
Scientific Computing

Ein Vortrag von
M. Jensen & T. Dziuk
Im Rahmen des Seminars
*Nebenläufige und
Verteilte Programmierung*



Überblick

- Motivation
 - Grid Computations
 - Particle Computations
 - Fazit
-

Motivation

- Scientific Computing- was ist das?
 - Grid computing
 - „Grid“ = Gitter ⇔ Rechnerverbund
 - Particle Computing
 - Matrix Computing
 - ...
 - Parallele Ausführung
 - wozu?
 - shared memory – im Folgenden: parallel
 - message passing – im Folgenden: distributed
-

Grid Computing

- Problemstellung:
 - Modell auf einem Kontinuum
 - Gesucht ist eine Funktion zur Berechnung des Modells
 - Laplace dient als Modell für z.B. Diffusion
 - Laplace ist eine partielle Differentialgleichung
 - Grid Computing für Approximation der Lösung von z.B. partiellen Differentialgleichungen
 - Jacobi Iteration
 - Gauß-Seidel
-

Laplace Gleichung

Geg.: Rechteck R

Ges.: Funktion

$$u: R \rightarrow \mathfrak{R},$$

$$(x, y) \mapsto r$$

Eine gutes Modell ist $\frac{\partial^2}{\partial^2 x} u + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} u = 0$, die Laplace-Gleichung

Nicht lösbar \longrightarrow Approximation

Teile das Rechteck in einzelne Punkte des Abstandes h ein:

$$R_h = \{(x, y) \mid x = i \cdot h, y = j \cdot h; i, j \in \mathbf{Z}\} \cap R$$

Geg.: R, h, R_h

Ges.: Gitterfunktion u_h

Laplace Gleichung

Approximation von Laplace: $\frac{\partial^2}{\partial^2 x} u(\bar{x}) = \frac{1}{h^2} [u(\bar{x} - h) - 2u(\bar{x}) + u(\bar{x} + h)]$

Mit $(\bar{x}, \bar{y}) \in R_h \setminus \partial R$ ergibt sich für Laplace als Approximation

$$0 = \frac{\partial^2}{\partial^2 x} u(\bar{x}, \bar{y}) + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} u(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} u(h)$$

und damit $u_h : R_h \rightarrow \mathfrak{R}$

mit $\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & -4 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & -4 & \vdots \\ & & & & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ \vdots \\ u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

Ist lösbar!

Iteration von Laplace

Aus der approximierten Laplace-Gleichung ergibt sich

$$0 = \frac{\partial^2}{\partial^2 x} u(\bar{x}, \bar{y}) + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} u(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} u(h)$$

$$\Leftrightarrow 4u(\bar{x}, \bar{y}) = u(\bar{x} - h, \bar{y}) + u(\bar{x} + h, \bar{y}) + u(\bar{x}, \bar{y} - h) + u(\bar{x}, \bar{y} + h)$$

$$\Leftrightarrow u(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{1}{4} \left(u(\bar{x} - h, \bar{y}) + u(\bar{x} + h, \bar{y}) + u(\bar{x}, \bar{y} - h) + u(\bar{x}, \bar{y} + h) \right)$$

Definiere nun $grid[i, j] \cong u(ih, jh)$ mit $\bar{x} = i \cdot h, \bar{y} = j \cdot h$

$$\Rightarrow grid[i, j] = \frac{1}{4} \left(grid[i-1, j] + grid[i+1, j] + grid[i, j-1] + grid[i, j+1] \right)$$

Die sequentielle Jacobi Iteration

```

While (true){
    for [i=1 to n, j=1 to n]
        new[i,j]=(grid[i-1,j]+grid[i+1,j]+grid[i,j-1]+grid[i,j+1])/4;
    iters++;

    maxdiff=0.0;
    for [i=1 to n, j=1 to n]
        maxdiff=max(maxdiff,abs(new[i,j]-grid[i,j]));
    if (maxdiff < EPSILON)
        break;
    for [i=1 to n, j=1 to n]
        grid[i,j] = new[i,j];
}

```

Optimierung (1)

```

While (true){
    for [i=1 to n, j=1 to n]
        new[i,j]=(grid[i-1,j]+grid[i+1,j]+grid[i,j-1]+grid[i,j+1])*0.25;
    iters++;

    maxdiff=0.0;
    for [i=1 to n, j=1 to n]
        maxdiff=max(maxdiff,abs(new[i,j]-grid[i,j]));
    if (maxdiff < EPSILON)
        break;
    for [i=1 to n, j=1 to n]
        grid[i,j] = new[i,j];
}

```

Optimierung (2)

```

for (iters=1 to MAXITERS){
  for [i=1 to n, j=1 to n]
    new[i,j]=(grid[i-1,j]+grid[i+1,j]+grid[i,j-1]+grid[i,j+1])*0.25;

  for [i=1 to n, j=1 to n]
    grid[i,j] = new[i,j];

  maxdiff=0.0;
  for [i=1 to n, j=1 to n]
    maxdiff=max(maxdiff,abs(new[i,j]-grid[i,j]));
}

```

Optimierung (3)

```

real grid[0:1][0:n+1][0:n+1]
int old=0, int new=1;

for (iters=1 to MAXITERS){
  for [i=1 to n, j=1 to n]
    grid[new][i,j]=(grid[old][i-1,j]+grid [old][ i+1,j]+grid [old][ i,j-1]
                    +grid [old][ i,j+1])*0.25;
  old=1-old; new=1-new;
}

```

Optimierung (4)

```

for (iters=1 to MAXITERS by 2){
  for [i=1 to n, j=1 to n]
    grid[new][i,j]=(grid[old][i-1,j]+grid [old][ i+1,j]+grid [old][ i,j-1]
                    +grid [old][ i,j+1])*0.25;
  old=1-old; new=1-new;

  for [i=1 to n, j=1 to n]
    grid[new][i,j]=(grid[old][i-1,j]+grid [old][ i+1,j]+grid [old][ i,j-1]
                    +grid [old][ i,j+1])*0.25;
  old=1-old; new=1-new;
}

```

Optimierung (5)

```

for (iters=1 to MAXITERS by 2){
  for [i=1 to n, j=1 to n]
    new][i,j]=(grid[i-1,j]+grid[ i+1,j]+grid[ i,j-1]+grid[ i,j+1])*0.25;

  for [i=1 to n, j=1 to n]
    grid[i,j]=(new[i-1,j]+new[ i+1,j]+new[ i,j-1]+new[ i,j+1])*0.25;

}

```

Jacobi parallel

Zu lösen: $Ax=b$

da $A=D-U-L$, ist $(D-U-L)x=b$ zu lösen.

$$\Leftrightarrow Dx_{\text{neu}} = (L+U)x_{\text{alt}} + b$$

Dx_{neu} beeinflusst L und U nicht, d.h. die Berechnung von D kann in beliebiger Reihenfolge vorgenommen werden.

