

5. Сарайкин В.А. Учет упругих свойств блоков в низкочастотной составляющей волны возмущений, распространяющейся в двумерной среде // Физ.-техн. проблемы разработки полезных ископаемых. 2009. № 3. С. 9-24.
6. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973. 343 с.
7. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1979. 744 с.
8. Садовский В.М., Садовская О.В., Варыгина М.П. Численное моделирование пространственных волновых движений в моментных средах // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2009. Т. 2. № 4. С. 111-121.

Numerical modeling of pendulum waves in a blocky medium

Maria Alexandrovna Pokhabova, Graduate Student, Institute of computational modeling SB RAS

The computational algorithms for study of propagation of stress waves and strain in layered media, consisting of a large number of deformable blocks with elastic layers are developed. Numerical results demonstrate the features of plane wave propagation in a blocky media.

Keywords – dynamics, elasticity, block medium, compliant interlayer, mathematic modeling.

УДК 519.688

АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА, УЧИТЫВАЮЩИХ МОМЕНТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Ирина Владимировна Смолехо, аспирант

Тел. 8 902 991 38 37, e-mail: irina_smolekho@mail.ru

Институт вычислительного моделирования СО РАН

http://icm.krasn.ru

Оксана Викторовна Садовская, к.ф.-м.н, с.н.с.

Тел. 8 391 290 74 65, e-mail: o_sadov@icm.krasn.ru

Институт вычислительного моделирования СО РАН

http://icm.krasn.ru

На основе математической модели жидкого кристалла в акустическом приближении получена система двух уравнений второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости. Разработан алгоритм численного решения краевых задач, который реализован в виде параллельной программы на языке Си по технологии.

Ключевые слова: жидкий кристалл, моментная среда, динамика, конечно-разностная схема, параллельный вычислительный алгоритм, технология CUDA.

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



О.В. Садовская

Жидкие кристаллы (мезоморфные материалы) являются уникальными веществами благодаря необычному сочетанию анизотропных свойств, присущих кристаллам, и текучести, свойственной жидкостям. Жидкокристаллическое состояние вещества реализуется в определенном диапазоне температур. Подвижность молекул жидких кристаллов позволяет за счет слабых внешних воздействий изменять их ориентацию и таким образом управлять оптическими свойствами.

Впервые образование новой, необычной (жидкокристаллической) фазы было замечено австрийским ботаником Ф. Рейнитцером в 1888 году, изучавшим роль холестерина в растении-

ях. Нагревая синтезированное им твердое вещество холестерилбензоат, он обнаружил, что при некоторой температуре кристаллы плавятся и образуют мутную, сильно рассеивающую свет жидкость, которая при дальнейшем нагревании становится совершенно прозрачной. Таким образом, у этого соединения имеются две точки плавления и три различные фазы: твердая, жидкокристаллическая и жидкая. С помощью жидких кристаллов обнаруживают пары вредных химических соединений и опасные для здоровья человека гамма- и ультрафиолетовое излучения. На основе жидких кристаллов созданы измерители давления, детекторы ультразвука. Но самая обширная область применения жидкокристаллических веществ — информационная техника. От первых индикаторов, знакомых всем по электронным часам, до цветных телевизоров с жидкокристаллическим экраном размером с почтовую открытку прошло лишь несколько лет.

Один из подходов к построению математических моделей для описания поведения жидких кристаллов основывается на представлении о жидкокристаллической среде как о мелкодисперсной сплошной среде, в каждой точке которой домены жидких кристаллов могут перемещаться в соответствии с законами динамики вязкой или невязкой жидкости и вращаться, проявляя упругие свойства. Модели жидкого кристалла были предложены Эриксоном [1], Лесли [2], Аэро [3] и другими авторами.



И.В. Смолехо

Данная работа посвящена численному решению дифференциальных уравнений второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости, полученных из системы уравнений, описывающей термомеханическое поведение жидкого кристалла в двумерном случае.

