine realistischen Anisotropieverhältnisse und sind als Maßstab der freien Energie nicht brauchbar. Man darf jedoch nach den Gleichungen 1.91 und 1.93 ($-\mathcal{F} = \mathcal{W}$ ¹) schreiben. Mit $-\mathcal{F}^* = \mathcal{W}$ werden wir im folgenden die aus dem Oberflächenintegral berechnete freie Energie bezeichnen, welche mit realistischen Anisotropieverhältnissen vereinbar ist. Lediglich zum Vergleich sind in den Tabellen 3.3 und 3.4 die mit der Dissipation berechneten Werte der freien Energie $-\mathcal{F}$ mit angegeben. Als ergebnisrelevant betrachten wir nur die Werte von $-\mathcal{F}^*(= \mathcal{W})$.

Wenn wir einen Rotationsfreiheitsgrad des Defektsystems um die y -Achse unterstellen und uns erinnern, dass die freie Energie identisch ist mit dem Arbeitspotential bei isothermen Bedingungen[15, S.111], bemerken wir, dass hier ein Doppelmulden-Potential vorliegt, dessen Mittelwall bei $\kappa = 0$, d.h. bei senkrechter Anströmung liegt, während die beiden Potentialmulden die achsparallele Strömung in positiver ($\kappa = +\frac{\pi}{2}$) bzw. in negativer ($\kappa = -\frac{\pi}{2}$) z -Richtung bestimmen. Also wird die Achse des Defektsystems in eine dieser achsparallelen Richtungen einschwenken. Bevorzugt ist hierbei mit steigenden Ericksenzahlen die negative z -Richtung, weil deren Minimum ausgeprägter ausfällt. Bei allen $ER > 3.0$ gibt es sowieso nur für diese Richtung numerisch stabile Lösungen.

Aus Tabelle 3.3 errechnen wir das *Anisotropieverhältnis* $= \frac{\eta_\beta(\kappa=0)}{\eta_\beta(\kappa=\pi/2)}$ bzw. $\frac{\eta_\beta(\kappa=0)}{\eta_\beta(\kappa=-\pi/2)}$. Für $ER = 0.01$ ergibt sich ein Wert von 1.38 in beiden Richtungen. Dagegen beträgt diese Zahl für $ER = 3.0$ in positiver z -Richtung 1.29, in negativer Richtung 1.42.

In der Grafik Abb. 3.2, S.49 zeigen freie Energie $-\mathcal{F}^*$ und effektive Viskosität η_β in Richtung der resultierenden Stokes-Kraft das oben beschriebene Bild mit einem Maximum bei $\kappa = 0$ und Minima bei $+\frac{\pi}{2}$ bzw. $-\frac{\pi}{2}$. Dieses Maximum ist allerdings genau genommen bei $ER = 3.0$ minimal nach rechts verschoben, siehe unten. Die Winkelgeschwindigkeit ω_y zur Kompensation des resultierenden Momentes M_y ist überall negativ definit, hat betragsmäßig ein Maximum bei $\kappa = 0$ und Nullstellen bei $\kappa \pm \frac{\pi}{2}$. Dieses Maximum ist mit $|\omega_y| = 0.050$ bei $ER = 3.0$ niedriger als bei kleineren Ericksenzahlen ($ER = 0.01 : |\omega_y| = 0.06148$, $ER = 1.0 : |\omega_y| = 0.0558$). Die Kurven, auch die der unten beschriebenen Winkel β und δ sind sich bei allen untersuchten Ericksenzahlen ähnlich. Allerdings sind bei $ER = 3.0$ kleine Asymmetrien und Abweichungen vom Idealverlauf zu beobachten. Die Nichtlinearität des Gleichungssystems macht sich hier bemerkbar.

Verdeutlicht wird dieser Sachverhalt durch das untere Diagramm in Abb. 3.2. Für $ER = 3.0$ ist die ω_y -Kurve zwischen $\kappa = 0$ und $\kappa = +\frac{\pi}{4}$ etwas eingedrückt, die $-\mathcal{F}^*$ -Kurve erscheint gegenüber der von $ER = 0.01$ nach links gekippt. Letzteres ist plausibel durch die Differenz der beiden Minima. Man kann auf Grund der mit csplines geglätteten Kurve eine leichte Verschiebung des Maximums nach rechts vermuten. Diese Vermutung wird

¹Aus η_x und η_z wurden die Komponenten der Stokeskraft in x - und z -Richtung durch Multiplikation mit 6π (siehe Abschnitt 1.7, Gl. 1.85) gebildet und zur resultierenden Stokeskraft \mathbf{F}_d zusammengesetzt. Es gilt für das Skalarprodukt $\mathcal{W} = \mathbf{F}_d \mathbf{v}_\infty$ mit $|\mathbf{v}_\infty| = 1$: $\mathcal{W} = |\mathbf{F}_d| \cos \delta = 6\pi \eta_\beta \cos \delta$.

bestätigt, wenn man für das grafisch ermittelte Energiemaximum bei $\kappa = +0.029\pi$ die numerische Rechnung ausführt. Dabei ergibt sich eine gegenüber $\kappa = 0$ leicht erhöhte freie Energie $-\mathcal{F}^* = 13.29$, ($\kappa = 0$: $-\mathcal{F}^* = 13.25$), siehe Tabelle 3.3. Damit ist geklärt, dass im Fall $ER = 3.0$ die stabilere Anströmrichtung des Szenarios B stets die negative z -Richtung ist, weil man sich bei $\kappa = 0$ links des Maximums befindet.

Ergebnisse bei variablen Anströmwinkeln $+\frac{\pi}{2} \geq \kappa \geq -\frac{\pi}{2}$ und M_y -Kompensation Ericksenzahlen 0.01, 1.0 und 3.0. Eff. Viskositäten. Vergleich: Freie Energien s.Text									
ER	κ	ω_y	M_y	η_x	η_z	η_β	β/π	$-\mathcal{F}$	$-\mathcal{F}^*$
0.01	$+\frac{\pi}{2}$	0.0	0.0	0.0	+0.516	0.516	0.5	9.054	9.723
"	$+\frac{\pi}{3}$	-0.0310	+2.91e-3	0.357	+ 0.447	0.572	0.286	25.49	10.66
"	$+\frac{\pi}{6}$	-0.0535	+2.87.0e-3	0.618	+0.257	0.670	0.126	58.86	12.53
"	0.0	-0.06148	-7.9e-5	0.713	0.0	0.713	0.0	75.78	13.45
"	$-\frac{\pi}{6}$	-0.0534	+1.95e-3	0.618	-0.258	0.669	-0.126	59.35	12.51
"	$-\frac{\pi}{3}$	-0.0302	-6.63e-3	0.357	-0.447	0.572	-0.286	25.98	10.66
"	$-\frac{\pi}{2}$	0.0	0.0	0.0	-0.515	0.515	-0.5	9.052	9.700
1.0	$+\frac{\pi}{2}$	0.0	0.0	0.0	+0.524	0.524	0.5	9.145	9.883
"	$+\frac{\pi}{3}$	-0.0300	-4.22e-3	0.358	+ 0.453	0.578	0.287	25.67	10.78
"	$+\frac{\pi}{4}$	-0.0410	+2.89e-3	0.505	+ 0.370	0.626	0.201	42.56	11.66
"	$+\frac{\pi}{6}$	-0.04851	-3.61e-3	0.616	+0.262	0.670	0.128	59.60	12.54
"	0.0	-0.0558	+2.77e-3	0.708	2.24e-3	0.708	0.0	76.86	13.35
"	$-\frac{\pi}{6}$	-0.0490	+3.78e-3	0.611	-0.254	0.662	-0.126	59.99	12.38
"	$-\frac{\pi}{3}$	-0.02973	+9.73e-3	0.353	-0.442	0.565	-0.286	26.03	10.53
"	$-\frac{\pi}{2}$	0.0	0.0	0.0	-0.509	0.509	-0.5	8.968	9.593
3.0	$+\frac{\pi}{2}$	0.0	1.1e-3	0.0	+0.547	0.547	0.5	9.438	10.03
"	$+\frac{\pi}{3}$	-0.0248	-1.53e-2	0.359	+ 0.472	0.593	0.293	26.97	11.09
"	$+\frac{\pi}{4}$	-0.03498	-1.85e-3	0.503	+ 0.388	0.635	0.209	43.38	11.87
"	$+\frac{\pi}{6}$	-0.040467	-1.13e-3	0.612	+0.280	0.673	0.137	64.31	12.63
"	$+0.0029\pi$	-0.04835	-6.72e-3	0.702	6.65e-2	0.705	0.0301	83.98	13.29
"	0.0	-0.0500	-3.21e-4	0.703	1.93e-2	0.703	0.009	84.67	13.25
"	$-\frac{\pi}{6}$	-0.0430	-6.21e-3	0.602	-0.241	0.648	-0.121	64.29	12.09
"	$-\frac{\pi}{3}$	-0.0260	+8,66e-3	0.350	-0.439	0.561	-0.286	26.55	10.46
"	$-\frac{\pi}{2}$	0.0	0.0	0.0	-0.496	0.496	-0.5	8.820	9.355

Tabelle 3.3: Igeldefektdipol bei variablen Anströmwinkeln und Drehmomentkompensation.

Bei der Diskussion der Daten aus Tabelle 3.3 ist von einem gewissen Interesse, wie sich die Abhängigkeit der Stokeskraft bzw. der effektiven Viskosität η_β von der Ericksenzahl bei unterschiedlichen Anströmwinkeln κ entwickelt. Wir haben gesehen, dass sich die Stokeskraft bei senkrechter Anströmung über ER nahezu konstant verhält. s. Tabelle 3.2 und Abb.3.1. Im anderen Grenzfall, bei achsparalleler Anströmung ist die Abhängigkeit von der Ericksenzahl deutlich ausgeprägt, s. Tabelle 3.4 und Abb.3.4.

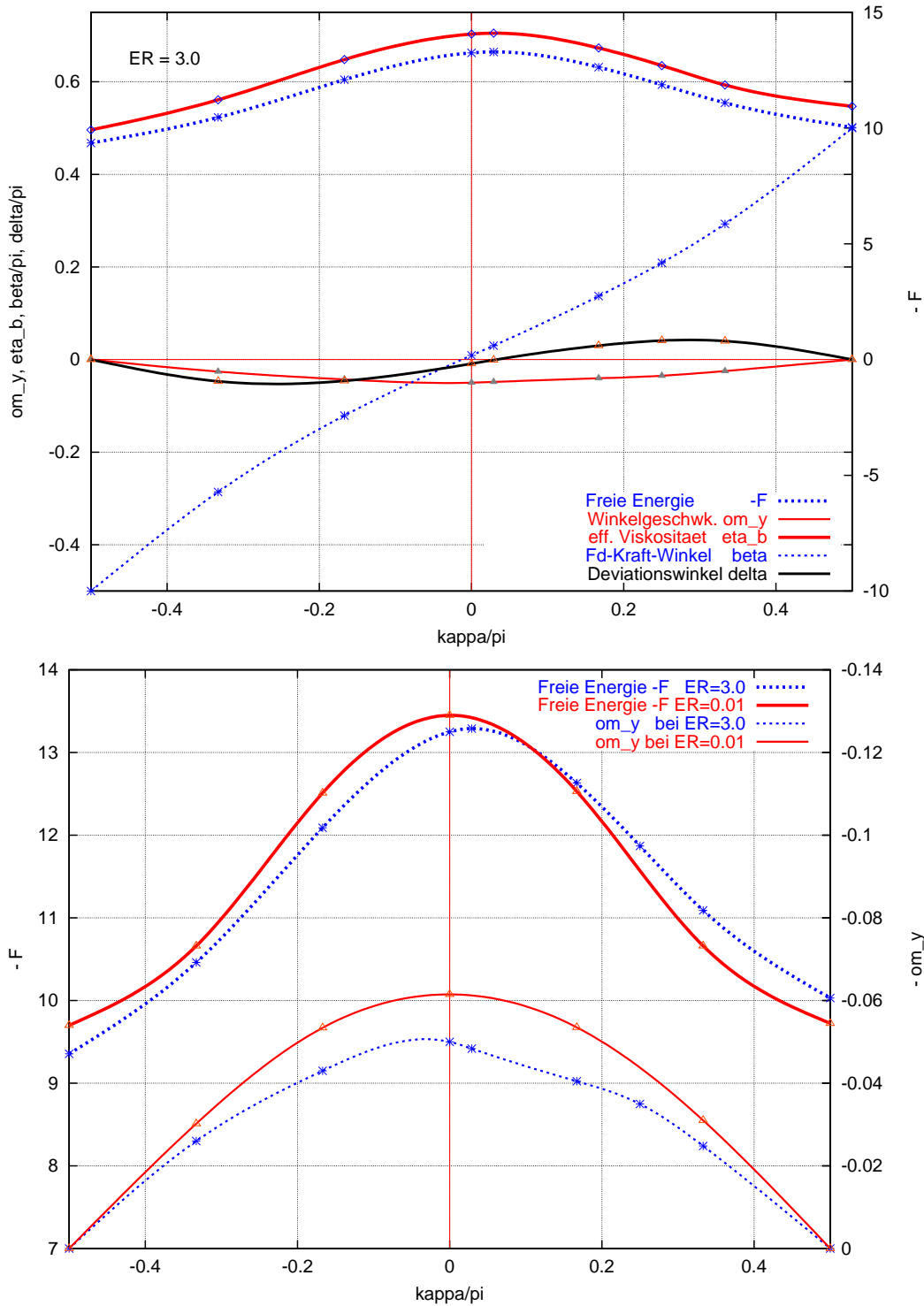


Abbildung 3.2: Igeldefektdipol: Oben: Freie Energie $-\mathcal{F}^*$ über Anströmwinkel κ bei Kompensation von $M_y \rightarrow 0$ durch Rotation mit Winkelgeschwindigkeit ω_y bei $ER = 3.0$. Die effektive Viskosität η_b bezieht sich auf die Richtung der resultierenden Stokeskraft. β bezeichnet den Winkel der resultierenden Stokeskraft zur x -Achse. Der Deviationswinkel ist als $\delta = \kappa - \beta$ definiert.

Unten: Vergleich der Freien Energien $-\mathcal{F}^*$ und der Winkelgeschwindigkeiten ω_y bei $ER = 3.0$ und $ER = 0.01$

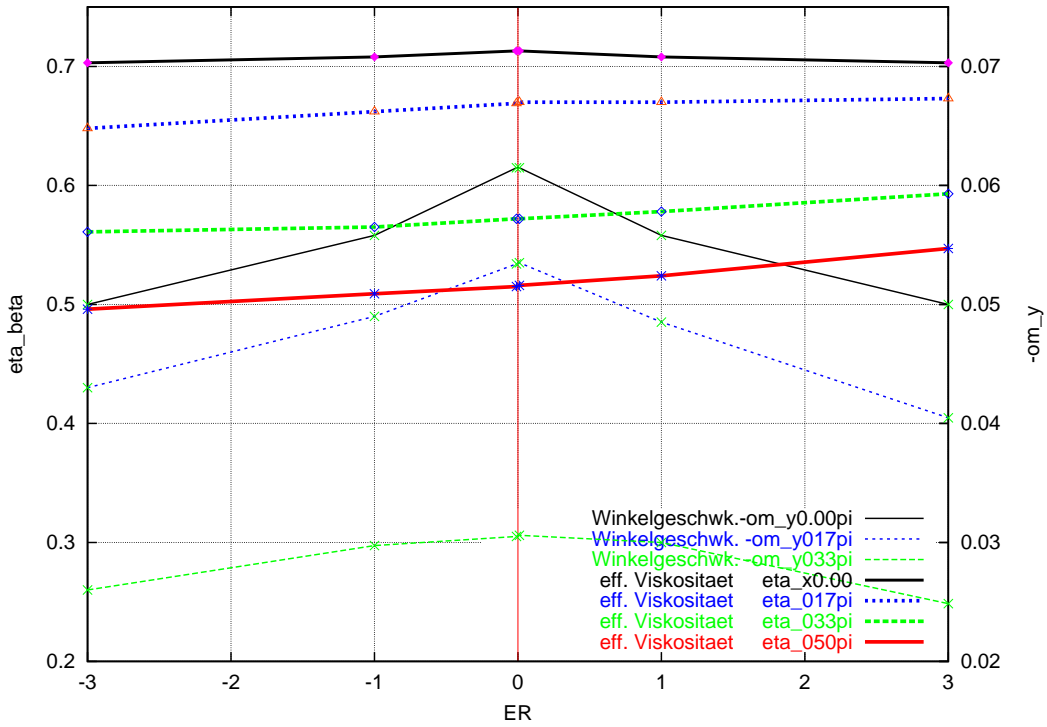


Abbildung 3.3: Igeldefektdipol: Stokeskraft und Winkelgeschwindigkeit bei variablen Anströmrichtungen unter Winkel $\kappa = 0.0, \pm\frac{\pi}{6}, \pm\frac{\pi}{3}, \pm\frac{\pi}{2}$ mit $M_y \rightarrow 0$. Negative Ericksenzahlen stehen für die negative z -Richtung, d.h. für κ mit negativem Vorzeichen, s. Abb.3.1. Erläuterungen siehe Text.

In der Abbildung 3.3 ist recht gut zu erkennen, dass die Abhängigkeit von der Ericksenzahl mit dem Anströmwinkel κ kontinuierlich zunimmt. Dabei ähnelt der Verlauf der Stokeskurve bei $\kappa = \frac{\pi}{6}$ mehr der Linie bei senkrechter Anströmung, während bei $\kappa = \frac{\pi}{3}$ die Verwandtschaft mit dem achsparallelen Fall erkennbar wird. Gleichzeitig sehen wir, dass mit abnehmendem Winkel κ die Beträge der Winkelgeschwindigkeiten zur Drehmomentkompensation stark zunehmen.

Bei variablen Anström winkeln mit $\kappa \neq 0, \pm\frac{\pi}{2}$ ist die Richtung der resultierenden Stokeskraft \mathbf{F}_d , beschrieben durch den Winkel β in Bezug auf die positive x -Achse und berechnet aus den Komponenten η_z und η_x , nicht mehr identisch mit der Anströmrichtung κ . Diese Deviation beschreibt der Winkel $\delta = \kappa - \beta$. Das Phänomen ist bekannt von der linearisierten Lösung des Stokesproblems[9] und ist begründet durch die Tensoreigenschaft von $F_i = \gamma_{ij} v_j$ [9, P.54][16, S.78]. In der dort dargestellten linearen Form lässt sich der Widerstandstensor γ_{ij} nicht mehr angeben außer als Näherung für kleine Ericksenzahlen.

Achsparallele Anströmung - Szenario B.

Wie wir zeigen konnten, sind achsparallele Anströmungen in beiden Richtungen die einzigen stabilen Zustände beim Vorliegen von *Szenario B - Freie Beweglichkeit des*

Defektsystems um die y -Achse. Sie waren Gegenstand der wissenschaftlichen Arbeit[17], die der Autor am Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart im November 2000 verfasst hat. Vergleicht man die auf der Basis der mit dem Volumenintegral durch Teilung von $-\mathcal{F}$ mit 6π berechneten effektiven Viskositäten $\tilde{\eta}_z$ (siehe Abschnitt 1.7, Gl. 1.85) mit den damals in [17, Abschnitt 3.1.1, S. 42] dokumentierten Vergleichswerten, findet man weitgehende Übereinstimmung. Dies gilt im wesentlichen auch für die Defektabstände r_d . Hier liegen die Differenzen mit Ausnahme der Werte für $ER = 2.0..3.0$ im Bereich der grafischen Ablesegenauigkeit. Mit dem dreidimensionalen Rechenverfahren lassen sich allerdings stabile Relaxationen in positiver z -Richtung nur bis $ER \approx 3$ erzielen (zweidimensional bis $ER \approx 11$). Dagegen konvergiert die Rechnung in negativer z -Richtung bis zu recht hohen Ericksenzahlen. Selbst bei $ER = 50$ war nur eine kleine örtlichen Störung im Direktorfeld sichtbar. Das Konvergenzkriterium der Iteration war schon früh bei $n = 35\ 359$ erreicht. Eine numerische Ursache der Störung wird vermutet.

Bestätigt wurde die in der zitierten Arbeit[17] gewonnene Erkenntnis, das der Defektabstand r_d mit zunehmendem Betrag der Ericksenzahl entgegen der Anströmrichtung auswandert. Das widerspricht der Intuition, lässt sich jedoch besser verstehen, wenn man bedenkt, dass eine nematische Defektstruktur keine feste Positionsordnung sondern nur eine definierte Orientierungsordnung kennt. Ein einzelnes Molekül muss sich an jedem Ort im Drehmomentengleichgewicht befinden. Wie dieses Drehmomentenfeld Γ strukturiert ist, kann intuitiv nicht vorhergesagt werden.

Achsparallele Anströmung über ER - Vergleich zur 2D-Rechnung								
$\kappa \pm \frac{\pi}{2}$ $\omega_y = 0$; $M_y = 0$; $\eta_x = 0$								
ER	κ	$\eta_z = \eta_\beta$	r_d	$-\mathcal{F}$	$-\mathcal{F}^*$	$\tilde{\eta}_\beta$	$\eta[17]$	$r_d[17]$
3.0	$+\frac{\pi}{2}$	0.547	1.50	9.445	10.31	0.501	0.500	1.57
2.0	$+\frac{\pi}{2}$	0.534	1.32	9.256	10.07	0.491	0.491	1.37
1.0	$+\frac{\pi}{2}$	0.524	1.28	9.145	9.882	0.485	0.485	1.28
0.01	$+\frac{\pi}{2}$	0.516	1.26	9.0536	9.723	0.480	0.480	1.26
-0.01	$-\frac{\pi}{2}$	-0.515	1.26	9.0518	9.700	0.480	0.480	1.26
-3.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.496	1.22	8.820	9.355	0.468	-	-
-5.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.486	1.20	8.692	9.153	0.461	0.461	1.21
-10.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.465	1.17	8.439	8.763	0.448	0.448	1.18
-15.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.450	1.15	8.250	8.476	0.438	0.438	1.16
-20.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.438	1.14	8.101	8.254	0.430	0.430	1.15
-30.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.421	1.13	7.883	7.938	0.418	0.418	1.14
-50.0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.402	1.10	7.620	7.574	0.404	-	-

Tabelle 3.4: Igeldefektdipol: Achsparallele Anströmung in z -Richtung. Negative Ericksenzahlen stehen für die negative z -Richtung. $\tilde{\eta}_\beta$ ist die aus $-\mathcal{F}$ errechnete eff. Viskosität. Die letzten zwei Spalten enthalten Vergleichswerte der 2D-Rechnung.

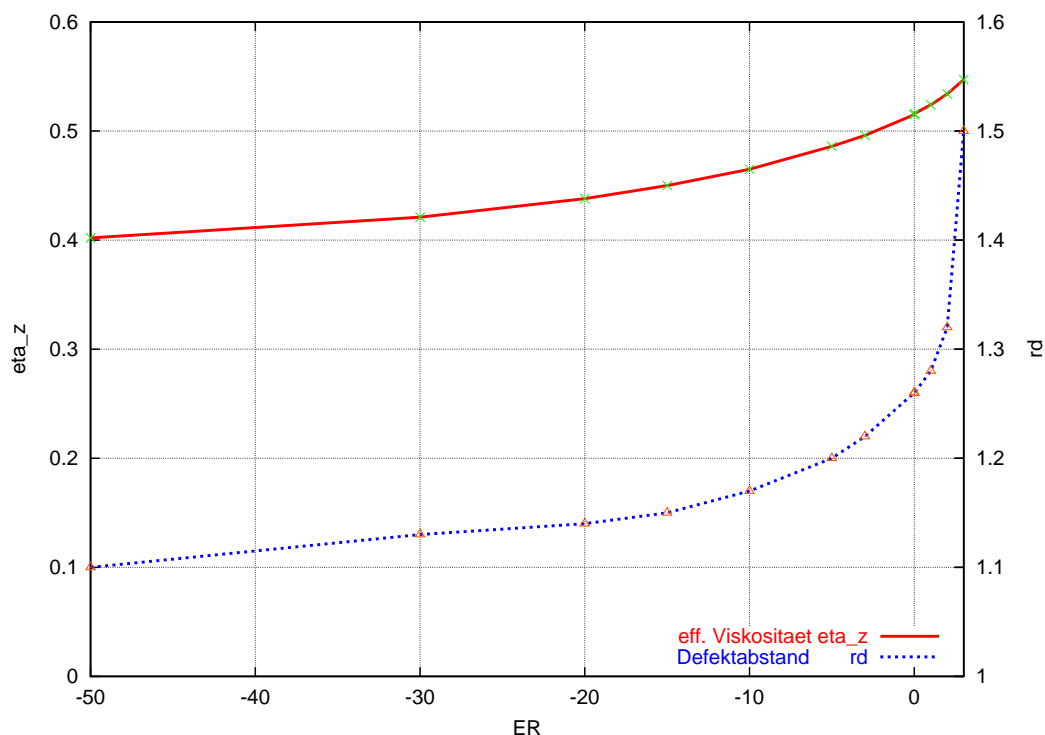


Abbildung 3.4: Igeldefektdipol: Achsparallele Anströmung in z -Richtung. Effektive Viskosität $\eta_z = \eta_\beta$ und Defektabstand r_d über ER . Negative Ericksenzahlen stehen für die negative z -Richtung. Der Defektabstand wurde maßstäblich aus Vektorbildern der Direktorfelder in der x - z -Ebene abgegriffen.