⇒ Gut parallelisierbar

Die Jacobi-Iteration ist ein Gesamtschrittverfahren

Jacobi parallel: Shared Variables

```
Int HEIGHT= n/PR;
```

```
Process worker[w=1 to PR]
```

```
  int firstrow = (w-1)*HEIGHT +1;
```

```
  int lastrow = firstrow + HEIGHT -1;
```

```
  <barrier>
```

```
  for(iters=1 to MAXITERS by 2){
```

```
    for(i=firstrow to lastrow, j=1 to n)
```

```
      new[i,j]=grid ...
```

```
    <barrier>
```

```
    for(i=firstrow to lastrow, j=1 to n)
```

```
      grid[i,j]=new ...
```

```
    <barrier>
```

```
  }
```

```
  for(i=firstrow to lastrow, j=1 to n){
```

```
    mydiff...
```

```
    maxdiff(w) = mydiff;
```

```
    <barrier>
```

```
  }
```

Jacobi parallel: Message Passing

```

if(w>1)
    send up[w-1](new[1,*]);
if(w<PR)
    send down[w+1](new[HEIGHT,*]);
if(w<PR)
    receive up[w] (new[HEIGHT+1,*]);
If(w>1)
    receive down[w] (new[0,*]);
    
```

```

chan up[1:PR] (real edge[0:n+1]);
chan down[1:PR] (real edge[0:n+1]);
chan diff (real);

Process worker[w=1 to PR]
int HEIGHT = n/PR;
*/initialisiere grid und new
for(iters=1 to MAXITERS by 2){
    for(i=1 to HEIGHT, j=1 to n)
        new[i,j]=grid ...
    */exchange edges
    for(i=2 to HEIGHT-1, j=1 to n)
        grid[i,j]=new ...
    */exchange edges
}
*/worker 1 berechnet maxdiff
    
```

Gauß-Seidel

Zu lösen: $Ax=b$

da $A=D-U-L$, ist $(D-U-L)x=b$ zu lösen.

$$\Leftrightarrow (D-L)x_{\text{neu}} = Ux_{\text{alt}} + b$$

$(D-L)x_{\text{neu}}$ beeinflusst L und ist deshalb nicht so einfach zu parallelisieren.

Gauß-Seidel ist ein Einzelschrittverfahren.

Ausblick :

- Adaptive Grid
 - Einteilungsfeinheit variiert
 - Aufteilung des Problemes in mehrere Grids
 - Mehrere Grids verschiedener Feinheit
-

Scientific Computing

(Teil 2: particle computing)

Ein Vortrag von
M. Jensen und T. Dziuk
Im Rahmen des Seminars
*Nebenläufige und
Verteilte Programmierung*



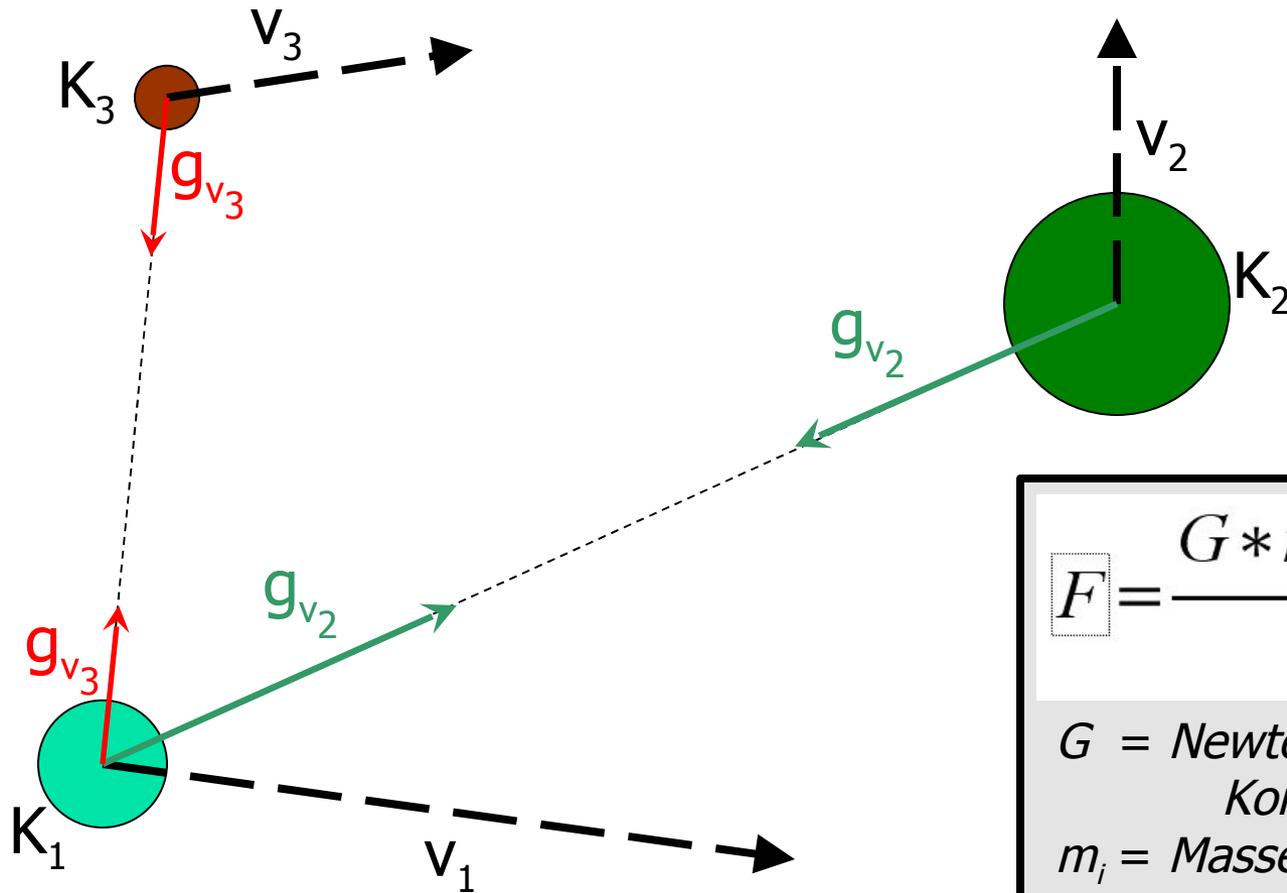
Überblick

- Das N-Körper-Problem
 - Lösungsalgorithmus
 - Sequentielle Implementierung
 - Parallele Implementierung
 - Verteilte Implementierung
 - Barnes-Hut-Approximation
 - Fazit
-

Das N-Körper-Problem

- Gegeben: N Körper (Partikel),
 - diese wirken aufeinander ein...
 - ...und bewegen/verändern sich...
 - ...in Abhängigkeit von den Einwirkungen aller anderen Körper.
- Die Veränderung eines Körpers hängt vom aktuellen Zustand aller $N-1$ anderen Körper ab!
-

Das N-Körper-Problem



$$F = \frac{G * m_1 * m_2}{r^2}$$

G = Newton-Konstante

m_i = Masse

r = Abstand

Lösungsalgorithmus

Zeit und Position diskretisieren!