1. Вывод уравнений для касательного напряжения и угловой скорости

Основная система уравнений, описывающих поведение жидкого кристалла при слабых акустических возмущениях с учетом моментных напряжений, в двумерном случае выглядит следующим образом [4–6]:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial q}{\partial y}, & \rho \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{\partial p}{\partial y}, & j \frac{\partial \omega}{\partial t} &= 2q + \frac{\partial \mu_x}{\partial x} + \frac{\partial \mu_y}{\partial y}, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -k \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \beta \frac{\partial T}{\partial t}, & \frac{\partial q}{\partial t} &= \alpha \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} - 2\omega \right), \\ \frac{\partial \mu_x}{\partial t} &= \gamma \frac{\partial \omega}{\partial x}, & \frac{\partial \mu_y}{\partial t} &= \gamma \frac{\partial \omega}{\partial y}, & \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \omega, \end{aligned} \quad (1)$$

$$c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_{11} \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa_{12} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa_{12} \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa_{22} \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \beta T \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right).$$

Здесь u и v – компоненты вектора скорости, ω – угловая скорость, φ – угол поворота молекул кристалла, p – гидростатическое давление, q – касательное напряжение, μ_x и μ_y – моментные напряжения, T – абсолютная температура; ρ – плотность, j – момент инерции, k – модуль объемного сжатия, α – модуль упругого сопротивления вращению, β – коэффициент теплового расширения, c – удельная теплоемкость; x , y и t – пространственные переменные и время; κ_{11} , κ_{12} и κ_{22} – компоненты симметричного тензора теплопроводности: $\kappa_{11} = \kappa_1 \cos^2 \varphi + \kappa_2 \sin^2 \varphi$, $\kappa_{12} = (\kappa_1 - \kappa_2) \sin \varphi \cos \varphi$, $\kappa_{22} = \kappa_1 \sin^2 \varphi + \kappa_2 \cos^2 \varphi$, κ_1 и κ_2 – коэффициенты теплопроводности в направлении ориентации молекул жидкого кристалла и в поперечном направлении. В систему (1) входят уравнения поступательного и вращательного движения, уравнение для угла по-

ворота, уравнения состояния для давления и касательного напряжения, уравнение анизотропной теплопроводности с переменными коэффициентами.

Рассмотрим, как из системы (1) получается система уравнений второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости. Продифференцировав первое уравнение системы (1) по x , второе уравнение – по y и сложив результаты, получим:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\Delta p.$$

Затем продифференцируем уравнение для давления по t :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = -k \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \beta \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{k}{\rho} \Delta p + \beta \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}.$$

Продифференцируем первое уравнение системы (1) по y , второе уравнение – по x . После вычитания:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) = -\Delta q.$$

С учетом этого выражения, после дифференцирования соответствующих уравнений системы (1) по t , получим отдельную подсистему для касательного напряжения q и угловой скорости ω :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} &= \frac{\alpha}{\rho} \Delta q - 2\alpha \frac{\partial \omega}{\partial t}, \\ \frac{\partial^2 \omega}{\partial t^2} &= \frac{2}{j} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\gamma}{j} \Delta \omega. \end{aligned} \tag{2}$$

Для решения системы двух уравнений второго порядка (2) разработан параллельный вычислительный алгоритм.

2. Постановка краевой задачи и алгоритм ее численного решения

Рассматривается расчетная область в виде прямоугольника. Искомыми величинами являются касательное напряжение и угловая скорость внутри расчетной области. Требуется найти решение системы (2) при следующих начальных данных:

$$\begin{aligned} q|_{t=0} &= q^0, \quad \frac{\partial q}{\partial t} \Big|_{t=0} = \alpha \left(\frac{\partial v^0}{\partial x} - \frac{\partial u^0}{\partial y} - 2\omega^0 \right) = -2\alpha \omega^0 \quad (u^0, v^0 = \text{const}), \\ \omega|_{t=0} &= \omega^0, \quad \frac{\partial \omega}{\partial t} \Big|_{t=0} = \frac{1}{j} \left(2q^0 + \frac{\partial \mu_x^0}{\partial x} + \frac{\partial \mu_y^0}{\partial y} \right) = \frac{2q^0}{j} \quad (\mu_x^0, \mu_y^0 = \text{const}). \end{aligned}$$