Die freie Energie $-\mathcal{F}^*$ ist mit dem Faktor 6π proportional zur effektiven Viskosität $\eta_z = \eta_\beta$ und nimmt mit dieser entsprechend der Abb.3.4 monoton mit fallender Ericksenzahl ab. Die im negativen Ast mit der Ericksenzahl leicht degressive (dimensionslose) Stokeskraft wird jedoch in aller Regel von einem Anstieg der dimensionsbehafteten Stokeskraft begleitet, da die Ericksenzahl linear von der realen Randgeschwindigkeit abhängt und deren Einfluß bei konstantem Teilchenradius und Viskositätsparametern bei weitem überwiegt, wenn man die Umrechnung mit der Gleichung 1.53 auf Seite 20 vornimmt.

Szenario A, Spezialisierung: Plattenparallele Bewegung in nematischer Zelle.

Im folgenden sollen die Ergebnisse jener Simulationen vorgestellt werden, die im Abschnitt 2.2.1 als *Programm-Modifikation Nematische Zelle* beschrieben wurden. Untersucht wird das einfache Modell einer nematischen Zelle mit Plattenabstand $12a$ und homöotroper Verankerung der Moleküle auf den Plattenoberflächen. Die Ausdehnung der Zelle in x - und y -Richtung wird als unbegrenzt angenommen. Das sphärische Teilchen bewege sich gleichförmig unter dem Einfluss einer Feldkraft (z.B. Gravitation, homogenes elektrisches Feld) auf der x -Achse parallel zu den Platten. Wir wollen untersuchen, ob die Ergebnisse unserer Simulationen im unbegrenzten Gebiet in ähnlicher Weise auch für eine

in z -Richtung auf $\approx 10 \mu\text{m}$ [8, S. 67] begrenzte nematische Zelle zutreffen. Das ergibt beim vorgewählte Plattenabstand mit dem Teilchendurchmesser $2a = 1.67 \mu\text{m}$ einen realistischen Wert. Der gleichförmigen Bewegung des Partikels in der ruhenden Zelle ist die gleichförmige Anströmung der ruhenden Kugel durch ein homogenes Geschwindigkeitsfeld äquivalent. Dabei ist für die zu wählenden Randbedingungen wichtig, dass eine Reibung zwischen den begrenzenden Platten und dem Fluid nicht existiert, weil Platten und Fluid sich mit derselben Relativgeschwindigkeit bezogen auf die Kugel bewegen.

Die Ergebnisse einer Simulationsreihe für den Bereich $ER = 0 \dots ER = 1.0$ bei Drehmomentkompensation auf $M_y \rightarrow 0$ sind in Tabelle 3.5 und in Abbildung 3.4 dokumentiert. Wir vergleichen die tabellarischen und grafischen Daten mit den Ergebnissen in unbegrenzter Umgebung, siehe Tabelle 3.2 und Abbildung 3.1 und kommen zu folgenden Feststellungen:

- Der Betrag der Winkelgeschwindigkeit $|\omega_y|$ zur Kompensation von M_y liegt um 9.2% bei $ER \rightarrow 0$ bis zu 10.4% bei $ER \rightarrow 1.00$ über dem bei freier Anströmung.
- Effektiven Viskosität $\eta_x = \eta_\beta$ und mit ihr die Stokeskraft sind ebenso annähernd konstant wie bei freier Anströmung, allerdings auf einem um $\approx 25\%$ höherem Niveau. Die Abnahme im Intervall $ER [0, 1.0]$ betrug nur 0.92%.
- Die Stokeskraft in z -Richtung war auch hier vernachlässigbar, d.h. im Rahmen der Ungenauigkeiten des numerischen Verfahrens.

Nematische Zelle, Bewegung zu den Platten mit M_y -Kompensation in Abhängigkeit von ER . $\kappa = 0$, $M_y \cong 0$				
ER	ω_y	$\eta_x = \eta_\beta$	η_z	M_y
1.0e-7	-0.0671	0.8939	0.0	+8.35e-4
0.01	-0.0670	0.8939	5.0e-6	-3.83e-4
0.1	-0.0668	0.8937	2.4e-5	-2.0e-6
0.2	-0.06581	0.8929	5.3e-5	-5.40e-3
0.5	-0.0605	0.8889	2.51e-3	2.57e-2
0.8	-0.05985	0.8871	7.26e-3	1.81e-3
1.0	-0.05787	0.8857	1.19e-2	3.28e-3

Tabelle 3.5: Igeldefektdipol in nematische Zelle, Plattenabstand $12a$, Feldkraft in x -Richtung: Winkelgeschwindigkeit ω_y , eff. Viskositäten $\eta_x = \eta_\beta$ und η_z über ER bei Minimierung des Restmomentes $M_y \rightarrow 0$.

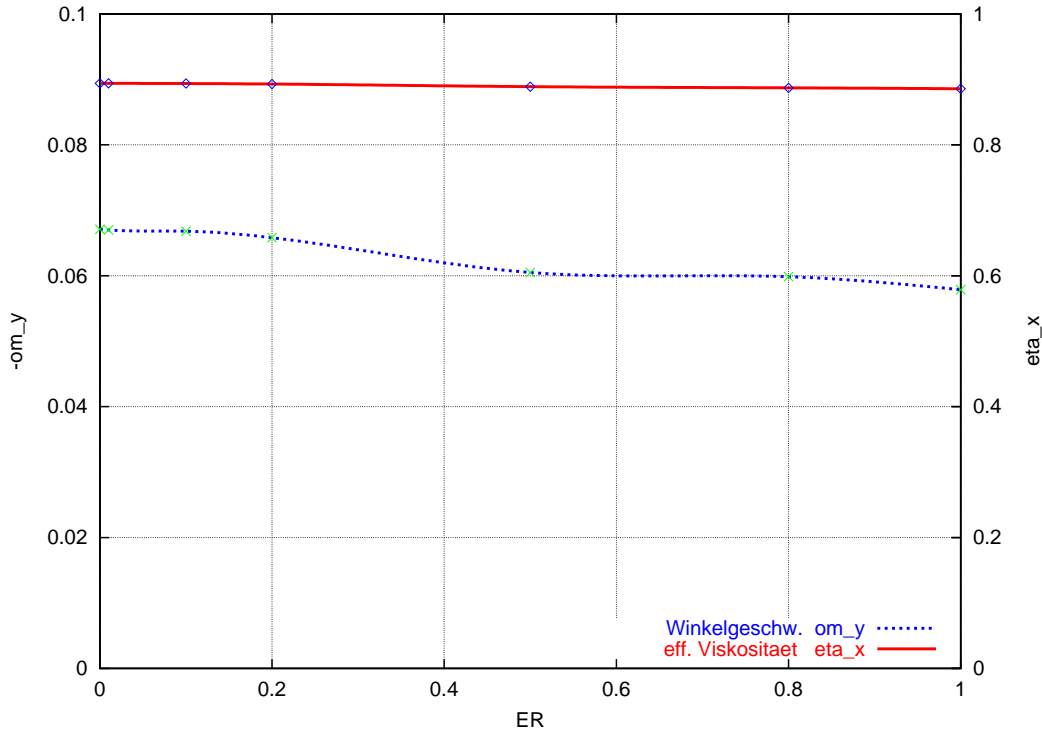


Abbildung 3.5: Igeldefektdipol in nematischer Zelle, Plattenabstand $12a$, Feldkraft in x -Richtung, Defektachse in z -Richtung, $\kappa = 0$: Winkelgeschwindigkeit ω_y , eff. Viskosität $\eta_x = \eta_\beta$ über Ericksenzahl ER

Insgesamt lässt sich feststellen, dass es zwischen freier Anströmung in x -Richtung und plattenparalleler Bewegung in einer nematischen Zelle keine fundamentalen Unterschiede gibt, wenn man davon absieht, dass im letzteren Fall effektive Viskosität und Stokeskraft 25 % höher liegen.

3.2 Simulationen mit Saturndisklinationen

Neben dem Igeldefektdipol haben wir die Saturndisklination als weitere stabile Defektstruktur zu untersuchen. Die Saturndisklination ist ein konzentrischen Liniendefekt in der Äquatorialebene des sphärischen Partikels mit einem topologisch stabilen Radius (= Defektabstand r_d) von $1.1a$, [5, P.12]. Gegenüber dem Igeldefektdipol vereinfacht sich das Problem, weil diese Defektstruktur als weitere Symmetrie-Ebene die x - y -Ebene aufweist. Daraus folgt, dass bei Anströmung in x -Richtung kein Moment M_y auftritt, welches durch Rotation um die y -Achse kompensiert werden muss. Bei achsparalleler Anströmung $\kappa = \pm\frac{\pi}{2}$ und größeren Ericksenzahlen geht diese x - y -Symmetrie der Defektstruktur zwar verloren. Dennoch tritt wie beim Igeldefektdipol wegen der Rotationssymmetrie um die z -Achse kein Moment M_y auf.

Bei Anström winkeln $\kappa \neq 0, \pm \frac{\pi}{2}$ können wegen fehlender Symmetrie Restmomente auftreten, die durch eine Rotation des Partikels um die y -Achse zu kompensieren sind. Es wird sich zeigen, dass diese Restmomente bei kleinen Ericksenzahlen innerhalb der Fehlergrenzen der Numerik liegen und deshalb vernachlässigt werden dürfen. Mit steigenden Ericksenzahlen trifft dies nicht mehr zu. Bei $ER = 3.0$ sind die zur Kompensation notwendigen Winkelgeschwindigkeiten ω_y dem Betrag nach etwa um den Faktor 0.3 kleiner als beim Igeldefektdipol, jedoch im Unterschied zu diesem dreht ω_y in positiver Richtung.

Ob im Falle des *Szenario B* die Anströmung in x - oder in z -Richtung die energetisch stabile Lage ist, wird durch den Verlauf des durch die freien Energie gebildeten Arbeitspotentials bestimmt. Beim *Szenario A*, d.h. ohne einen Rotationsfreiheitsgrad des Defektsystems um die y -Achse spielt dieses Kriterium keine Rolle. Jeder Wert von κ zwischen $-\frac{\pi}{2}$ und $+\frac{\pi}{2}$ lässt bei Kompensation mit dem entsprechenden ω_y eine stabile Konfiguration zu.

Anströmung in x -Richtung in Abhängigkeit von ER .		$M_y, \eta_z \rightarrow 0$ $\kappa = 0, \quad \omega_y = 0$	
ER	$\eta_x = \eta_\beta$	η_z	M_y
1.0e-7	0.754	0.0	+2.54e-2
1.0	0.754	5.3e-5	+2.55e-2
2.0	0.754	1.6e-4	+2.48e-2
3.0	0.753	2.4e-4	+2.50e-2
4.0	0.753	3.1e-4	+2.57e-2
5.0★	0.755	1.52e-3	-5.84e-3
10.0★	0.751	1.50e-3	+3.64e-2
15.0★	0.747	2.97e-2	+9.06e-2
20.0★	0.726	-1.75e-4	+3.64e-2

Tabelle 3.6: Saturndiskination - Senkrechte Anströmung, eff. Viskositäten $\eta_x = \eta_\beta = \eta_z$ und Restmoment M_y über ER . Mit ★ markierte Simulationen zeigen im Direktorfeld zunehmend lokale Störungen.

Die Tabellen 3.6 und 3.7 zeigen die Ergebnisse der Simulationen in Fällen achssymmetrischer Anströmung in x - und in z -Richtung, wobei die z -Achse auch die Defektachse der Saturndiskination ist. Anschaulich gegenübergestellt sind beide Fälle in Abbildung 3.6. Die Winkelgeschwindigkeit ω_y ist stets Null, weil kein Drehmoment kompensiert werden muss. Wegen der x - y -Symmetrie sind Anströmungen in positiver und negativer z -Richtung ununterscheidbar, also bezüglich der numerischen Ergebnisse äquivalent.

Achsparallele Anströmung: $M_y, \eta_x \rightarrow 0$ in Abhängigkeit von ER $\kappa = \frac{\pi}{2}, \omega_y = 0$				
ER	$\eta_z = \eta_\beta$	η_x	M_y	$-\mathcal{F}^*$
1.0e-7	0.411	0.0	0.0	7.751
1.0	0.411	0.0	0.0	7.751
2.0	0.411	0.0	0.0	7.751
3.0*	0.483	6.2e-3	+0.259	9.097
3.01	0.412	3.2e-5	+5.4e-4	7.764
4.0	0.414	-0.0	-3.2e-3	7.798
5.0	0.414	0.0	-2.0e-6	7.794
15.0	0.437	3.6e-5	-5.73e-4	8.245
20.0*	0.474	1.3e-5	-5.25e-4	8.935
25.0*	0.538	9.0e-4	1.79e-2	10.13

Tabelle 3.7: Saturndisklination - achsparallele Anströmung $\eta_z = \eta_\beta, -\mathcal{F}^*$ über ER . Mit \star markierte Simulationen zeigen zunehmend lokale Feldstörungen. Der mit \star gekennzeichnete ER -Wert 3.0 relaxiert anders als der Nachbarwert 3.01 wegen ungünstiger Gitterkonstellation unvollständig, s. Text.

Im Diagramm Abb. 3.6 werden die charakteristischen Daten der senkrechten und achsparallelen Anströmung, die effektiven Viskositäten η_x und η_z über der Abszisse der Ericksenzahlen aufgetragen und verglichen. Wie aus den Zeilenmarkierungen (\star) der beiden Tabellen ersichtlich ist, sind störungsfreie Relaxationen in glatte Direktor- und Geschwindigkeitsfelder bei senkrechter Anströmung bis $ER = 4$, bei achsparalleler Anströmung bis $ER = 15$ möglich. Zwar konvergiert die Numerik jenseits dieser Grenzwerte noch immer gegen brauchbare Grenzwerte $\eta_x, \eta_z = \eta_\beta$. Jedoch treten zunehmend - zuerst nur im Direktorfeld, dann auch im Geschwindigkeitsfeld - örtlich kleine Bereiche mit chaotischer Vektorenanordnung auf, die ungefähr ab $ER > 20$ (senkrecht) und $ER > 25$ (achsparallel) in den Zusammenbruch der Orientierungsordnung mit instabilen Iterationen übergehen. Ein Indikator für zunehmende Störungen ist das Auftreten kleinerer Restmomente M_y , die es eigentlich aus Symmetriegründen nicht geben dürfte.

Vom Übergangsbereich sind singuläre numerische Instabilitäten zu unterscheiden. Solche können auftreten, wenn in irgend einer Phase der Iterationsfolgen die Konstellation der Rechenwerte zum Gitter so ungünstig ist, dass einzelne finite Differenzen grob ungenau werden. Ändert man die Ericksenzahl (oder den Wert von ω_y) nur minimal im Promillebereich, erhält man in unmittelbarer Nachbarschaft stabile Relaxationen mit konsistenten Ergebnissen. Ein solcher Fall ist in Tabelle 3.6 mit ein \star gekennzeichnet, siehe Abschnitt 3.3, S. 77.

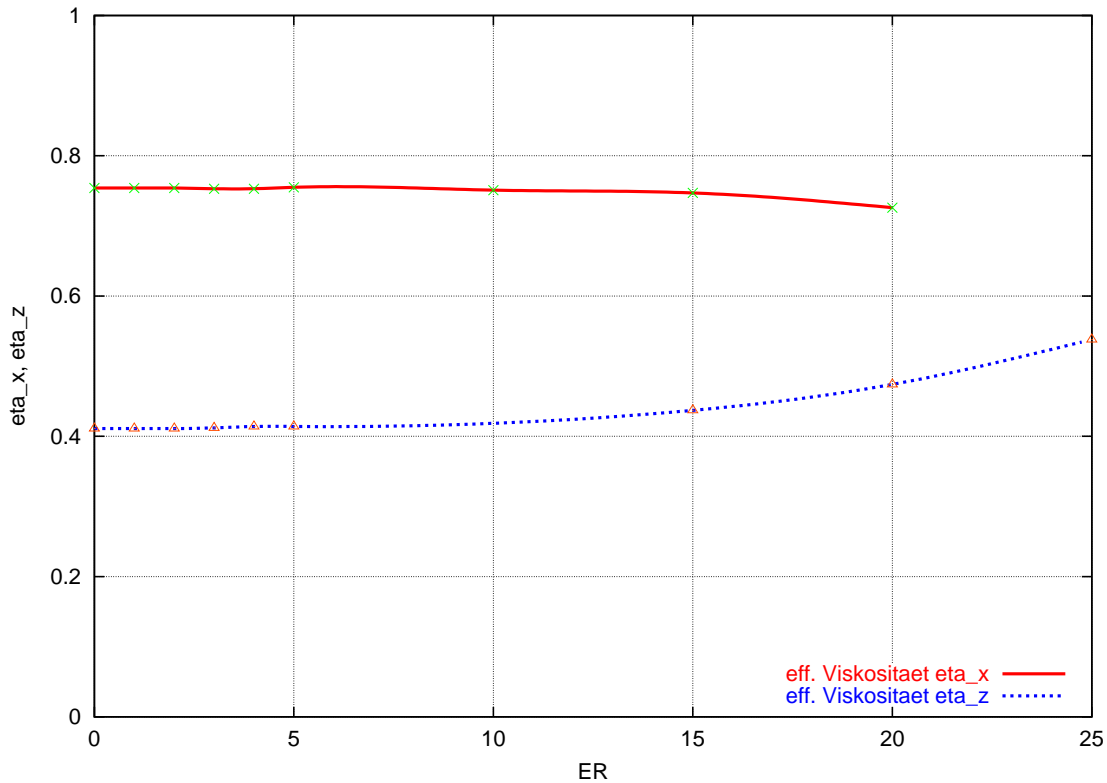


Abbildung 3.6: Saturndiskkination: Effektive Viskositäten η_x , η_z bei Anströmung in Richtung der Hauptachsen x und z . Das Restmoment M_y ist auch bei senkrechter Anströmung aus Symmetriegründen Null.

Bei der Diskussion der in den Tabellen 3.6 und 3.7 in Verbindung mit Abbildung 3.6 dokumentierten Ergebnisse ist folgendes zu bemerken:

- Verglichen mit den Verhältnissen beim Igeldefektdipol ist das störungsfreie Intervall bei senkrechter Anströmung $ER = [0, 4.0]$ um ungefähr ein Drittel größer. Bei achsparalleler Strömung ist dieses Intervall $ER = [0, 15.0]$ zwar kleiner als beim Igeldefektdipol in negativer z -Richtung, aber hinreichend groß. In beiden Fällen werden mit unserer Rechnung nahezu alle denkbaren Anwendungen abgedeckt.
- Der Funktionsverlauf der Stokeskräfte ähnelt denen des Igeldefektdipols. Bei senkrechter Anströmung ist die effektive Viskosität η_x bis $ER = 5.0$ nahezu konstant, wenn auch leicht degressiv und fällt dann mit steigender Ericksenzahl etwas deutlicher ab, bei $ER = 20.0$ um 3.7%. Die effektive Viskosität in z -Richtung ist bis $ER = 4.0$ ebenfalls nahezu konstant mit leicht steigender Tendenz, wächst dann monoton mit steigender Ericksenzahl, bis $ER = 15.0$ um 6.1% und weiter bei $ER = 25.0$ um 30.9%. Der Anstieg ist weniger ausgeprägt als beim Igeldefektdipol..
- Das Anisotropieverhältnis $\frac{\eta_x}{\eta_z}$ beträgt bei Ericksenzahlen $ER = 0 \dots 4.0$ ziemlich konstant 1.83..1.84, um bei $ER = 15$ auf 1.71 zurückzugehen. Das Niveau liegt deutlich höher als beim Igeldefektdipol ($\frac{\eta_x}{\eta_z} = 1.38 \dots 1.29$).

- Die Differenz der freien Energie bei achsparalleler und senkrechter Strömung entspricht dem Anisotropieverhältnis. Im Vergleich zum Igeldefektdipol ist bei der Saturndisklination die gebundene freie Energie bei $ER = 3.0$ und senkrechter Anströmung um 7.1% höher, dagegen bei positiv achsparalleler Strömung um 22.6% und bei negativer Igeldefektströmung um 16.8% niedriger.

Übergang zum Szenario B durch Einschwenken der Defektachse in z -Richtung.

Wie beim Igeldefektdipol wird sich die Defektstruktur der Saturndisklination beim Vorhandensein eines Rotationsfreiheitsgrades um die y -Achse (Szenario B) mit ihrer Defektachse so ausrichten, dass ein Minimum an freier Energie $-\mathcal{F}^*$ gebunden ist. In Tabelle 3.8, deren Inhalt in Abbildung 3.7 veranschaulicht wird, sind die unter dem Winkel β in Richtung der Stokeskraft wirkende effektive Viskosität und die gebundene freie Energie bei verschiedenen Anströmwinkeln κ für kleine und große Ericksenzahlen ($ER = 3.0$) dargestellt. ω_y hat aus Symmetriegründen anders als beim Igeldefektdipol außer bei $\kappa \pm \frac{\pi}{2}$ eine dritte Nullstelle bei $\kappa = 0$. Allerdings liegt bei $\kappa = 0$ auch der Maximalwert von $-\mathcal{F}^*$. Bei vorhandenem Rotationsfreiheitsgrad bildet der Verlauf der \mathcal{F}^* -Funktion über κ wie beim Igeldefektdipol ein Doppelmuldenpotential, dessen Mulden im Unterschied zu jenem gleich tief sind. Bei $\kappa = 0$ befindet sich der Mittelwall. Das Defektsystem wird aus einem solchen labilen Zustand ausbrechen und in die achsparallele Lage $\kappa \pm \frac{\pi}{2}$ auf eines der Minima einschwenken, wobei anders als beim Igeldefektdipol die positive und negative z -Richtung äquivalent sind.

Bei Anströmwinkeln $\kappa \neq 0, \pm \frac{\pi}{2}$ ist die Symmetrie zur x - y -Ebene gebrochen. Bei größeren Ericksenzahlen ist deshalb zur Kompensation von Restmomenten auf Null eine kleine, im Gegensatz zum Igeldefektdipol positiv gerichtete Winkelgeschwindigkeit ω_y notwendig, deren Verlauf über κ der Grafik 3.7 zu entnehmen ist.

Eine Veränderung von Position und Defektabstand des Liniendefektes, vergleichbar mit Verlagerungen des hyperbolischen Defektes des Igeldefektdipols, konnte bei der Saturndisklination weder bei achsparalleler noch bei senkrechter Anströmung nachgewiesen werden. Allerdings gab es bei größeren Ericksenzahlen erhebliche Verzerrungen des Direktorfeldes, welche in den Abbildungen der Vektorfelder und Bahnlinien im Abschnitt 3.3 zu besichtigen sind.

Saturndisklination: Ergebnisse bei variablen Anströmwindeln $+\frac{\pi}{2} \geq \kappa \geq 0.0$ M_y -Kompensation wo erforderlich - Ericksenzahlen 1.0e-7 und 3.0.								
ER	κ	ω_y	$M_y d$	η_x	η_z	η_β	β/π	$-\mathcal{F}^*$
1.0e-7	$\frac{\pi}{2}$	0.0	0.0	0.0	+0.411	0.411	0.5	7.749
"	$\frac{3\pi}{8}$	0.0	+9.65e-3	0.289	+0.380	0.477	0.293	8.693
"	$+\frac{\pi}{4}$	0.0	+1.78e-2	0.534	+0.291	0.608	0.159	11.00
"	$+\frac{\pi}{8}$	0.0	+2.33e-2	0.697	+0.157	0.714	0.071	13.26
"	0.0	0.0	+2.52e-2	0.754	0.0	0.754	0.0	14.21
3.0	* $\frac{\pi}{2}$	0.0	5.4e-4	3.2e-5	+0.412	+0.412	0.5	7.766
"	$\frac{3\pi}{8}$	+0.00974	+6.13e-4	0.289	+0.382	0.478	0.294	8.721
"	$+\frac{\pi}{4}$	+0.01175	-4.42e-3	0.533	+0.293	0.608	0.160	11.01
"	$+\frac{\pi}{8}$	+0.009889	-1.90e-3	0.697	+0.161	0.715	0.072	13.29
3.0	0.0	0.0	+2.48e-2	0.753	-2.4e-4	0.753	0.0	14.19

Tabelle 3.8: Saturndisklination: Effektive Viskositäten, Kraftangriffswinkel β und freie Energie bei variablen Anströmwindeln: Die achsparallele Anströmung $\kappa = \frac{\pi}{2}$ ist energetisch am günstigsten. Die mit * gekennzeichnete Position ist aus numerischen Gründen mit $ER = 3.01$ gerechnet worden, s. S.56.