- Unterteile Betrachtungszeitraum in einzelne Zeitschritte
 - Für jeden Zeitschritt:
 - Berechne den Endzustand aus dem Anfangszustand
 - Für jeden Körper einzeln:
 1. Berechne die Einflüsse aller $N-1$ anderen Körper
 2. Berechne Endzustands-Position aus
 - Anfangsposition
 - Anfangsgeschwindigkeit
 - Summe der Einflüsse anderer Körper
-

Sequentielle Implementierung

```

foreach delta_t ( delta_t ∈ <<Betrachtungszeitraum>> ) {
    // calculate new movement vector
    foreach K[i] ( i ∈ 1..N ) {
        foreach K[ j ] ( j ∈ 1..N, j ≠ i ) {
            f[i,j] = calculate_forces(K[i], K[ j]);
        }
    }
    // move particles
    foreach K[i] ( i ∈ 1..N ) {
        v[i] = <<Summe der f[i,j], j ∈ 1..N>>
        move_particle(K[i], v[i]);
    }
}

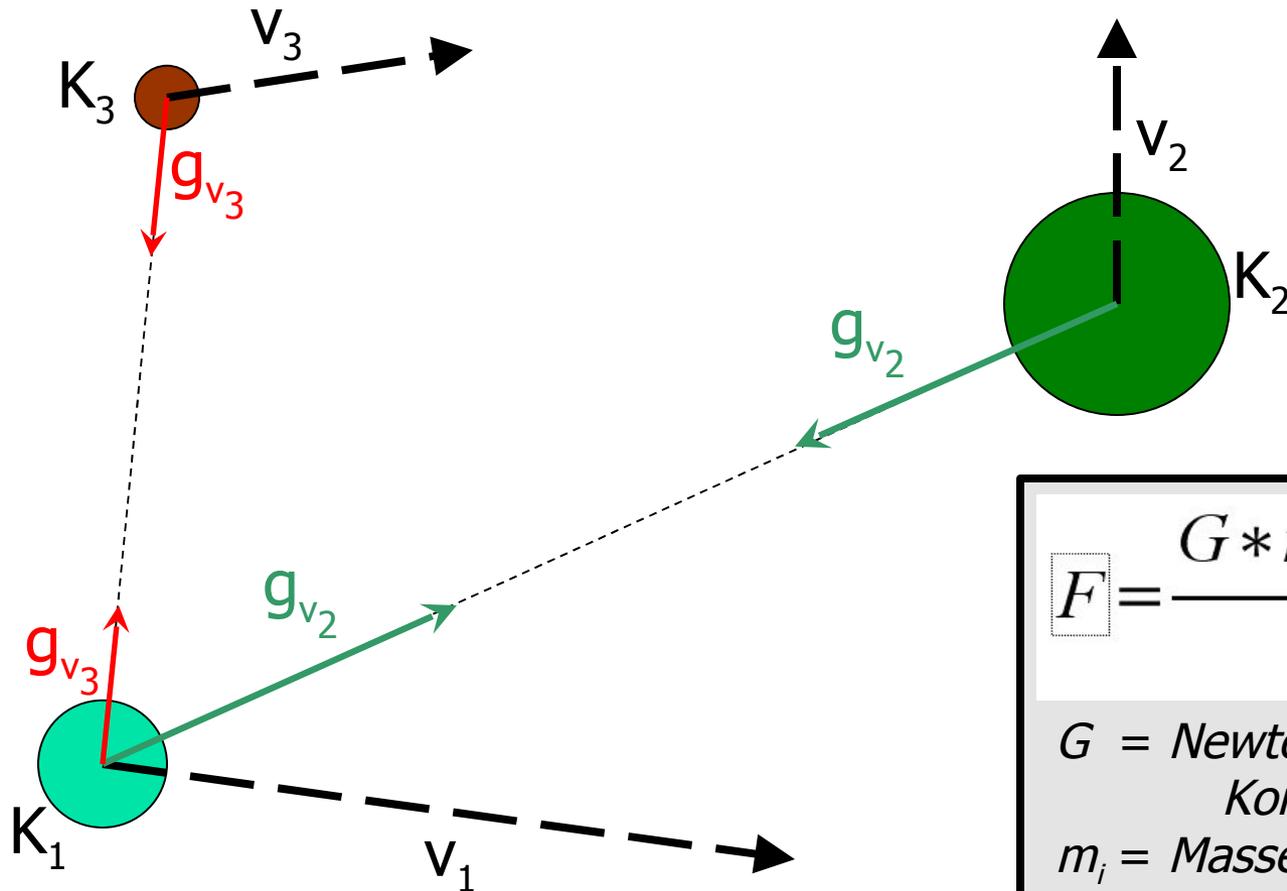
```

K[i] = Körper
 v[i] = Geschwindigkeiten
 f[i,j] = Kräftewirkung zwischen den Körpern

Sequentielle Implementierung

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	0	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2	f[2,1]	0	f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3	f[3,1]	f[3,2]	0	f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4	f[4,1]	f[4,2]	f[4,3]	0	f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5	f[5,1]	f[5,2]	f[5,3]	f[5,4]	0	f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6	f[6,1]	f[6,2]	f[6,3]	f[6,4]	f[6,5]	0	f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7	f[7,1]	f[7,2]	f[7,3]	f[7,4]	f[7,5]	f[7,6]	0	f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8	f[8,1]	f[8,2]	f[8,3]	f[8,4]	f[8,5]	f[8,6]	f[8,7]	0	f[8,9]	...	f[8,N]
9	f[9,1]	f[9,2]	f[9,3]	f[9,4]	f[9,5]	f[9,6]	f[9,7]	f[9,8]	0	...	f[9,N]
...
N	f[N,1]	f[N,2]	f[N,3]	f[N,4]	f[N,5]	f[N,6]	f[N,7]	f[N,8]	f[N,9]	...	0

Sequentielle Implementierung



$$F = \frac{G * m_1 * m_2}{r^2}$$

G = Newton-
Konstante

m_i = Masse

r = Abstand

Sequentielle Implementierung

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	0	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2	f[2,1]	0	f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3	f[3,1]	f[3,2]	0	f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4	f[4,1]	f[4,2]	f[4,3]	0	f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5	f[5,1]	f[5,2]	f[5,3]	f[5,4]	0	f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6	f[6,1]	f[6,2]	f[6,3]	f[6,4]	f[6,5]	0	f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7	f[7,1]	f[7,2]	f[7,3]	f[7,4]	f[7,5]	f[7,6]	0	f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8	f[8,1]	f[8,2]	f[8,3]	f[8,4]	f[8,5]	f[8,6]	f[8,7]	0	f[8,9]	...	f[8,N]
9	f[9,1]	f[9,2]	f[9,3]	f[9,4]	f[9,5]	f[9,6]	f[9,7]	f[9,8]	0	...	f[9,N]
...
N	f[N,1]	f[N,2]	f[N,3]	f[N,4]	f[N,5]	f[N,6]	f[N,7]	f[N,8]	f[N,9]	...	0

Sequentielle Implementierung

	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2		f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3			f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4				f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5					f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6						f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7							f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8								f[8,9]	...	f[8,N]
...									...	f[9,N]

Sequentielle Implementierung

```

foreach delta[t] ( delta[t] ∈ {Zeitintervalle}) {
  // calculate new movement vector
  foreach K[i] ( i ∈ 1..N ) {
    foreach K[ j] ( j ∈ 1..N, j ≠ i ) {
      if ( i < j ) {
        f[i,j] = calculate_forces(K[i], K[ j]);
      } else {
        f[i,j] = f[ j,i];
      }
    }
  }
}
// move particles
...
  
```

Parallele Implementierung

- n Prozessoren/Prozesse, N Körper/Partikel
- Ein gemeinsamer Speicher
- arbeiten auf der gleichen Speichermatrix!

