

Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II

Übungsblatt 3 - Musterlösung

1) kurzreichweitiges Potential

- a) Der Fehler ist, dass wir bei Verdopplung der Teilchenzahl in einem Gebiet mit gleichen Volumen eine völlig anderes Simulationsszenario haben. Wir haben nun nämlich einen Stoff mit der doppelten Dichte. Eine Verdopplung der Problemgröße entspricht also nicht eine reine Verdopplung der Teilchenzahl, sondern einer Verdopplung der Gebietsgröße bei gleich bleibender Dichte (Damit also auch doppelte Teilchenzahl). In diesem Fall benötigt der Algorithmus tatsächlich nur den doppelten Rechenaufwand.
- b) Zunächst betrachten wir den eindimensionalen Fall. Das Integral über den weggeschnittenen Teil muß endlich sein:

$$\int_{\|\vec{r}\|>r_c} U(\vec{r}) d\vec{r}$$

Da wir nur feststellen wollen, ob das Integral endlich ist, genügt es, positive Abstände zu betrachten:

$$\int_{r>r_c} U(r) dr = \int_{r>r_c} c \cdot r^{-p} = c \left[\frac{r^{1-p}}{1-p} \right]_{r_c}^{\infty} = c \left(\frac{\infty^{1-p}}{1-p} - \frac{r_c^{1-p}}{1-p} \right)$$

Für $p \leq 1$ geht das Integral also gegen unendlich. Für $p > 1$ ist das eindimensionale Potential kurzreichweitig. Das zweidimensionale Integral über den abgeschnittenen Bereich ist etwas komplizierter zu berechnen. In kartesischen koordinaten ist ein zweidimensionales Integral nur über ein rechteckiges Gebiet möglich. Um das gewünschte Integral zu berechnen, muss daher noch eine Koordinatentransformation in die Polarkoordinaten durchgeführt werden. Die Transformationsfunktion $\Psi(r, \alpha)$ lautet:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \Psi(r, \alpha) = \begin{pmatrix} r \cos \alpha \\ r \sin \alpha \end{pmatrix}$$

Mit dieser Funktion lässt sich das Integral umschreiben:

$$\int_{\|\vec{r}\|>rc} U(\vec{r})d\vec{r} = \int_0^{2\pi} \int_{rc}^{\infty} U(r)det(J(\Psi(r, \alpha)))drd\alpha \quad (1)$$

Zunächst berechnen wir die Determinante der Jacobi-Matrix:

$$\begin{aligned} det(J(\Psi(r, \alpha))) &= \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial r}\Psi_1(r, \alpha) & \frac{\partial}{\partial r}\Psi_2(r, \alpha) \\ \frac{\partial}{\partial \alpha}\Psi_1(r, \alpha) & \frac{\partial}{\partial \alpha}\Psi_2(r, \alpha) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -r \sin \alpha & r \cos \alpha \end{vmatrix} \\ &= r \cos^2 \alpha + r \sin^2 \alpha = r \end{aligned}$$

Dieser Ergebnis in Gl. (1) eingesetzt ergibt:

$$\int_{\|\vec{r}\|>rc} U(\vec{r})d\vec{r} = \int_0^{2\pi} \int_{rc}^{\infty} U(r) \cdot r drd\alpha$$

Nun setzen wir das in der Aufgabenstellung gegebene Potential ein:

$$\begin{aligned} \int_{\|\vec{r}\|>rc} U(\vec{r})d\vec{r} &= \int_0^{2\pi} \int_{rc}^{\infty} c \cdot r^{-p} \cdot r drd\alpha = \int_0^{2\pi} \int_{rc}^{\infty} c \cdot r^{1-p} drd\alpha \\ &= 2\pi \int_{rc}^{\infty} c \cdot r^{1-p} dr = 2\pi c \left[\frac{r^{2-p}}{2-p} \right]_0^{\infty} \\ &= 2\pi c \left(\frac{\infty^{2-p}}{2-p} - \frac{0^{2-p}}{2-p} \right) \end{aligned}$$

Analog zum eindimensionalen Fall lässt sich an dieser Formel wieder sehen, für welche p das Integral endlich ist, nämlich für $p > 2$. In diesem Fall ist das Potential kurzreichweitig.

Für den dreidimensionalen Fall lässt sich die gleiche Rechnung (mit etwas komplizierterer Transformation) auch anstellen. Man erhält das erwartete Ergebnis, dass im dreidimensionalen für $p > 3$ das Potential kurzreichweitig ist.

2) Linked-Cells

i) $l = rc$: In diesem Fall sind nur direkte Nachbarzellen notwendig.

