UDC 004.942:519.688:538.911

ВИКОРИСТАННЯ GPU У БАГАТОПОТОКОВИХ ОБЧИСЛЕННЯХ ГРУПОВИХ ІНТЕГРАЛІВ ДЛЯ ҐРАТКОВИХ МОДЕЛЕЙ РЕЧОВИНИ

Ушкац М.В., д.ф.-м.н., проф.[1]; Ушкац. С.Ю., к.ф.-м.н., доц.[2]
[1,2] Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова
[1,2] Україна, Миколаїв
[1] mykhailo.ushcats@nuos.edu.ua; [2] svitlana.ushkats@nuos.edu.ua

Анотація. *Обчислення групових інтегралів Майєрів є актуальною проблемою статистичної фізики, пов'язаною як зі складністю визначення самого підінтегрального виразу так і великою кількістю точок інтегрування у багатовимірному фазовому просторі. В роботі запропонована методика відповідних обчислень з використанням багатопотокових технологій на базі сучасних GPU.*
Ключові слова: *Груповий розклад Майєрів; звідний груповий інтеграл; ґраткова модель; алгоритм Уітлі; багатопотокові обчислення.*

Вступна частина. В останні роки суттєві досягнення в теоретичному описі фазових переходів речовини [1,2] пов'язані з використанням статистичного підходу на основі групового розкладу Майєрів [3]. При цьому, особливий інтерес представляють ґраткові моделі речовини [4] (моделі з дискретним конфігураційним простором різної геометрії та вимірності, в яких потенціал парної взаємодії враховує притягання і відштовхування: ґраткові гази [5], модель феромагнетиків Ізінга [6], бінарні суміші [7] тощо) завдяки тому, що притаманна цим моделям симетрія «частинка–дірка» [8] дозволяє підходити до опису фазових переходів, як з боку розріджених, так і з боку щільних (конденсованих) станів [9]. Дискретність конфігураційного простору ґраткових моделей означає перетворення усіх групових інтегралів розкладу Майєрів (звідних або незвідних інтегралів) на точні суми по всіх можливих положеннях частинок у ґратках. З іншого боку, дуже велика кількість відповідних конфігурацій для групових інтегралів високих порядків робить знаходження кожної такої точної суми надзвичайно складною обчислювальною задачею.

Метою роботи було створення ефективної методики обчислення групових інтегралів для ґраткових моделей речовини з використанням багатопотокових технологій на базі сучасних GPU з великою кількістю CUDA-ядер.

Основна частина. У звідному груповому інтегралі порядку n,

$$b_n = \frac{1}{n!V} \int\limits_{V^{(n)}} \left(\sum \prod_{i,j \in \{n\}} f_{ij} \right) d\mathbf{r}^{(n)}, \qquad (1)$$

підсумовування має проводитись по всім можливим добуткам парних функцій Майєрів f_{ij} [3], що зв'язують усі n частинок кластеру, (по всім можливим зв'язним діаграмам Майєрів для n частинок) в кожній конфігурації цих n частинок.

Навіть генерація усіх таких добутків (зв'язних діаграм) в кожній точці конфігураційного простору n частинок, вже сама по собі, є досить складною задачею для великих n. Крім того, з ростом n дуже швидко зростає число таких точок конфігураційного простору, приблизно як $(2n-1)^{D(n-1)}$ (D – вимірність простору для однієї частинки), по яких треба провести підсумовування для точного знаходження групового інтеграла.

На сьогодні найбільш ефективним підходом до визначення підінтегрального виразу незвідного групового інтеграла в кожній точці інтегрування є алгоритм Уітлі [10], який містить декілька етапів складних рекурсивних співвідношень на кожному такому етапі та

потребує досить значних об'ємів пам'яті для зберігання проміжних результатів. Звичайно, для CPU цей алгоритм не представляє складнощів, але його багатопотокова реалізація на кожному окремому CUDA-ядрі GPU залишається вкрай неефективною. З іншого боку, реалізація тільки першого етапу алгоритму Уітлі – визначення підінтегрального виразу звідного групового інтеграла (1) – є цілком можливою для окремого CUDA-ядра.