- Berechnung der Kräfte parallel,
- danach Berechnung der Bewegungen parallel
- Dürfen sich gegenseitig nicht ins Gehege kommen!

Idee: Kräftetabelle auf Prozesse aufteilen

Parallele Implementierung

Beispiel: 4 Prozesse: P1, P2, P3, P4, mit Blockverfahren

	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2		f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3			f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4				f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5					f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6						f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7							f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8								f[8,9]	...	f[8,N]
...									...	f[9,N]

P1: 15 f

P2: 11 f

P3: 7 f

P4: 3 f

Parallele Implementierung

4 Prozesse: P1, P2, P3, P4, mit "Striping"-Verfahren

	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2		f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3			f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4				f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5					f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6						f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7							f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8								f[8,9]	...	f[8,N]
...									...	f[9,N]

P1: 12 f

P2: 10 f

P3: 8 f

P4: 6 f

Parallele Implementierung

4 Prozesse: P1, P2, P3, P4, mit "Reverse Striping"

	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2		f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3			f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4				f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5					f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6						f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7							f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8								f[8,9]	...	f[8,N]
...									...	f[9,N]

P1: 9 f

P2: 9 f

P3: 9 f

P4: 9 f

Parallele Implementierung

```

Pk:  foreach delta[t] ( delta[t] ∈ {Zeitintervalle} ) {
      // calculate new movement vector
      for( i = k to N step (N/n) ) {          for( j = i+1 to N ) {
          f[i,j] = f[ j,i] = calculate_forces(K[i], K[ j]);
      }
      }
      <<barrier for all n processes>>
      // move particles
      for( i = 1 to N ) {
          v[i] = Summe der f[i,j], j ∈ 1..N
          move_particle(K[i], v[i]);
      }
      <<barrier for all n processes>>
  }
  
```

Verteilte Implementierung

- n Prozessoren/Prozesse, N Körper/Partikel
- n verschiedene Speicher
- Kommunikation durch Message-passing

➔ Verschiedene Paradigmen:

- Manager / Workers
 - Heartbeat - Algorithmus
 - Pipeline - Algorithmus
-

Verteilte Implementierung

Manager / Workers:

- $n+1$ Prozesse, N Körper
 - Ein Prozess als "*Manager*", n als "*Workers*".
 - Der Manager verteilt die Zuständigkeiten,
 - die Workers berechnen die Kräfte,
 - der Manager sammelt die Ergebnisse...
 - ...und verteilt sie dann (Broadcast),
 - die Workers berechnen die neuen Körper-Positionen und Geschwindigkeiten,
 - der Manager sammelt die neuen Positionen und Geschwindigkeiten und verteilt sie dann.
-

Verteilte Implementierung

4 Blöcke: B1, B2, B3, B4, mit Manager / Workers

	2	3	4	5	6	7	8	9	...	N
1	f[1,2]	f[1,3]	f[1,4]	f[1,5]	f[1,6]	f[1,7]	f[1,8]	f[1,9]	...	f[1,N]
2		f[2,3]	f[2,4]	f[2,5]	f[2,6]	f[2,7]	f[2,8]	f[2,9]	...	f[2,N]
3			f[3,4]	f[3,5]	f[3,6]	f[3,7]	f[3,8]	f[3,9]	...	f[3,N]
4				f[4,5]	f[4,6]	f[4,7]	f[4,8]	f[4,9]	...	f[4,N]
5					f[5,6]	f[5,7]	f[5,8]	f[5,9]	...	f[5,N]
6						f[6,7]	f[6,8]	f[6,9]	...	f[6,N]
7							f[7,8]	f[7,9]	...	f[7,N]
8								f[8,9]	...	f[8,N]
...									...	f[9,N]

10 Blockpaare = Tasks

Verteilte Implementierung

Manager / Workers:

- Manager verwaltet "Bag of Tasks"
- Worker holen sich Tasks zur Bearbeitung ab, bis keine mehr da sind.
- Körperbewegungs-Phase wird verteilt:
Worker i bewegt alle Körper in Block i
- Danach Broadcast der neuen Positionen

Optimierungen:

- Jeder Worker erhält zu Anfang gesamte Positionsmatrix
=> Task-Nachrichten werden kleiner
 - Statt zum Manager sendet jeder Worker berechnete Kräfte zu dem Worker, der die zugehörigen Körper später bewegen soll.
-

Verteilte Implementierung

Heartbeat – Algorithmus:

Grundidee: Für die Berechnung der neuen Position von Körper i :

1. erfrage Kräftewirkung der Körper 1 bis $i-1$,
2. erfrage Positionen und Massen der Körper $i+1$ bis N ,
3. berechne Kräftewirkung für Körper i ,
4. sende Kräftewirkung von Körper i auf Körper $i+1$ bis N an Diese.

→ andere Werte sind nicht erforderlich!

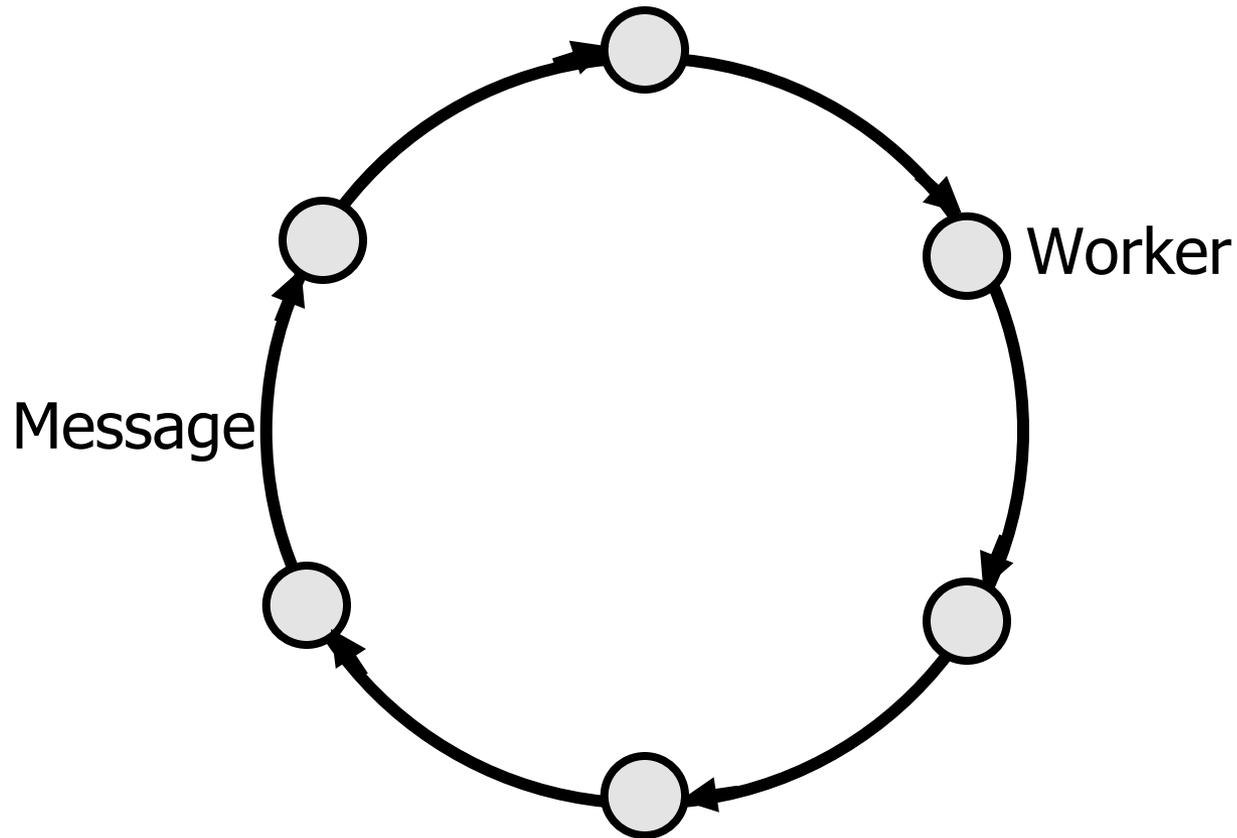
Verteilte Implementierung

Heartbeat – Algorithmus:

