

РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА НА КОМПЬЮТЕРАХ С ГРАФИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ

Смолехо И.В., Садовская О.В.



***Институт вычислительного моделирования СО РАН
(г. Красноярск)***

Отдел вычислительной механики деформируемых сред

Постановка задачи

- Целью работы является создание параллельной программы для вычислительных систем на графических ускорителях по технологии CUDA, позволяющей численно исследовать математическую модель термомеханического поведения жидких кристаллов

Математическая модель

Система дифференциальных уравнений, описывающих поведение жидких кристаллов, в двумерном случае выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\rho u_t &= -p_x - q_y, & \rho v_t &= q_x - p_y, & j\omega &= 2q, & \varphi_t &= \omega, \\ p_t &= -k(u_x + v_y) + \beta T_t, & q_t &= \alpha(v_x - u_y - 2\omega), \\ cT_t &= (\kappa_{11}T_x + \kappa_{12}T_y)_x + (\kappa_{12}T_x + \kappa_{22}T_y)_y - \beta T(u_x + v_y),\end{aligned}$$

где u и v – компоненты вектора скорости, ω – угловая скорость, φ – угол поворота молекул кристалла, p – гидростатическое давление, q – касательное напряжение, T – абсолютная температура, ρ – плотность, j – момент инерции, k – модуль объемного сжатия, α – модуль упругого сопротивления вращению, β – коэффициент теплового расширения, c – удельная теплоемкость, κ_{11} , κ_{12} и κ_{22} – компоненты тензора теплопроводности

Численный алгоритм

Двухциклическое расщепление

На 1-м и 5-м этапах метода расщепления считается, что искомое решение зависит только от x , и система уравнений преобразуется к следующему виду:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial x}, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial T}{\partial t}, \quad \frac{\partial q}{\partial t} = \alpha \frac{\partial v}{\partial x} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial f_1}{\partial x} - \beta T \frac{\partial u}{\partial x}, \quad f_1 = \kappa_{11} \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa_{12} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (2)$$

Аналогично, на 2-м и 4-м этапах, когда решение зависит только от y , получим систему:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial y}, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial y}, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial v}{\partial y} + \beta \frac{\partial T}{\partial t}, \quad \frac{\partial q}{\partial t} = -\alpha \frac{\partial u}{\partial y} \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial f_2}{\partial y} - \beta T \frac{\partial v}{\partial y}, \quad f_2 = \kappa_{12} \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa_{22} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (4)$$

На 3-м этапе метода расщепления решается система уравнений:

$$j \frac{\partial \omega}{\partial t} = 2q, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \omega, \quad \frac{\partial q}{\partial t} = -2\alpha \omega. \quad (5)$$

Схема “предиктор–корректор” для уравнений акустики

Сгруппируем уравнения систем (1) и (3) следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial x} \\ \frac{\partial q}{\partial t} = \alpha \frac{\partial v}{\partial x} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial y} \\ \frac{\partial q}{\partial t} = -\alpha \frac{\partial u}{\partial y} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial y} \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial v}{\partial y} \end{array} \right.$$

Шаг “предиктор” разностной схемы:

$$u_{j1, j2-\frac{1}{2}} = \frac{p_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - p_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2} + \frac{u_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + u_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2}$$

$$p_{j1, j2-\frac{1}{2}} = \frac{u_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - u_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2} + \frac{p_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + p_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2}$$

$$v_{j1, j2-\frac{1}{2}} = \frac{v_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + v_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2} + \frac{q_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\alpha}}$$

$$q_{j1, j2-\frac{1}{2}} = \frac{q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + q_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2} + \sqrt{\alpha} \frac{v_{j1+\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - v_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}}{2}$$

(6)

$$u_{j1-\frac{1}{2}, j2} = \frac{q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - q_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\alpha}} + \frac{u_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + u_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2}$$

$$q_{j1-\frac{1}{2}, j2} = \frac{q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + q_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2} + \sqrt{\alpha} \frac{u_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - u_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2}$$

$$v_{j1-\frac{1}{2}, j2} = \frac{p_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - p_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{v_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + v_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2}$$

$$p_{j1-\frac{1}{2}, j2} = \frac{p_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + p_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{v_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - v_{j1-\frac{1}{2}, j2+\frac{1}{2}}}{2}$$