	2D: 9 Zellen	3D: 27 Zellen
benötigte Fläche:	$9rc^2$	$27rc^3$
rc-Fläche	πrc^2	$\frac{4}{3}\pi rc^3$
Anteil der rc-Fläche:	$\frac{\pi}{9} \approx 35\%$	$\frac{4\pi}{81} \approx 16\%$
⇒ unnötig:	$\approx 65\%$	$\approx 84\%$

- ii) $l = \frac{rc}{2}$: In diesem Fall sind je zwei Nachbarzellen in jeder Richtung nötig, also insgesamt in jeder Dimension fünf Zellen.

	2D: 25 Zellen	3D: 125 Zellen
benötigte Fläche:	$25\left(\frac{rc}{2}\right)^2 = \frac{25}{4}rc^2$	$\frac{125}{8}rc^3$
rc-Fläche	πrc^2	$\frac{4}{3}\pi rc^3$
Anteil der rc-Fläche:	$\frac{4\pi}{25} \approx 50\%$	$\frac{32\pi}{375} \approx 27\%$
⇒ unnötig:	$\approx 50\%$	$\approx 73\%$

- iii) $l = \frac{rc}{4}$: Hier sind in jeder Dimension 9 Zellen notwendig. Allerdings können nun manche dieser Zellen eingespart werden. Im zweidimensionalen beispielsweise ist der geringstmögliche Abstand eines Partikels aus einer Zelle in der Ecke zur mittleren Zelle $\sqrt{2\left(\frac{3}{4}rc\right)^2} = 1.06rc$. Damit ist diese Zelle nicht notwendig. Im Dreidimensionalen sind damit automatisch sämtliche Kanten des 9x9x9-Würfels unnötig. Ausserdem können noch vier weitere Zellen auf jeder Seite des Würfels vernachlässigt werden.

	2D: 77 Zellen	3D: 613 Zellen
benötigte Fläche:	$77\left(\frac{rc}{4}\right)^2 = \frac{77}{16}rc^2$	$\frac{613}{64}rc^3$
rc-Fläche	πrc^2	$\frac{4}{3}\pi rc^3$
Anteil der rc-Fläche:	$\frac{16\pi}{77} \approx 65\%$	$\frac{256\pi}{3 \cdot 613} \approx 44\%$
⇒ unnötig:	$\approx 35\%$	$\approx 56\%$

Hier nochmal die Ergebnisse in der Übersicht:

	$l = rc$	$l = \frac{rc}{2}$	$l = \frac{rc}{4}$...	$L \rightarrow 0$
2D	9	6.25	4.81		3.14
(% unnötig)	65%	50%	35%		0%
3D	27	15.63	9.58		4.19
(% unnötig)	84%	73%	56%		0%

- iv) Die Zeit, die für die Bearbeitung einer Zelle nötig ist, setzt sich zusammen aus der Zeit, die für den Zugriff auf die Zelle notwendig ist, zuzüglich der Zeit, um auf die Partikel zuzugreifen und die Abstände zu berechnen. Bei gleichverteilten Partikeln ist die Anzahl an Molekülen pro Zelle proportional zur Dichte ρ . Die Zeit für eine Zelle ist also (ohne Kraftberechnungen):

$$t_{Zelle} = c_{Zelle} + c_{Abstand} \cdot \rho \cdot V_{Zelle}$$

Die Anzahl an Kraftberechnungen ist unabhängig von der Größe der Zellen, da immer genau die Moleküle verwendet werden, die innerhalb des Abschneideradius liegen. Sie hängt aber auch von der Dichte ab.

$$t_{Kraft} = (c_{Kraft} \cdot \rho \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot rc^3) \cdot \rho \cdot V_{domain}$$

Für die Gesamtzeit gilt: $t_{total} = N_{cells} \cdot t_{cell} + t_{force}$

3) Fehlerabschätzung

Zunächst einige Vorüberlegungen. Für das Infimum des Kerns (für gegebenes x das y so wählen, dass der Kern minimal wird) und das Supremum der $(p + 1)$ -ten Ableitung verwenden wir folgende Abkürzungen:

$$g_{min}^{\nu}(x) = \inf_{y \in \Omega_{\nu}} G(x, y) \quad (2)$$

$$g_{max}^{\nu, p+1}(x) = \sup_{y \in \Omega_{\nu}} \max_{\|j\|_1 = p+1} \frac{1}{j!} |G_{0,j}(x, y)| \quad (3)$$