- Zuordnung von Körpern auf Prozesse (blockweise, "striping", "reverse striping", ...)
 - Jeder Prozess ...
 - ... sendet Positionen und Geschwindigkeiten nach unten,
 - empfängt Positionen und Geschwindigkeiten von oben,
 - empfängt Kräftewirkungen von unten
 - berechnet eigene Kräftewirkungen
 - sendet Kräftewirkungen nach oben
 - bewegt seine Körper
-

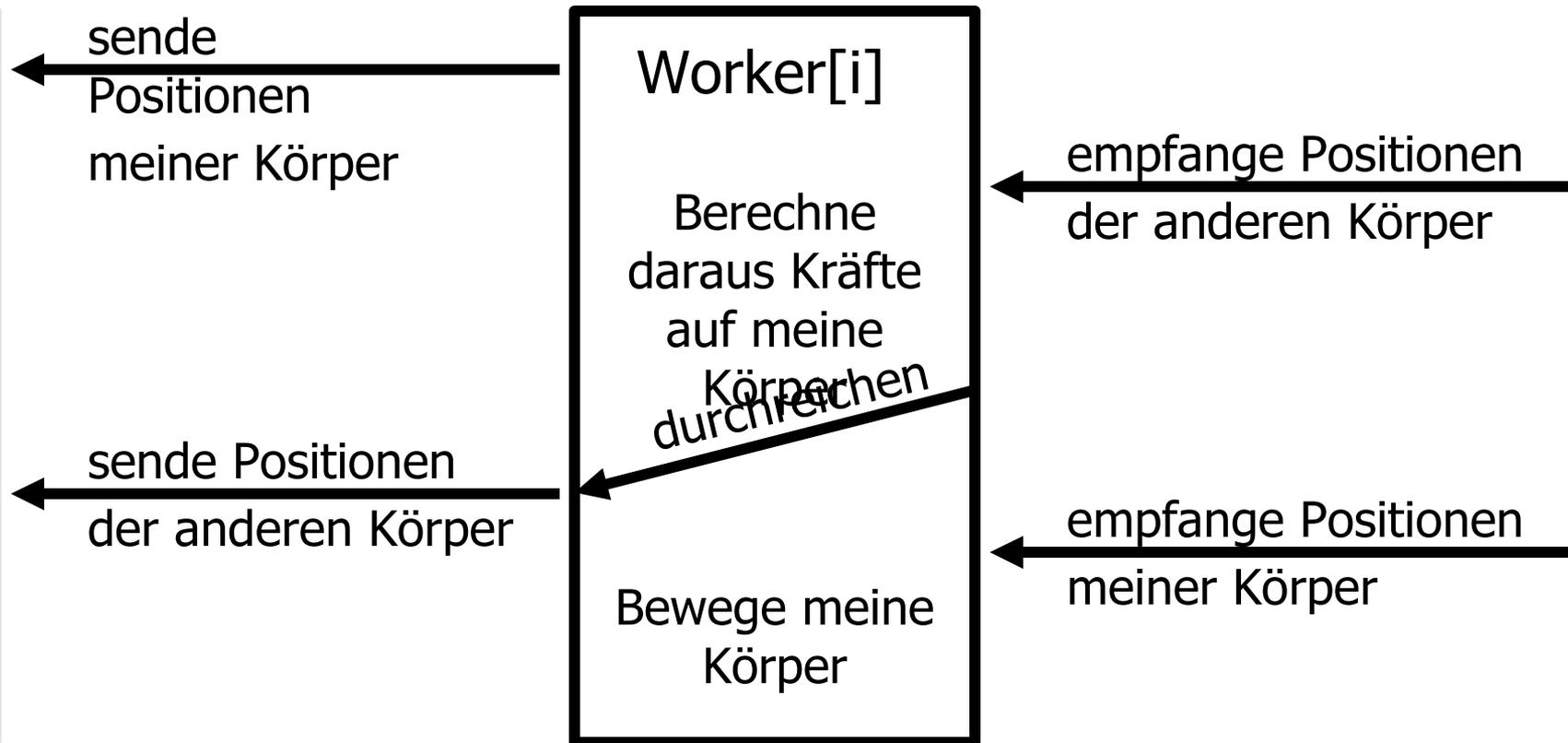
Verteilte Implementierung

Pipeline – Algorithmus:



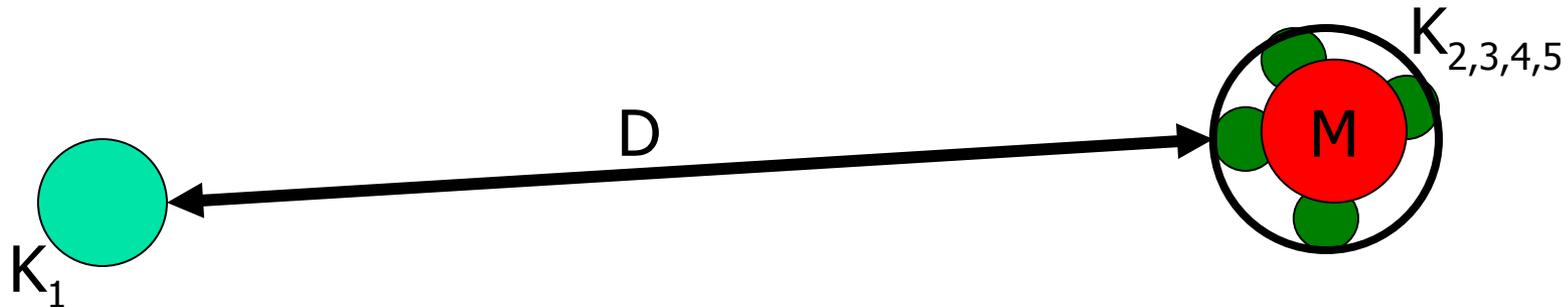
Verteilte Implementierung

Pipeline – Algorithmus:



Barnes-Hut-Approximation

Barnes-Hut-Approximation



$$D > X \Rightarrow f[1,2] + f[1,3] + f[1,4] + f[1,5] \approx f[1, \emptyset 2345]$$