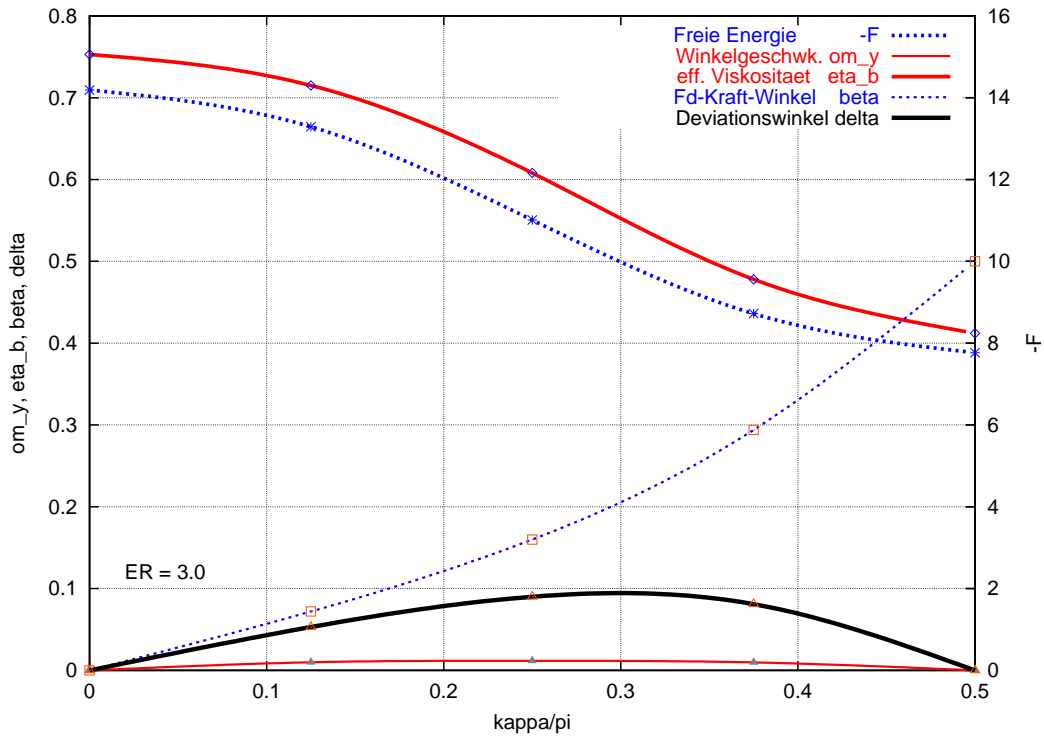


Abbildung 3.7: Saturndisklination: Freie Energie $-\mathcal{F}^*$ bei variablem Anströmwindel κ und Kompensation von $M_y \rightarrow 0$ durch Rotation des sphärischen Teilchens mit Winkelgeschwindigkeit ω_y . - Ericksenzahl 3.0 - Die effektive Viskosität η_β bezieht sich auf die Richtung der resultierenden Stokeskraft. β bezeichnet den Winkel der resultierenden Stokeskraft zur x -Achse. Der Deviationswinkel ist als $\delta = \kappa - \beta$ definiert.

3.3 Direktor- und Geschwindigkeitsfelder

Vektorfelder lassen sich als Richtungsfelder der an den durch Ortsvektoren definierten Raumpunkten angehefteten Vektorpfeilen darstellen oder man bedient sich hierzu der Bahnlinien (Trajektorien), auf welchen sich materielle Punkte unter dem Einfluss des Vektorfeldes im untersuchten Gebiet bewegen [17, S.46]. Unser Gegenstand sind dreidimensionale Direktor- und Geschwindigkeitsfelder. Wir können aber nur zwei Dimensionen maßstäblich darstellen und beschränken uns deshalb auf die x - z -Ebene. Diese liefert als einzige verbliebene Symmetrieebene Bilder mit der größtmöglichen Information.

Bahnlinien sind durch ein gewöhnliches System von Differentialgleichungen 1. Ordnung [10] definiert. In vorliegendem Fall lauten diese

$$\frac{d\mathbf{r}(x(\rho, \theta, \phi), z(\rho, \theta, \phi))}{dt} = \mathbf{v}(x(\rho, \theta, \phi), z(\rho, \theta, \phi)) \quad (3.4)$$

$$\frac{d\mathbf{r}(x(\rho, \theta, \phi), z(\rho, \theta, \phi))}{dt} = \mathbf{n}(x(\rho, \theta, \phi), z(\rho, \theta, \phi)) \quad (3.5)$$

Solche Gleichungssysteme lassen sich numerisch lösen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde hierzu ein C-Programm geschrieben, welches von der Struktur eines schon früher von H. Stark erstellten FORTRAN-Programms ausgeht und diese der vorliegenden erweiterten Aufgabe (Wegfall der y - z -Symmetrieebene) anpasst. Es sei darauf hingewiesen, dass unter stationären Bedingungen Bahnlinien mit Stromlinien $\frac{d\mathbf{r}}{ds} = \mathbf{v}(\mathbf{r})$ identisch sind (s = Bogenlänge).

Beide Darstellungsweisen haben Vor- und Nachteile, ergänzen sich aber gegenseitig. Deshalb findet man auf den folgenden Seiten eine Auswahl charakteristischer Beispiele von Direktor- und Geschwindigkeitsfeldern so angeordnet, dass für einen durch Anströmwinkel κ und Ericksenzahl ER definierten Fall Direktor- und Geschwindigkeitsfeld in Vektor- und Bahnlinien-Darstellung auf einer Seite vereint sind. Aus der Länge der Geschwindigkeitspfeile kann man den dimensionslosen Betrag der örtlichen Geschwindigkeit abgreifen (Maßstab ist in den Untertiteln angegeben.) Die Richtung der Pfeilspitzen ist zwar nicht eingezeichnet, jedoch erschließt sich uns diese eindeutig durch den eingezeichneten Pfeil der Anströmrichtung \mathbf{v}_∞ . Bahnlinien erlauben zwar keine Rückschlüsse auf die örtlichen Geschwindigkeitsbeträge, ihre Tangenten geben lediglich die Richtung an. Sie liefern so eine anschauliche Ergänzung des Feldstrukturbildes.

Auf den Bahnliniendiagrammen ist neben der Anströmrichtung \mathbf{v}_∞ auch die resultierende Stokeskraft \mathbf{F}_d ($= 6\pi\eta\beta$) ggf. mit ihrem Winkel β zur x -Achse eingezeichnet. Ferner ist der Drehsinn der Rotation mit der Winkelgeschwindigkeit ω_y zur Kompensation des Restmomentes M_y angegeben. Die dadurch bedingte Wirbelströmung in Kugelnähe lässt sich nicht direkt durch Bahnlinien darstellen. In der Verformung der benachbarten Trajektorien erkennt man jedoch den Einfluss dieses Wirbels. Schließlich wurde auf den Bahnliniendiagrammen die Lage der Defekte durch schwarze Punkte markiert.

Igeldefektdipol: Direktor- und Geschwindigkeitsfelder

Auf den folgenden Abbildungen 3.83.16 sind einige typische Direktor- und Geschwindigkeitsfelder von sphärischen Teilchen mit Igeldefektdipolen und deren Bahnlinien dargestellt.

Abb. 3.8 und 3.9 zeigen solche Konfigurationen bei Anströmung senkrecht zur Defektachse für die kleinste und die größte numerisch stabile Ericksenzahl $ER = 3.0$. Bei kleiner Ericksenzahl ($ER \leq 0.01$) ist trotz der überlagerten Wirbelströmung ω_y die Aufhebung der x - y -Symmetrie in allen vier Darstellungen nicht so recht erkennbar. Lediglich die Auswirkung der Wirbelströmung sieht man, weil Bahnlinien aus der oberen Bildhälfte unter die rotierende Kugel gezogen werden. Dagegen wird die asymmetrische Verzerrung des Direktorfeldes mit einer Verformung der Bahnlinien in Anströmrichtung in Abb. 3.9 deutlich erkennbar. Auch im Geschwindigkeitbild ist der Symmetriebruch zur x - y -Ebene zu sehen. An Hand der Vektormarkierungen des Richtungsfeldes in Defektnähe kann man eine kleine aber signifikante Auslenkung des hyperbolischen Punktdefektes nach links - entgegen des Anströmrichtung - ausmachen. Aus dem (vergrößerten) Richtungsfeld lassen sich die Defektkoordinaten für $ER = 3.0$ - mit Fehlerbalken - wie folgt abgreifen:

$$\begin{aligned} x_d &= -0.065 \pm 0.015 \\ z_d &= -1.253 \pm 0.005. \end{aligned}$$

Recht aufschlussreich sind die in Abb. 3.10 dargestellten Verhältnisse bei diagonaler Anströmung $\kappa = \frac{\pi}{4}$ und $ER = 3.0$. Auch hier sehen wir eine Ablenkung der Bahnlinien in Anströmrichtung und im Vektorbild eine Auslenkung des Defekts nach links und unten. Zu beachten ist die unterschiedliche Richtung von Anströmung und resultierender Stokeskraft, beschrieben durch den Deviationswinkel $\delta = \kappa - \beta$, s. S. 49f, welche eine Ablenkung des Partikels senkrecht zur Anströmrichtung bewirkt. Auf dem rechten Bild erkennt man in den Asymmetrien der Geschwindigkeitsbahnlinien den Einfluss des ω_y -Wirbels. Als Defektkoordinaten konnten die folgenden Werte bestimmt werden, wiederum mit einer gewissen Unschärfe bei der Ablesung:

$$\begin{aligned} x_d &= -0.055 \pm 0.015 \\ z_d &= -1.325 \pm 0.005. \end{aligned}$$

Auf den Abbildungen 3.11 , 3.12 und 3.13 beschäftigen wir uns mit der achsparallelen Anströmung, welche Gegenstand der wissenschaftlichen Arbeit des Autors vom November 2000 war[17]. Die Richtungsfelder und Bahnlinienbilder zeigen vergleichbare Strukturen und im wesentlichen die gleichen Auslenkungen des hyperbolischen Punktdefektes entgegen der Anströmrichtung. Im Bereich der Anströmung in positiver z -Richtung gelangen bei dreidimensionaler Rechnung stabile Relaxationen nur bis zu $ER = 3.0$ (zweidimensional bis $ER = 11.0$). Dagegen konnte bei Anströmung in negativer z -Richtung der stabile Bereich bis zu $ER = 50.0$ ausgedehnt werden, s. S. 51.

Bei achsparalleler Strömung finden wir zusätzliche Symmetrien der Felder bezüglich der y - z -Ebene und Rotationssymmetrie zur z -Achse. Diese erlaubten die zweidimensionale Bearbeitung in [17]. Auf den Abbildungen 3.11 und 3.12 haben wir zur besseren Vergleichbarkeit Richtungs- und Bahnlinienbild der Direktorfelder halbseitig jeweils dem Bild des Feldes bei $ER \leq 0.01$ gegenübergestellt. Diese Teilung schien bei den Geschwindigkeitsfeldern in Anbetracht der geringeren Unterschiede nicht ratsam. In Abweichung vom sonst angewandten Schema sind in Abb. 3.13 die Geschwindigkeitsbilder für kleine Ericksenzahlen $ER \leq 0.01$ gesondert dokumentiert. Als Defektabstand in z -Richtung wurden die folgenden Werte aus den Richtungsbildern abgegriffen, Vergleichszahlen aus der früheren Arbeit [17] in Klammern:

$$\begin{aligned} ER = +3.0: & \quad r_d = -1.50 \pm 0.010 \quad (-1.48) \\ ER = -50.0: & \quad r_d = -1.10 \pm 0.005 \quad (-1.13 \text{ bei } ER = -30.0). \end{aligned}$$

Die achsparallele Anströmung sieht man immer dann, wenn *Szenario B* vorliegt, d.h. wenn für die Defektstruktur ein Rotationsfreiheitsgrad um die y -Achse gegeben ist. Bevorzugt ist dabei die negative z -Richtung.

Der Sonderfall der nematischen Zelle mit der Bewegung eines sphärischen Teilchens unter Einwirkung äußerer homogener Felder parallel zu deren Begrenzungsplatten wird mit den Abbildungen 3.14 bis 3.16 veranschaulicht. Da die Begrenzung der Platten außerhalb unseres gebräuchlichen Gebiets $[-3:+3][+3:+3]$ liegt, haben wir für Abb. 3.14 und Abb. 3.16 (Bahnlinienbild) ein vergrößertes Gebiet $[-9:+9][+9:+9]$ gewählt. In Abb. 3.15 ist der Kernbereich der Richtungsfelder nochmals im gewohnten Maßstab zu sehen. Dargestellt sind die Felder für die in diesem Anwendungsfall größte noch realistische Ericksenzahl $ER = 1.0$.

Vergleicht man die Felddbilder und Bahnlinien mit den Verhältnissen bei freier Strömung $\kappa = 0$ und $ER = 3.0$, Abb. 3.9, erkennt man keine großen Unterschiede. Die Bahnlinien des Direktorfeldes sind auf ähnliche Weise nach links abgelenkt. Stärker gefasst und "homogenisiert" sind die Bahnlinien des Geschwindigkeitsfeldes durch die Begrenzung der Platten. Das erklärt die in der Zelle um 25% höhere Stokeskraft. Der hyperbolische Punktdefekt wandert in der nematischen Zelle in Bewegungsrichtung des Partikels aus. Als Defektkoordinaten wurden, mit methodisch bedingter Unschärfe, folgende Werte aus dem Richtungsfeld abgegriffen:

$$\begin{aligned} x_d &= -0.05 \pm 0.015 \\ z_d &= -1.26 \pm 0.005. \end{aligned}$$

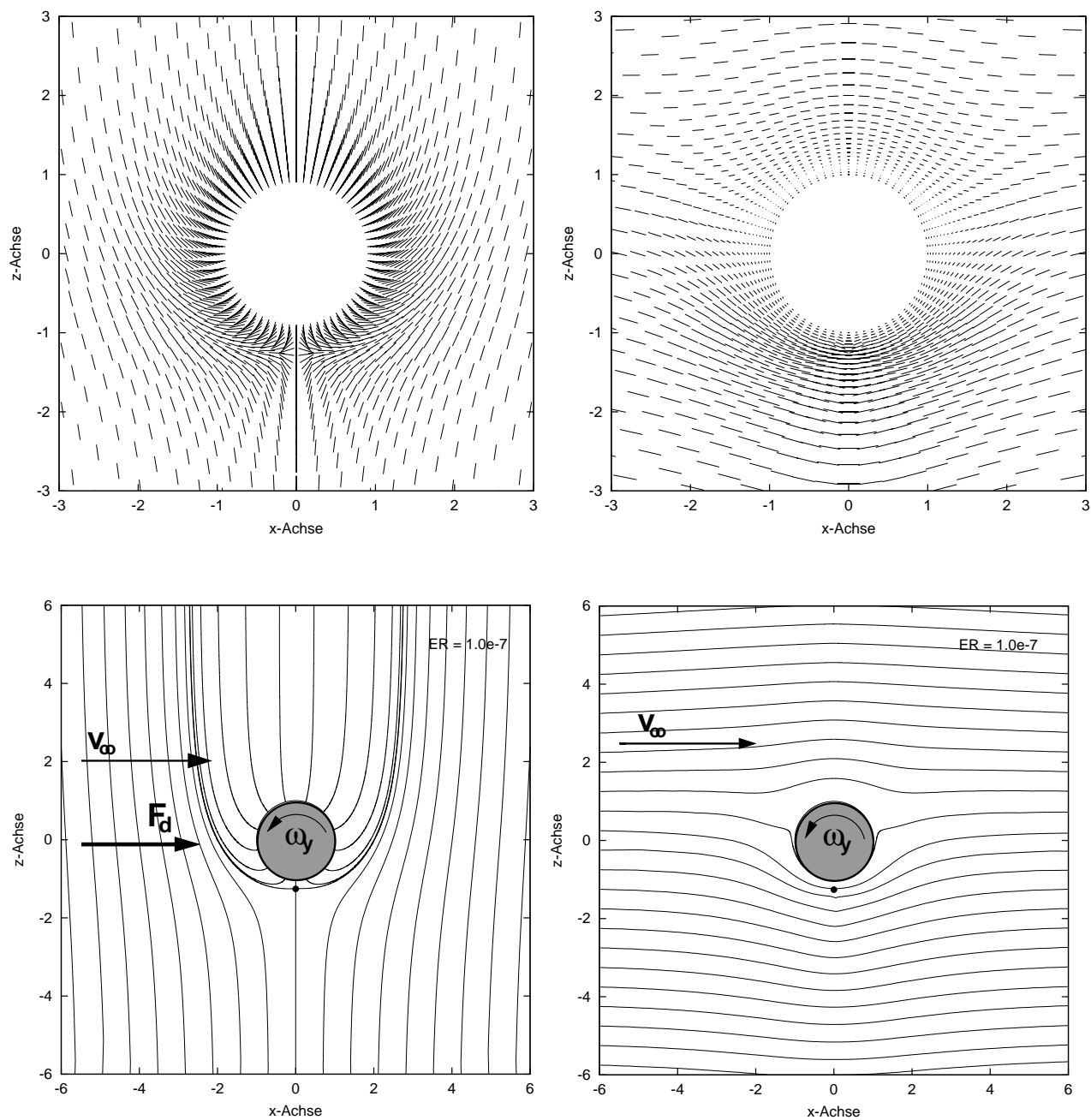


Abbildung 3.8: Igeldefektdipol, senkrechte Anströmung $\kappa = 0$; $M_y \rightarrow 0$; $\omega_y = -0.061443$; $ER = 1.0e-7$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

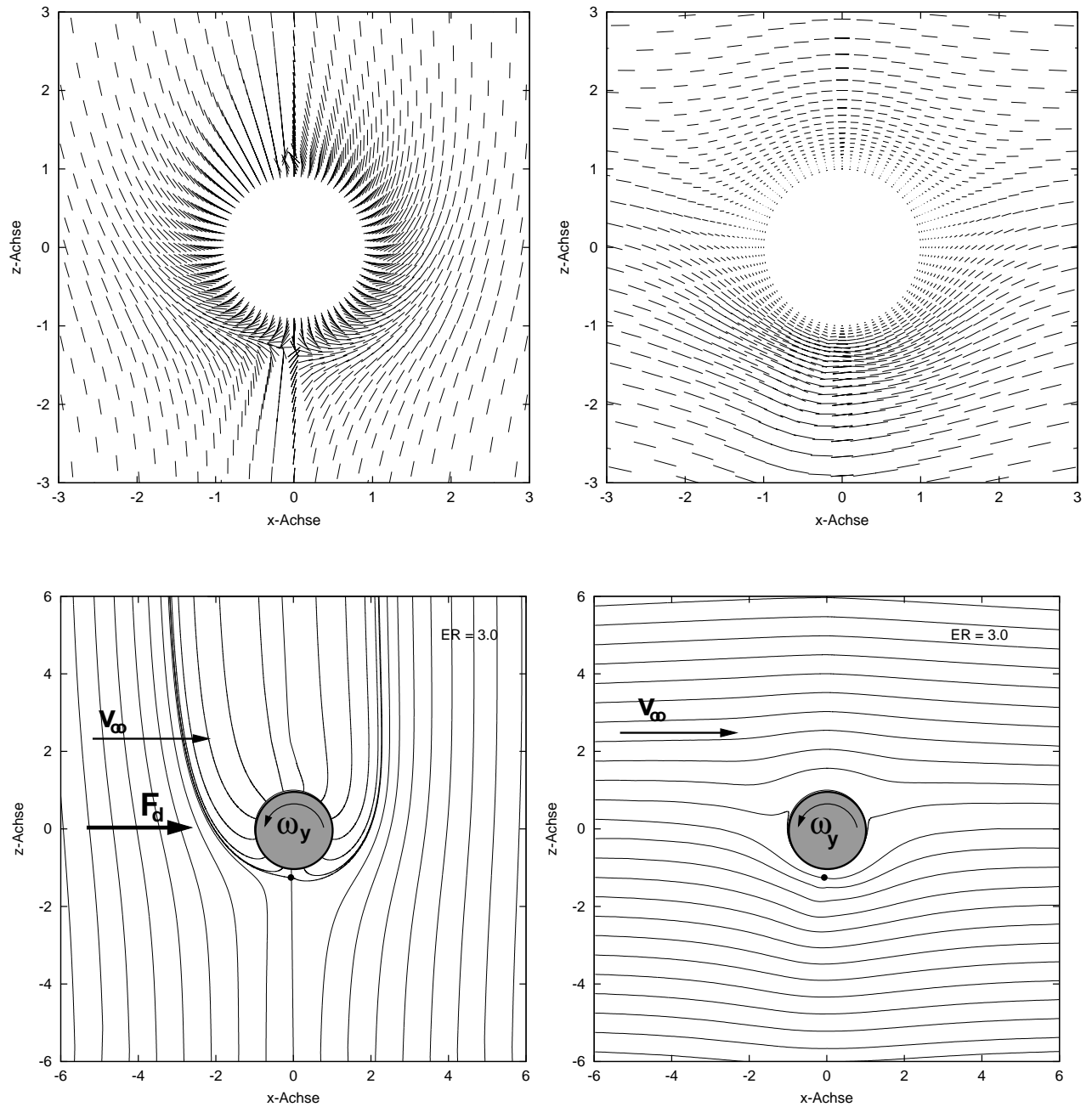


Abbildung 3.9: Igeldefektdipol, senkrechte Anströmung $\kappa = 0$; $M_y \rightarrow 0$; $\omega_y = -0.05$; $ER = 3.0$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

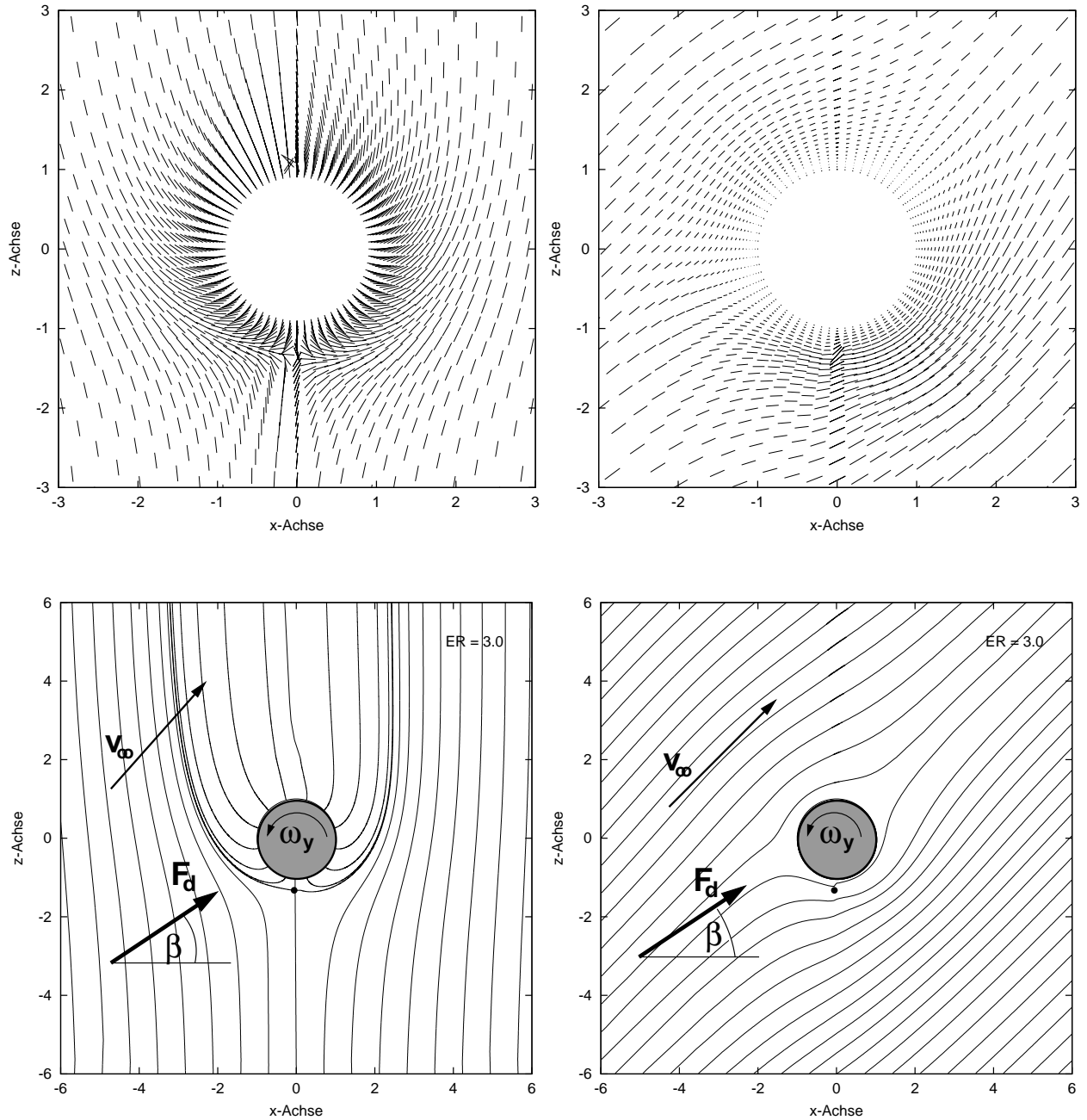


Abbildung 3.10: Igeldefektdipol, diagonale Anströmung. $\kappa = \frac{\pi}{4}$; $M_y \rightarrow 0$; $\omega_y = -0.03498$; $ER = 3.0$. Deviation $\delta = \kappa - \beta = 0.041\pi$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

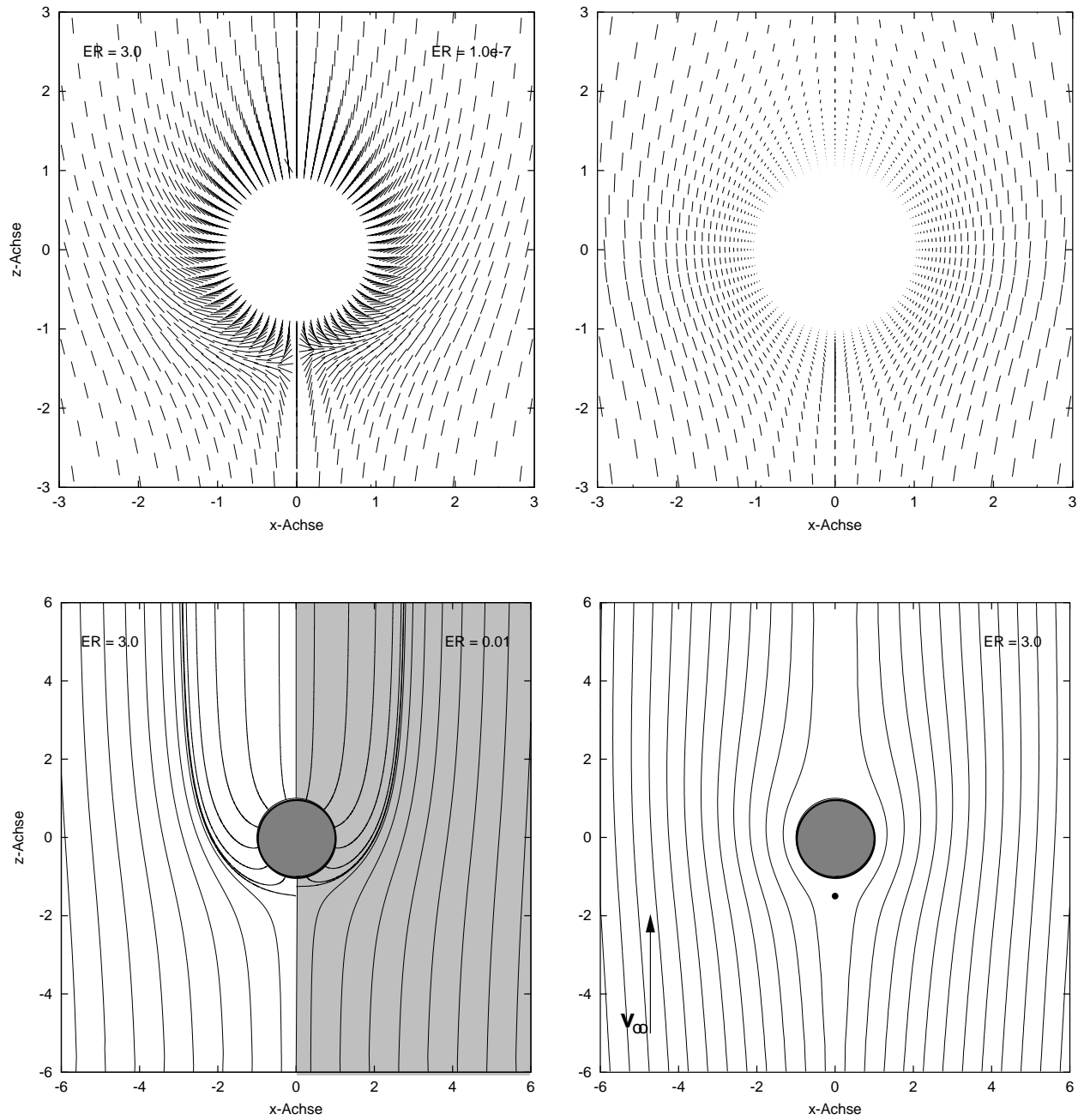


Abbildung 3.11: Igeldefektdipol, positiv achsparallele Anströmung: Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme. $\kappa = \frac{\pi}{2}$; $M_y = 0$; $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie; $ER = 3.0$. Die Direktorbilder zeigen auf der rechten Bildhälfte die Konfiguration bei $ER \leq 0.01$.