(7)

Аппроксимируя уравнения систем (1), (3), получим:

- Соотношения шага “корректор” в направлении x

$$\begin{aligned}
 u^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= u_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h_1} (p_{j1, j2-\frac{1}{2}} - p_{j1-1, j2-\frac{1}{2}}) \\
 v^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= v_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{2h_1} (q_{j1, j2-\frac{1}{2}} - q_{j1-1, j2-\frac{1}{2}}) \\
 p^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= p_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h_1} (u_{j1, j2-\frac{1}{2}} - u_{j1-1, j2-\frac{1}{2}}) + \beta (T^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - T_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}) \\
 q^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + \alpha \frac{\tau}{2h_1} (v_{j1, j2-\frac{1}{2}} - v_{j1-1, j2-\frac{1}{2}})
 \end{aligned} \tag{8}$$

- Соотношения шага “корректор” в направлении y

$$\begin{aligned}
 u^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= u_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h_2} (q_{j1-\frac{1}{2}, j2} - q_{j1-\frac{1}{2}, j2-1}) \\
 v^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= v_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h_2} (p_{j1-\frac{1}{2}, j2} - p_{j1-\frac{1}{2}, j2-1}) \\
 p^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= p_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h_2} (v_{j1-\frac{1}{2}, j2} - v_{j1-\frac{1}{2}, j2-1}) + \beta (T^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - T_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}) \\
 q^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} &= q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \alpha \frac{\tau}{2h_2} (u_{j1-\frac{1}{2}, j2} - u_{j1-\frac{1}{2}, j2-1})
 \end{aligned} \tag{9}$$

Схема Кранка–Николсон

$$j \frac{\partial \omega}{\partial t} = 2q, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \omega, \quad \frac{\partial q}{\partial t} = -2\alpha \omega.$$

$$j \frac{\omega' - \omega}{\partial t} = 2q, \quad \frac{\varphi' - \varphi}{\partial t} = \omega, \quad \frac{q' - q}{\partial t} = -2\alpha \frac{\omega' + \omega}{2}.$$

Таким образом, на 3-м этапе метода расщепления используются формулы:

$$q^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} = \frac{(j - \tau^2 \alpha)}{j + \tau^2 \alpha} q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} - \frac{2\tau \alpha j}{j + \tau^2 \alpha} \omega_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}$$

$$\omega^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} = \omega_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{j} (q^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + q_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}}) \quad (10)$$

$$\varphi^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} = \varphi_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{2} (\omega^{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}} + \omega_{j1-\frac{1}{2}, j2-\frac{1}{2}})$$

Схема “предиктор–корректор” для уравнения теплопроводности

Конечно-разностная схема Иванова типа “предиктор–корректор” является неявной на шаге “предиктор” и явной на шаге “корректор”.

На шаге “**предиктор**” решаются уравнения:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{a\kappa_j}{h} - \frac{1}{2}\right)T_{j+1/2} + \left(1 + \frac{a}{h}(\kappa_j + \kappa_{j-1})\right)T_{j-1/2} - \left(\frac{a\kappa_{j-1}}{h} - \frac{1}{2}\right)T_{j-3/2} = \\ = T_j + T_{j-1} + a(g_j - g_{j-1}) \end{aligned} \quad (11)$$

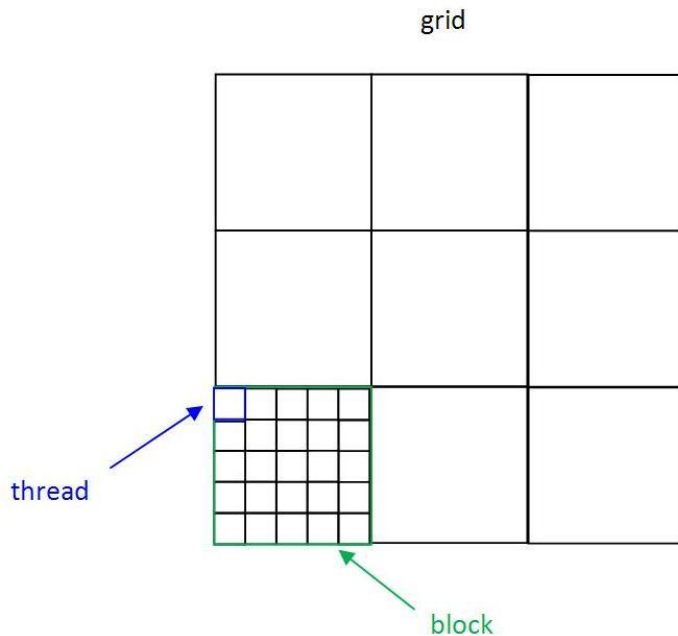
$$\begin{aligned} 2af_{j-1/2} = \left(\frac{a\kappa_j}{h} - \frac{1}{2}\right)T_{j+1/2} - \frac{a}{h}(\kappa_j - \kappa_{j-1})T_{j-1/2} - \\ - \left(\frac{a\kappa_{j-1}}{h} - \frac{1}{2}\right)T_{j-3/2} + T_j - T_{j-1} + a(g_j + g_{j-1}) \end{aligned} \quad (12)$$

