

0.1. Смолего И.В. Вычислительный алгоритм для реализации математической модели жидкого кристалла с помощью технологии CUDA

Разрабатывается параллельная программа с использованием технологии CUDA для численного исследования термомеханического поведения жидкого кристалла. Математическая модель нематического жидкого кристалла содержит уравнения поступательного и вращательного движения, уравнения состояния для давления, касательного и моментных напряжений, а также уравнение анизотропной теплопроводности с переменными коэффициентами [1]. Искомыми величинами являются скорости и напряжения, а также угловая скорость и температура внутри расчетной области. Задаются граничные условия в скоростях или напряжениях, либо температура на границе.

Численное решение краевых задач осуществляется с помощью метода двуциклического расщепления по пространственным переменным [2]. На каждом временном интервале расщепление включает в себя 5 этапов: решение одномерных подсистем уравнений акустики жидкого кристалла и связанных уравнений теплопроводности в направлениях x и y на полуинтервале по времени, решение системы дифференциальных уравнений для пересчета угла поворота молекул жидкого кристалла, угловой скорости и касательного напряжения по схеме Кранка–Николсон, повторное решение одномерных подсистем на втором полуинтервале.

На этапах расщепления одномерные задачи решаются с использованием конечно-разностной схемы типа "предиктор–корректор": сначала реализуется шаг "предиктор" для подсистемы уравнений акустики, затем решается связанное уравнение теплопроводности, и в заключение выполняется шаг "корректор" матричной системы, правая часть которой зависит от температуры. Конечно-разностная схема, построенная по принципу схемы Годунова [3], применяется при решении акустических уравнений, схема Иванова [4] с контролируемой диссипацией энергии – при решении уравнения теплопроводности. Температура в каждом направлении вычисляется с помощью трехточечной прогонки. Схема является неявной на шаге "предиктор" и явной на шаге "корректор".

Вычислительный алгоритм реализуется в виде параллельной программы на языке Си по технологии CUDA, позволяющей использовать графические ускорители видеокарт. Графическое устройство содержит большое количество нитей, каждой нити ставится в соответствие ячейка разностной сетки. Нити параллельно выполняют однотипные операции в ячейках по расчету решения на этапах расщепления. Этапы метода расщепления выполняются последовательно.

Исследована эффективность параллельной программы. Выполнены тестовые расчеты при разных размерностях сетки. В расчетах зафиксировано ускорение работы параллельной программы примерно в 25 раз по сравнению с последовательной версией. Проведены расчеты динамического деформирования жидких кристаллов при слабых механических и температурных воздействиях, демонстрирующие работу параллельной программы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-01-00130).

Список литературы

- [1] Садовский В. М., Садовская О. В. Об акустическом приближении термомеханической модели жидкого кристалла // Физическая мезомеханика. — 2013. — Т. 16, № 3, С. 55–62.
- [2] Марчук Г. И. Методы расщепления / М.: Наука, 1988. — 263 с.
- [3] Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики / М.: Наука, 1976. — 400 с.
- [4] Иванов Г. В., Волчков Ю. М., Богульский И. О., Анисимов С. А., Кургузов В. Д. Численное решение динамических задач упругопластического деформирования твердых тел / Новосибирск: Наука, Сиб. унив. изд-во, 2002. — 352 с.