Граничные условия задаются в терминах q , ω , а также $\partial q/\partial x$, $\partial q/\partial y$ и $\partial \omega/\partial x$, $\partial \omega/\partial y$. Для численного решения применяется явная конечно-разностная схема “крест” второго порядка аппроксимации по x , y и t . Аппроксимируем уравнения системы (2) на каждом временном слое заменой производных по времени и пространству конечными разностями:

$$\begin{aligned} &\frac{q_{j_1, j_2}^{n+1} - 2q_{j_1, j_2}^n + q_{j_1, j_2}^{n-1}}{(\Delta t)^2} + \alpha \frac{\omega_{j_1, j_2}^{n+1} - \omega_{j_1, j_2}^{n-1}}{\Delta t} = \\ &= \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{q_{j_1+1, j_2}^n - 2q_{j_1, j_2}^n + q_{j_1-1, j_2}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{q_{j_1, j_2+1}^n - 2q_{j_1, j_2}^n + q_{j_1, j_2-1}^n}{(\Delta y)^2} \right), \end{aligned}$$

$$\frac{\omega_{j_1, j_2}^{n+1} - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1, j_2}^{n-1}}{(\Delta t)^2} - \frac{1}{j} \frac{q_{j_1, j_2}^{n+1} - q_{j_1, j_2}^{n-1}}{\Delta t} =$$

$$= \frac{\gamma}{j} \left(\frac{\omega_{j_1+1, j_2}^n - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1-1, j_2}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\omega_{j_1, j_2+1}^n - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1, j_2-1}^n}{(\Delta y)^2} \right).$$

Здесь $j_1 = \overline{2, N_1 - 1}$, $j_2 = \overline{2, N_2 - 1}$. Выражаем из второго уравнения ω_{j_1, j_2}^{n+1} :

$$\omega_{j_1, j_2}^{n+1} = 2\omega_{j_1, j_2}^n - \omega_{j_1, j_2}^{n-1} + \frac{\Delta t}{j} (q_{j_1, j_2}^{n+1} - q_{j_1, j_2}^{n-1}) +$$

$$+ \frac{\gamma(\Delta t)^2}{j} \left(\frac{\omega_{j_1+1, j_2}^n - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1-1, j_2}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\omega_{j_1, j_2+1}^n - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1, j_2-1}^n}{(\Delta y)^2} \right). \quad (3)$$

Подставив (3) в первое уравнение, получаем формулу для расчета q_{j_1, j_2}^{n+1} :

$$\left(\frac{\alpha}{j} + \frac{1}{(\Delta t)^2} \right) q_{j_1, j_2}^{n+1} = \left(\frac{\alpha}{j} - \frac{1}{(\Delta t)^2} \right) q_{j_1, j_2}^{n-1} + \frac{2}{(\Delta t)^2} q_{j_1, j_2}^n + \frac{2\alpha}{\Delta t} (\omega_{j_1, j_2}^{n-1} - \omega_{j_1, j_2}^n) -$$

$$+ \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{q_{j_1+1, j_2}^n - 2q_{j_1, j_2}^n + q_{j_1-1, j_2}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{q_{j_1, j_2+1}^n - 2q_{j_1, j_2}^n + q_{j_1, j_2-1}^n}{(\Delta y)^2} \right) + \quad (4)$$

$$- \frac{\alpha \gamma \Delta t}{j} \left(\frac{\omega_{j_1+1, j_2}^n - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1-1, j_2}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\omega_{j_1, j_2+1}^n - 2\omega_{j_1, j_2}^n + \omega_{j_1, j_2-1}^n}{(\Delta y)^2} \right).$$

Таким образом, на новом слое по времени нужно сначала решать уравнение (4) для q , а затем уравнение (3) для ω при заданных начальных данных и граничных условиях.

3. Реализация алгоритма и полученные результаты

Разработана параллельная программа для численного решения системы уравнений (2) по формулам (3), (4). Программа реализована на языке Си с применением технологии CUDA для распараллеливания вычислений, позволяющей использовать графические ускорители видеокарт. Для решения задач CUDA использует очень большое количество параллельных нитей, каждой из них соответствует один элемент вычисляемых данных. Фактически, для каждого допустимого индекса входных массивов запускается отдельная нить, осуществляющая необходимые вычисления. Расчеты выполняются параллельно всеми нитями, и каждая нить может получить информацию о себе через встроенные переменные. Исходная задача разбивается на набор отдельных подзадач. Каждой подзадаче соответствует свой блок нитей.