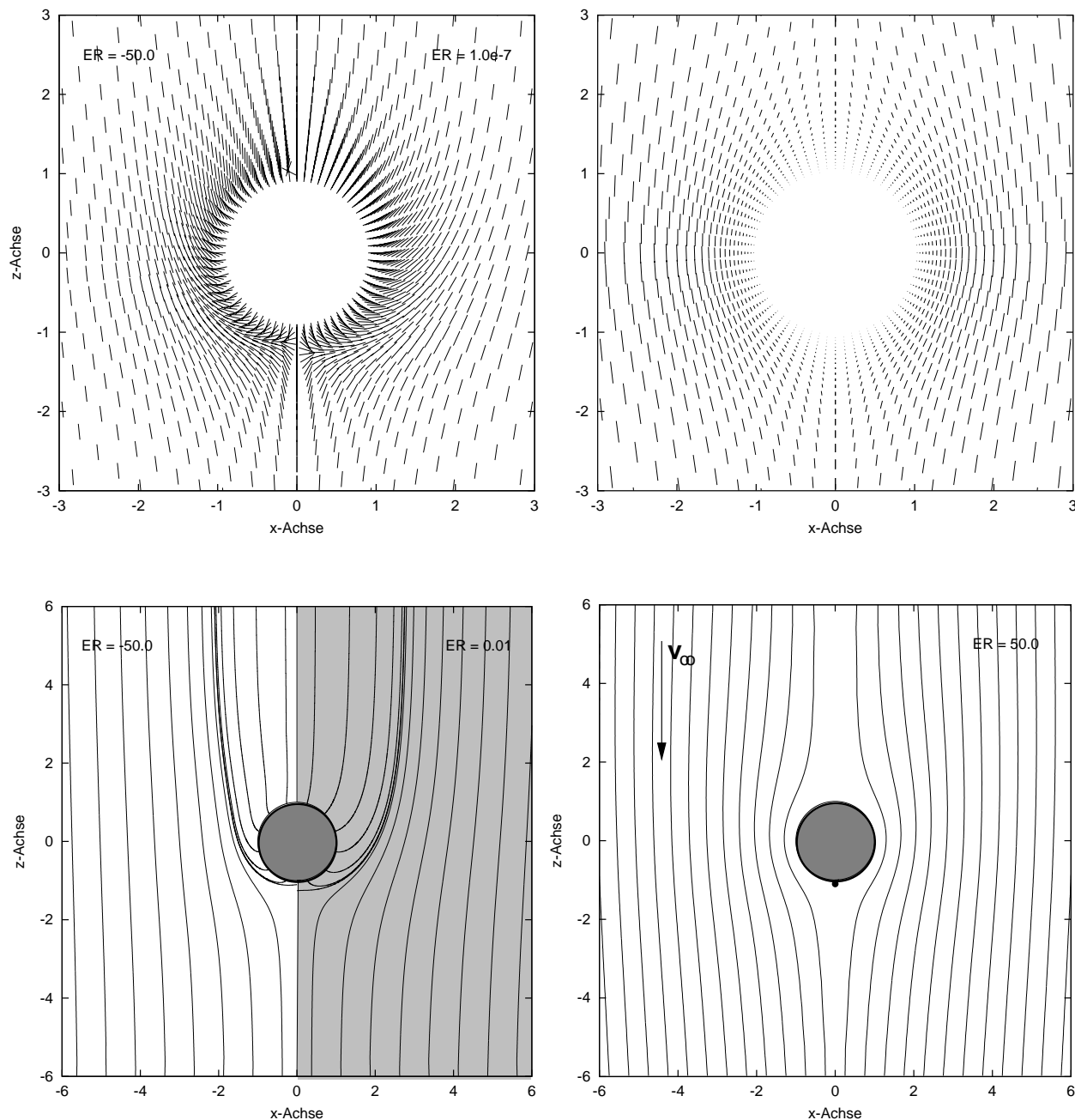


Abbildung 3.12: Igeldefektdipol, negativ achsparallele Anströmung: Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme. $\kappa = -\frac{\pi}{2}$; $M_y = 0$; $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie; $ER = 50.0$. Die Direktorbilder zeigen auf der rechten Bildhälfte die Konfiguration bei $ER \leq 0.01$.

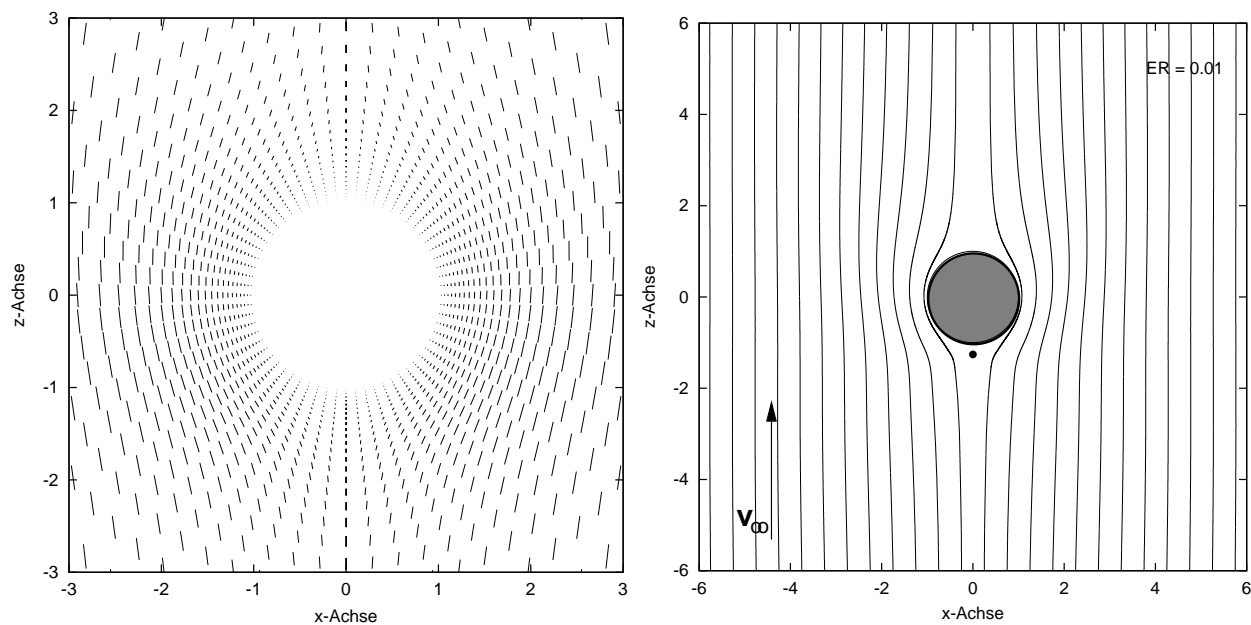


Abbildung 3.13: Igeldefektdipol: Geschwindigkeitsfeld, achsparallele Anströmung und Ericksenzahlen $ER \leq 0.01$ - zum Vergleich mit den vorige Seiten 66 und 67. $\kappa = \frac{\pi}{2}$; $M_y = 0$; $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie. - Geschwindigkeits-Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$.

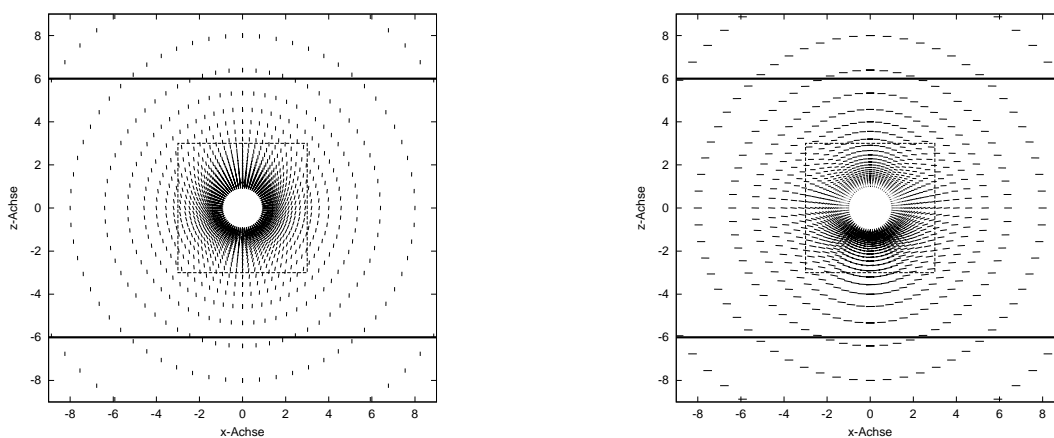


Abbildung 3.14: Igeldefektdipol in nematischer Zelle, plattenparallele Bewegung, Plattenabstand 12a: $\kappa = 0$; $M_y = 0$; $\omega_y = -0.05787$; $ER = 1.0$. -Direktorfeld | Geschwindigkeitsfeld - Zentralbereich vergrößert in Abb.3.15

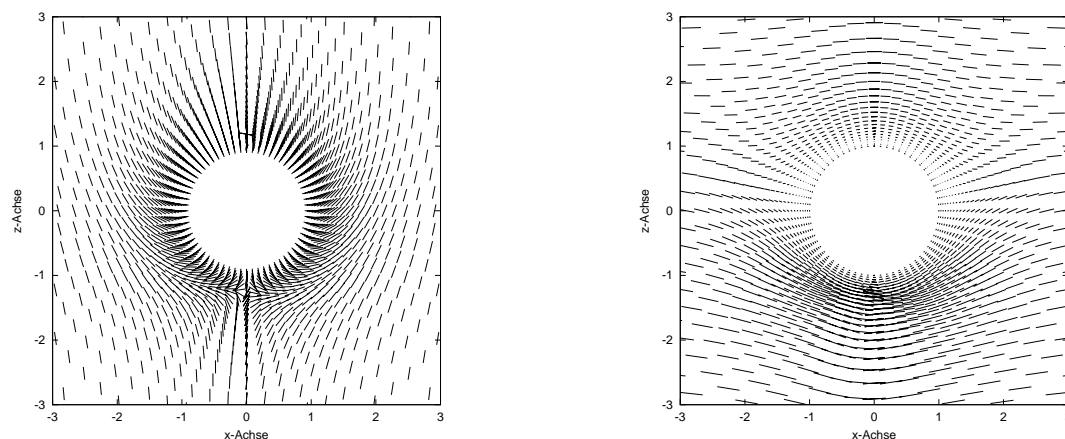


Abbildung 3.15: Igeldefektdipol in nematischer Zelle, plattenparallele Bewegung, Plattenabstand $12a$, wie in Abb. 3.14, Zentralbereich vergrößert, Geschwindigkeitsfeld Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$.

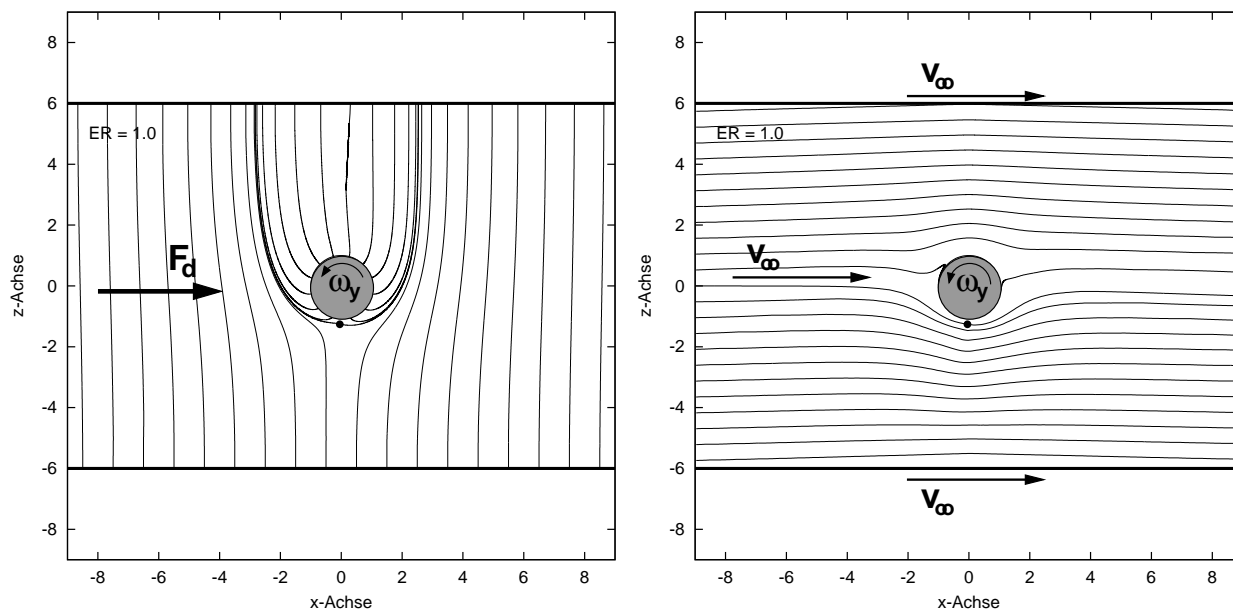


Abbildung 3.16: Igeldefektdipol in nematischer Zelle, Bahnlinien bei plattenparalleler Bewegung, Plattenabstand $12a$: $\kappa = 0$; $M_y = 0$; $\omega_y = -0.05787$; $ER = 1.0$.- Vektordiagramme der Direktor- und Geschwindigkeitsfelder siehe Abb. 3.14 auf voriger Seite.

Saturndisklination: Direktor- und Geschwindigkeitsfelder

Die Abbildungen 3.17....3.21 auf den folgenden Seiten zeigen analog zu den Abbildungen von Igeldefektdipolen vergleichbare Felder und Bahnlinien von sphärischen Teilchen mit Saturndisklinationen. Der charakteristische Unterschied zum Igeldefektdipol besteht in der zusätzlich vorhandene Symmetrie zur x - y -Ebene, welche zumindest im statischen Fall aber auch im quasistatischen Fall kleiner Ericksenzahlen $ER \leq 0.01$ durch die äquatoriale Lage des Ringdefektes gegeben ist. Wir werden später sehen, dass bei achsparalleler Anströmung diese x - y -Symmetrie gebrochen wird. Dennoch ist eine Verlagerung des Liniendefektes bei keiner der behandelten Fälle nachzuweisen.

Die Abbildungen 3.17 und 3.18 beschreiben wie die Abbildungen 3.8, 3.9 die Anströmung senkrecht zur Defektachse einmal bei kleiner und dann bei der größten Ericksenzahl mit ungestörtem Direktorfeld $ER = 4.0$. Anders als beim Igeldefektdipol kann bei der Saturndisklination wegen der x - y -Symmetrie kein Restmoment M_y entstehen. Folglich entfällt auch die beim Igeldefektdipol zur Kompensation benötigte Wirbelströmung mit ω_y . Es ergeben sich symmetrische Geschwindigkeitsfelder. (Die kleine scheinbare Symmetrieabweichung der Bahnlinie beginnend bei $(-6.0, 0.0)$ ist technisch bedingt, weil diese Bahnlinie die Kugel sowohl oben als auch unten umlaufen kann, aber niemals den Defekt auf der x -Achse passieren darf.) Während bei $ER = 1.0e-7$ die Symmetrie gegenüber alle drei Hauptebenen und in allen vier Teilbildern erhalten ist (quasistatischer Fall), sehen wir bei $ER = 4.0$ einen signifikanten Symmetriebruch zur y - z -Ebene bei Erhaltung der x - y -Symmetrie. Die Bahnlinien des Direktorfeldes werden mit zunehmendem Abstand von der Kugel nach links verformt. Man kann dies anschaulich so deuten, dass die Kugel unter dem Einfluss der Stokeskraft gegenüber einem ortsfesten Direktorfernfeld in Krafrichtung ausgelenkt wird.

Die Abbildung 3.19 zeigt die diagonale Anströmung unter $\kappa = \frac{\pi}{4}$ bei einer mittleren Ericksenzahl $ER = 3.0$. Außer der Symmetrie zur x - z -Ebene existieren keinerlei Symmetrien, nicht einmal, wie man vermuten könnte, zur Hauptebene in Anströmrichtung, aufgespannt durch die y -Achse mit der Diagonalen durch den Nullpunkt. Wenn man genau hinsieht, besteht insbesondere für die kugelnahen Bahnlinien des Geschwindigkeitsfeldes keine Symmetrie in Bezug auf diese Ebene. Die Ursache ist ein sehr kleines Restmoment M_y , welches anders als beim Igeldefektdipol in positiver Richtung dreht. Zu seiner Aufhebung wird eine kompensierende Wirbelströmung mit $\omega_y = 0.01175$ induziert. Die Winkelgeschwindigkeit ist dem Betrag nach kleiner als beim Igeldefektdipol, s. S.58. In den Darstellungen des Direktorfeldes auf der linken Bildhälfte ist der Symmetriebruch offensichtlich.

Beim Saturnring fällt die Differenz δ zwischen Anströmwinkel κ dem Winkel β , unter dem die Stokeskraft \mathbf{F}_d angreift, etwa doppelt so groß aus wie bei einem Igeldefektdipol mit gleichem ER und κ , s. Tabellen 3.3 und 3.8, Seiten 48 und 58.

Betrachten wir den achsparallelen Fall auf den Abbildungen 3.20 und 3.21. Auch diesmal vergleichen wir den quasistatischen Fall $ER = 1.0e-7$ mit dem der größten störungsfrei relaxierenden Ericksenzahl, hier $ER = 15.0$. Im quasistatischen Fall sehen wir beim Direktorfeld vollständige Symmetrie bezüglich der drei Hauptebenen. Die Bahnlinien des Geschwindigkeitsfeldes zeigen in der Nähe des Saturnrings eine Delle und sind in der oberen Bildhälfte leicht gespreizt, wodurch im Geschwindigkeitsbild die Symmetrie zur x - y -Ebene aufgehoben wird. Bei der zweidimensionalen Rechnung[17] konnte vergleichbares nicht beobachtet werden. Plausibel zu erklären wäre die Ablenkung der Bahnlinien mit einer Beeinflussung durch die Ringdisklination. Eine noch deutlichere Spreizung tritt bei der großen Ericksenzahl $ER = 15.0$ auf. Dies überrascht nicht, da die x - y -Symmetrie des Direktorfeldes fehlt. Die Direktor-Bahnlinien sind oberhalb des Äquators signifikant nach außen abgelenkt. Auch im Richtungsfeld ist die auffällige Asymmetrie gut erkennbar.

Immer bleibt bei achsparalleler Anströmung die Rotationssymmetrie in Bezug auf die z -Achse erhalten. Auch kann aus Symmetriegründen kein Restmoment um die y -Achse auftreten. Es fällt auf, dass die Geschwindigkeitsfelder bei $ER = 1.0e-7$ und $ER = 15.0$ sowohl im Richtungsfeld als auch in der Bahnliniendarstellung kaum zu unterscheiden sind, nur bei den Direktorfeldern erkennt man deutliche Unterschiede. Danach erscheint es plausibel, dass Stokeskraft und effektive Viskosität laut Tabelle 3.7 auf S. 55 auch im achsparallelen Fall nur wenig von der Ericksenzahl abhängen. Die beiden hier verglichenen Fälle differieren bezüglich der Stokeskraft nur um 6.1%.

Wie erwähnt spielt es im Gegensatz zum Igeldefektdipol keine Rolle, ob die Anströmung in Richtung positiver oder negativer z -Werte erfolgt. Es ergeben sich in beiden Fällen gleich strukturierte Felder.