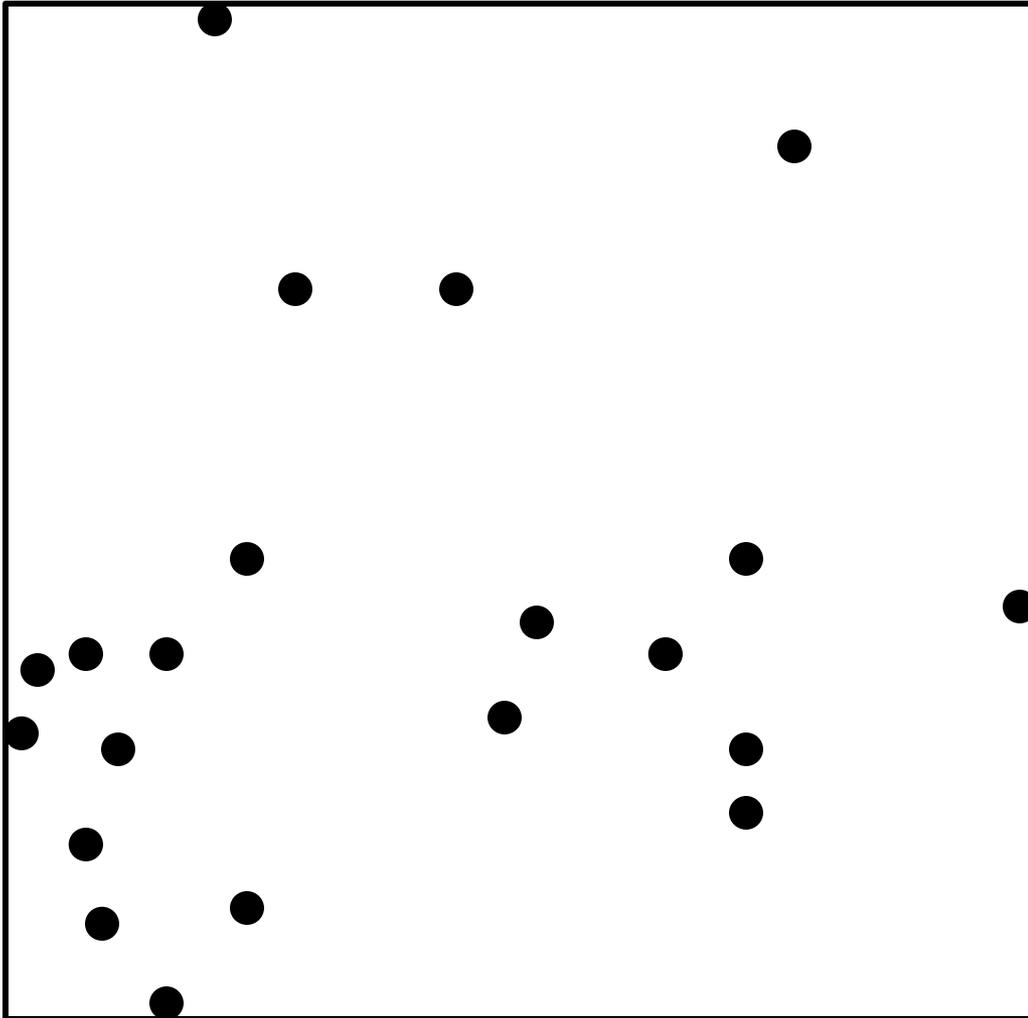
→ Berechne neuen Partikel M mit:

$$\text{mass}(M) := \text{mass}(K_2) + \text{mass}(K_3) + \text{mass}(K_4) + \text{mass}(K_5)$$

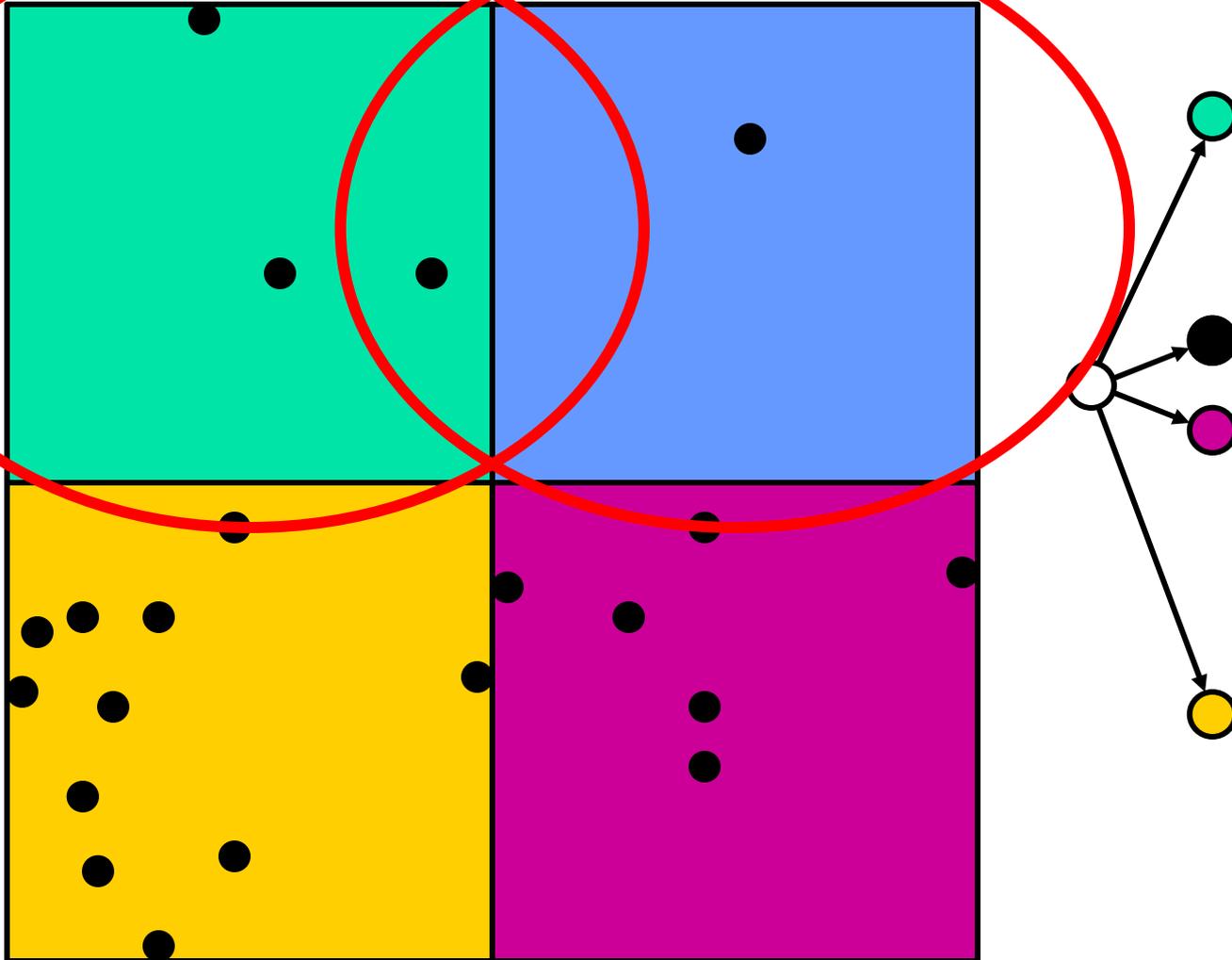
$$\text{pos}(M) := (\text{pos}(K_2) + \text{pos}(K_3) + \text{pos}(K_4) + \text{pos}(K_5)) / 4$$