Параллельный вычислительный алгоритм для анализа математической модели жидкого кристалла без учета моментных воздействий подробно представлен в работе [7].

Для демонстрации работоспособности параллельной программы проведена серия тестовых расчетов на высокопроизводительном вычислительном сервере Flagman с графическими вычислителями Tesla C2050 Института вычислительного моделирования СО РАН.

Расчеты проведены на прямоугольной области $100 \text{ мкм} \times 40 \text{ мкм}$ для жидкого кристалла 5ЦБ с параметрами: $\rho = 1022 \text{ кг/м}^3$, $j = 1.33 \cdot 10^{-10} \text{ кг/м}$, $\alpha = 0.161 \text{ ГПа}$, $\gamma = 1 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-5} \text{ Н}$. Размерность конечно-разностной сетки: 2560×1024 ячеек.

На рис. 1 приведены линии уровня касательного напряжения в разные моменты времени для задачи с начальными данными:

$$\omega|_{t=0} = \omega_0, \quad q|_{t=0} = 0, \quad \partial\omega/\partial t|_{t=0} = 0, \quad \partial q/\partial t|_{t=0} = -2\alpha\omega_0,$$

и нулевыми граничными условиями: $\bar{q} = \bar{\omega} = 0$.

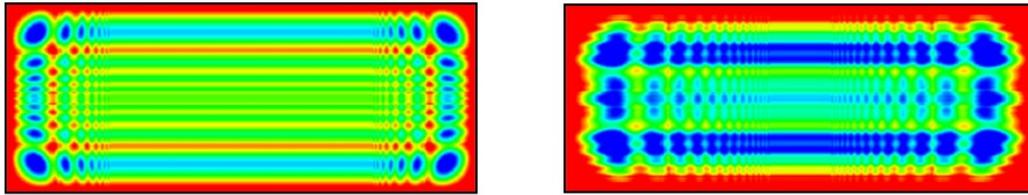


Рис. 1. Заданная начальная угловая скорость ω_0 : линии уровня касательного напряжения (1000-й и 2000-й шаги по времени)

На рис. 2 представлены результаты расчетов для задачи о действии П-образного импульса касательного напряжения на части верхней границы расчетной области. Заданы нулевые начальные данные. Граничные условия на верхней границе: $q = \bar{q}$, если $|x - x_c| \leq l$, и $q = 0$, если $|x - x_c| > l$; $\partial\omega/\partial y = 0$. Здесь x_c – центр зоны, где действует нагрузка, l – радиус этой зоны. В расчетах $x_c = 50$ мкм, $l = 25$ мкм. Нижняя граница закреплена: $\bar{q} = \bar{\omega} = 0$. На боковых границах заданы условия периодичности.

На рис. 3 приведены результаты для задачи о периодическом действии касательного напряжения на части границы. Граничные условия на верхней границе: $q = \bar{q} \sin(2\pi\nu t)$, если $|x - x_c| \leq l$, и $q = 0$, если $|x - x_c| > l$; $\partial\omega/\partial y = 0$. Нижняя граница по-прежнему закреплена, на боковых границах заданы условия периодичности. Частота ν в расчетах принималась равной $\nu_* = 1/t_*$, где $t_* = \pi\sqrt{j/\alpha}$ – период осцилляций, и $0.5\nu_*$.

