

## Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

### Нерекурсивный мультипольный метод в двумерном и трехмерном пространствах

*Михалев Александр Юрьевич*

*Аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет вычислительной математики и кибернетики, Москва, Россия*

*E-mail: mizasizhevsk@gmail.com*

В данной работе в качестве основной проблемы была взята задача многих тел — определение взаимодействий всех данных тел с заданными свойствами.

В общем виде поставленную задачу можно записать следующим образом:

$$F(i) = \sum_{j \neq i} f(i, j)q_j.$$

Проблема вычисления этих сумм является одной из фундаментальных задач вычислительной математики.

К примеру, такие суммы вычисляются при решении задач астрофизики, молекулярной динамики, граничных интегральных уравнений.

Так как задача была поставлена довольно давно, существуют алгоритмы, реализующие нахождение всех взаимодействий тел.

Самыми распространенными являются: наивный (сложность  $O(N^2)$ ), Барнс-Хатса [1] (линейная сложность, требует построения иерархического дерева), мультипольный метод [2] (линейная сложность, группирование «близких» тел, разделение взаимодействий на «дальние» и «ближние»), мозаично-скелетонный [3] (линейная сложность, аппроксимация блоков матрицы взаимодействия скелетонным методом).

Каждый из перечисленных методов обладает как плюсами, так и минусами.

В связи с широким распространением доступа к высокопроизводительным кластерам, требования к алгоритму решения исходной задачи меняются — на первый план выходит возможность хорошей параллелизации кода.

К сожалению, метод Барнс-Хатса и мультипольный метод обладают рекурсивной составляющей и привязаны к функции взаимодействия тел, а мозаично-скелетонный метод требует большого количества памяти.

Таким образом необходим новый алгоритм, не зависящий от функции взаимодействия, не имеющий рекурсии в своем составе и не выдвигающий высоких требований к памяти.

Описанный в работе алгоритм является аналогом мультипольного метода, но разбиение суммы идет не по качеству «далеко»-«близко», а по качеству «до»-«после» [4].

Он состоит из разложения матрицы взаимодействия новым способом и умножения матрицы в полученном виде на вектор-свойство (заряд, масса, ...).

Само по себе разложение имеет сложность  $O(N^2)$ , но производится всего-лишь один раз, далее работают операции по вычислению произведения матрицы на вектор (линейная сложность).

Отличительной чертой алгоритма является то, что он состоит из совершенно независимых конвейеров вычислений, так что при его имплементации можно использовать все вычислительные ресурсы (OpenMP, MPI, CUDA).

Алгоритм был реализован с использованием OpenMP, ускорение счета на 8 потоках составило порядка 8 раз.

Результаты численных экспериментов приведены в следующих таблицах ( $N$  - количество частиц,  $Factor$  - время построения разложения,  $MVMul$  - время умножения разложенной матрицы на вектор,  $naiveMVMul$  - время умножения не разложенной матрицы на вектор,  $rndL2err$  - относительная ошибка вычислений по норме  $L_2$ ,  $mem$  - необходимая память для хранения разложения).

$N$	$Factor$	$MVMul$	$naiveMVMul$	$rndL2err$	$mem$
10000	1.13	0.0212	0.446	2.1e-5	21M
20000	3.13	0.0223	1.75	2.7e-5	44M
30000	6.13	0.032	3.93	2.86e-5	68M
40000	9.62	0.04	6.95	2.86e-5	93M
50000	14.75	0.05	10.98	3.05e-5	118M
60000	20.35	0.062	15.9	3.36e-5	144M
70000	26.65	0.067	21.43	3.41e-5	170M
80000	35.67	0.074	27.84	3.58e-5	197M
90000	46.03	0.085	35.31	3.8e-5	223M
100000	59.38	0.1	43.74	3.76e-5	250M

Таблица 1. Зависимость времени счета разложения, быстрого матвека, стандартного матвека, полученных максимальных рангов от количества частиц при заданной точности  $\varepsilon = 1e - 5$ ,  $f(x, y) = -\log r(x, y)$  в 2-мерном пространстве, частицы расположены случайным образом внутри куба  $[0; 1]^2$

$N$	$Factor$	$MVMul$	$naiveMVMul$	$rndL2err$	$mem$
10000	3.66	0.0665	0.358	1.38e-5	103M
20000	16.08	0.0686	1.36	2.23e-5	236M
30000	37.3	0.105	3.06	2.54e-5	377M
40000	73.3	0.142	5.47	2.96e-5	522M
50000	125.5	0.176	8.5	3.44e-5	676M
60000	181.3	0.172	12.25	3.62e-5	828M
70000	260	0.22	16.6	4.06e-5	989M
80000	366.8	0.27	21.85	4.47e-5	1.2G
90000	455.7	0.285	27.75	4.56e-5	1.3G
100000	598	0.341	34.3	4.96e-5	1.5G

Таблица 2. Зависимость времени счета разложения, быстрого матвека, стандартного матвека, полученных максимальных рангов от количества частиц при заданной точности  $\varepsilon = 1e - 5$ ,  $f(x, y) = r(x, y)^{-1}$  в 3-мерном пространстве, частицы расположены случайным образом внутри куба  $[0; 1]^3$

## Список литературы

- [1] J. Barnes and P. Hut. A hierarchical  $O(N \log N)$  force-calculation algorithm. Nature, 324:4, 1986.

- [2] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *Journal of Computational Physics*, 73(2):325–348, 1987.
- [3] E. Tyrtyshnikov. Mosaic-skeleton approximations. *Calcolo*, 33(1):47–57, 1996.
- [4] Alan Edelman Charles E. Leiserson Erik D. Demaine, Martin L. Demaine and Per-Olof Persson. Building Blocks and Excluded Sums. From *SIAM News*, Volume 38, Number 1, January/February 2005, 2005.