На шаге “**корректор**” решаются уравнения:

$$\frac{T^j - T_j}{\tau/2} = \frac{f_{j+1/2} - f_{j-1/2}}{h}, \quad f_j = \kappa \frac{T_{j+1/2} - T_{j-1/2}}{h} + g_j \quad (13)$$

Среда разработки программы CUDA

CUDA (*Compute Unified Device Architecture*) – программно-аппаратная архитектура, позволяющая производить вычисления с использованием графических процессоров NVIDIA.



Расчетная область разбивается на квадратные блоки, содержащие одинаковое число нитей.

Верхний уровень иерархии в CUDA – сетка (*grid*) – соответствует всем нитям, выполняющим ядро.

Следующий уровень – массив блоков (*block*). Он может быть двумерным или одномерным.

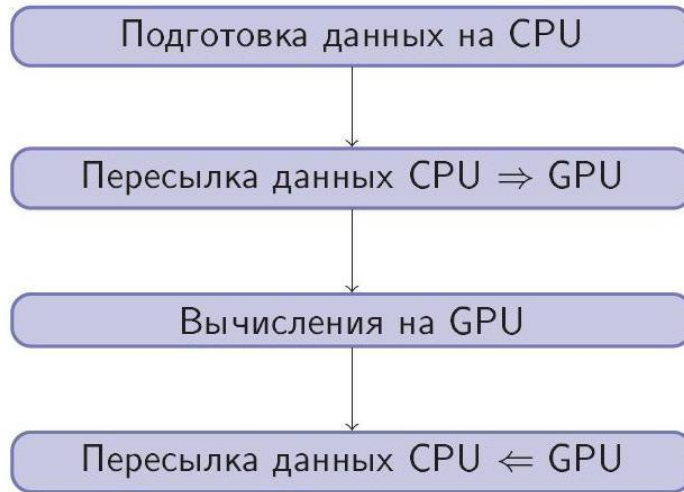
Каждый блок представляет собой одномерный, двумерный или трехмерный массив нитей (*thread*).

В параллельном режиме нити графического устройства выполняют однотипные операции в ячейках по расчету решения на шаге “предиктор” и, после этого, на шаге “корректор” схемы.

Каждый блок в сетке имеет свой адрес *blockIdx*. Также и каждая нить имеет свой адрес *threadIdx*.

gridDim, *blockDim* – переменные, используемые для определения размеров сетки и блока.

Структура параллельной программы



Вычисления на GPU

В основном расчетном цикле по времени последовательно запускаются 5 процедур, реализующие двуциклическое расщепление и схему Кранка–Николсон:

- 1) расщепление в направлении x на полуинтервале по времени;
 - 2) расщепление в направлении y на полуинтервале по времени;
 - 3) этап пересчета величин w , φ и q , по схеме Кранка–Николсон;
 - 4) расщепление в направлении y на полуинтервале по времени;
 - 5) расщепление в направлении x на полуинтервале по времени.
- Каждое из расщеплений включает в себя 7 ядер: *pred_uvpq*, *bound_uvpq*, *prog_coeff*, *progonka*, *bound_flux*, *pred_flux*, *korr*.
 - Пересчет величин w , φ и q происходит в ядре *KrNik*, реализующем схему Кранка–Николсон.
 - После выполнения каждого из ядер производится барьерная синхронизация, чтобы обеспечить завершение вычислений каждой нитью до начала выполнения следующего ядра.