und berechne statt $f[1,2]$, $f[1,3]$, $f[1,4]$ und $f[1,5]$ nur $f[1,M]$

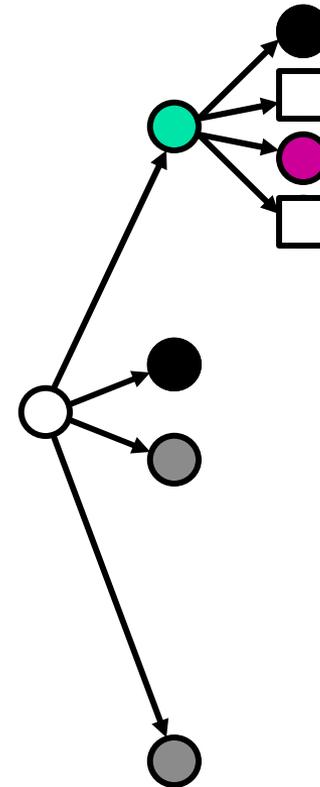
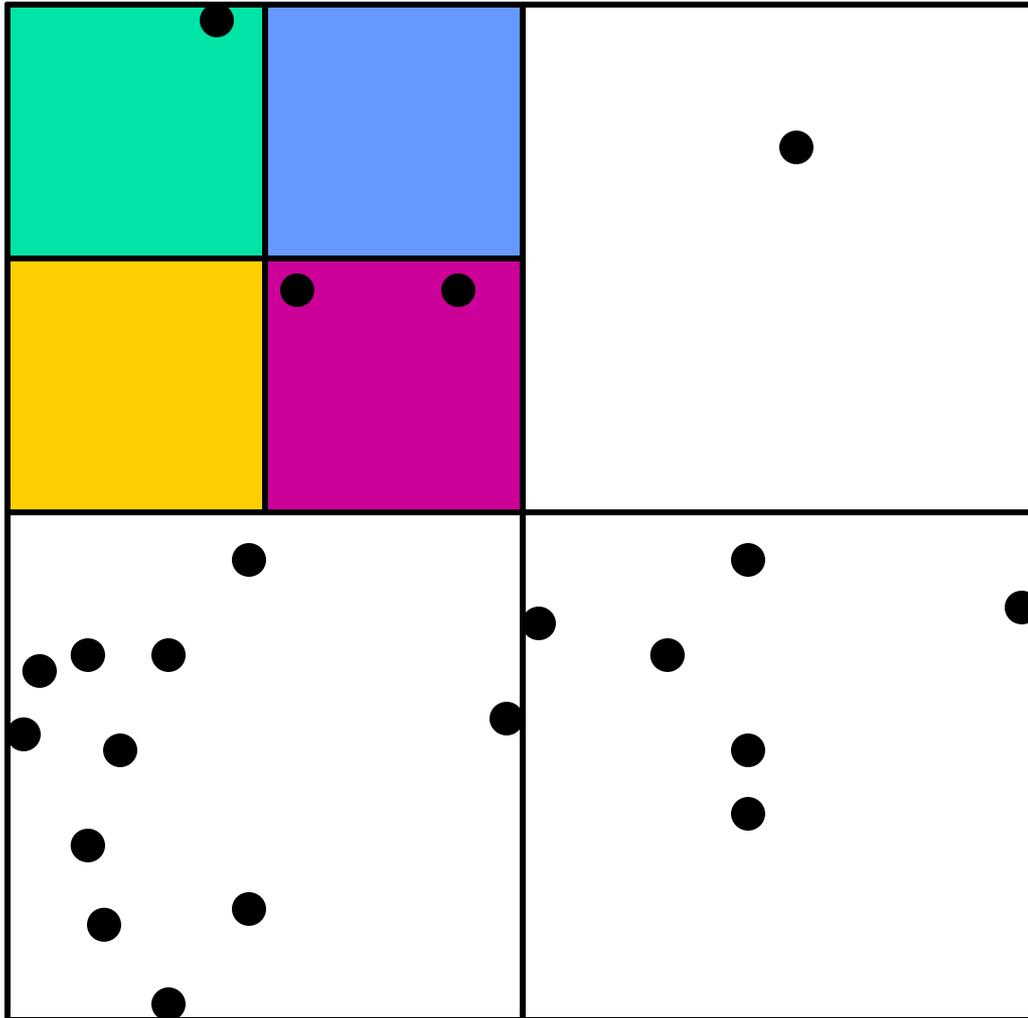
Barnes-Hut-Approximation



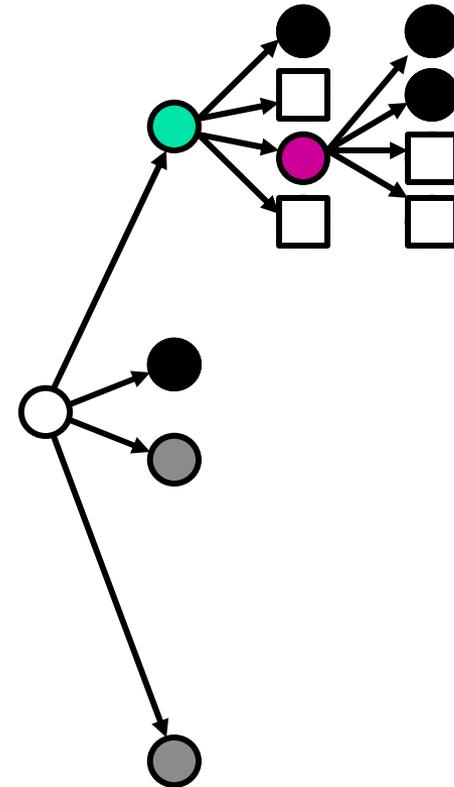
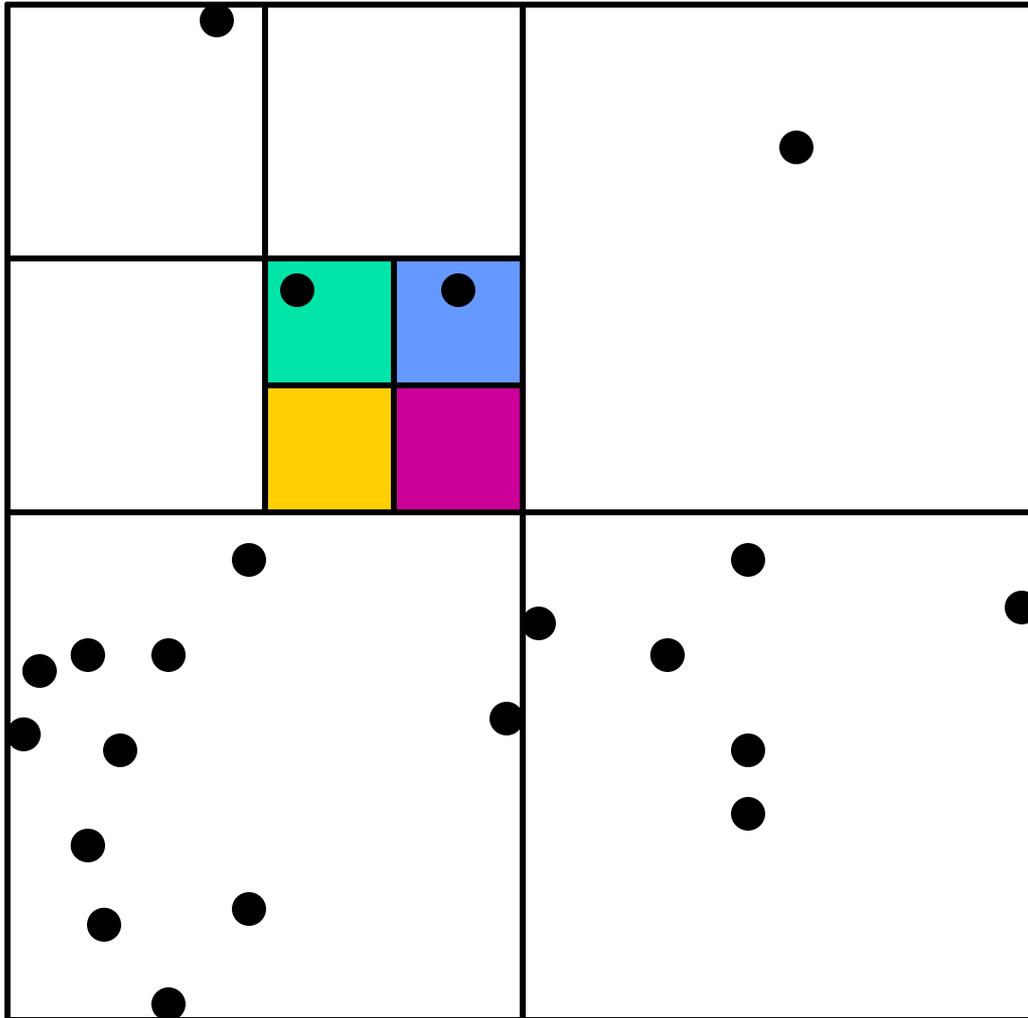
Barnes-Hut-Approximation



