

Stručný úvod do problematiky algoritmu metody více pólů

Petr Přikryl

Matematický ústav AV ČR, Praha

Hned na začátku roku 2000 uveřejnili Jack Dongarra a Francis Sullivan v časopise *Computing in Science and Engineering* svůj seznam deseti nejvýznamnějších algoritmů minulého století. V květnu téhož roku pak v časopise *SIAM News* vyšel článek „The Best of the 20th Century: Editors Name Top 10 Algorithms“. Výběr algoritmů v obou člancích se přirozeně do značné míry překrývá, pro nás je zajímavé, že v obou vystupuje algoritmus metody více pólů (FMM, Fast Multipole Method), který je, zdá se, v české matematické veřejnosti méně znám. Zdá se proto užitečné prezentovat na PANM 15 alespoň rámcovou informaci o principech a algoritmu této metody.

Metoda více pólů je matematický postup, který byl vyvinut s cílem urychlit výpočet sil dalekého dosahu v úloze N těles. Dosahuje toho tak, že rozvine Greenovu funkci daného systému do tzv. multipólového rozvoje, což pak umožní seskupit zdroje ležící blízko sebe a pracovat s nimi jako se zdrojem jediným. Dále se používá hierarchická dekompozice prostoru, což umožňuje s rostoucí vzdáleností zavádět do výpočtu stále větší skupiny těles či částic. Uvážíme-li, že přesný výpočet pohybů N částic interagujících prostřednictvím gravitačních nebo elektrostatických sil (hvězdy v galaxii či třeba atomy v proteinu) by vyžadoval $O(N^2)$ výpočtů, pak FMM umožňuje totéž provést s požadovanou přesností pomocí $O(N)$ výpočtů (ovšem konstanta obsažená v tomto $O(N)$ je velká). Jednou ze zřetelných předností algoritmu FMM je skutečnost, že přichází vybaven rigorózními odhady chyb, což je rys, který leckteré jiné metody postrádají.

Metoda v současné době nachází řadu aplikací, například při modelování nanokompozitních materiálů, biomateriálů, palivových článků, akustických vln či zpracování obrazů. Zajímavé se zdá, že je také úspěšně kombinována s metodou hraničních prvků, kde pak dává možnost řešit na běžném PC modely s miliony neznámých. O této problematice ale čas vyhrazený na přednášku už nedává možnost hovořit, pro případné zájemce budou k dispozici další materiály v elektronické podobě.