Полученные результаты

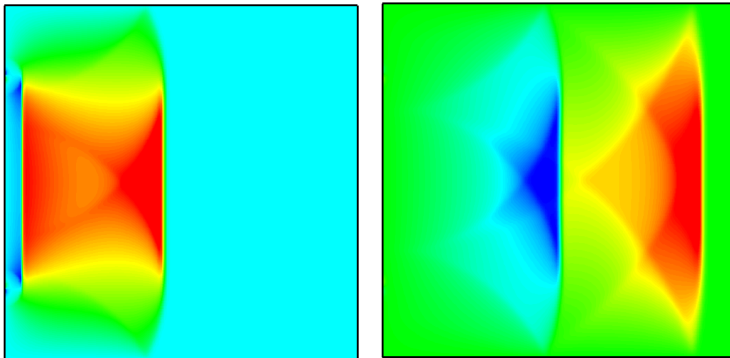


Рис. 1. П-образный импульс давления на части левой границы в нормальном направлении: линии уровня давления p

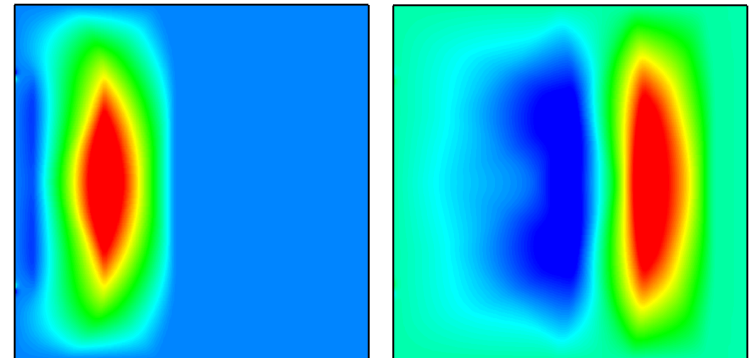


Рис. 2. Λ -образный импульс давления на части левой границы в нормальном направлении: линии уровня давления p

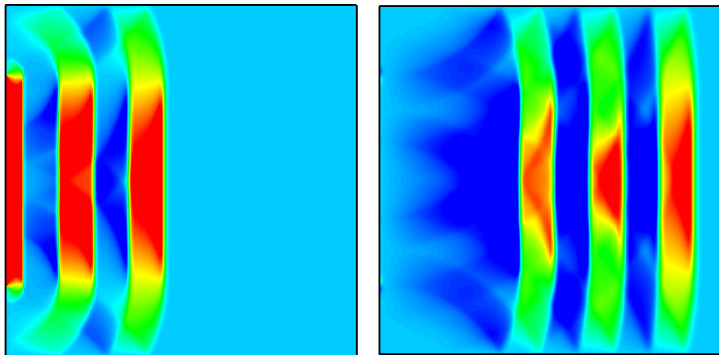


Рис. 3. Три П-образных импульса давления на части левой границы в нормальном направлении: линии уровня давления p

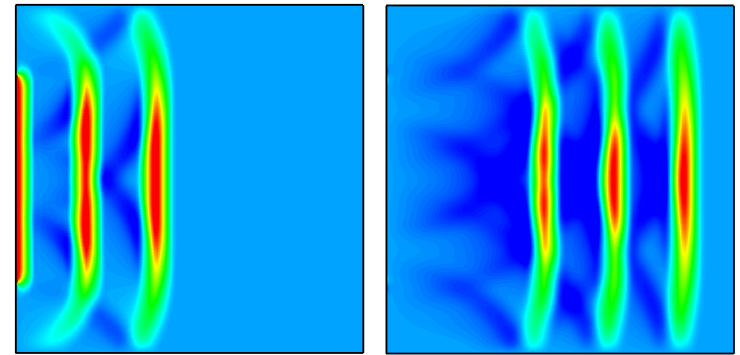


Рис. 4. Три Λ -образных импульса давления на части левой границы в нормальном направлении: линии уровня давления p

