

Чисельний розв'язок системи нелінійних інтегральних рівнянь та комп'ютерне моделювання із використанням технології CUDA для опису просторового розподілу системи взаємодіючих частинок між двома стінками (HPC:Sci)

Теоретичний опис просторових розподілів систем взаємодіючих частинок, що моделюють різноманітні об'єкти м'якої речовини (рідини, колоїдні суспензії, полімери, рідкі кристали), є однією із фундаментальних проблем статистичної фізики [1]. Вибір взаємодії між частинками визначається моделлю, що використовується, яка в свою чергу покликана відображати особливості властивостей досліджуваної речовини. Впродовж останнього часу велику увагу привертають до себе системи, частинки яких взаємодіють між собою, так званим, конкуруючим парним потенціалом (рис. 1). Такий потенціал описує ефективну взаємодію між колоїдними частинками, які на коротких відстанях притягуються, а на довгих – відштовхуються (SALR – short-range attraction and long-range repulsion) [2,3]. Це, в свою чергу, спричинює формування кластерів частинок (self-assembly process), або ж навіть до мезоструктурування у вигляді впорядкованих фаз, що мають форму послідовних шарів, паралельних циліндрів, а також сферичних кластерів (рис. 2 і 3), розташованих у вигляді кристалічної ґратки [4-6].

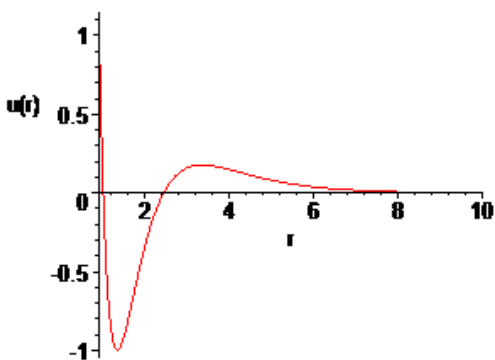


Рис. 1: Приклад парного потенціалу SALR.

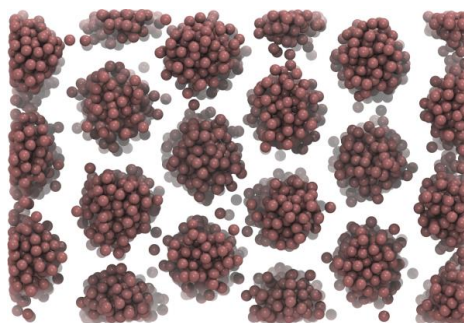


Рис. 2: Ілюстрація просторового мезоструктурування SALR-частинок.

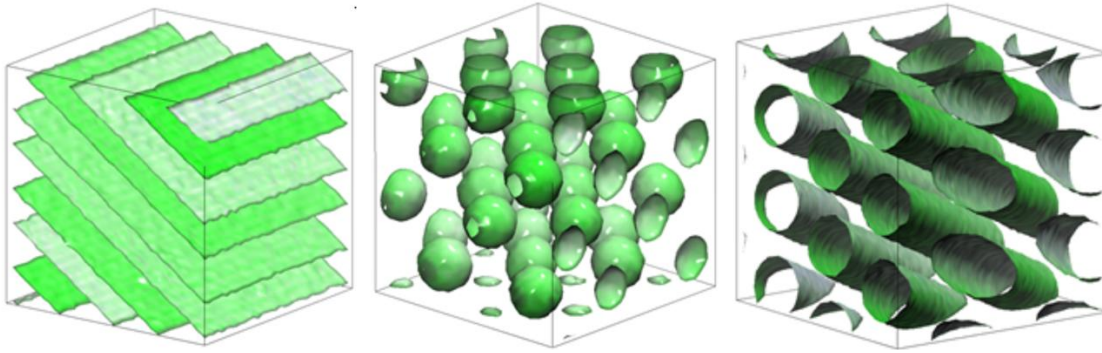


Рис. 3: Різні морфології розподілу густини частинок із конкуруючою взаємодією (шарувата структура, сферичні кластери, паралельні циліндри).

