DOI 10.25205/978-5-4437-1513-1-9

УСКОРЕНИЕ МЕТОДА ДИСКРЕТНЫХ ДИПОЛЕЙ ДЛЯ МНОЖЕСТВА ПАДАЮЩИХ ПОЛЕЙ И ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

✉ К. Г. Инжеваткин[1,2], М. А. Юркин[1]

[1] Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
[2] Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск, Россия

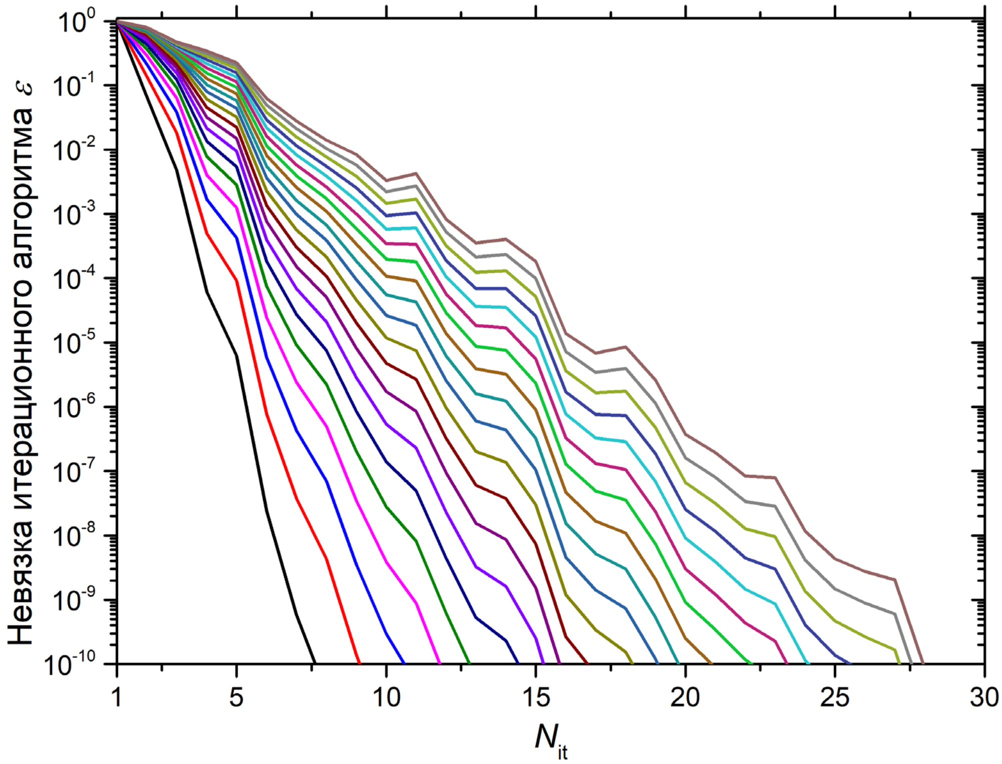
✉ k.inzhevatkin@yandex.ru

Для решения прямой задачи светорассеяния широко применяется метод дискретных диполей (МДД). Он позволяет моделировать рассеяние и поглощение света частицами различной формы и внутренней структуры [1, 2]. Суть метода — замена рассеивателя набором диполей (кубики равного объема) с последующим решением системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для поиска векторов электрического поля внутри частицы. Поскольку число диполей велико, то решение СЛАУ прямыми методами занимает много времени, поэтому применяются итерационные подходы. МДД используется в различных областях науки, от биологии и наночастиц до атмосферных аэрозолей и межзвездной пыли. Важной областью применения являются оптически мягкие частицы, для которых показатель преломления рассеивателя близок к внешней среде $|m - 1| \ll 1$, m — относительный показатель преломления. МДД эффективно работает с такими частицами по сравнению с другими методами. Однако он все еще требует много времени в случае больших частиц и огромных баз данных (вычисления для многих параметров частиц). Для оптимизации вычислений применяются подходы, когда несколько СЛАУ решаются одновременно: блочные методы и метод сопряженных градиентов со сдвигами.

В задачах усреднения параметров рассеяния по ориентациям частицы и при возбуждении точечным источником (с переменным положением) необходимо решать множество СЛАУ с одной и той же матрицей, но разными правыми частями. То есть задачу можно записать в виде: $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$, где $\mathbf{X}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times s}$. В таких случаях удобно использовать блочные методы, которые позволяют ускорить вычисления за счет обмена информацией о подпространствах Крылова, в которых ищутся решения, для различных СЛАУ. Из тестирования наиболее интересных алгоритмов (BBiCG — стандартный подход, BCGbQ — с начальной ортогонализацией $\mathbf{B}$ и COCGrQ — с ортогонализацией матрицы $\mathbf{R}$ на каждой итерации) видно, что метод COCGrQ работает стабильнее и быстрее остальных. Он позволяет ускорить вычисления более чем в 5 раз (при $s > 250$) по сравнению с последовательным решением систем. COCGrQ дает бóльшее ускорение в случае близких правых частей линейных систем. Однако данный эффект незначительный, и для его увеличения мы применили дефляцию базисных векторов, что положительно повлияло на результаты.

Также мы рассмотрели другой вариант оптимизации вычислений в МДД — метод сопряженных градиентов со сдвигами [3]. Он позволяет решать системы с матрицами вида $\mathbf{A} + \sigma_i \mathbf{I}$ одновременно для многих сдвигов σ_i. На каждой итерации мы находим базисный вектор (одно произведение матрицы на вектор), а затем вычисляем решение сразу для всех σ_i (небольшие дополнительные издержки). В нашем случае это аналогично решению задачи, когда рассеяние происходит на частице с переменным m (σ — функция от m), а сам рассеиватель не меняется.

Первые тесты при дифракционном параметре x = 12 ($x = kR$, k — волновое число, R — эффективный радиус), m = 1,01 − 1, шаг — 0,01, показали, что вычислительное время для одной частицы соизмеримо со временем для 20, что показывает большой потенциал для ускорения вычислений в МДД. График сходимости для этого случая представлен на рисунке. Сейчас мы реализуем данный алгоритм в программном пакете ADDA в отдельной ветке [4].



Невязка итерационного метода (в логарифмическом масштабе)
от числа итераций для шара с x = 12 и m = 1,01 − 1, шаг — 0,01.
Здесь m растет слева направо, т. е. черный график — 1,01, красный — 1,02 и т. д.

Список литературы

1. Draine B. T. The discrete dipole approximation and its application to interstellar graphite grains // Astrophys. J. 1988. Vol. 333. P. 848–872.

2. Yurkin M. A., Hoekstra A. G. The discrete dipole approximation: an overview and recent developments // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2007. Vol. 106. P. 558–589.

3. Birk S. Deflated shifted block Krylov subspace methods for Hermitian positive definite matrices: Thesis. Bergischen Universität Wuppertal, 2015.

4. URL: https://github.com/inzhevatkin/adda/tree/Shifted_CG.