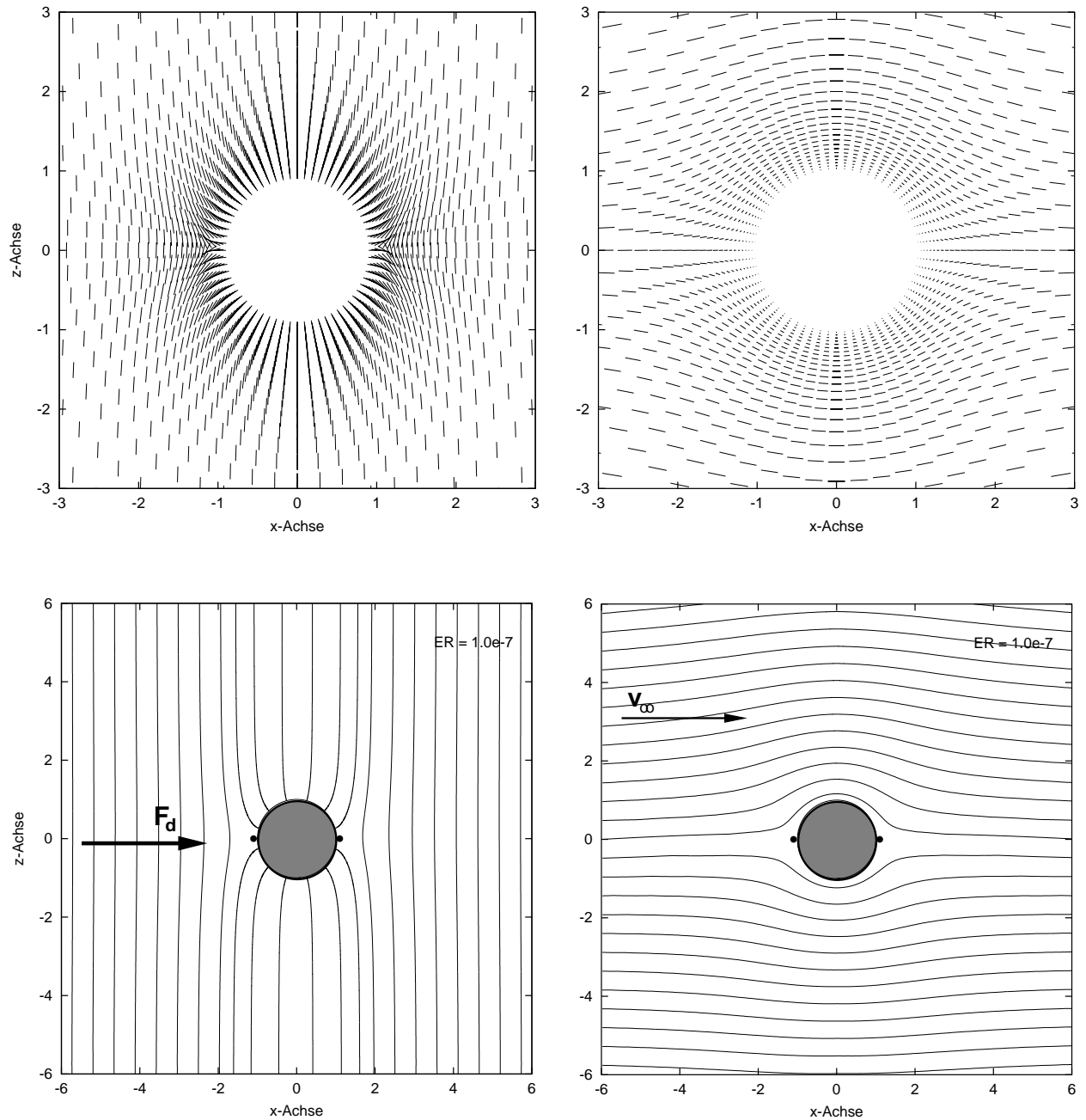


Abbildung 3.17: Saturndisklination, senkrechte Anströmung $\kappa = 0$; $M_y = 0$ und $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie; $ER = 1.0e-7$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

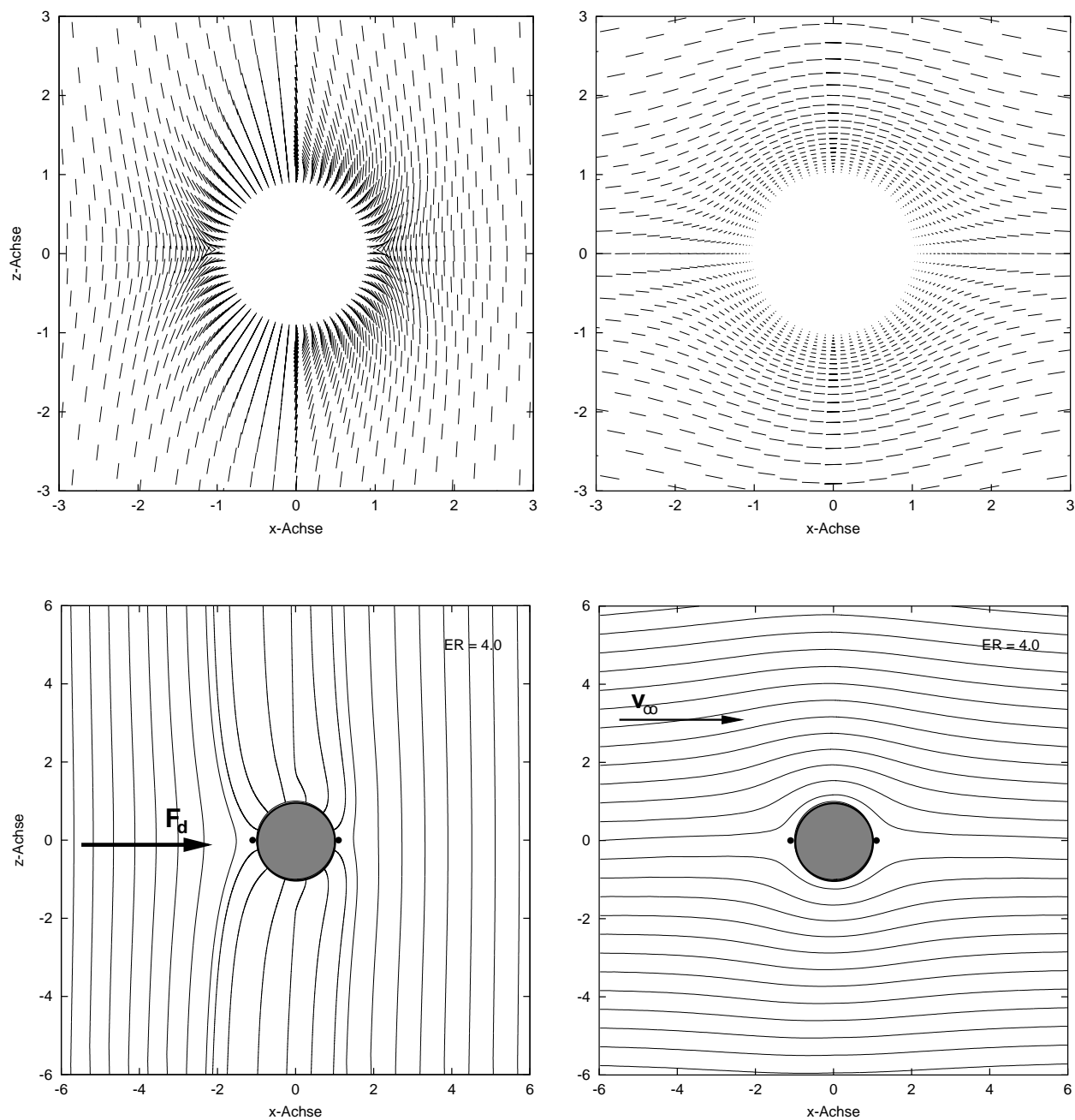


Abbildung 3.18: Saturndisklination, senkrechte Anströmung $\kappa = 0$; $M_y = 0$ und $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie; $ER = 4.0$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

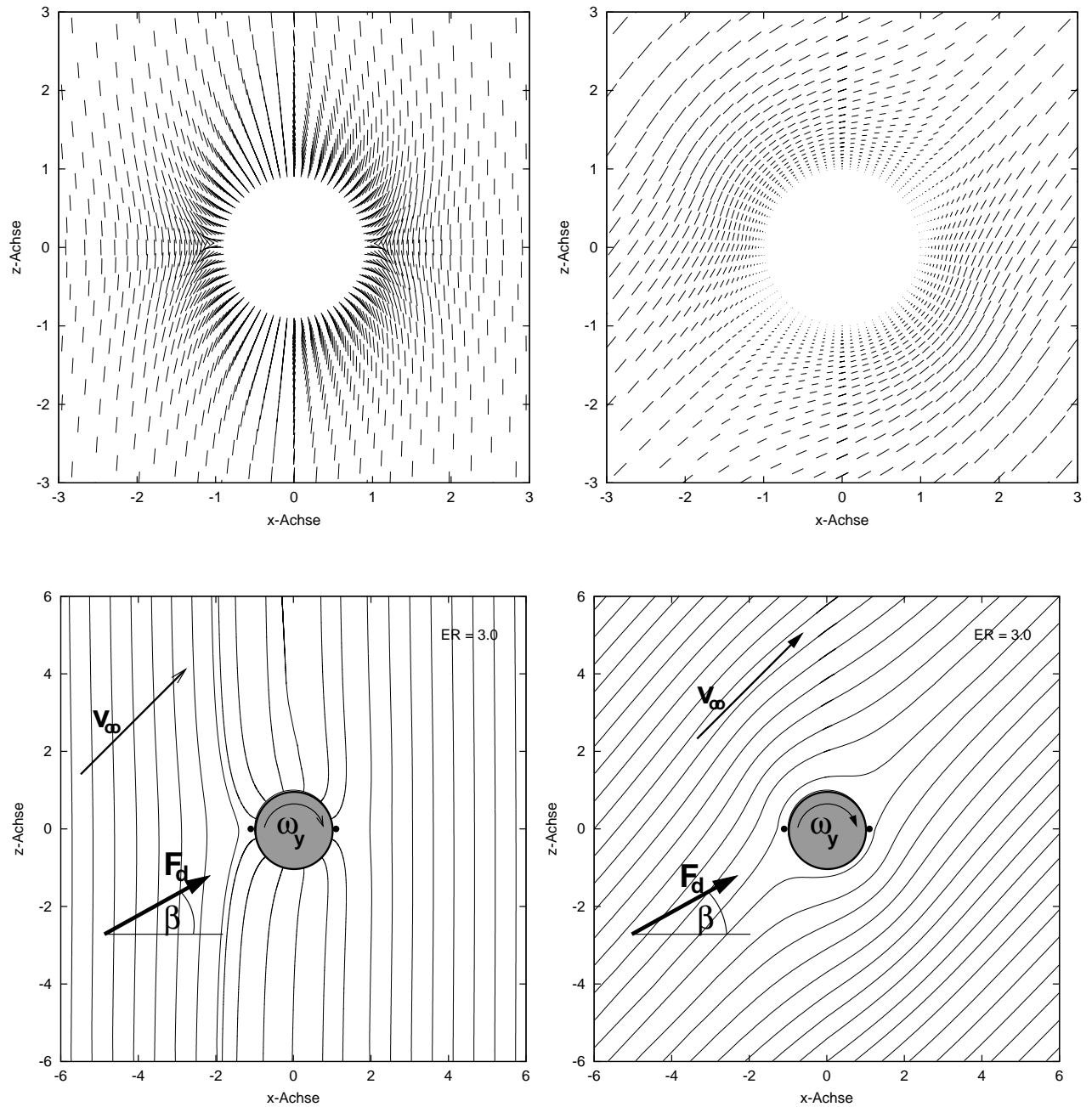


Abbildung 3.19: Saturndisklination, diagonale Anströmung $\kappa = \frac{\pi}{4}$; $M_y \rightarrow 0$; $\omega_y = +0.01175$; $ER = 3.0$. Deviation $\delta = \kappa - \beta = 0.090\pi$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

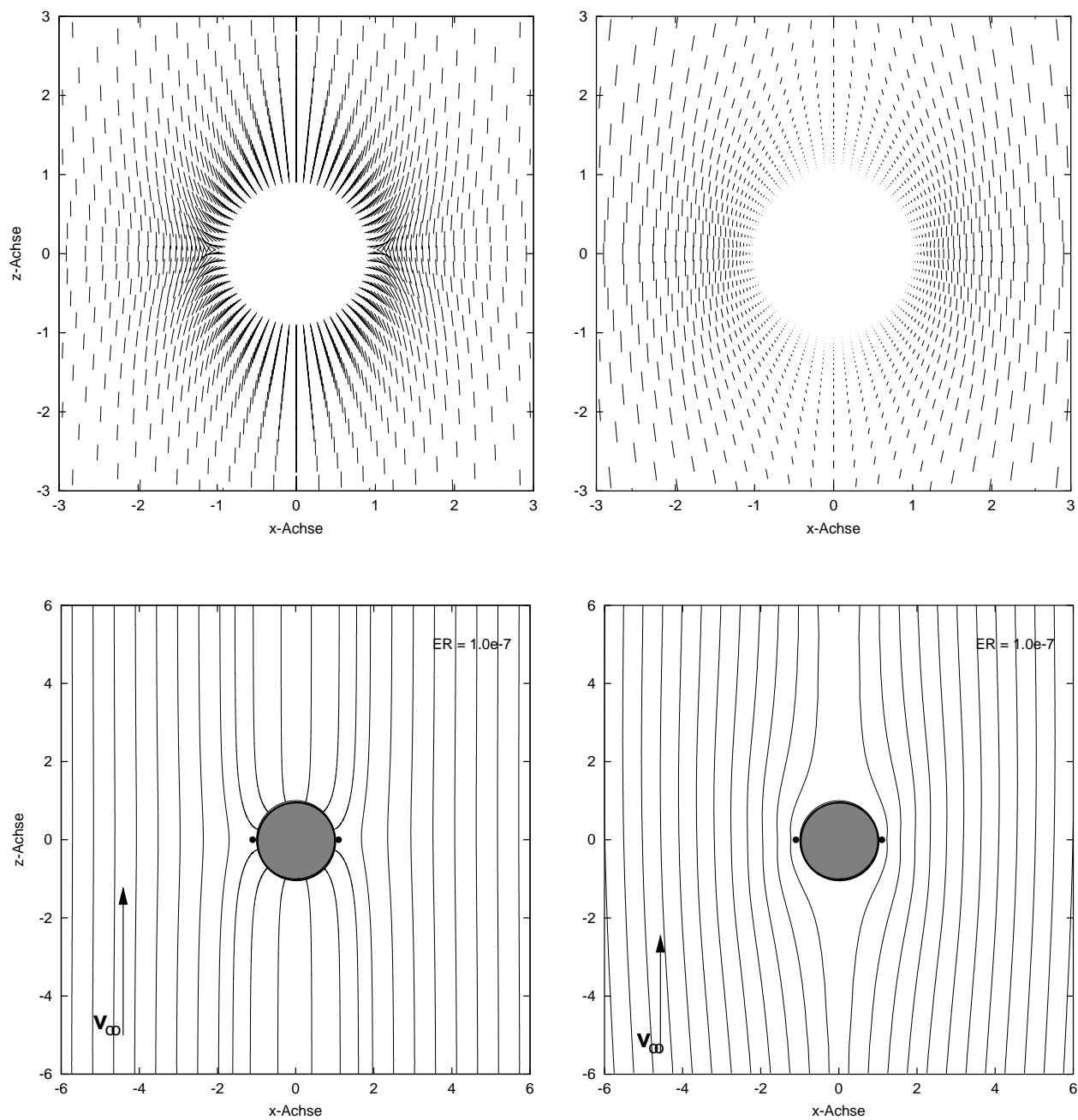


Abbildung 3.20: Saturndisklination, achsparallele Anströmung: $\kappa = \frac{\pi}{2}$; $M_y = 0$ und $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie; $ER = 1.0e-7$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme.

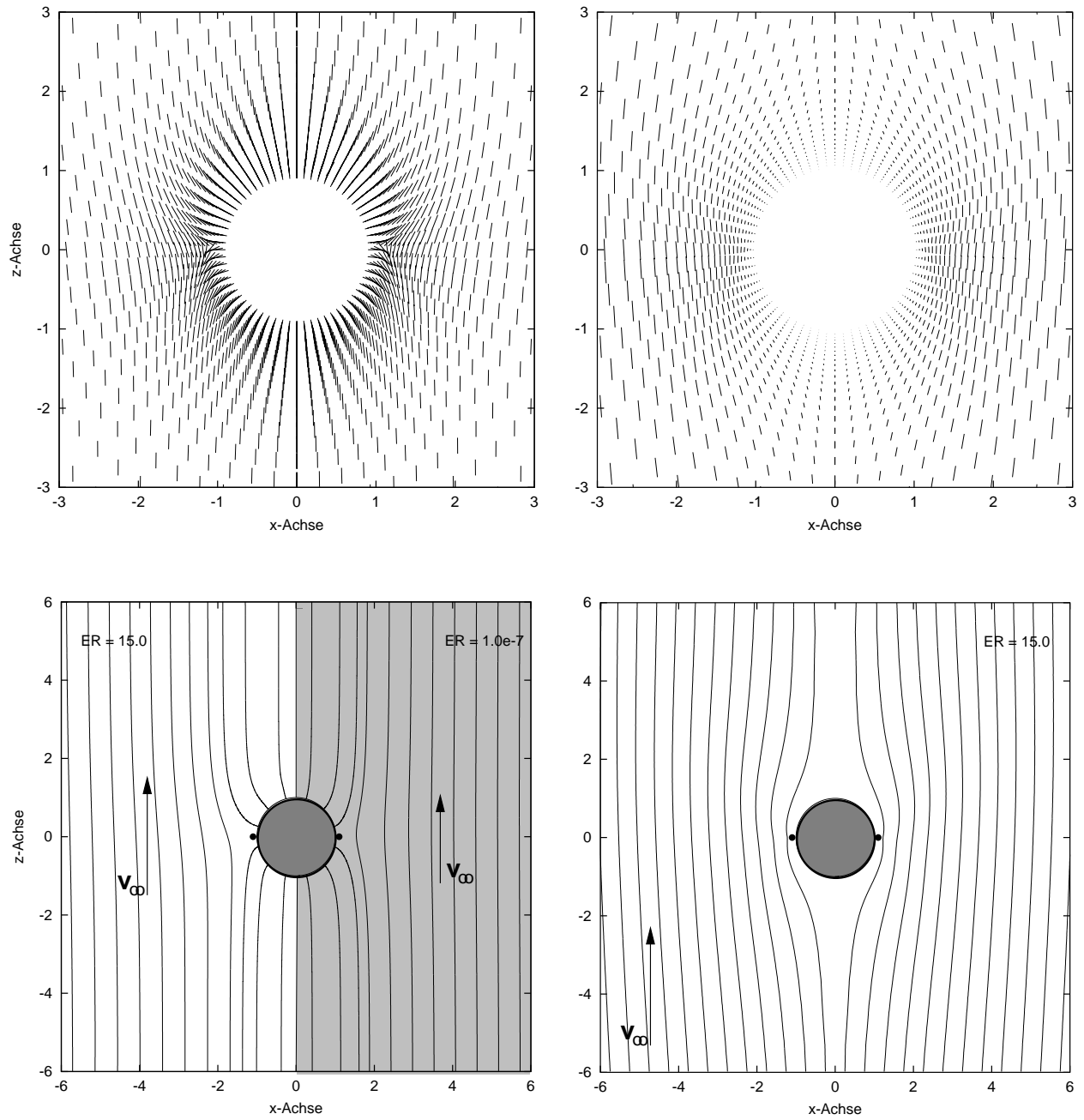


Abbildung 3.21: Saturndisklination, achsparallele Anströmung: $\kappa = \frac{\pi}{2}$; $M_y = 0$ und $\omega_y = 0$ wg. Symmetrie; $ER = 15.0$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld - Maßstab: 4.8 mm entsprechen $v_\infty = 1.0$. Die untere Reihe zeigt die dazu gehörigen Bahnliniendiagramme. Das Direktorbild zeigt auf der rechten Hälfte Bahnlinien bei $ER=1.0e-7$ zum Vergleich.

Störungen der Orientierungsordnung.

Bei der Betrachtung von Richtungsfeldern auf den vorhergehenden Seiten erkennen wir mitunter punktuelle Fehler des Direktorfeldes, i.d.R. in Nachbarschaft des oberen Scheitelpunktes der Kugel, bei welchen ein oder wenige Vektoren aus der Orientierungsordnung ausbrechen. Solange sich ein solcher Fehler nicht im Geschwindigkeitsfeld abbildet und die numerische Relaxation ungehindert konvergiert, können wir diesen getrost ignorieren. Solche Fehler ereignen sich in Gebieten, in denen sehr kleine Geschwindigkeiten vorherrschen. In unserem Rechnerprogramm werden diese kleinen Geschwindigkeiten $\|v\| \rightarrow 0$ mit dem Direktortiltwinkel Θ rückgekoppelt, was punktuelle numerische Fehler erklären könnte. Typischerweise bleibt in solchen Fällen der lokale Orientierungsfehler auch bei beliebig ausgedehnten Relaxationszyklen kaum verändert erhalten, nimmt aber auch nicht zu.

Andererseits gibt es gravierende Störungen der Orientierungsordnung, die sich im Verlauf der Iteration nestförmig ausbreiten und im Geschwindigkeitsfeld durch chaotisch desorientierte, meist stark verlängerte Vektorpfeile auffallen. Die Iteration wird instabil, d. h. das Programm steigt an den Abbruchkriterien aus, zumindest ist die Konvergenz der Iteration bei großen Restresiduen stark verlangsamt. Wir unterscheiden zwei Ursachen:

- Innerhalb des *ER*-Intervalls, in welchem normalerweise stabile Relaxationen möglich sind, ist bei einer bestimmten Ericksenzahl und/oder Winkelgeschwindigkeit ω_y die relative Lage des Gitters zu den Feldern zufallsbedingt so ungünstig, dass einzelne Differenzenquotienten zur numerischen Berechnung partieller Ortsableitungen grob ungenau werden. Dies führt zu fehlerhaften Berechnung von Feldern und Stokeskräften. Eine minimale Verrückung der Ericksenzahl um $\pm 0.01 \dots \pm 0.02$ löst das Problem und man erreicht wieder stabile Verhältnisse, siehe Abb.3.22, Abb.3.23 und Tab. 3.7.
- Die Intervalle der Ericksenzahlen und/oder der Winkelgeschwindigkeiten, welche physikalisch stabile Direktorfelder zulassen, sind überschritten. Die Orientierungsordnung im Direktorfeld bricht zusammen. Die Berechnungsgrundlage für das Geschwindigkeitsfeld entfällt und die Iterationsrechnung wird irreparabel instabil - Abb.3.24.

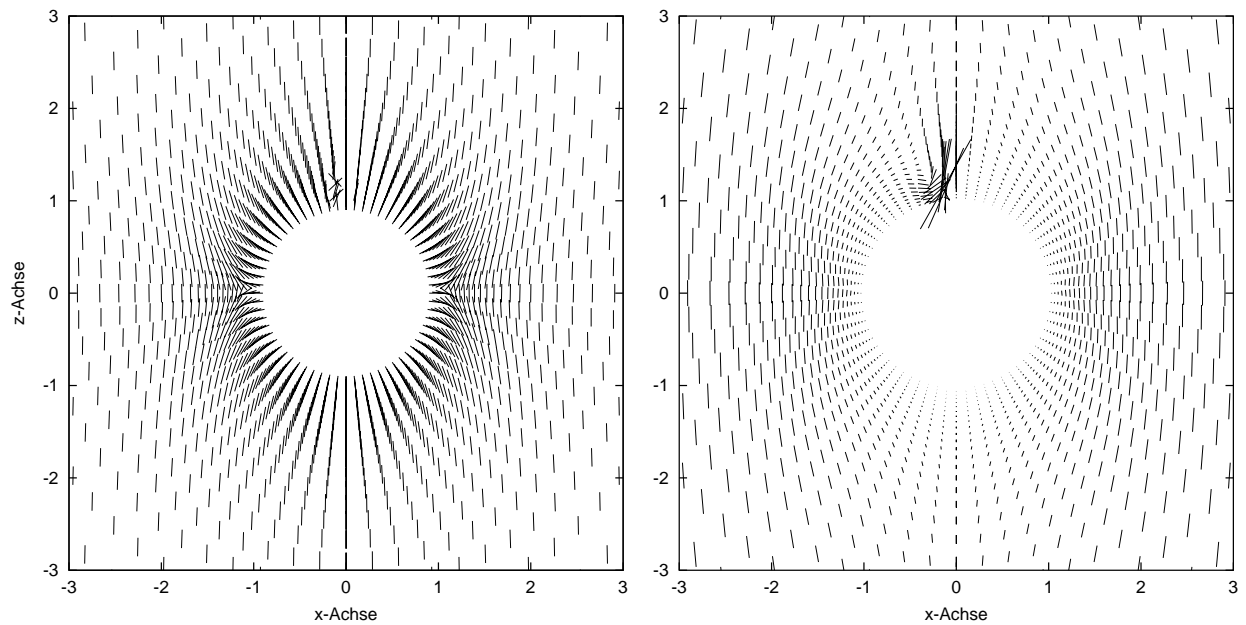


Abbildung 3.22: Saturndisklination, achsparallel angeströmt bei $ER = 3.0$: Numerisch bedingte lokale Störung im Direktor- und im Geschwindigkeitsfeld. Eine geringe Verrückung auf $ER = 3.01$ löst das Problem, s. Abb. 3.23. Die Iteration war dennoch stabil bei $n = 45000$, wenn auch verlangsamt und mit großen Restresiduen. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld, beides in Vektordarstellung.

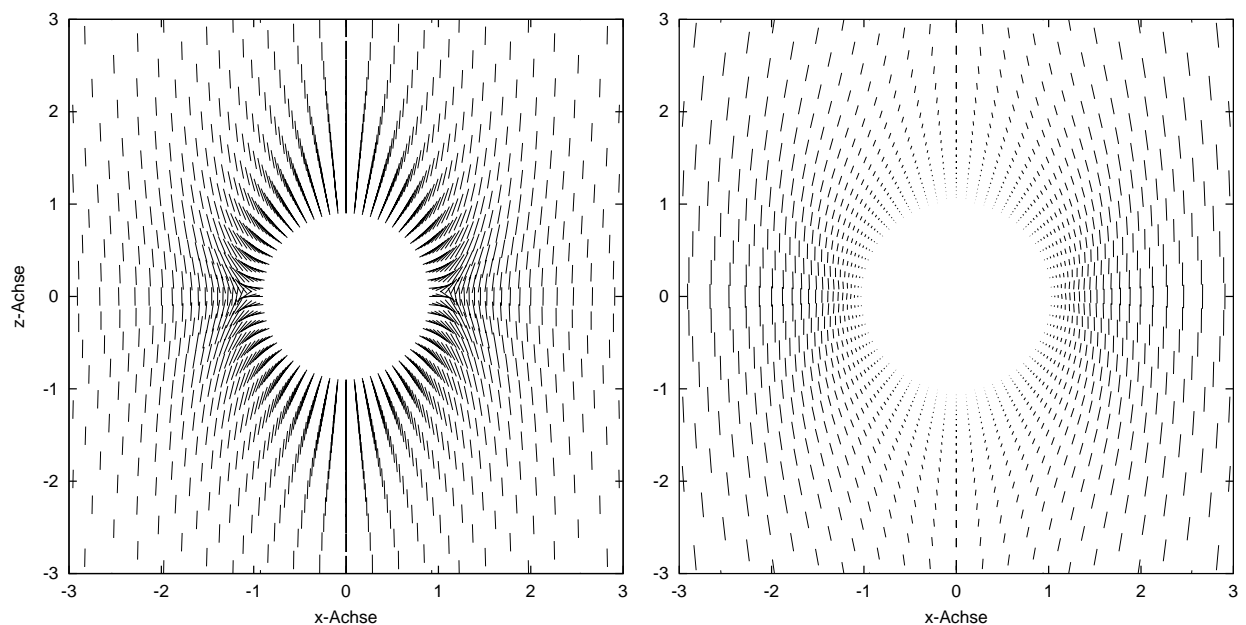


Abbildung 3.23: Eliminierung des numerischen Problems in Abb. 3.22 durch geringfügige Verrückung der Ericksenzahl um 0.33% auf $ER = 3.01$. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld, beides in Vektordarstellung.