250-й и 500-й шаги по времени

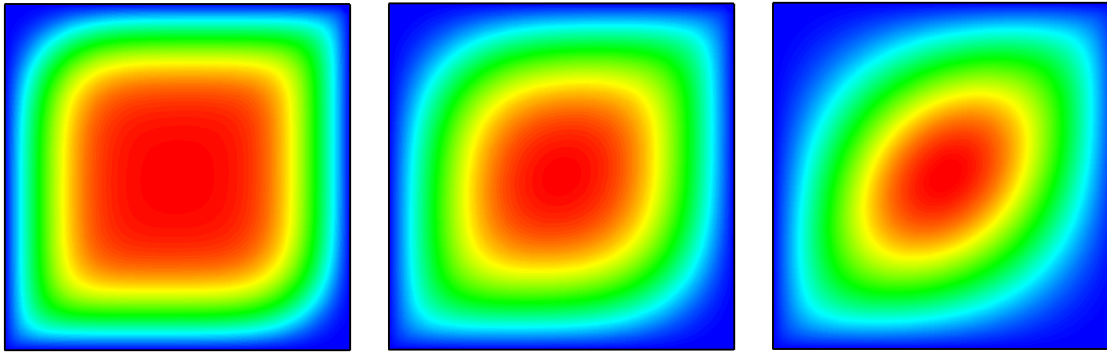


Рис. 5. Заданная начальная температура T_0 : линии уровня температуры T при коэффициентах теплопроводности $\kappa_1 = 5\kappa_2$ и угле поворота $\varphi = \pi/4$ (100, 200 и 500-й шаги по времени)

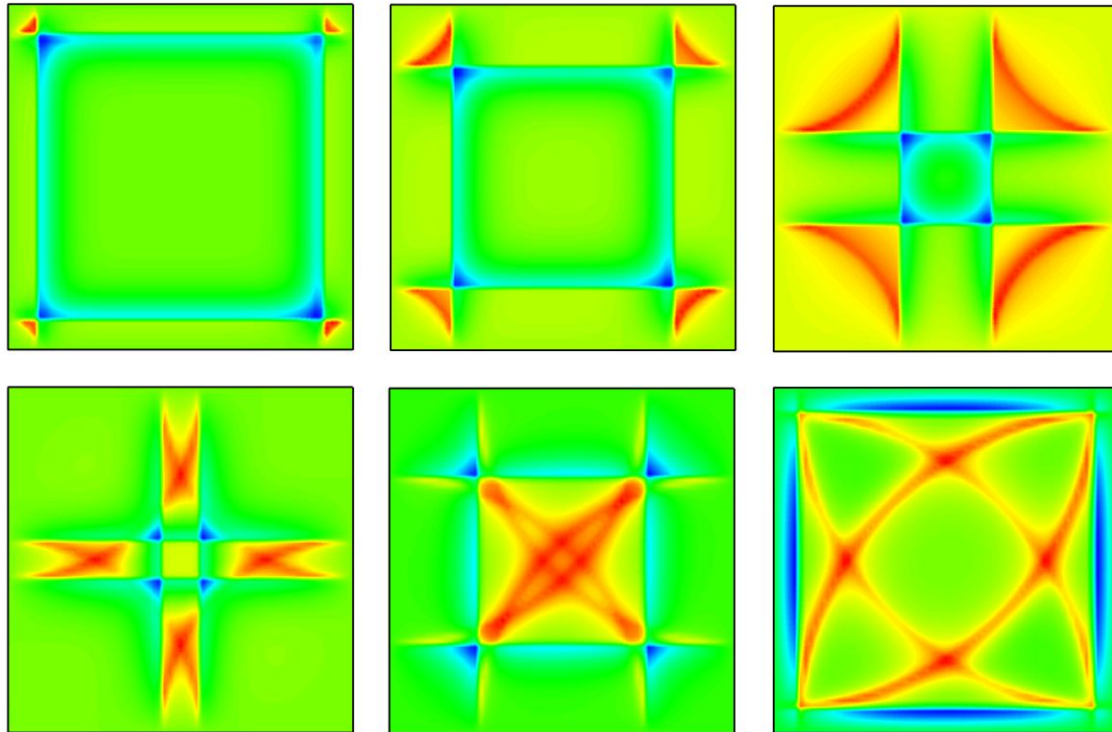


Рис. 6. Заданная начальная температура T_0 : линии уровня давления p при коэффициентах теплопроводности $\kappa_1 = 5\kappa_2$ и угле поворота $\varphi = \pi/4$ (50, 100, 200, 300, 400 и 500-й шаги по времени)