Das zu untersuchende Potential verhält sich wie $\frac{1}{r}$. Es gibt also Konstanten c_1 und c_2 für die gilt:

$$c_1 \cdot \frac{1}{\|x - y\|} \leq G(x, y) \quad (4)$$

$$c_2 \cdot \frac{1}{\|x - y\|^{\|j\|_1 + 1}} \geq |G_{0,j}(x, y)| \quad (5)$$

Im folgenden wollen wir auf den linken Seiten der beiden Ungleichungen y durch y_0 ersetzen. Mit Hilfe des theta-Kriteriums aus der Aufgabenstellung lässt sich folgender Zusammenhang herleiten:

$$\frac{1}{\|x - y\|} \geq \frac{1}{\|x - y_0'\| + \|y_0' - y\|} \geq \frac{1}{\|x - y_0'\| + \theta \|x - y_0'\|} = \frac{1}{1 + \theta} \cdot \frac{1}{\|x - y_0'\|}$$

Aus der Ungleichung (4) folgt damit:

$$c_1 \cdot \frac{1}{(1 + \theta) \|x - y_0'\|} \leq G(x, y)$$

Diese die linke Seite der Ungleichung nun nicht mehr abhängig von y ist, lässt sich die Kernfunktion auf der rechten Seite durch die Kernfunktion für ein beliebiges y ersetzen (da die Ungleichung für alle y gilt). Wir ersetzen also auf der rechten Seite $G(x, y)$ durch $g_{min}^{\nu}(x)$:

$$c_1 \cdot \frac{1}{(1 + \theta) \|x - y_0'\|} \leq g_{min}^{\nu}(x) \quad (6)$$

Analog kann mit Ungleichung (5) verfahren werden. Dabei wird im ersten Schritt die Dreiecksungleichung verwendet (Für ein Dreieck mit den Seiten a , b und c gilt: $a \geq b - c$, daher auch $\frac{1}{a} \leq \frac{1}{b-c}$):

$$\frac{1}{\|x - y\|} \leq \frac{1}{\|x - y_0'\| - \|y_0' - y\|} \leq \frac{1}{\|x - y_0'\| - \theta \|x - y_0'\|} = \frac{1}{1 - \theta} \cdot \frac{1}{\|x - y_0'\|}$$

$$c_2 \cdot \frac{1}{(1 - \theta)^{\|j\|_1 + 1} \|x - y_0^\nu\|^{\|j\|_1 + 1}} \geq G(x, y)$$

$$c_2 \cdot \frac{1}{(1 - \theta)^{p+2} \|x - y_0^\nu\|^{p+2}} \geq g_{max}^{\nu, p+1}(x) \quad (7)$$

Die bisherigen Überlegungen haben zu Abschätzungen für $g_{min}^\nu(x)$ und $g_{max}^{\nu, p+1}$ geführt. Wir werden sie später noch verwenden. Für die Fehlerberechnung wollen wir aber vom Potential ausgehen. Die Formel für das Potential, das von einem Gebiet Ω_ν bezüglich des Punktes x besteht, lautet:

$$\Phi_\nu(x) = \int_{\Omega_\nu} G(x, y) \rho(y) dy \quad (8)$$

In der Vorlesung wurde die Taylorentwicklung des Kerns erläutert:

$$G(x, y) = \sum_{\|j\|_1 \leq p} \frac{1}{j!} G_{0,j}(x, y_0) (y - y_0)^j + R_p(x, y) \quad (9)$$

Das Restglied des Kerns $R_p(x, y)$ lässt sich mit der Lagrange-Form abschätzen:

$$R_p(x, y) = \sum_{\|j\|_1 = p+1} \frac{1}{j!} G_{0,j}(x, y_0 + \xi(y - y_0)) (y - y_0)^j \quad (10)$$

Dabei gilt $0 \leq \xi \leq 1$. Mit (10), (9) und (8) folgt für den absoluten Fehler bei der Berechnung des Potentials:

$$e_\nu^{abs}(x) = \int_{\Omega_\nu} \rho(y) \sum_{\|j\|_1 = p+1} \frac{1}{j!} G_{0,j}(x, y_0 + \xi(y - y_0)) (y - y_0)^j dy \quad (11)$$

Der relative Fehler entspricht dem absoluten Fehler (11) dividiert durch das Potential (8):

$$e_\nu^{rel}(x) = \frac{e_\nu^{abs}(x)}{\Phi_\nu(x)}$$

$$= \frac{\int_{\Omega_\nu} \rho(x) \sum_{\|j\|_1 = p+1} \frac{1}{j!} G_{0,j}(x, y_0 + \xi(y - y_0)) (y - y_0)^j dy}{\int_{\Omega_\nu} G(x, y) \rho(y) dy}$$