На цьому етапі підінтегральний вираз в (1) для кожної конфігурації n частинок визначається в наступному рекурсивному співвідношенні:

$$f_C^{\{n\}} = f_Q^{\{n\}} - \sum_{\{s\}\in\{n\}} f_C^{\{s\}} f_Q^{\{n\}/\{s\}}, \qquad (2)$$

де $f_Q^{\{m\}}$ – добуток усіх можливих $(f_{ij}+1)$ для всіх пар частинок у певній сукупності $\{m\}$ цих частинок. Сукупність $\{s\}$ завжди включає «першу» (центральну) частинку (для сукупності, що містить тільки цю одну частинку, $f_C^1 \equiv 1$). Сукупність $\{n\}/\{s\}$ є завжди комплементарною до $\{s\}$ і ніколи не включає «першу» частинку (для сукупності з лише однієї частинки, $f_Q^{i\neq 1} \equiv 1$).

Оригінальний підхід означає використання рекурсії (2), а отже й розрахунок усіх можливих $f_C^{\{s\}}$ та $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$, в кожній конфігурації. Однак, такий досить громіздкий набір операцій в кожній точці інтегрування насправді може бути суттєво спрощений: так як інтегрування (або підсумовування) для $f_C^{\{s\}}$ і $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ в кожному їхньому добутку рівняння (2) відбувається по незалежним конфігураційним просторам груп частинок $\{s\}$ та $\{n\}/\{s\}$, то на практиці можна окремо проводити підсумовування всіх $f_C^{\{s\}}$ та $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ для кожної групи частинок по різним точкам інтегрування і лише потім (вже після підсумовування по всіх точках) визначати суму відповідних добутків (тобто, використовувати рекурсію (2) лише один раз на фінальному етапі розрахунку результуючого звідного групового інтеграла). Більш того, так як будь-яка група частинок $\{s\}$ завжди включає «центральну» частинку, правильне підсумовування $f_C^{\{s\}}$ по всьому об'єму інтегрування має давати звідний інтеграл відповідного порядку s меншого за n – інтеграл, відомий з попередніх обчислень. Таким чином, тільки значення всіх можливих $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ для різних груп частинок $\{n\}/\{s\}$ насправді мають підсумовуватись по точках інтегрування, а потреба в реалізації низки рекурсій (2) для визначення $f_C^{\{s\}}$ в кожній точці повністю відпадає: рекурсія (2) використовується лише один раз на фінальному етапі розрахунку результуючого звідного групового інтеграла після простого підсумовування різних $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ по всіх точках конфігураційного простору. В результаті, така принципово спрощена версія першого етапу алгоритму Уітлі (2) робить використання багатопотокових обчислень на базі GPU особливо ефективним – обчислень, де кожен потік (кожне CUDA-ядро на певному етапі) проводить розрахунок лише різних $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ в певній точці конфігураційного простору та додає їх до загального набору відповідних сум $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$.

Крім того, дискретність конфігураційного простору ґраткових моделей (а, отже, й дискретність відповідного потенціалу парної взаємодії) дозволяє визначити груповий інтеграл безпосередньо у вигляді точної функціональної залежності від температури, тобто провести розрахунки інтегралу лише один раз, замість того, щоб розраховувати цілий набір його значень для певного (й завжди обмеженого) набору температур. Дійсно, в ґратковій моделі кожна функція Майєрів f_{ij} в залежності від взаємного розташування відповідної пари частинок може мати лише обмежену кількість значень. Наприклад, для моделей зі взаємодією тільки найближчих сусідів (так званий square-well потенціал) функція Майєрів f_{ij} може мати лише три значення: -1 (абсолютне відштовхування, коли частинки знаходяться в одній комірці); $f(T)$