Полученные результаты

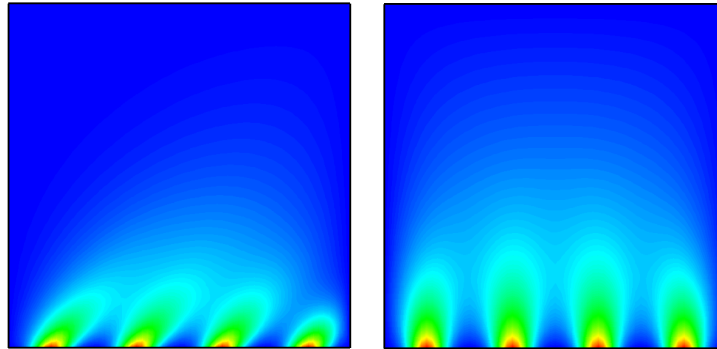


Рис. 7. Источники тепла на нижней границе: линии уровня температуры T при коэффициентах теплопроводности $\kappa_1 = 5\kappa_2$ и углах поворота $\varphi = \pi/4$ и $\pi/2$ (1000-й шаг по времени)

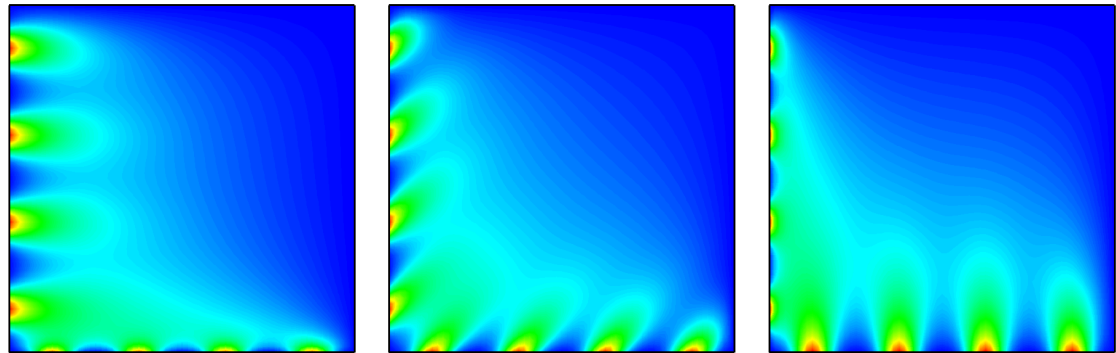


Рис. 8. Источники тепла на левой и нижней границах: линии уровня температуры T при коэффициентах теплопроводности $\kappa_1 = 5\kappa_2$ и углах поворота $\varphi = 0, \pi/4$ и $\pi/2$ (1000-й шаг по времени)