Für positives ρ und positiven Kern und mit (2) und (3) folgt:

$$e_\nu^{rel}(x) \leq \frac{\int_{\Omega_\nu} \rho(x) \sum_{\|j\|_1 = p+1} \frac{1}{j!} |G_{0,j}(x, y_0 + \xi(y - y_0))| \cdot |(y - y_0)^j| dy}{\int_{\Omega_\nu} G(x, y) \rho(y) dy}$$

$$\leq c \cdot \frac{g_{max}^{\nu, p+1}(x) \cdot diam^{p+1}}{g_{min}^\nu(x)}$$

Wenn man nun die Abschätzungen (6) und (7) einsetzt erhält man:

$$\begin{aligned} e_{\nu}^{rel}(x) &\leq c \cdot \frac{(1 + \theta) \|x - y_o^{\nu}\| \cdot diam^{p+1}}{(1 - \theta)^{p+2} \|x - y_o^{\nu}\|^{p+2}} \\ &= c \cdot \frac{(1 + \theta)}{(1 - \theta)^{p+2}} \cdot \left(\frac{diam}{\|x - y_o^{\nu}\|^{p+1}} \right)^{p+1} \\ &\leq c \cdot \frac{(1 + \theta)}{(1 - \theta)^{p+2}} \cdot \theta^{p+1} \end{aligned}$$

Wenn man nun noch annimmt, dass θ sehr klein ist, gehen $(1 + \theta)$ und $(1 - \theta)$ gegen 1:

$$e_{\nu}^{rel}(x) \leq c \cdot \theta^{p+1}$$

4) Komplexität des Barnes-Hut-Verfahrens

Die "äußere Schleife" des Barnes-Hut-Verfahrens läuft über alle Partikel und berechnet die Kraft, die auf jedes dieser Partikel wirkt. Da es insgesamt N Partikel sind, muß also für jedes dieser Partikel der Aufwand $O(\theta^{-d} \cdot \log N)$ sein. Für die gegebene Komplexität von $O(\theta^{-d} \cdot N \cdot \log N)$ wurde angenommen, dass der Baum nicht entartet ist, somit hat der Baum $O(\log N)$ Ebenen. Wenn nun also gezeigt werden kann, dass auf jeder Ebene der Rechenaufwand $O(\theta^{-d})$ ist, so ist die Gültigkeit der Formel nachgewiesen.

Zunächst gehen wir vom zweidimensionalen Fall aus. Wir betrachten eine beliebige Ebene und überlegen, wieviele Knoten (Partikel bzw. Pseudopartikel) auf dieser Ebene angeschaut werden müssen. Das sind genau diejenigen Knoten, bei denen der Vaterknoten das θ -Kriterium nicht erfüllt hat. Für den Vaterknoten muss also gelten: $\frac{diam}{|distance|} > \theta$. Es folgt also für den Abstand:

$$|distance| < \frac{diam}{\theta} \quad (12)$$

Wir versuchen nun festzustellen, wie viele Vaterzellen diese Bedingung maximal erfüllen. Dazu schauen wir uns zunächst nur eine Koordinatenrichtung an. Ohne Betrag lässt sich (12) schreiben als $-\frac{diam}{\theta} < distance < \frac{diam}{\theta}$. Der "Bereich" des Abstands beträgt also $2 \cdot \frac{diam}{\theta}$. Da das von einem Knoten belegte Gebiet die Breite $diam$ hat, können es also insgesamt nur

$$\frac{2 \cdot \frac{diam}{\theta}}{diam} = \frac{2}{\theta}$$

Knoten nebeneinander sein, die das θ -Kriterium nicht erfüllen. In der zweiten Raumrichtung sind es ebensoviele. Damit sind es insgesamt

$$\left(\frac{2}{\theta}\right)^2 = 4 \cdot \theta^{-2}$$

Knoten, für die das θ -Kriterium nicht gilt. Dies sind die Vaterknoten derjenigen Knoten, die in der aktuellen Ebene betrachtet werden müssen. Diese Zahl muss also noch mit 4 multipliziert werden, was an der Ordnung nichts ändert. Somit hat man auf jeder Ebene einen maximalen Rechenaufwand von $O(\theta^{-2})$. Da es insgesamt $\log N$ Ebenen und N Partikel gibt, ergibt sich ein Gesamtaufwand von $O(\theta^{-2} \cdot N \cdot \log N)$.

Für drei Dimensionen sieht man leicht, dass es nun nicht mehr $c \cdot \theta^{-2}$ Knoten (alle in einer Ebene) gibt, für die das θ -Kriterium nicht erfüllt ist, sondern $c \cdot \theta^{-3}$, da nun ein Quaderförmiges (dreidimensionales) Gebiet betroffen ist.