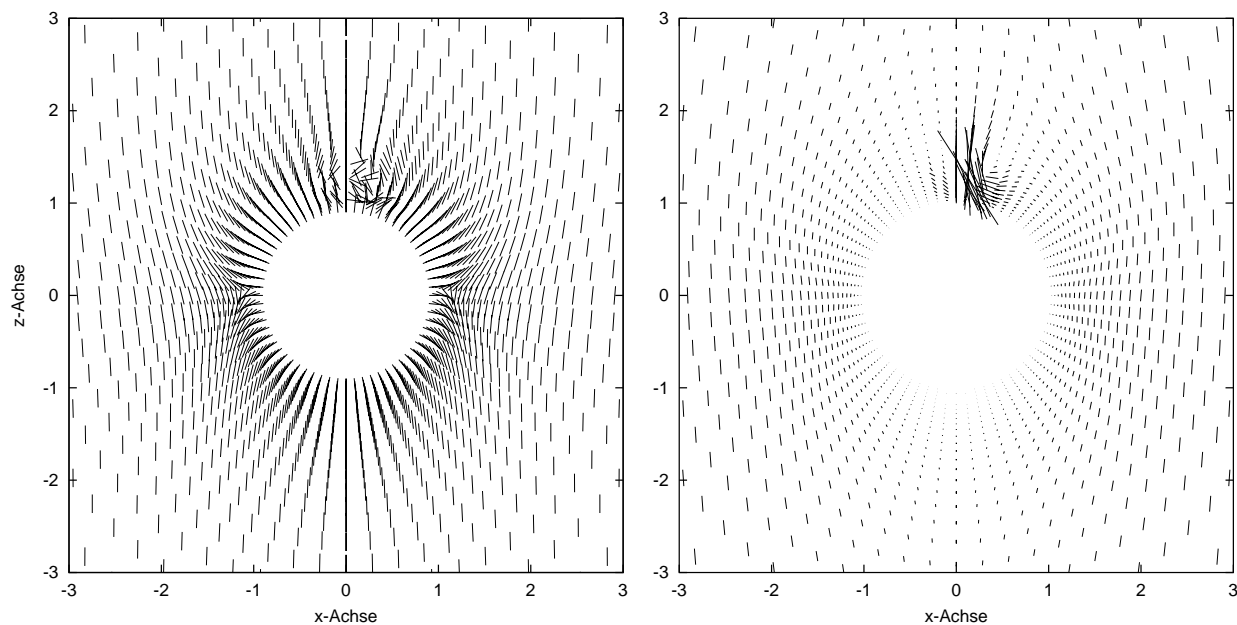


Abbildung 3.24: Auflösung der Orientierungsordnung oberhalb eines ER -Grenzwertes für stabile Iterationen. Bei 6663 Zyklen stieg das Programm nach Erreichen der Abbruchkriterien aus. $ER = 30.0$ - Stabile Konvergenz war bei achsparalleler Anströmung bis $ER = 25$ nachgewiesen. Links: Direktorfeld; rechts: Geschwindigkeitsfeld, beides in Vektordarstellung.

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

Es war das Ziel dieser Arbeit, die beschränkenden Annahmen, die den vorangegangenen Arbeiten des Autors [16][17] zugrunde lagen, aufzugeben und eine möglichst vollständige numerische Lösung des dreidimensionalen nicht linearen Stokesproblems in nematischer Umgebung vorzustellen. Hierzu wurden die folgenden Verallgemeinerungen vorgenommen:

- Für alle zu untersuchenden Anströmrichtungen sollen beliebig große Ericksenzahlen zulässig sein, soweit diese zur Berechnung stabiler Direktor- und Geschwindigkeitsfelder führen.
- Die Beschränkung auf den Fall der achsparallen Anströmung $\kappa = \pm\frac{\pi}{2}$ und damit die Reduzierung auf ein zweidimensionales Gleichungssystem wurde aufgehoben. Es waren beliebige Anströmrichtungen im Intervall $\kappa[-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}]$ zugelassen.
- Die fehlende x - y -Symmetrie ließ erwarten, dass nach dem Drehimpulssatz zur Eliminierung von Restmomenten um die y -Achse eine additive Wirbelströmung verbunden mit einer Rotation der Kugel um diese Achse mit ω_y als Randbedingung vorzugeben war, die iterativ mit mehreren Simulationsläufen angepasst werden musste.
- Alle Rechnungen und Auswertungen wurden für die in nematischer Umgebung sphärischer Teilchen vorkommenden begleitenden Defektstrukturen, also für Igeldefektdipol und Saturndisklination vorgenommen.
- Anders als bei der linearisierten Rechnung der senkrechten Anströmung[16][17] sollte für alle Richtungen die Beschränkung der Rechnung auf ein begrenztes Gebiet aufgehoben sein.
- Schließlich wollten wir die gewonnenen Erkenntnisse und numerischen Verfahren speziell auf das vereinfachte Modell einer nematischen Zelle bei vorgegebenem realistischem Plattenabstand anwenden. Es war zu untersuchen, ob die Simulation der Stokeschen Reibung eines sphärischen Teilchens, welches sich unter dem Einfluss eines homogenen äußeren Feldes parallel zu den Platten gleichförmig bewegt, zu Ergebnissen führt, die mit denen der freien Anströmung verträglich sind.

Diese Vorgaben erforderten bei der Realisierung bestimmte Konsequenzen:

- Durch die nunmehr notwendige dreidimensionale Bearbeitung der vollständigen Leslie-Ericksengleichungen erhöhte sich die Zahl der Variablen von vier auf sechs.
- Nachdem als einzig sichere Symmetrieebene des Systems nur noch die x - z -Ebene in Betracht kam, war das Gebiet unserer Rechnung vom Quadranten zur Hemisphäre zu erweitern. Allein durch diese Maßnahme, verdoppelten sich alle Rechenzeiten.
- Der Übergang von zwei auf drei Dimensionen erhöht bei einem $65 \times 65 \times 65$ -Gitter die Rechenzeit um den Faktor 65, die größere Anzahl der Schleifenvariablen verlängert die Rechenzeit wegen der komplexeren Algorithmen mindestens um den Faktor 1.5...2. Nach dieser Überschlagsrechnung war zu erwarten, dass die Rechenzeit gegenüber dem zweidimensionalen Fall um den Faktor 200 – 250 höher ausfällt.
- Die Berechnung der Stokeskräfte und -momente musste vektoriell mit Hilfe des Oberflächenintegrals erfolgen, wenn man beliebige Anströmwinkel und Winkelgeschwindigkeiten zuließ.
- Im linearisierten Fall genügte es, die Stokeskräfte in den beiden Hauptachsen zu berechnen und daraus den Widerstandstensor zu bilden. Mit ihm konnte man Größe und Richtung der Stokeskraft für alle anderen Anströmrichtungen berechnen. Dieser Weg ist im nicht linearen Fall nur im Grenzfall kleiner Ericksenzahlen gangbar. Das war der Grund, den numerische Algorithmus auf beliebige Anströmrichtungen zu erweitern.

Zur Bearbeitung der geschilderten Aufgaben haben wir, ausgehend von dem vorhandenen Programm zur zweidimensionalen Berechnung gekoppelter Direktor-, Geschwindigkeits- und Druckfelder[17], ein C-Programm für die dreidimensionale Feldberechnung und Integration der Stokesschen Kräfte und Momente geschrieben. Die Komplexität dieses Programms erhöhte sich auf Grund der oben aufgezählten Umstände beträchtlich.

Nach Ende der Testphase wurden Simulationsläufe mit 428 verschiedenen Input-Datensätzen durchgeführt. Jeder Datensatz repräsentierte einen spezifischen Satz fester Parameter, bestehend aus den charakteristischen Daten des jeweiligen Defektyps (Igeldefektdipol, Saturndisklination, nematische Zelle), dem Anströmwinkel κ , der Ericksenzahl ER und der Winkelgeschwindigkeit ω_y . Außerdem waren alle Materialkonstanten des nematischen Fluids CB5, drei Parameter zur Festlegung der Gittermaschenweite und die maximale Anzahl der Iterationszyklen in diesem Datensatz aufgelistet. Bis auf wenige verkürzte Testläufe mit größeren Gittern haben wir die Simulationen auf einem 3D-Gitter $65 \times 65 \times 65$ abgearbeitet. Die große Variationsbreite war zur Bestimmung von ω_y bei Nulldurchgang des Restmomentes M_y notwendig. Zur Inter-/Extrapolation bzw. zur empirischen Suche des richtigen ω -Wertes benötigte man für jede Kombination von Defekt, Anströmwinkel und Ericksenzahl mehrere Simulationen bei unterschiedlichen Winkelgeschwindigkeiten ω_y . Für wichtige Simulationen waren 50.000 Iterationszyklen

vorgegeben. Stark konvergierende Iterationsläufe brachen schon vorher bei Erreichen des Konvergenzkriteriums ab. Eine Verdoppelung brachte Abweichungen der zu berechnenden Stokeskräfte lediglich im Promillebereich. An den Grafiken der Felder hat sich dabei nichts mehr verändert. Die Rechenzeit lag im Normalfall bei 48...52 Stunden je Programm-
lauf. Nur durch die Möglichkeit, das Rechnernetz des ITAP für Simulationsläufe über DFÜ zu nutzen, konnte ein solches Volumen in realistischem Zeitrahmen bearbeitet werden.

Jeder Simulationslauf lieferte als Output einen Datensatz der Stokeskraftkomponenten F_x , F_z mit den korrespondierenden effektiven Viskositäten η_x , η_z und dem Restmoment M_y , außerdem eine eindeutige numerische Beschreibung von Direktor-, Geschwindigkeits- und Druckfeld durch die Ergebnis- und Plotdateien zur Generierung der grafischen Felddarstellungen. Im Kapitel 3 wurden die normierten Ergebnisdaten der Stokeskräfte bzw. effektiven Viskositäten und der freien Energien, ggf. auch die variablen Positionen von Punktdefekten in Tabellen, Diagrammen und dokumentiert. Im Abschnitt 3.3 sind typische Felddarstellungen der Direktor- und Geschwindigkeitsfelder in Vektoren- und Bahnliniendarstellung abgebildet.

Alle Ergebnisse wurden unter dem Blickwinkel zweier möglicher Szenarien diskutiert. Ein Szenario postuliert, dass das Defektsystem durch eine Zwangsbedingung an einer Drehung um die y -Achse gehindert wird, was z.B. auch in einer dünnen nematischen Zelle der Fall ist. Eine solche Voraussetzung (Szenario A) bedingt einen invarianten Anströmwinkel κ und erzeugt zur Vermeidung eines Restmomentes M_y eine konstante Wirbelströmung ω_y .

Im anderen Szenario ist die Zwangsbedingung aufgehoben. Es besteht ein Rotationsfreiheitsgrad um die y -Achse (Szenario B). Auszugehen ist davon immer, wenn das nematische Fluid nicht oder nur wenig von den Rändern des Gebiets beeinflusst wird. Hier wird das Prinzip der minimalen freien Energie wirksam, welches bedeutet, dass sich Defektstrukturen mit ihrer Hauptachse immer zur Anströmrichtung parallel ausrichten. Igeldefektdipole bevorzugen die negative z -Richtung, weil mit zunehmender ER das Maximum der freien Energie ein wenig in positiver κ -Richtung verschoben ist. Bei Saturndisklinationen sind wegen der zusätzlichen x - y -Symmetrie positive und negative z -Richtung nicht zu unterscheiden. In beiden Fällen bildet dabei die freie Energie als Funktion des Anströmwinkels κ ein Doppelmuldenpotential ab, im Falle der Saturndisklination mit zwei gleich tiefen Mulden. Beim Igeldefektdipol ist die Mulde bei $\kappa = -\frac{\pi}{2}$ tiefer.

Abschließend seien nochmals die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit aufgelistet:

- Die - dimensionslose - Stokeskraft ist über ER bei senkrechter Anströmung $\kappa = 0$ bei beiden Defekttypen bis $ER \approx 4$ nahezu konstant bis leicht degressiv. Ab $ER \approx 10$ nimmt bei der Saturndisklination diese degressive Tendenz zu (Szenario A).
- Dagegen nimmt die Stokeskraft über ER bei achsparalleler Anströmung $\kappa = \pm\frac{\pi}{2}$ bei beiden Defekttypen monoton zu, wenn man die Ericksenzahlen bei Anströmung

in negativer z -Richtung mit negativem Vorzeichen darstellt. Der Anstieg ist beim Igeldefektdipol stärker ausgeprägt. Bei der Saturndisklination verlief die Stokeskurve bis $ER \approx 4$ nahezu horizontal, um dann deutlicher anzusteigen (Szenario B).

- Der achsparallele Defektstand des hyperbolischen Defekts r_d bildet die Tendenz der Funktion $\eta_z(ER)$ verstärkt ab, nimmt also mit ER noch mehr zu. Der Defekt wandert dabei mit zunehmender ER stets entgegen der Anströmrichtung aus. Diese Regel gilt offenbar auch bei senkrechter oder schräger Anströmung.¹ Eine Lageveränderung des Saturnrings konnte jedoch in keinem Fall beobachtet werden, dafür aber mit steigenden Ericksenzahlen erhebliche Feldverzerrungen.
- Die numerischen Ergebnisse der zweidimensionalen Rechnung wurden bezüglich Stokeskraft und Defektstand bestätigt. Allerdings sind die Grenzen stabiler Konvergenz in Richtung negativer ER verschoben.
- Das Anisotropieverhältnis bezieht die Stokeskräfte in den beiden Hauptachsen aufeinander und ist damit eine Messgröße für das anisotrope Verhalten des Systems. Die Stokeskraft ist in x -Richtung am größten und nimmt mit $\kappa \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}$ monoton ab. Das Anisotropieverhältnis selbst fällt mit zunehmender ER . Nachstehend die berechneten Werte:

Igeldefektdipol, positive z -Richtung	$\frac{\eta_x}{\eta_z} = 1.38\dots 1.29; (ER = 0\dots 3)$
Igeldefektdipol, negative z -Richtung	$\frac{\eta_x}{\eta_z} = 1.38\dots 1.42; (ER = 0\dots -3)$
Saturndisklination,	$\frac{\eta_x}{\eta_z} = 1.83\dots 1.71; (ER = 0\dots 15)$

- Die Winkelgeschwindigkeit ω_y fällt überall degressiv mit steigender Ericksenzahl ER , ebenso fällt sie bei konstanter ER und steigendem Absolutwert $|\kappa|$.

- Grenzen stabiler Relaxationen und Feldstrukturen:

beim Igeldefektdipol und senkrechter Anströmung:	bis $ER \approx 3$;
	bei achsparalleler Anströmung: $ER \approx -50\dots \approx +3$;
bei der Saturndisklination, senkrechte Anströmung:	bis $ER \approx 4(\approx 20)$;
	bei achsparalleler Anströmung: bis $ER \approx 15(\approx 25)$.

Die eingeklammerten erweiterten Grenzen stehen für stabile Relaxationen bei einzelnen lokal eng begrenzten Störungen des Direktorfeldes. Der gültige Bereich deckt bei der Saturndisklination und beim Szenario B des Igeldefektdipols alle im Gravitationsfeld zu erwartenden Anwendungsfälle einschließlich des extremen Falls der Golddispersion ab. Auch für Szenario A des Igeldefektdipols gilt dies in den meisten Fällen, wenn man von dem zuletzt genannten Extrem absieht.

¹Die Defektauslenkung ist ausschließlich bestimmt vom jeweiligen Gleichgewichtszustand des Drehmomentenfeldes. Es ist daher nicht vergleichbar mit der Auslenkung eines konsistenten Gebildes unter dem Einfluss hydrodynamischer Kräfte. Intuitiv könnte man fälschlich ein solches Phänomen vermuten.

- Für Anströmung unter allen $\kappa \neq 0, \pm \frac{\pi}{2}$ (Schräganströmung) ist stets vom Szenario A, $\omega_y \neq 0$ auszugehen. Alle berechneten Größen (freie Energie, effektive Viskositäten, Winkelgeschwindigkeit) ordnen sich stetig zwischen die beiden Extreme senkrechte und achsparallele Anströmung ein. Bei Schräganströmung fällt die Richtung der Stokeskraft(Winkel β) nicht mehr genau mit der Anströmrichtung(Winkel κ) zusammen. Diese Deviation $\delta = \kappa - \beta$ ist bei der Saturndisklination stärker ausgeprägt.

Die Lösung des Stokesproblems sphärischer Teilchen in nematischer Umgebung im Direktorbild mit Hilfe der vollständigen nicht linearen Leslie-Eriksengleichungen, bei Zulassung beliebiger Ericksenzahlen und Anströmwinkel, ist mit dieser Abhandlung weitgehend abgeschlossen. Aus der Sicht des Autors sind folgende weiterführenden physikalischen Fragestellungen von besonderem Interesse:

- Experimentelle Verifizierung der berechneten Stokeskräfte(ggf. indirekt durch Messung der anisotropen Diffusionskonstanten).
- Gibt es eine physikalische Entsprechung der numerischen Verfahrensgrenzen bei höheren Ericksenzahlen? Ab welchen Grenz-Ericksenzahlen löst sich die nematische Orientierungsordnung ggf. auf, bzw. tut sie das überhaupt?
- Lässt sich unter Szenario A die Rotation der sphärischen Partikel experimentell beobachten?

Eine Herausforderung für die Freaks der numerischen Physik auf dem Computer ist die Lösung des vollständigen dreidimensionalen Stokesproblem von nematischen Defektstrukturen im Q-Tensorbild. Es gibt zwar schon Ansätze in dieser Richtung^[18]², welche sich bisher jedoch mit erheblichen Restriktionen begnügen mussten. Um den beim Q-Tensor um Größenordnungen höheren Rechenaufwand in Grenzen zu halten, wurde das Projekt auf die isotrope Phase eines nematischen Fluids bei achsparallele Anströmung beschränkt. Insofern ist eine Vergleichbarkeit mit den hier vorgestellten Ergebnissen in Frage gestellt.

²*Jun-ichi Fukuda* Effect of hydrodynamic flow on the orientation profiles of nematic liquid crystal around a spherical particle. conference proceeding *Nanotechnology Research Institute, Tsukuba, Japan* Mai 2004.

Anhang A

Ergänzende Berechnungen zum Kapitel 1 (Kugelkoordinaten).

In dieser Arbeit wurde ebenso wie schon in [16] und [17] mit tensoriellen bzw. vektoriellen Größen und deren differentiellen Derivaten gerechnet, wobei i.d.R. eine koordinatenfreie Darstellung bevorzugt wurde. Es handelte sich unter anderem um den Spannungstensor σ bzw. σ' und seiner Divergenz, um den Geschwindigkeitsgradienten mit seinem symmetrischen Anteil \mathbf{A} und den zur Beschreibung seines antisymmetrischen Teils benötigten Vektor \mathbf{N} . Dabei wird σ' in Termen von \mathbf{A} - und \mathbf{N} -Komponenten ausgedrückt.

Aus physikalischen Gründen hatten wir uns bei der analytischen und numerischen Rechnung für Kugelkoordinaten entschieden. Krummlinige Koordinaten haben jedoch im Gegensatz zu kartesischen den Nachteil, dass das orthogonale Dreibein der Einheitsvektoren mit der Änderung des Ortsvektors ständig seine Lage im Ortsraum ändert, was dazu führt, dass Ableitungen von Einheitsvektoren i.d.R. nicht verschwinden, sondern - unter Beachtung der Produktregel - zu berücksichtigen sind. Dies verursacht kompliziertere Formen für alle mit Differentialoperatoren gebildeten Ausdrücke wie $\text{grad } \mathbf{v}$, $\mathbf{A} = \text{def } \mathbf{v}$, $\mathbf{N} = \dot{\mathbf{n}} - \frac{1}{2}[\text{rot } \mathbf{v} \times \mathbf{n}]$ und $\text{div } \sigma'$.

Sei \mathbf{x} der Ortsvektor einer Funktion P, beschrieben in Kugelkoordinaten:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \phi \\ r \sin \theta \sin \phi \\ r \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

mit den Basisvektoren

$$\mathbf{e}_r = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad \mathbf{e}_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \\ \cos \theta \sin \phi \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \quad \mathbf{e}_\phi = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Daraus berechnet man die partiellen Ortsableitungen der Basisvektoren. Wo es die Übersichtlichkeit erlaubt, werden wir im folgenden partielle Ableitungen in Indexschreibweise

angeben:

$$\begin{aligned}
e_{r,r} &= 0 & e_{\theta,r} &= 0 & e_{\phi,r} &= 0 \\
e_{r,\theta} &= e_\theta & e_{\theta,\theta} &= -e_r & e_{\phi,\theta} &= 0 \\
e_{r,\phi} &= \sin \theta e_\phi & e_{\theta,\phi} &= \cos \theta e_\phi & e_{\phi,\phi} &= -\sin \theta e_r - \cos \theta e_\theta.
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Bei der numerischen Rechnung ist es zweckmäßig, mit dem reziproken Radius $\rho = 1/r$ zu arbeiten. Dies verlangt folgende Variablentransformation:

$$\rho = \frac{1}{r} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial \rho}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \rho} = -\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho}. \tag{A.4}$$

A.1 Gradient und Divergenz eines Vektorfeldes.

Den *Gradienten* eines Skalars schreibt man in Kugelkoordinaten[1, S.566] unter Verwendung von Gl. A.4

$$\nabla = \nabla_i e_i = -\frac{\partial}{\partial \rho} e_\rho + \rho \frac{\partial}{\partial \theta} e_\theta + \frac{\rho}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} e_\phi. \tag{A.5}$$

Angewandt auf einen Vektor \mathbf{v} erhält man einen Tensor 2.Stufe. \mathbf{v} steht für einen beliebigen Vektor, kann also in unserem Fall sowohl der Geschwindigkeitsvektor als auch der Direktor sein

$$\begin{aligned}
\text{grad } \mathbf{v} &= (\nabla \otimes \mathbf{v})^t \\
&= (\nabla_i \mathbf{v} \otimes e_i) \otimes e_j \\
&= (\nabla_\rho \mathbf{v} \otimes e_\rho + \nabla_\theta \mathbf{v} \otimes e_\theta + \nabla_\phi \mathbf{v} \otimes e_\phi) \otimes e_j \\
&= (-\rho^2 v_{\rho,\rho} e_\rho - \rho_{\theta,\rho}^2 e_\theta - \rho^2 v_{\phi,\rho} e_\phi) \otimes e_\rho \\
&\quad + (\rho v_{\rho,\theta} e_\rho + \rho v_\rho e_\theta + \rho v_{\theta,\theta} e_\theta - \rho v_\theta e_\rho + \rho v_{\phi,\theta} e_\phi) \otimes e_\theta \\
&\quad + \left(\frac{\rho}{\sin \theta} v_{\rho,\phi} e_\rho + \rho v_\rho e_\theta + \frac{\rho}{\sin \theta} v_{\theta,\phi} e_\theta + \frac{\rho}{\tan \theta} v_\theta e_\phi + \frac{\rho}{\sin \theta} v_{\phi,\phi} e_\phi \right. \\
&\quad \left. - \rho v_\phi e_\rho + \frac{\rho}{\tan \theta} v_\phi e_\theta \right) \otimes e_\phi
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Wichtiger Hinweis: Nach der Produktregel wirken die Nabla-Operatoren in A.6 auch auf die Basisvektoren e_i . Die Anordnung der Terme in der Matrix des Gradienten-Tensors A.7 geschieht nach folgender Regel: Die Zeile wird bestimmt durch die Einheitsvektoren e_i , die Spalte durch den Einheitsvektoren e_j .

$$\text{grad } \mathbf{v} = v_{i,j} = \begin{vmatrix} -\rho^2 v_{\rho,\rho} & \rho(v_{\rho,\theta} - v_\theta) & \rho \left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - v_\phi \right) \\ -\rho^2 v_{\theta,\rho} & \rho(v_{\theta,\theta} + v_\rho) & \rho \left(\frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{v_\phi}{\tan \theta} \right) \\ -\rho^2 v_{\phi,\rho} & \rho v_{\phi,\theta} & \rho \left(\frac{v_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + v_\rho + \frac{v_\theta}{\tan \theta} \right) \end{vmatrix}. \tag{A.7}$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes \mathbf{v} :

Man gewinnt $\operatorname{div} \mathbf{v}$ durch Bildung der Spur des Tensors $\operatorname{grad} \mathbf{v}$ (A.7)

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \operatorname{Sp}(\operatorname{grad} \mathbf{v}) = -\rho^2 v_{\rho,\rho} + \rho \left(v_{\theta,\theta} + 2v_\rho + \frac{v_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + \frac{v_\theta}{\tan \theta} \right). \quad (\text{A.8})$$

$\operatorname{div} \mathbf{v}$ ist ein Skalar. Mit der Inkompressibilitätsbedingung gleich Null gesetzt erhält man die Bestimmungsgleichung für den Druck.

A.2 Die Deformationsrate.

Die Deformationsrate \mathbf{A} ist der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradiententensors $\operatorname{grad} \mathbf{v}$ (A.7)

$$A_{ij} = \frac{1}{2} (\nabla_j v_i e_i \otimes e_j + \nabla_i v_j e_j \otimes e_i). \quad (\text{A.9})$$

Mit (A.4) und (A.7) ergeben sich daraus die Komponenten der Deformationsrate:

$$A_{\rho\rho} = -\rho^2 v_{\rho,\rho}; \quad (\text{A.10})$$

$$A_{\theta\theta} = \rho (v_{\theta,\theta} + v_\rho); \quad (\text{A.11})$$

$$A_{\phi\phi} = \rho \left(v_\rho + \frac{v_\theta}{\tan \theta} + \frac{v_{\phi,\phi}}{\sin \theta} \right); \quad (\text{A.12})$$

$$A_{\rho\theta} = \frac{\rho}{2} (v_{\rho,\theta} - \rho v_{\theta,\rho} - v_\theta) = A_{\theta\rho}; \quad (\text{A.13})$$

$$A_{\rho\phi} = \frac{\rho}{2} \left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - \rho v_{\phi,\rho} - v_\phi \right) = A_{\phi\rho}; \quad (\text{A.14})$$

$$A_{\theta\phi} = \frac{\rho}{2} \left(\frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} + v_{\phi,\theta} - \frac{v_\phi}{\tan \theta} \right) = A_{\phi\theta}. \quad (\text{A.15})$$

A.3 Die Direktor-Änderungsrate.