Эффективность параллельной программы

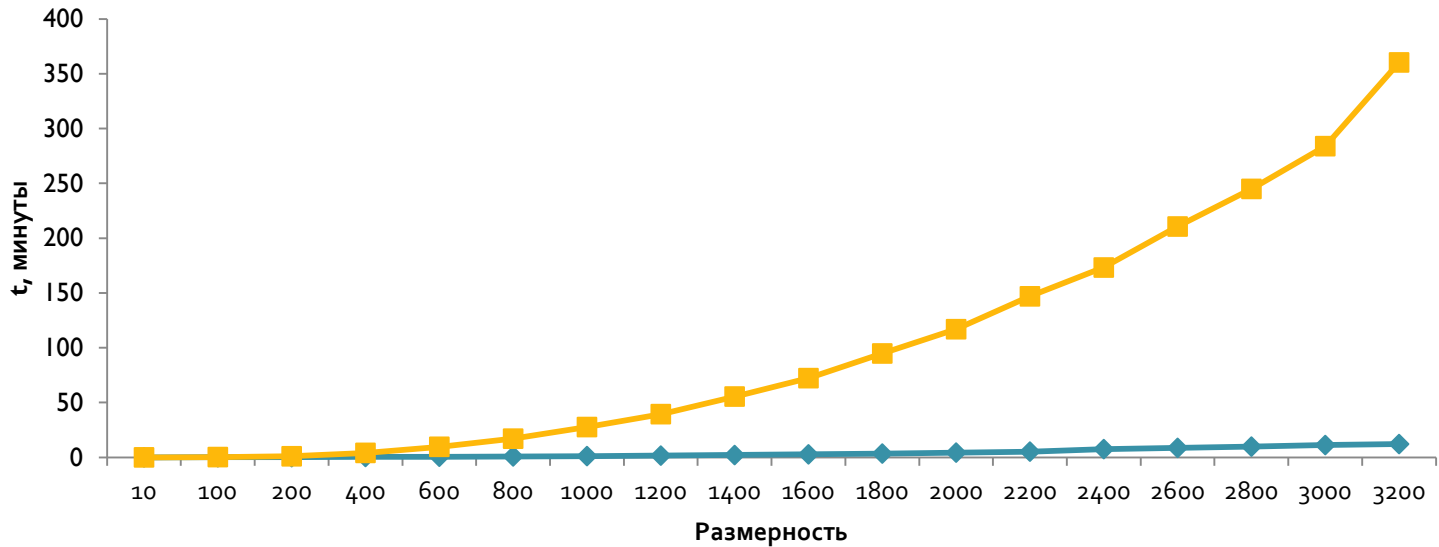


Рис. 9. Зависимость времени счета программы (на GPU и на CPU) от количества узлов $N \times N$ конечно-разностной сетки

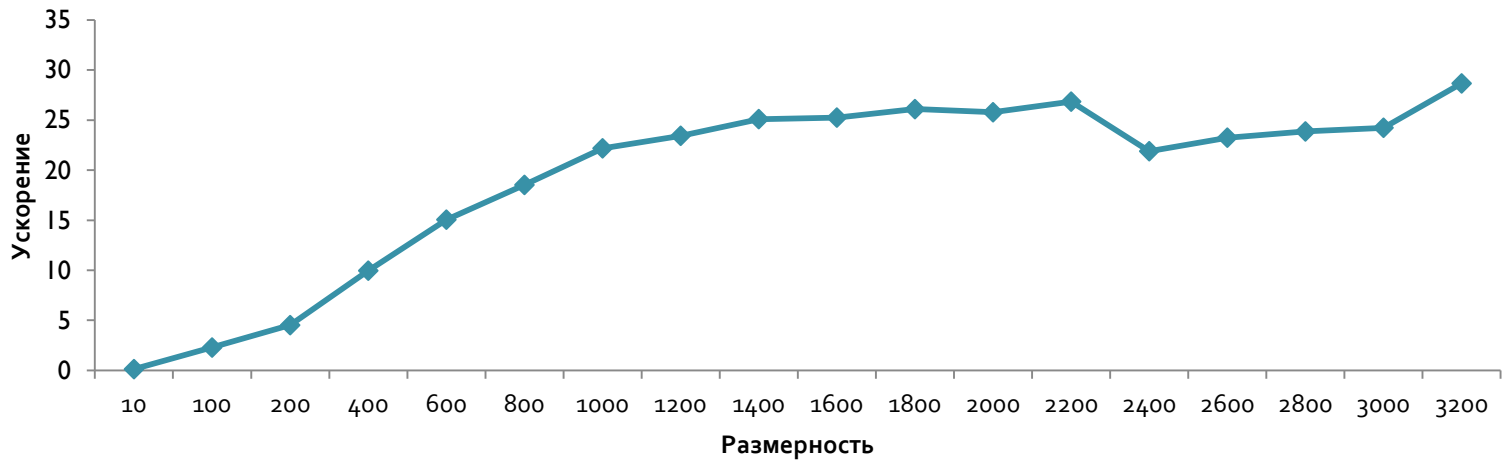


Рис. 10. Ускорение работы программы на GPU по сравнению с CPU

Заключение

В работе получены следующие результаты:

- Разработана параллельная программа для вычислительных систем на графических ускорителях по технологии CUDA, позволяющая решать систему уравнений математической модели поведения жидких кристаллов.
- Численно исследована эффективность работы параллельного алгоритма: в демонстрационных расчетах зафиксировано ускорение работы примерно в 25 раз параллельной программы по сравнению с последовательной версией.
- Проведена серия численных расчетов на высокопроизводительном вычислительном сервере Flagman ИВМ СО РАН, демонстрирующих работу программы.