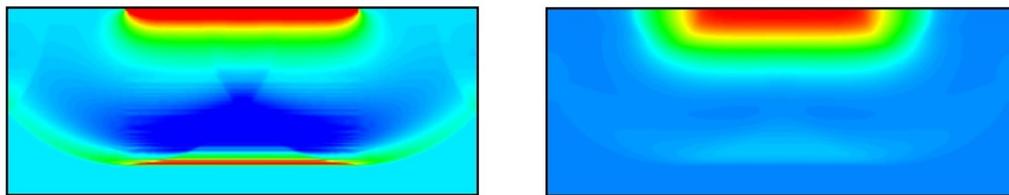


Рис. 2. П-образный импульс касательного напряжения на части верхней границы: линии уровня касательного напряжения и угловой скорости (2500-й шаг по времени)

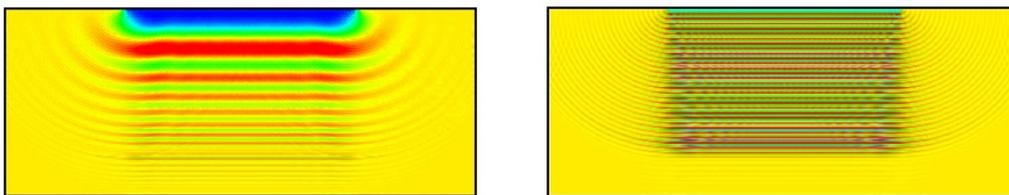


Рис. 3. Периодическое действие касательного напряжения: линии уровня угловой скорости ($\nu = \nu_*$ и $\nu = 0.5\nu_*$, 4000-й шаг по времени)

Заключение

Авторы считают, что в данной работе новыми являются следующие положения и результаты: выведена система уравнений второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости в акустическом приближении модели жидкого кристалла с учетом моментного взаимодействия, разработан алгоритм численного решения этой системы с использованием графических ускорителей видеокарт, а также проведены тестовые расчеты, демонстрирующие работу параллельной программы.

Литература

1. *Ericksen J.L.* Conservation laws for liquid crystals // *Trans. Soc. Rheol.* 1961. V. 5. P. 23-34.

2. Leslie F.M. Some constitutive equations for liquid crystals // Arch. Ration. Mech. Anal. 1968. V. 28. P. 265-283.
3. Аэро Э.Л., Булыгин А.Н. Уравнения движения нематических жидких кристаллов // Прикл. матем. и механ. 1971. Т. 35. Вып. 5. С. 879-891.
4. Садовский В.М., Садовская О.В. Об акустическом приближении термомеханической модели жидкого кристалла // Физическая мезомеханика. 2013. Т. 16. № 3. С. 55-62.
5. Sadovskii V.M. Equations of the dynamics of a liquid crystal under the influence of weak mechanical and thermal perturbations // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1629. P. 311-318.
6. Sadovskaya O.V. Numerical simulation of the dynamics of a liquid crystal in the case of plane strain using GPUs // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1629. P. 303-310.
7. Смолехо И.В. Параллельная реализация алгоритма для описания термоупругих волн в жидких кристаллах // Молодой ученый. 2015. № 11 (96). Часть I. С. 107-112.

Analysis of the equations of a liquid crystal taking into account moment interaction

*Irina Vladimirovna Smolekho, Post-graduate Student,
Oxana Victorovna Sadovskaya, Ph.D., Senior Scientific Researcher,
Institute of computational model SB RAS*

Based on the mathematical model of a liquid crystal in the acoustic approximation, the system of two equations of second-order was obtained for tangential stress and angular velocity. Computational algorithm for numerical solution of boundary-value problems is worked out, implemented as a parallel program in the C language using the CUDA technology.

Keywords – liquid crystal, moment medium, dynamics, finite-difference scheme, parallel computational algorithm, CUDA technology.

УДК 51-72

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ СИСТЕМЫ К ПОВРЕЖДЕНИЮ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ

Марина Геннадьевна Усатова, аспирант

E-mail: UsatovaMarina555@yandex.ru

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова

<http://www.khsu.ru>

Роман Анатольевич Козлитин, к.ф.м.н.

E-mail: kran80@mail.ru

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова

<http://www.khsu.ru>

Владимир Николаевич Удодов, д.ф.м.н.

E-mail: udodovv@hotmail.com

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова

<http://www.khsu.ru>

Рассмотрена математическая модель устойчивости системы к повреждению. Предложен новый алгоритм исследования устойчивости системы к повреждению в рамках квазиодномерной модели перколяции. Модель может быть использована для интерпретации результатов в квазиодномерных нанометровых системах.

Ключевые слова: теория перколяции, композитный материал, устойчивость системы.