Dieser Vektor beschreibt die Änderungen des Direktorfeldes in Bezug auf die ungestörte Strömung: - siehe [3, S.203,(5.22)]

$$\mathbf{N} = \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad} \mathbf{n} + \frac{1}{2} [\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{v}]. \quad (\text{A.16})$$

Unter der Voraussetzung einer stationären Strömung gilt $\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} = 0$. Im Unterschied zu [16] und [17] kann man jedoch nicht von vorherein ein zur z -Achse axialsymmetrisches Direktorfeld voraussetzen. Man muss deshalb Terme mit ϕ -Komponenten des Direktor und allen Ortsableitungen nach ϕ mitnehmen:

$$n_\phi \neq 0 \quad \text{ebenso} \quad n_{\rho,\phi} \neq 0; \quad n_{\theta,\phi} \neq 0; \quad n_{\phi,\phi} \neq 0.$$

Wir berechnen zuerst die konvektive Ableitung. Das Matixprodukt der Geschwindigkeit mit dem Direktorgradienten (Gl. A.7) ist eine vektorielle Größe:

$$\mathbf{v} \cdot \text{grad } \mathbf{n} = \begin{vmatrix} -\rho^2 n_{\rho,\rho} v_\rho + \rho(n_{\rho,\theta} - n_\theta) v_\theta + \rho \left(\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - n_\phi \right) v_\phi \\ -\rho^2 n_{\theta,\rho} v_\rho + \rho(n_{\theta,\theta} + n_\rho) v_\theta + \rho \left(\frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_\phi}{\tan \theta} \right) v_\phi \\ -\rho^2 n_{\phi,\rho} v_\rho + \rho n_{\phi,\theta} v_\theta + \rho \left(\frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + n_\rho + \frac{n_\theta}{\tan \theta} \right) v_\phi \end{vmatrix} \quad (\text{A.17})$$

Nun berechnen wir den zweiten Term $\frac{1}{2}[\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{v}]$, wobei wir die Formel für $\text{rot } \mathbf{v}$ in Kugelkoordinaten dem Taschenbuch [1, S.574] entnehmen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}[\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{v}] &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} n_\rho \\ n_\theta \\ n_\phi \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \rho \left(v_{\phi,\theta} + \frac{v_\phi}{\tan \theta} - \frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} \right) \\ \rho \left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - v_\phi + \rho v_{\phi,\rho} \right) \\ \rho (v_\theta - \rho v_{\theta,\rho} - v_{\rho,\theta}) \end{vmatrix} \\ &= \frac{\rho}{2} \begin{vmatrix} (v_\theta - \rho v_{\theta,\rho} - v_{\rho,\theta}) n_\theta - \left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - v_\phi + \rho v_{\phi,\rho} \right) n_\phi \\ \left(v_{\phi,\rho} + \frac{v_\phi}{\tan \theta} - \frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} \right) n_\phi - (v_\theta - \rho v_{\theta,\rho} - v_{\rho,\theta}) n_\rho \\ \left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - v_\phi + \rho v_{\phi,\rho} \right) n_\rho - \left(v_{\phi,\theta} + \frac{v_\phi}{\tan \theta} - \frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} \right) n_\theta \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Mit den Gln. A.17 und A.19 lassen sich die Komponenten des Vektors \mathbf{N} angeben:

$$\begin{aligned} N_\rho &= -\rho^2 n_{\rho,\rho} v_\rho + \rho(n_{\rho,\theta} - n_\theta) v_\theta + \rho \left(\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - n_\phi \right) v_\phi \\ &\quad + \frac{\rho}{2} \left((v_\theta - \rho v_{\theta,\rho} - v_{\rho,\theta}) n_\theta - \left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - v_\phi + \rho v_{\phi,\rho} \right) n_\phi \right) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} N_\theta &= -\rho^2 n_{\theta,\rho} v_\rho + \rho(n_{\theta,\theta} + n_\rho) v_\theta + \rho \left(\frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_\phi}{\tan \theta} \right) v_\phi \\ &\quad + \frac{\rho}{2} \left(\left(v_{\phi,\rho} + \frac{v_\phi}{\tan \theta} - \frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} \right) n_\phi - (v_\theta - \rho v_{\theta,\rho} - v_{\rho,\theta}) n_\rho \right) \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} N_\phi &= -\rho^2 n_{\phi,\rho} v_\rho + \rho n_{\phi,\theta} v_\theta + \rho \left(\frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + n_\rho + \frac{n_\theta}{\tan \theta} \right) v_\phi \\ &\quad + \frac{\rho}{2} \left(\left(\frac{v_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - v_\phi + \rho v_{\phi,\rho} \right) n_\rho - \left(v_{\phi,\theta} + \frac{v_\phi}{\tan \theta} - \frac{v_{\theta,\phi}}{\sin \theta} \right) n_\theta \right). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

A.4 Die Divergenz des Spannungstensors.

Die Divergenz eines Tensors 2. Stufe ist ein Vektor. Beim vorliegenden Problem liefern seine Komponenten - gleich Null gesetzt - die drei Gleichungen für das Geschwindigkeitsfeld. (Insgesamt werden sechs Bestimmungsgleichungen benötigt). Der Spannungstensor sei

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{ij} e_i \otimes e_j. \quad (\text{A.23})$$

Dann ist die Divergenz dieses Tensors wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= (\nabla_j \boldsymbol{\sigma}) e_j = (\nabla_j \sigma_{kl} e_k \otimes e_l) e_j \\ &= (\nabla_j \sigma_{kl}) e_k \delta_{jl} + \sigma_{kl} (\nabla_j e_k) \delta_{jl} + \sigma_{kl} e_k (\nabla_j e_l) \cdot e_j \\ &= \nabla_l \sigma_{kl} e_k + \sigma_{kl} (\nabla_l e_k) + \sigma_{kl} e_k (\nabla_j e_l) \cdot e_j. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Im zweiten Term von Gl. A.24 ergeben sich mit (A.3) für $\nabla_l e_k$ fünf Möglichkeiten $\neq 0$, wobei wir die Substitution $\rho = 1/r$ nach Gl. A.4 vorab vornehmen: ($l = r \Rightarrow \nabla_l e_k = 0$; $l = \theta, k = \phi \Rightarrow \nabla_l e_k = 0$)

$$\nabla_\theta e_r = \rho e_\theta, \quad \nabla_\theta e_\theta = -\rho e_\rho, \quad \nabla_\phi e_r = \rho e_\phi,$$

$$\nabla_\phi e_\theta = \frac{\rho}{\tan \theta} e_\phi, \quad \nabla_\phi e_\phi = -\rho e_\rho - \frac{\rho}{\tan \theta} e_\theta.$$

Im dritten Term von Gl. A.24 ergeben sich mit (A.3) für $(\nabla_j e_l) \cdot e_j$ drei Möglichkeiten $\neq 0$: ($l = r \Rightarrow (\nabla_j e_l) \cdot e_j = 0$; $l = \theta, k = \phi \Rightarrow (\nabla_j e_l) \cdot e_j = 0$; außerdem verschwinden Skalarprodukte orthogonaler Basisvektoren)

$$(\nabla_\theta e_\rho) \cdot e_\theta = -\rho, \quad (\nabla_\phi e_\rho) \cdot e_\phi = \rho, \quad (\nabla_\phi e_\theta) \cdot e_\phi = \frac{\rho}{\tan \theta}.$$

Nach dieser Zwischenrechnung sind wir mit den Gln. A.23 und A.24 in der Lage, die Komponenten des Vektors $\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}$ anzugeben:

$$\begin{aligned} (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma})_\rho &= -\rho^2 \sigma_{\rho\rho,\rho} + \rho \sigma_{\rho\theta,\theta} + \frac{\rho}{\sin \theta} \sigma_{\rho\phi,\phi} - \rho \sigma_{\theta\theta} - \rho \sigma_{\phi\phi} \\ &\quad + 2\rho \sigma_{\rho\rho} + \frac{\rho}{\tan \theta} \sigma_{\rho\theta}; \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

$$\begin{aligned} (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma})_\theta &= -\rho^2 \sigma_{\theta\rho,\rho} + \rho \sigma_{\theta\theta,\theta} + \frac{\rho}{\sin \theta} \sigma_{\theta\phi,\phi} + \rho \sigma_{\rho\theta} - \frac{\rho}{\tan \theta} \sigma_{\phi\phi} \\ &\quad + 2\rho \sigma_{\theta\rho} + \frac{\rho}{\tan \theta} \sigma_{\theta\theta}; \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{aligned} (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma})_\phi &= -\rho^2 \sigma_{\phi\rho,\rho} + \rho \sigma_{\phi\theta,\theta} + \frac{\rho}{\sin \theta} \sigma_{\phi\phi,\phi} + \rho \sigma_{\rho\phi} + \frac{\rho}{\tan \theta} \sigma_{\theta\phi} \\ &\quad + 2\rho \sigma_{\phi\rho} + \frac{\rho}{\tan \theta} \sigma_{\phi\theta}. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

A.5 Das statische Molekularfeld.

Das statische Molekularfeld in Kugelkoordinaten erhält man aus der Euler-Lagrange-Gleichung für die freie Verzerrungsenergiedichte f_d . Die statische Gleichgewichtsbedingung verlangt, dass die Verzerrungsenergie des Systems

$$\mathcal{F} = \int f_d d^3r \quad (\text{A.28})$$

minimiert wird. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn das statische Molekularfeld kollinear dem Direktorfeld ist:[3, S.107 - 3.1.3.4], siehe auch 1.8

$$h_j^d = \frac{\delta f_d}{\delta n_j} = -\frac{\partial f_d}{\partial n_j} + \partial_i \left(\frac{\partial f_d}{\partial (\partial_i n_j)} \right). \quad (\text{A.29})$$

In Ein-Konstantennäherung ist die freie Verzerrungsenergiedichte unter Beachtung des bei Kugelkoordinaten zu berücksichtigenden Volumenelementes $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ und mit $r = \frac{1}{\rho}$, $dr = -\frac{1}{\rho^2} d\rho$

$$\begin{aligned} f_d &= \frac{K}{2} n_{j,i}^2 \frac{-\sin \theta}{\rho^4} \\ f_d &= -\frac{K \sin \theta}{2} \left(n_{\rho,\rho}^2 + n_{\theta,\rho}^2 + n_{\phi,\rho}^2 + \frac{1}{\rho^2} \left((n_{\rho,\theta} - n_\theta)^2 + (n_{\theta,\theta} + n_\rho)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + n_\rho + \frac{n_\theta}{\tan \theta} \right)^2 + n_{\phi,\theta}^2 + \left(\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - n_\phi \right)^2 + \left(\frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_\phi}{\tan \theta} \right)^2 \right) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Bei dieser Berechnung von f_d benötigen wir das skalare Matrixprodukt $n_{j,i}^2$ des *transponierten* Gradiententensors, welchen wir auf Seite 88 in Gl. A.7 finden und den wir zuvor in seine transponierte Form umwandeln müssen.

Indem wir Gl. A.29 mit f_d in Gl. A.30 auswerten, erhalten wir die diversen Differentialoperatoren. Zunächst die Ergebnisse des ersten Terms $-\frac{\partial f_d}{\partial n_j}$:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial f_d}{\partial n_\rho} &= \frac{K \sin \theta}{\rho^2} \left(n_{\theta,\theta} + 2n_\rho + \frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + \frac{n_\theta}{\tan \theta} \right); \\ -\frac{\partial f_d}{\partial n_\theta} &= \frac{K \sin \theta}{\rho^2} \left(-n_{\rho,\theta} + n_\theta + \frac{n_\theta}{(\tan \theta)^2} + \frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta \tan \theta} + \frac{n_\rho}{\tan \theta} \right); \\ -\frac{\partial f_d}{\partial n_\phi} &= \frac{K \sin \theta}{\rho^2} \left(-\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} + n_\phi - \frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta \tan \theta} + \frac{n_\phi}{(\tan \theta)^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Es folgen die Auswertungen des zweiten Terms $\partial_i \left(\frac{\partial f_d}{\partial (\partial_i n_j)} \right)$:

$$\begin{aligned}
\partial_\rho \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\rho,\rho})} &= \partial_\rho(-K \sin \theta n_{\rho,\rho}) &= & -K n_{\rho,\rho} \sin \theta; \\
\partial_\theta \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\rho,\theta})} &= \partial_\theta\left(\frac{-K \sin \theta}{\rho^2}(n_{\rho,\theta} - n_\theta)\right) &= & \frac{-K}{\rho^2}(\cos \theta(n_{\rho,\theta} - n_\theta) + \sin \theta(n_{\rho,\theta\theta} - n_{\theta,\theta})); \\
\partial_\phi \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\rho,\phi})} &= \partial_\phi\left(\frac{-K \sin \theta}{\rho^2}\left(\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - n_\phi\right)\right) &= & \frac{-K}{\rho^2}\left(\frac{n_{\rho,\phi\phi}}{\sin \theta} - n_{\phi,\phi}\right); \\
\partial_\rho \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\theta,\rho})} &= \partial_\rho(-K \sin \theta n_{\theta,\rho}) &= & -K n_{\theta,\rho} \sin \theta; \\
\partial_\theta \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\theta,\theta})} &= \partial_\theta\left(\frac{-K \sin \theta}{\rho^2}(n_{\theta,\theta} + n_\rho)\right) &= & \frac{-K}{\rho^2}(\cos \theta(n_{\theta,\theta} + n_\rho) + \sin \theta(n_{\theta,\theta\theta} + n_{\rho,\theta})); \\
\partial_\phi \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\theta,\phi})} &= \partial_\phi\left(\frac{-K}{\rho^2}\left(\frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_\phi}{\tan \theta}\right)\right) &= & \frac{-K}{\rho^2}\left(\frac{n_{\theta,\phi\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_{\phi,\phi}}{\tan \theta}\right); \\
\partial_\rho \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\phi,\rho})} &= \partial_\rho(-K \sin \theta n_{\phi,\rho}) &= & -K n_{\phi,\rho} \sin \theta; \\
\partial_\theta \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\phi,\theta})} &= \partial_\theta\left(\frac{-K \sin \theta}{\rho^2} n_{\phi,\theta}\right) &= & \frac{-K}{\rho^2}(\cos \theta(n_{\phi,\theta}) + \sin \theta(n_{\phi,\theta\theta})); \\
\partial_\phi \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\phi,\phi})} &= \partial_\phi\left(\frac{-K}{\rho^2}\left(\frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + n_\rho + \frac{n_\theta}{\tan \theta}\right)\right) &= & \frac{-K}{\rho^2}\left(\frac{n_{\phi,\phi\phi}}{\sin \theta} + n_{\rho,\phi} + \frac{n_{\theta,\phi}}{\tan \theta}\right);
\end{aligned} \tag{A.32}$$

Mit den Einzelergebnissen in (A.31) und (A.32) lassen sich die drei Vektorkomponenten des statischen Molekularfeldes gemäß Gl. A.29 zusammensetzen, wobei die explizite Berechnung vom Rechnerprogramm vorgenommen wird - siehe Anhang B. Bei der dimensionslosen Rechnung ist hierbei $K = \hat{K} = \frac{\hat{\eta}}{ER}$ zu setzen:

$$\begin{aligned}
h_\rho^d &= -\frac{\partial f_d}{\partial n_\rho} + \partial_\rho \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\rho,\rho})} + \partial_\theta \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\rho,\theta})} + \partial_\phi \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\rho,\phi})}; \\
h_\theta^d &= -\frac{\partial f_d}{\partial n_\theta} + \partial_\rho \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\theta,\rho})} + \partial_\theta \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\theta,\theta})} + \partial_\phi \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\theta,\phi})}; \\
h_\phi^d &= -\frac{\partial f_d}{\partial n_\phi} + \partial_\rho \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\phi,\rho})} + \partial_\theta \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\phi,\theta})} + \partial_\phi \frac{\partial f_d}{\partial(n_{\phi,\phi})}.
\end{aligned} \tag{A.33}$$

A.6 Das viskose Molekularfeld.

Die Komponenten des viskosen Molekularfeldvektors lassen sich nach dessen Definition in [3, S.206 (5.32)] wie folgt angeben:

$$\begin{aligned}
h'_\rho &= \gamma_1 N_\rho + \gamma_2(A_{\rho\rho}n_\rho + A_{\rho\theta}n_\theta + A_{\rho\phi}n_\phi); \\
h'_\theta &= \gamma_1 N_\theta + \gamma_2(A_{\theta\rho}n_\rho + A_{\theta\theta}n_\theta + A_{\theta\phi}n_\phi); \\
h'_\phi &= \gamma_1 N_\phi + \gamma_2(A_{\phi\rho}n_\rho + A_{\phi\theta}n_\theta + A_{\phi\phi}n_\phi);
\end{aligned} \tag{A.34}$$

In dieses Gleichungssystem sind die explizit berechneten Ausdrücke für N_ρ (Gl.A.21), N_θ (Gl.A.22) und N_ϕ (Gl.A.22) einzusetzen. Ebenso verfährt man mit den in den Gleichungen A.10...A.15 bestimmten neun Komponenten A_{ij} des Tensors der Deformationsrate,

Abschnitt A.2. Diese Operation wird innerhalb des Rechnerprogramms ausgeführt und ist deshalb hier nicht detailliert dargestellt, weil sie jederzeit in trivialer Weise nachvollziehbar ist.

A.7 Dynamischer Anteil des elastischen Spannungstensors

In koordinatenfreier Darstellung wurde dieser in Gl. 1.19 beschrieben:

$$h'_k \partial_i n_k = (\gamma_1 N_k + \gamma_2 A_{kl} n_l) \partial_i n_k. \quad (\text{A.35})$$

In Gl. A.35 sind die alle Komponenten N_k und A_{kl} bekannt, wie schon im vorhergehenden Abschnitt A.6 unter Hinweis auf die entsprechenden Referenznummern dargelegt wurde. Benötigt wird noch der transponierte Direktorgradient $\partial_i n_k$, dessen Matrix sich durch Vertauschen von Zeilen- und Spaltenindizes in Gl. A.7 wie folgt darstellt:

$$\partial_i n_k = n_{k,i} = \begin{vmatrix} -\rho^2 n_{\rho,\rho} & -\rho^2 n_{\theta,\rho} & -\rho^2 n_{\phi,\rho} \\ \rho(n_{\rho,\theta} - n_\theta) & \rho(n_{\theta,\theta} + n_\rho) & \rho n_{\phi,\theta} \\ \rho \left(\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - n_\phi \right) & \rho \left(\frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_\phi}{\tan \theta} \right) & \rho \left(\frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + n_\rho + \frac{n_\theta}{\tan \theta} \right) \end{vmatrix}. \quad (\text{A.36})$$

Mit Gl. A.34 schreibt man die die Komponenten des dynamischen Anteils des elastischen Spannungstensors wie folgt:

$$\begin{aligned} (h'_k n_{k,i})_\rho &= h'_k n_{k,\rho} = -\rho^2 (h'_\rho n_{\rho,\rho} + h'_\theta n_{\theta,\rho} + h'_\phi n_{\phi,\rho}); \\ (h'_k n_{k,i})_\theta &= h'_k n_{k,\theta} = \rho (h'_\rho (n_{\rho,\theta} - n_\theta) + h'_\theta (n_{\theta,\theta} + n_\rho) + h'_\phi n_{\phi,\theta}); \\ (h'_k n_{k,i})_\phi &= h'_k n_{k,\phi} = \rho \left(h'_\rho \left(\frac{n_{\rho,\phi}}{\sin \theta} - n_\phi \right) + h'_\theta \left(\frac{n_{\theta,\phi}}{\sin \theta} - \frac{n_\phi}{\tan \theta} \right) \right. \\ &\quad \left. + h'_\phi \left(\frac{n_{\phi,\phi}}{\sin \theta} + n_\rho + \frac{n_\theta}{\tan \theta} \right) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Die explizite Berechnung mit den vollständig ausgewerteten Komponenten des Vektors \mathbf{h}' erledigt das Rechnerprogramm, siehe Anhang B.

A.8 Zum Oberflächenintegral des Spannungstensors

Im folgenden wird die auf unseren Fall spezialisierte Berechnung des Oberflächenintegrals zur Bestimmung der Stokesschen Kräfte und Momente erläutert, die auf das sphärische Teilchen wirken. Wir gehen von den Gleichungen 1.78, 1.79 und 1.84 des Theorieteils aus:

$$F'_x = \int (\sin \theta \cos \phi \sigma'_{rr} + \cos \theta \cos \phi \sigma'_{\theta r} - \sin \phi \sigma'_{\phi r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi; \quad (\text{A.38})$$

$$F'_z = \int (\cos \theta \sigma'_{rr} - \sin \theta \sigma'_{\theta r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (\text{A.39})$$

$$F_x^D = - \int \sin^2 \theta \cos \phi \tilde{p} d\theta d\phi; \quad (\text{A.40})$$

$$F_z^D = - \int \sin \theta \cos \theta \tilde{p} d\theta d\phi. \quad (\text{A.41})$$

$$M_y = + \int (\cos \phi \sigma_{\theta r} - \cos \theta \sin \phi \sigma_{\phi r}) \sin \theta d\theta d\phi \quad (\text{A.42})$$

Gegeben sei die Definition des viskosen Spannungstensor in [3 S.206,(5.31)] bzw. in Gl. 1.3

$$\sigma'_{ij} = \alpha_1 n_i n_j n_k n_l A_{kl} + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_j n_k A_{ik} + \alpha_6 n_i n_k A_{jk}. \quad (\text{A.43})$$

Zur Berechnung der Integrale benötigen wir dessen Komponenten σ'_{rr} , $\sigma'_{\theta r}$ und $\sigma'_{\phi r}$. Dabei ist zu beachten, dass auf der Kugeloberfläche bei homöotroper Verankerung der nematischen Moleküle und unter der Voraussetzung einer möglichen Wirbelströmung um die y -Achse die folgenden Bedingungen gelten:

$$n_r = n_\rho = 1.0; \quad n_\theta = n_\phi = 0; \quad (\text{A.44})$$

$$v_r = v_\rho = 0; \quad v_\theta, v_\phi \neq 0; \quad (\text{A.45})$$

$$\begin{aligned} n_{i,\theta} = n_{i,\phi} &= 0; \\ v_{r,\theta} = v_{r,\phi} &= 0; \\ v_{\theta,\theta}, v_{\theta,\phi} &\neq 0; \\ v_{\phi,\theta}, v_{\phi,\phi} &\neq 0; \\ r = \rho &= 1.0; \\ \frac{\partial}{\partial r} = -\frac{\partial}{\partial \rho} &\neq 0; \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Damit reduzieren sich die Komponenten der Deformationsrate \mathbf{A} gemäß den Gln. A.10...A.15 für die Kugeloberfläche wie folgt:

$$\begin{aligned} A_{rr} &= v_{r,r} = -v_{\rho,\rho} \\ A_{r\theta} = A_{\theta r} &= \frac{1}{2}(v_{\theta,r} - v_\theta) = -\frac{1}{2}(v_{\theta,\rho} + v_\theta) \\ A_{r\phi} = A_{\phi r} &= \frac{1}{2}(v_{\phi,r} - v_\phi) = -\frac{1}{2}(v_{\phi,\rho} + v_\phi) \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Die Komponenten des Vektors \mathbf{N} lassen sich bei Beachtung der Gln. A.44...A.47 ohne weiteres aus den Gleichungen A.21..A.22 hinschreiben:

$$\begin{aligned} N_\rho = N_r &= 0; \\ N_\theta &= \frac{1}{2}(v_{\theta,\rho} + v_\theta); \\ N_\phi &= \frac{1}{2}(v_{\phi,\rho} + v_\phi). \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Bei Anwendung aller Zwischenergebnisse lassen sich die drei gesuchten Komponenten des viskosen Spannungstensors auf der Kugeloberfläche mit der Gleichung A.43 bestimmen:

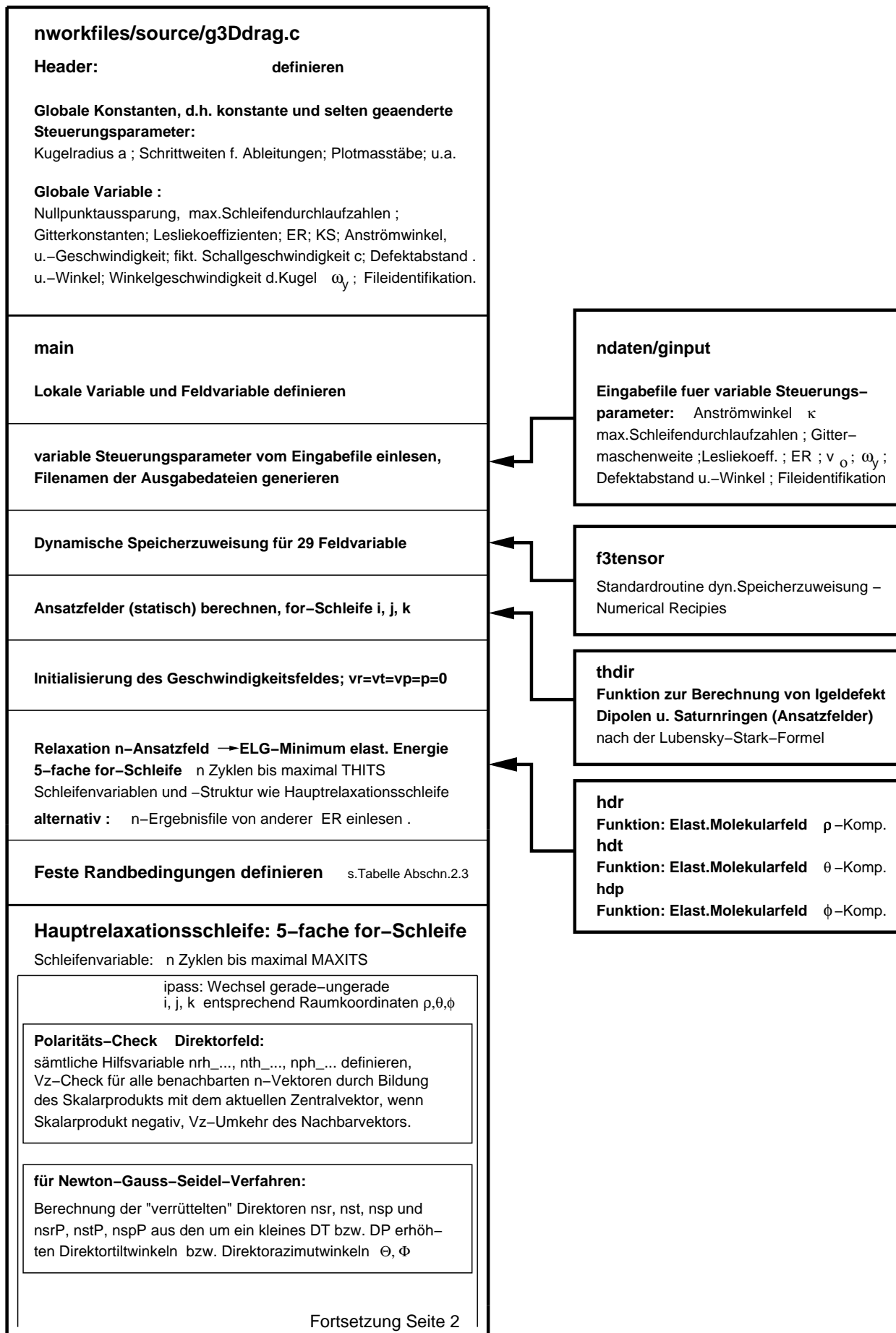
$$\begin{aligned}
 \sigma'_{rr} &= (\alpha_1 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6)A_{rr} = -(\alpha_1 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6)v_{\rho,\rho}; \\
 \sigma'_{\theta r} &= \alpha_2 N_\theta + (\alpha_4 + \alpha_5)A_{\theta r} = \frac{1}{2}(\alpha_2 - \alpha_4 - \alpha_5)(v_{\theta,\rho} + v_\theta); \\
 \sigma'_{\phi r} &= \alpha_2 N_\phi + (\alpha_4 + \alpha_5)A_{\phi r} = \frac{1}{2}(\alpha_2 - \alpha_4 - \alpha_5)(v_{\phi,\rho} + v_\phi).
 \end{aligned} \tag{A.49}$$

Die Ergebnisse von A.49 sind in die Gleichungen 1.78 und 1.84 des Abschnitts 1.7 auf Seite 27 einzusetzen. Zusammen mit den Druckanteilen, Gln. 1.79 ist damit die numerische Auswertung nach den Vorschriften der Gln. 1.78 und 1.84 auf einfache Weise möglich.