(певне притягання між частинками в сусідніх комірках); 0 (відсутність взаємодії між віддаленими частинками). Відповідно, будь-яка величина $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ в (2), як добуток певних $(f_{ij} + 1)$, може мати лише два принципово різні значення: 0 (така величина не дає жодного внеску в результуючий інтеграл) або $[f(T) + 1]$ в певному ступені (ступінь теж може дорівнювати 0), а окремий потік має обчислити лише цей ступінь для кожної групи частинок $\{n\}/\{s\}$ та внести відповідний доданок до загального по всім конфігураціям $f_Q^{\{n\}/\{s\}}$ як полінома $[f(T) + 1]$ або $f(T)$. В результаті, весь груповий інтеграл на фінальному етапі теж визначається як точний поліном $f(T)$.

Висновки. Реалізація запропонованої методики на GPU GeForce GTX 1060 (з використанням бібліотеки DirectX 12 та відповідних Compute шейдерів) дозволило суттєво підвищити порядок відомих групових інтегралів для різних ґраткових моделей речовини.

Зокрема, для двовимірних квадратних ґраток зі взаємодією з чотирма та вісьма найближчими сусідами були розраховані звідні групові інтеграли до 9-го та 8-го порядків, відповідно. Для тривимірних кубічних ґраток зі взаємодією з шістьма та двадцяти шістьма найближчими сусідами вдалось обчислити звідні групові інтеграли до 7-го й 6-го порядків, відповідно. Своєю чергою, це дозволило суттєво підвищити точність теоретичного опису поведінки зазначених ґраткових моделей.

Використання інструментів ШІ. В роботі інструменти ШІ не використовувались.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] Ushcats, M. V. (2012). Equation of state beyond the radius of convergence of the virial expansion. *Physical Review Letters*, 109, 040601.

[2] Ushcats, M. V., Bulavin, L. A., Sysoev, V. M., Bardik, V.Y., & Alekseev, A. N. (2016). Statistical theory of condensation - advances and challenges, *J. Molecular Liquids*. 224 (Part A), 694–712.

[3] Mayer, J. E., & Mayer, M. G. (1977). *Statistical mechanics* (2nd ed.). John Wiley.

[4] Hill, T. L. (1956). *Statistical Mechanics: Principles and Selected Applications*. New York: McGraw-Hill.

[5] Lee, T. D., & Yang, C. N. (1952). Statistical theory of equations of state and phase transitions. II. Lattice gas and Ising model. *Physical Review*, 87(3), 410–419.

[6] Ising, E. (1925). Contribution to the theory of ferromagnetism. *Zeitschrift für Physik*, 31, 253–258.

[7] Ushcats, M., Ushcats, S., Kondratieva, A., & Koval, S. (2024). Quantitative description of phase transitions in binary mixtures via Mayer's cluster expansion. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 649, 129957.

[8] Ushcats, M. V. (2015). High-density equation of state for a lattice gas. *Physical Review E*, 91(5), 052144.

[9] Ushcats M., Bulavin L., Ushcats S., Burunina Z., Maiboroda O., Romanchuk N., & Shapoval N. (2025). Advances of Mayer's cluster approach in quantitative theoretical description of phase transitions for various lattice models of matter. *Condens. Matter Phys.*, 28(1), 13501.

[10] Wheatley, R. J. (2013). Calculation of high-order virial coefficients with applications to hard and soft spheres. *Physical Review Letters*, 110(20), 200601.

Ushcats M.V., Ushcats S.Yu.

Using GPU in multithread computations of cluster integrals for lattice models of matter

Abstract. *Computing the Mayer cluster integrals is a significant challenge in statistical physics, stemming both from the complexity of the integrand and the huge number of integration points in the corresponding multidimensional phase space. This study proposes a methodology for performing these computations by using multithread technologies of modern GPUs.*

Keywords: *Mayer cluster expansion; reducible cluster integral; lattice model; Wheatley's algorithm; multithread computations.*