Існують декілька популярних підходів, які дозволяють передбачити таке структурування, зокрема, коли система обмежена стінками пори. Серед них, найбільш популярними, є метод функціоналу густини (DFT – density functional theory) [7] та методи комп'ютерного моделювання (Монте-Карло, молекулярна динаміка) [8]. Перший метод зводиться до чисельного розв'язку системи нелінійних інтегральних рівнянь ітеративними алгоритмами. Найпростіше наближення (середньо-польове – mean-field approximation) в рамках цього методу дає рівняння типу:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \exp \left[-\beta \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') u(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + \beta W(\mathbf{r}) + \beta V_0 \right] \quad (1)$$

що розв'язується відносно функції $\rho(\mathbf{r})$, яка описує розподіл густини частинок в просторі, де \mathbf{r} – вектор-координати точки в просторі. Для розв'язку такого рівняння, простір розбивається у вигляді ґриду $n_x n_y n_z$, де кожний вузол ґриду (i, j, k) відповідає координатам вектора $\mathbf{r}_{ijk} = (x_i, y_j, z_k)$. Розв'язок такого рівняння в тривимірному просторі є доволі ресурсоемкий і потребує багато обчислювального часу, оскільки необхідно виконувати розрахунок трикратного інтегралу на кожній ітерації розв'язку рівнянь при всіх значеннях для всіх координат $\mathbf{r}_{ijk} = (x_i, y_j, z_k)$. Суттєво пришвидшити такий розрахунок можна за допомогою розпаралелення обчислення інтегралу за допомогою технології CUDA на GPU-прискорювачі.

Пропонується розробити програмний код для розв'язку рівняння виду (1). Код повинен бути реалізований на мові C із використанням CUDA для виконання задачі на GPU-прискорювачі. Також повинен бути розроблений аналогічний код без використання CUDA для виконання на звичайному CPU, щоб продемонструвати ефективність CUDA-версії програми.

Ще однією задачею (або ж двох задач) в рамках цього чи іншого проєкту може бути розробка програми для комп'ютерного моделювання системи частинок із конкуруючою взаємодією (між стінками пори) з використанням методу Монте-Карло або методу молекулярної динаміки. Розроблений код також повинен бути реалізований із застосуванням CUDA, що дозволить помітно покращити його продуктивність.

- [1] Hansen, Jean-Pierre, and Ian Ranauld McDonald. Theory of simple liquids: with applications to soft matter. Academic press, 2013.
- [2] Royall, C. Patrick. "Hunting mermaids in real space: Known knowns, known unknowns and unknown unknowns." Soft Matter 14, no. 20 (2018): 4020-4028.
- [3] Liu, Yun, and Yuyin Xi. "Colloidal systems with a short-range attraction and long-range repulsion: Phase diagrams, structures, and dynamics." Current opinion in colloid & interface science 39 (2019): 123-136.
- [4] Zhuang, Yuan, Kai Zhang, and Patrick Charbonneau. "Equilibrium phase behavior of a continuous-space microphase former." Physical review letters 116, no. 9 (2016): 098301.
- [5] Pini, Davide, and Alberto Parola. "Pattern formation and self-assembly driven by competing interactions." Soft Matter 13, no. 48 (2017): 9259-9272.
- [6] I. Kravtsiv, T. Patsahan, M. Holovko, and Dung Di Caprio. "Soft core fluid with competing interactions at a hard wall." Journal of Molecular Liquids 362 (2022): 119652.
- [7] Evans, Robert. "Density functional theory for inhomogeneous fluids I: Simple fluids in equilibrium." Lectures at 3rd Warsaw School of Statistical Physics, Kazimierz Dolny 27 (2009).
- [8] Allen, M.P., Tildesley, D.J., Computer simulation of liquids. Oxford university press, 2017.

Науковий керівник: Тарас Миколайович Пацаган, д.ф.-м.н., Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, taras.patsahan@gmail.com