Anhang B

Blockdiagramm zur Programmstruktur *g3Ddrag.c*

Die in Abschnitt 2.2 erläuterte Programmstruktur ist auf den folgenden Seiten detailliert als Blockdiagramm dargestellt.



Ortsableitungen des Direktorfeldes berechnen:

9 erste Ableitungen nach ρ, θ, ϕ
 18 zweite und gemischte Ableitungen nach ρ, θ, ϕ
 9 zweite Ableitungen mit um $\Delta\theta$ verrüttelte Zentralkreditoren
 6 zweite Ableitungen mit um $\Delta\phi$ verrüttelte Zentralkreditoren

Ortsableitungen des Geschwindigkeitsfeldes berechnen:

9 erste Ableitungen nach ρ, θ, ϕ
 18 zweite und gemischte Ableitungen nach ρ, θ, ϕ
 Deklaration der um Δv verrüttelten Geschwindigkeitskomponenten
 9 zweite Ableitungen für das um Δv verrüttelte Geschwindigkeitsfeld

Druckfeld berechnen mit der Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes $\text{div } v$

$\text{div } v = \text{Sp}(\text{grad } v)$ Iteration gegen 0 – Methode der künstlichen Kompressibilität
 Residuum berechnen $\text{residps} = \text{div } v \cdot \Delta t / c^2$
 $p = p - \omega \cdot \text{residps}$; $\omega = \text{SOR-Relaxationsfaktor}$, =1 gesetzt
 3 erste Ableitungen des Drucks nach ρ, θ, ϕ berechnen

Berechnung der ρ -, θ -, ϕ - Komponenten des viskosen Spannungstensors

für punktgenaue Geschwindigkeitskomponenten $\text{DSr}, \text{DSt}, \text{DSp}$ (Feldvariable)
 für um Δv verrüttelten Geschwindigkeitskomponenten $\text{DSrplus}, \text{DStplus}, \text{DSpplus}$ (lokale Variable)
 Berechnung erfolgt durch Aufruf von mit MAPLE V berechneten C-Funktionen

Restterme des elastischen Spannungstensors für ρ, θ, ϕ berechnen: $h', \text{grad } n$

für punktgenaue Geschwindigkeitskomponenten $\text{korr}, \text{kort}, \text{korp}$
 für um Δv verrüttelten Geschwindigkeitskomponenten $\text{korr}, \text{korts}, \text{korps}$

Geschwindigkeitskomponenten v_r, v_t, v_p mit dem Newton-Gauss-Seidelverfahren berechnen:

Korrektur durch elastische Restterme EIN/AUS ?
 Ortsableitungen im Nenner der Residuen berechnen $\text{Dtr}, \text{Dtv}, \text{Dtp}$
 Residuen berechnen:
 $\text{residr} = (\text{DSr} + \text{korr}) / \text{Dtr}$;
 $\text{residt} = (\text{DSt} + \text{kors}) / \text{Dtv}$;
 $\text{residp} = (\text{DSp} + \text{korp}) / \text{Dtp}$;
 Residuen (Absolutwerte) je Iterationszyklus aufsummieren. (Abbruchkriterium) $\text{anormr}, \text{anormt}, \text{anormp}$
 Geschwindigkeitskomponenten berechnen:
 $v_r = v_r - \omega \cdot \text{residr}$; $\omega = \text{SOR-Relaxationsfaktor}$
 $v_t = v_t - \omega \cdot \text{residt}$; = 1 gesetzt !
 $v_p = v_p - \omega \cdot \text{residp}$;

divr

Funktion: Divergenz visk. Spannungstensors ρ -Komponente.

divst

Funktion: Divergenz visk. Spannungstensors θ -Komponente.

divsp

Funktion: Divergenz visk. Spannungstensors ϕ -Komponente.

hsr

Funktion: Visk. Molekularfeld ρ -Komp.

hst

Funktion: Visk. Molekularfeld θ -Komp.

hsp

Funktion: Visk. Molekularfeld ϕ -Komp.

nworkfiles/source/g3Ddrag.c

Seite 4

main – Hauptrelaxationsschleife

Fortsetzung

Schleifenvariable (immer noch): n Zyklen bis max. MAXITS

Schleifen zur Extrapolation variabler Randwerte:**Randwerte auf der x-z-Ebene berechnen:**Bedingung: Schleifenvariable $k == 1 \parallel k == K$ äquivalent $\phi == 0 \parallel \phi == \pi$ innere Schleifenvariable: $i = 2 \dots l-1, j = 2 \dots J-1$

zu berechnen mit quadratischer Extrapolation IPOL für

 $k=1$ und $k=K$: vr, vt, p, Θ zu deklarieren (wg Symmetrie) $vp=0, \Phi=0$, bzw. $\Phi=-\pi$; nr, nt, np zu berechnen über Winkelfunktionen von Θ und Φ **Randwerte auf z-Achse berechnen :**Bedingung: Schleifenvariable $j == 1 \parallel j == J$ äquivalent: $\Theta == 0 \parallel \Theta == \pi$ innere Schleifenvariable: $i = 2 \dots l-1, k = 1 \dots K$ **Fall $k == 1 \parallel k == K$**

zu berechnen sind die Mittelwerte für $\Theta vr, vt, p$ aus den durch die diametral benachbarten Ortsvektoren ($\theta=\Delta\theta, \theta=\pi-\Delta\theta$) definierten Nachbarwerten. Es ist zu beachten, dass beim umklappen bei Θ und vt eine Vorzeichenumkehr stattfindet.

zu deklarieren (wg.Symmetrie) $vp, np = 0; \Phi = -\phi$ auf pos. z-Achse, $\Phi = +\phi$ auf neg. z-Achse .

 nr, nt zu berechnen über Winkelfunktionen von Θ **Fall $k != 1 \parallel k != K$**

Die im Fall $k = 1, K$ berechneten Randwerte müssen mit den für alle übrigen k bestimmten Werten in ortsfesten Koordinaten übereinstimmen. Die für den jeweiligen Wert von ϕ bzw. k geltenden Randwerte in Kugelkoordinaten müssen über entsprechende Koordinatentransformation berechnet werden.

konstant über alle Werte von k : vr, nr, p abhängig von $\cos \Phi$ vt, nt abhängig von $\sin \Phi$ vp, np Direktortiltwinkel $\Theta(k) = \arctan(\sqrt{nt^2(k) + np^2(k)} / nr)$ **Fall $\kappa = \pi/2 \parallel \kappa = -\pi/2$, achsparallele Anströmung**

zu berechnen mit quadratischer Extrapolation IPOL für

 $j = 1$ und $j = J$ vr, p zu deklarieren: $vt=0, vp=0, \Theta(j=1)=\pi, \Theta(j=J)=0, \Phi=0$ nr, nt, np zu berechnen über Winkelfunktionen von Θ und Φ **Randwerte des Drucks auf der Kugeloberfläche berechnen**Bedingung: Schleifenvariable $i == l$ innere Schleifenvariable: $j = 1 \dots J, k = 1 \dots K$ Druck p linear extrapolieren: $p(l) = 2*p(l-1) - p(l-2)$ **Schleifenabbruchkriterien für n:**1) Absolutwerte der Residuen je Zyklus für vr, vt, vp, p :< vres **if-Abfrage + UND-Bedingg, Meldung an Konsole**2) $n > \text{Maxits}$ **if-Abfrage, Meldung an Konsole****IPOL****Funktion: Quadratische Interpolation auf den Rand.**

Fortsetzung Seite 5

nworkfiles/source/g3Ddrag.c

Seite 5

main – Output, Integrationsschleifen**Ergebnisdateien öffnen:**

pfile2: vfeldinit	pfile7: vfeldplotxy
pfile3: dfeldinit	pfile9: dfeldplotxz
pfile4: vfelderg	pfile10: dfeldplotxy
pfile5: dfelderg	pfile11: dfeldplotyz
pfile6: vfeldplotxz	pfile12: dfeldelg

3-fache for-Schleife: Output in ErgebnisfilesSchleifenvariable: $i = 1 \dots I$, $j = 1 \dots J$, $k = 1 \dots K$;**Ausgabe der in der Hauptschleife berechneten Feldvariablen in die Ergebnisfiles direkt mit fprintf :**

vfeldinit, dfeldinit, dfelderg;

Berechnung der kartesischen Komponenten vx, vy, vz

Ausgabe vfelderg mit fprintf

kartesisische Vektoren für Gnuplotdarstellung der Geschwindigkeits- und Direktorfelder berechnen:

x-z-Ebene: vfeldplotxz, dfeldplotxz, Ausgabe mit fprintf

x-y-Ebene: vfeldplotxy, dfeldplotxy, Ausgabe mit fprintf

y-z-Ebene: dfeldplotyz, Ausgabe mit fprintf

x-z-Ebene: dfeldelg: statisches Dir.feld, ins ELG-Minimum relaxiert, Ausgabe mit fprintf

Ergebnisdateien schließen .**3-fache for-Schleife: Integrationsschleife zur Berechnung der Dissipation mit dem Volumenintegral**Schleifenvariable: $i = 1 \dots (I-1)$, $j = 1 \dots (J-1)$, $k = 1 \dots (K-1)$; ρ, θ, ϕ definiert auf Mitte Gitterzelle: $\rho = \text{drho}*(i-0.5) + \text{eps}$;analog $\text{thet} = \text{dthet}*(j-0.5)$, $\text{phi} = \text{dphi}*(k-0.5)$.**Polaritäts-Check Direktorfeld:**

Hilfsvariable nrh_..., nth_..., nph für einseitige Differenzenquotienten bilden. Vz-Check für benachbarte n-Vektoren durch bilden des Skalarprodukts wie in Hauptschleife.

Mittelwerte onr, ont, onp über die 8 Vertices der Zelle bilden und normieren auf $|n| = 1.0$; ovr, ovt. ovp mitteln.**Ortsableitungen des Geschwindigkeitsfeldes und des Direktorfeldes berechnen:**je 9 erste Ableitungen gemittelt aus den jeweils 4 zur Zellenmitte benachbarten Komponenten-Differenzen nach ρ, θ, ϕ **Berechnen der Dissipation $F_d = F_d + 2.0 * \text{intf}$**

intf : mit MAPLE V berechneter Integrator (C-Funktion), welcher die oben berechneten Mittelwerte und Ableitungen als Variable benutzt

intf**dissipative Integrator-Funktion für F_d**

intf = sigma: A + h*N

3-fache for-Schleife zur Berechnung der Reibungskräfte F_x, F_z und des Reibungsmoments M_y mit dem Oberflächenintegral.Schleifenvariable: $i = 1 \dots (I-1)$, $j = 1 \dots (J-1)$, $k = 1 \dots (K-1)$; ρ, θ, ϕ definiert auf Mitte Gitterzelle: $\rho = \text{drho}*(i-0.5) + \text{eps}$;analog $\text{thet} = \text{dthet}*(j-0.5)$, $\text{phi} = \text{dphi}*(k-0.5)$.

Fortsetzung Seite 6

nworkfiles/source/g3Ddrag.c Seite 6

main – Integrationsschleife Oberflächenintegral

Direktorfeld auf Oberfläche deklarieren:
 $onr = 1; ont = 0, (onp = 0)$

Druckfeld op auf Oberfläche berechnen:
 Druckmittelwerte über 8 Vertices der OFlächenzelle

Geschwindigkeitsableitungen nach ρ berechnen :
 ovr_r, ovt_r, ovp_r , gemittelt über 4 zur Zellenmitte benachbarten Komponenten-Differenzen

Fx = Fx + 2{-sin^2(thet)cos(phi)*op+[sin(thet)cos(phi)Srr +cos(thet)cos(phi)Str -sin(phi)Spr]sin(thet) }dthetdphi
Fz = Fz + 2{sin(thet)cos(phi)*op-[cos(thet)Srr-sin(thet)]*sin(thet)}dthetdphi
My = My+2{cos(phi)Str - cos(thet)sin(phi)Spr}sin(thet)*dthetdphi
Fy = 0; Mx = Mz = 0; wg. Symmetrie

Berechnen der effektiven Viskositäten:
 $eta_efx = Fx/6.0 * \pi$, $eta_efz = Fz/6.0 * \pi$

Ausgabe an Konsole – mit printf
 $Fx, eta_efx, Fz, eta_efz, My, Fd, eta_eff$

Ausgabe an Ergebnisfile vfelderg – mit fprintf
 $Fx, eta_efx, Fz, eta_efz, My, Fd, eta_eff$

Programmende

Srr

$\rho\rho$ – Komponente des visk. Spannungstensors auf der Oberfläche C-Funktion

Str

$\theta\rho$ – Komponente des visk. Spannungstensors auf der Oberfläche C-Funktion

Spr

$\phi\rho$ – Komponente des visk. Spannungstensors auf der Oberfläche C-Funktion

Abbildungsverzeichnis

1.1	Sphärische Direktorkoordinaten mit Ortskoordinaten.	16
1.2	Drehbewegung des sphärischen Partikels um die y -Achse.	24
2.1	Bestimmung der Nullstelle des Restmomentes M_y bei senkrechter Anströmung.	38
3.1	Igeldefektdipol: Anströmung senkrecht zur Defektachse mit und ohne M_y -Kompensation.	45
3.2	Igeldefektdipol: Freie Energie $-\mathcal{F}^*$ bei variablem Anströmwinkel κ und Kompensation von $M_y \rightarrow 0$ durch Rotation des sphärischen Partikels.	49
3.3	Igeldefektdipol: Stokeskraft und Winkelgeschwindigkeit bei variablen Anströmrichtungen.	50
3.4	Igeldefektdipol: Achsparallele Anströmung in positiver und negativer z -Richtung.	52
3.5	Igeldefektdipol in nematischer Zelle, Plattenabstand $12a$, Feldkraft in x -Richtung, Defektachse in z -Richtung	54
3.6	Saturndisklination: Effektive Viskositäten η_x, η_z bei Anströmung in Richtung der Hauptachsen.	57
3.7	Saturndisklination: Freie Energie $-\mathcal{F}^*$ bei variablem Anströmwinkel κ und Kompensation von $M_y \rightarrow 0$ durch Rotation des sphärischen Partikels.	59
3.8	Igeldefektdipol, senkrechte Anströmung - $ER = 1.0e-7$	63
3.9	Igeldefektdipol, senkrechte Anströmung - $ER = 3.0$	64
3.10	Igeldefektdipol, diagonale Anströmung. - $ER = 3.0$	65
3.11	Igeldefektdipol, positiv achsparallele Anströmung - $ER = 3.0$	66
3.12	Igeldefektdipol, negativ achsparallele Anströmung - $ER = 50.0$	67
3.13	Igeldefektdipol: Geschwindigkeitsfeld, achsparallele Anströmung und Ericksenzahlen $ER \leq 0.01$	68
3.14	Igeldefektdipol in nematischer Zelle, plattenparallele Bewegung, Plattenabstand $12a$	68
3.15	Igeldefektdipol in nematischer Zelle, plattenparallele Bewegung, Zentralbereich vergrößert.	69
3.16	Igeldefektdipol in nematischer Zelle, plattenparallele Bewegung, Plattenabstand $12a$ - Bahnliniendiagramme	69
3.17	Saturndisklination, senkrechte Anströmung - $ER = 1.0e-7$	72
3.18	Saturndisklination, senkrechte Anströmung - $ER = 4.0$	73

3.19 Saturndisklination, diagonale Anströmung - $ER = 3.0$	74
3.20 Saturndisklination, achsparallele Anströmung - $ER = 1.0e-7$	75
3.21 Saturndisklination, achsparallele Anströmung - $ER = 15.0$	76
3.22 Numerisch bedingte lokale Störung im Direktor- und im Geschwindigkeitsfeld.	78
3.23 Eliminierung des numerischen Problems in Abb. 3.22 durch geringfügige Verrückung der Ericksenzahl.	78
3.24 Auflösung der Orientierungsordnung oberhalb eines ER -Grenzwertes. . . .	79

Literaturverzeichnis

- [1] I.N. Bronstein and K.A. Semenjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/M, 1989.
- [2] A.J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.*, 2(12-26):12-26, 1967.
- [3] P.G. de Gennes and J. Prost. *The Physics of Liquid Crystals*. 2nd. ed. Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [4] H. Heuer, H. Knepe and F. Schneider. Flow of a nematic liquid crystal around a sphere. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 214:43-61, 1992.
- [5] T.C. Lubensky, D. Petey, N. Currier and H. Stark. Topological defects and interactions in nematic emulsions. *Phys. Rev. E*, 57(1:610-625, January 1998.)
- [6] P. Poulin, H. Stark, T.C. Lubensky and D.A. Weitz. Novel colloidal interactions in anisotropic fluid. *Science*, 275:1770-1773, March 1997.
- [7] W.H. Press. *Numerical Recipes in C: The Art of Science Computing*. Academic Press, Cambridge, 2 edition, 1992.
- [8] M. Reichenstein. Dynamik von Disklinationen in anisotropen Fluiden. (Dissertation) *Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart*. 2002.
- [9] R.W. Ruhwandl and E.M. Terentjev. Friction drag on a particle moving in a nematic liquid crystal. *Phys. Rev. E*, 54(5):5204-5210, November 1996.
- [10] Seeger. Kontinuumsmechanik - Vorlesungsskript. *Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart*. 1994.
- [11] A. Sommerfeld, E Fues und E. Kröner *Mechanik der deformierbaren Medien, Bd.2 Vorlesungen über Theoretische Physik*. Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/M, 1992.
- [12] H. Stark und D.Ventzki. Stokes drag of spherical particles in a nematic environment at low Ericksen numbers. *Phys. Rev. E*, 64, 031711,1-9 2001.

- [13] H. Stark und D.Ventzki. Non-linear Stokes drag of spherical particles i a nematic solvent. *Europhys. Lett.*, 57(1), pp. 60-66 2002.
- [14] H. Stark, D.Ventzki and M. Reichert. Recent Developments of colloidal dispersions in a nematic liquid crystal: The Stokes drag. *J. Phys.: Condens. matter* 15(2003) S.191-196.
- [15] H.R. Trebin. Kursvorlesung zur Theoretischen Physik V - Thermodynamik und Statistik. *Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart*. 1991.
- [16] D. Ventzki. Brownsche Bewegung von Wasserblasen in nematischen Emulsionen. Diplomarbeit. *Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart*. August 1998.
- [17] D. Ventzki. Das Stokesproblem bei geschwindigkeitsgekoppelten nematischenDirektorfeldern. Wissenschaftliche Arbeit. *Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart*. doc.:<http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2001/757> November 2000.
- [18] Jun-ichi Fukuda. Effect of hydrodynamic flow on the orientation profiles of nematic liquid crystal around a spherical particle. conference proceeding *Nanotechnology Research Institute, Tsukuba, Japan* Mai 2004.
- [19] M. Yada, J. Yamamoto, H. Yokoyama. Direct Observation of Anisotropic Interparticle Forces in Nematic Colloids with Optical Tweezers. *Phys. Rev. Lett.* 92(18), 185501-1..4. Mai 2004.
- [20] P. Poulin, V. Cabuil and D.A. Weitz. Direct measurement of collodial forces in a anisotropic solvent. *Phys. Rev. Lett.* 79(24):4862-4865, Dezember 1997.

Danksagung

Wenn man sich wie im vorliegenden Fall eine selbst gestellte wissenschaftliche Aufgabe in "Heimarbeit" vornimmt, hätte man kaum Erfolgchancen, wenn man nicht von Anfang an die Ressourcen eines leistungsfähigen Instituts und seiner wissenschaftlichen Mitarbeiter, Freunde und Kollegen aus früheren Uni-Tagen im Hintergrund wüsste. Dass ich mich darauf im vollen Umfang verlassen konnte und immer wieder die freundschaftliche Hilfsbereitschaft ehemaliger Kollegen erfahren durfte, dafür bin ich besonders dankbar.

Vor allem aber gilt mein Dank Herrn Prof. Trebin, der mir in großzügiger Weise auch nach meinem formellen Ausscheiden aus dem Institut für Angewandte und Theoretische Physik an der Universität Stuttgart Rechnerkapazität des Instituts zur Verfügung gestellt hat, auf die ich während dieser Arbeit nach Belieben über DFÜ zugreifen konnte. Die Systemadministratoren Dr. Johannes Roth und Uli Koschella haben mich bei gelegentlich aufgetretenen Rechnerproblemen in gleicher Weise wirkungsvoll unterstützt, wie sie dies schon früher taten, als ich noch dem Institut angehörte.

Dr. Michael Reichenstein und Uli Koschella konnten mir bei vielen Linux-spezifischen Problemen, bei Text- und Bildverarbeitungsfragen mit fundierten Ratschlägen weiterhelfen. Auch Christof Rudhart habe ich mit derartigen Dingen öfter in Anspruch genommen.

Ganz besonders wichtig war für mich jedoch die immer wieder vorgenommene Rückkopplung mit meinem ehemaligen Betreuer aus der Zeit meiner Diplomarbeit PD Dr.habil Holger Stark, jetzt an der Universität Konstanz. Zwischen uns gab es von Zeit zu Zeit einen sehr kreativen Gedankenaustausch und wichtige Anregungen sind von seiner Seite in diese Arbeit eingeflossen.

Schließlich wäre diese Arbeit wohl nie fertiggestellt worden, hätte nicht meine liebe Frau Irmelin mit nie erlahmender Engelsgeduld alle diese schrecklichen Störungen eines geordneten häuslichen Ablaufs hingenommen, die gemeinhin mittenächtliche Fehlersuche, verschwundene Dateien und Programmabstürze mit sich bringen. Was aber noch wichtiger war, sie hat mich bei meinem Vorhaben uneingeschränkt unterstützt, wobei mir in vollem Umfang die begrenzte Bedeutung des zu lösenden Problems bewusst war. Wenn man so will, war es ein Stück weit 'die Eroberung des Unnützen', - aber es hat Spaß gemacht.