

0.1. Черныш Ю.С., Ряткина Е.П. Быстрый алгоритм матрично-векторного умножения на основе модификации метода Барнса — Хата с применением идей мультипольного метода

Проблема моделирования динамики множества дальнедействующих частиц первоначально возникла в небесной механике (задача N тел), впоследствии аналогичные задачи возникли в вихревых методах вычислительной гидромеханики. Их непосредственное решение с прямым расчетом парных взаимодействий приводит к алгоритмам с вычислительной сложностью $O(N^2)$, что не позволяет на практике обрабатывать более чем десятки тысяч частиц, особенно при решении нестационарных задач, когда требуется выполнять большое количество шагов по времени.

Для решения таких задач наиболее часто применяют метод Барнса — Хата [1] и быстрый метод мультиполей [2], разработанные первоначально для решения гравитационных задач и имеющие квазилинейную вычислительную сложность $O(N \log N)$ или $O(N)$. Отметим, что их перенос на вихревые методы может быть нетривиальным, поскольку аналогом скалярной неотрицательной массы в данном случае является завихренность, ассоциированная с частицами, которая в двумерных задачах может быть представлена скалярной величиной произвольного знака, а в трехмерных — является векторной величиной с вытекающими отсюда особенностями. В настоящей работе обсуждается комбинированный метод, представляющий собой модификацию метода Барнса — Хата с применением некоторых идей мультипольного метода, показывающий большую эффективность по сравнению с исходными алгоритмами. В нем подобно оригинальному методу Барнса — Хата выполняется обход дерева с определением принадлежности кластеров частиц ближней либо дальней зоне в соответствии с выбираемым критерием близости, что позволяет регулировать точность в широком диапазоне; функция влияния кластеров дальней зоны заменяется несколькими первыми слагаемыми ее мультипольного разложения. При этом полагается, что в ячейках нижнего уровня располагаются несколько частиц, поэтому для вычисления влияния на них строятся локальные разложения функции влияния.

Следует отметить, что процедуру расчета взаимного влияния частиц можно рассматривать как умножение матрицы специального вида на вектор-столбец масс частиц (в вихревых методах их аналогом является завихренность, ассоциированная с частицами), и поэтому упомянутые методы можно рассматривать как быстрые алгоритмы приближенного матрично-векторного умножения.

Это позволяет предложить эффективные вычислительные алгоритмы для решения граничных ин-

тегральных уравнений (ГИУ), возникающих как в вихревых методах при моделировании обтекания тел произвольной формы, так и в иных приложениях, в частности, в задачах электродинамики при расчете рассеяния электромагнитных волн на проводящих поверхностях. «Прямое» их решение с заменой интеграла квадратурной суммой и обеспечением выполнения условий коллокаций или методом Галеркина потребовало бы хранения в памяти плотной матрицы системы размерностью до нескольких миллионов (что, очевидно, невозможно!) и ее многократного умножения на некоторые векторы при реализации какого-либо итерационного метода.

Использование упомянутого выше комбинированного метода позволяет решить данную проблему и обеспечить реализацию численных схем метода Галеркина повышенной (по сравнению с методом коллокаций) точности. В разработанном на основе быстрого метода алгоритме решения ГИУ требуется явное вычисление и хранение лишь $O(N)$ компонент матрицы, а трудоемкость всей процедуры численного решения ГИУ можно оценить величиной $O(N \log^2 N)$.

Научный руководитель — к.ф.-м.н. Марчевский И. К.

Список литературы

- [1] Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm // Nature. 1986. Vol. 324, N. 4. P. 446–449.
- [2] Greengard L., Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations // Journal of Computational Physics. 1987. Vol. 73, N. 2. P. 325–348.
- [3] Марчевский И. К. Разработка и реализация Т-схем численного решения граничных интегральных уравнений в математических моделях вихревых методов вычислительной гидродинамики: дис. ... д-ра физ.-мат. наук, 2021. 480 с.