

## Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II

### Übungsblatt 3 - Datenstrukturen und Baumverfahren

#### 1) kurzreichweitiges Potential

- a) In der Vorlesung wurde gezeigt, wie die benötigte Rechenzeit durch Einführung eines Abschneideradius reduziert werden kann. Ohne diesen Abschneideradius werden  $O(N^2)$  Operationen benötigt, mit nur noch  $O(n)$ . Nun könnte man behaupten, diese Abschätzung sei falsch: Angenommen für eine Simulation von  $N$  Molekülen werden  $C$  Operationen benötigt. Wenn nun ausschließlich die Anzahl an Molekülen von  $N$  auf  $2 \cdot N$  erhöht wird und alles andere beibehalten wird (Geschwindigkeitsverteilung, Größe des Gebiets,...), so wird der Rechenaufwand zunächst dadurch verdoppelt, dass doppelt so viele Teilchen zu berücksichtigen sind. Außerdem sind aber auch im Einflußgebiet jedes Moleküls doppelt so viele andere Moleküle, womit sich der Rechenaufwand insgesamt vervierfacht. Dies bedeutet aber, dass selbst mit Abschneideradius die Methode weiterhin quadratisch und nicht linear ist.

Wo ist der Fehler in dieser Argumentation?

- b) Bei kurzreichweitigen Potentialen ist es möglich, nur einen kleinen Bereich um jedes Molekül herum zu betrachten, um die auf das Molekül wirkende Kraft abzuschätzen. Der gesamte Bereich ausserhalb des Abschneideradius wird vernachlässigt. Dies ist aber nur dann erlaubt, wenn das Integral über den angeschnittenen Teil endlich ist. Nun betrachten wir Potentiale der Form:

$$U(r) = c \cdot r^{-p}$$

Hierbei ist  $c$  eine beliebige Konstante und  $p$  eine natürliche Zahl. Der Einfachheit halber gehen wir davon aus, dass das Potential im zweidimensionalen definiert ist. Zeigen sie, für welche Wahl von  $p$  das Potential kurzreichweitig ist!

## 2) Linked-Cells

- i) Wie in der Vorlesung erläutert wurde, ist das Lennard-Jones Potential ein kurzreichweitiges Potential, d.h. sobald der Abstand zweier Teilchen einen bestimmten Wert ( $rc$ ) übersteigt, werden die Kräfte zwischen den Teilchen vernachlässigt.

Die Linked-Cell Datenstruktur wird verwendet, um diejenigen Teilchen zu finden, die nicht außerhalb des Abschneidebereichs eines anderen Teilchens liegen. Allerdings decken die betrachteten Nachbarzellen ein größeres Gebiet als nötig ab. Dies liegt zum einen daran, dass alle Zellen quaderförmig und nicht rund sind, zum anderen daran, dass in dem abgedeckten Bereich nicht nur die potentiellen Interaktionspartner eines einzelnen Partikels, sondern diejenigen einer ganzen Zelle liegen müssen.

In dieser Aufgabe soll nun berechnet werden, wie groß der unnötige Bereich des abgedeckten Gebiets ist. Konkret soll zu verschiedenen Zellgrößen ( $l = rc$ ,  $l = \frac{rc}{2}$ ,  $l = \frac{rc}{4}$  und  $L \rightarrow 0$ ) untersucht werden, wieviele Abstandsrechnungen durchgeführt werden und wieviele davon das Abstandskriterium erfüllen. Die Berechnungen sollen sowohl im zweidimensionalen als auch im dreidimensionalen ausgeführt werden.

Tabelle mit dem Maß für die Anzahl an Abstandsrechnungen:

	$l = rc$	$l = \frac{rc}{2}$	$l = \frac{rc}{4}$	...	$L \rightarrow 0$
$2D$					
(% unnötig)					
$3D$					
(% unnötig)					

- ii) Wie in Teil i) gezeigt, hängt die benötigte Rechenzeit, um die Kraft auf ein Teilchen zu berechnen, von der Größe der Zellen in der Linked-Cell Datenstruktur ab. Versuchen Sie festzustellen, was sonst noch einen Einfluss auf die benötigte Rechenzeit hat, und stellen Sie eine Formel dafür auf.

### 3) Fehlerabschätzung

Im Folgenden sollen Sie den Fehler bei der Berechnung langreichweitiger Potentiale mit den behandelten Baumverfahren untersuchen. Nehmen Sie dabei an, dass sich der Kern  $G$  des Potentials  $\Phi$  wie ein  $\frac{1}{r}$ -Potential verhält.

In der Vorlesung wurde behauptet, der relative lokale Approximationsfehler bei der Berechnung von  $\Phi$  sei  $O(\theta^{p+1})$ . Zeigen Sie, dass das wirklich so ist. Verwenden Sie dabei das  $\theta$ -Kriterium aus der Vorlesung:

$$\frac{\text{diam}}{\|x - y'_0\|} \leq \theta$$

### 4) Komplexität des Barnes-Hut-Verfahrens

In der Vorlesung wurden die Kosten des  $d$ -dimensionalen Barnes-Hut-Verfahrens betragen  $O(\theta^{-d} N \log N)$  angegeben. Leiten Sie zunächst die Kosten für das zwei-dimensionale Barnes-Hut-Verfahren her. Überlegen Sie dann anschaulich (ohne Beweis), warum die Formel auch für die Kosten des dreidimensionalen Barnes-Hut-Verfahrens korrekt ist.