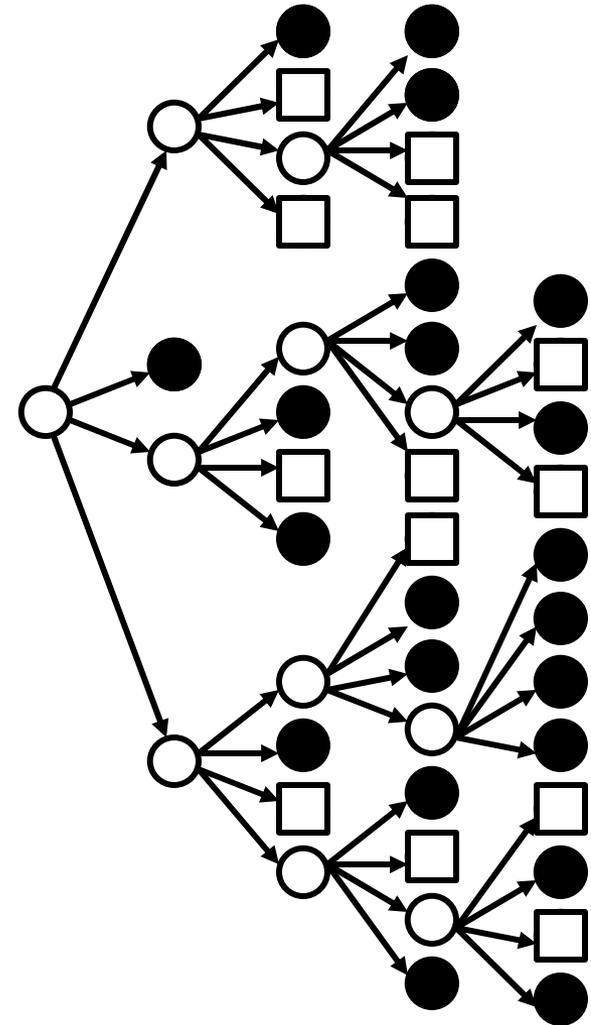
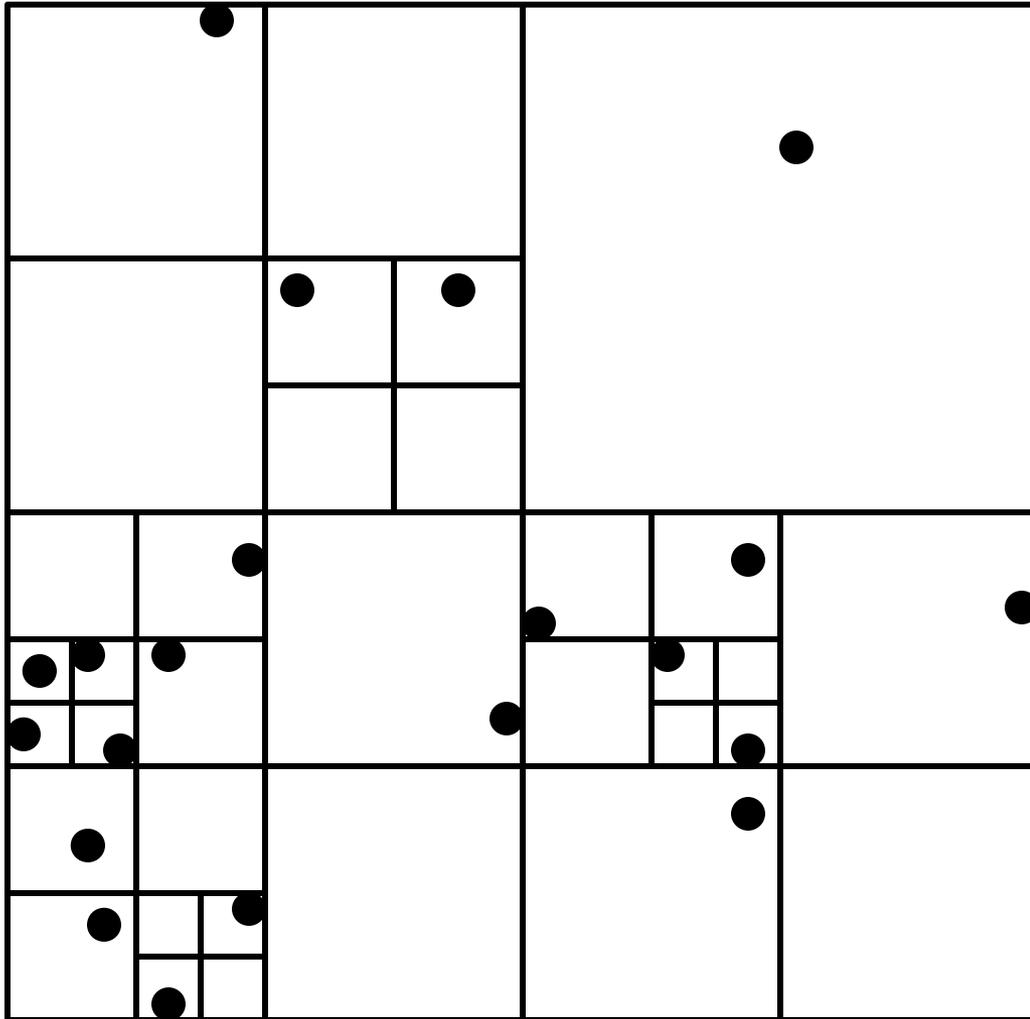
Barnes-Hut-Approximation



Barnes-Hut-Approximation

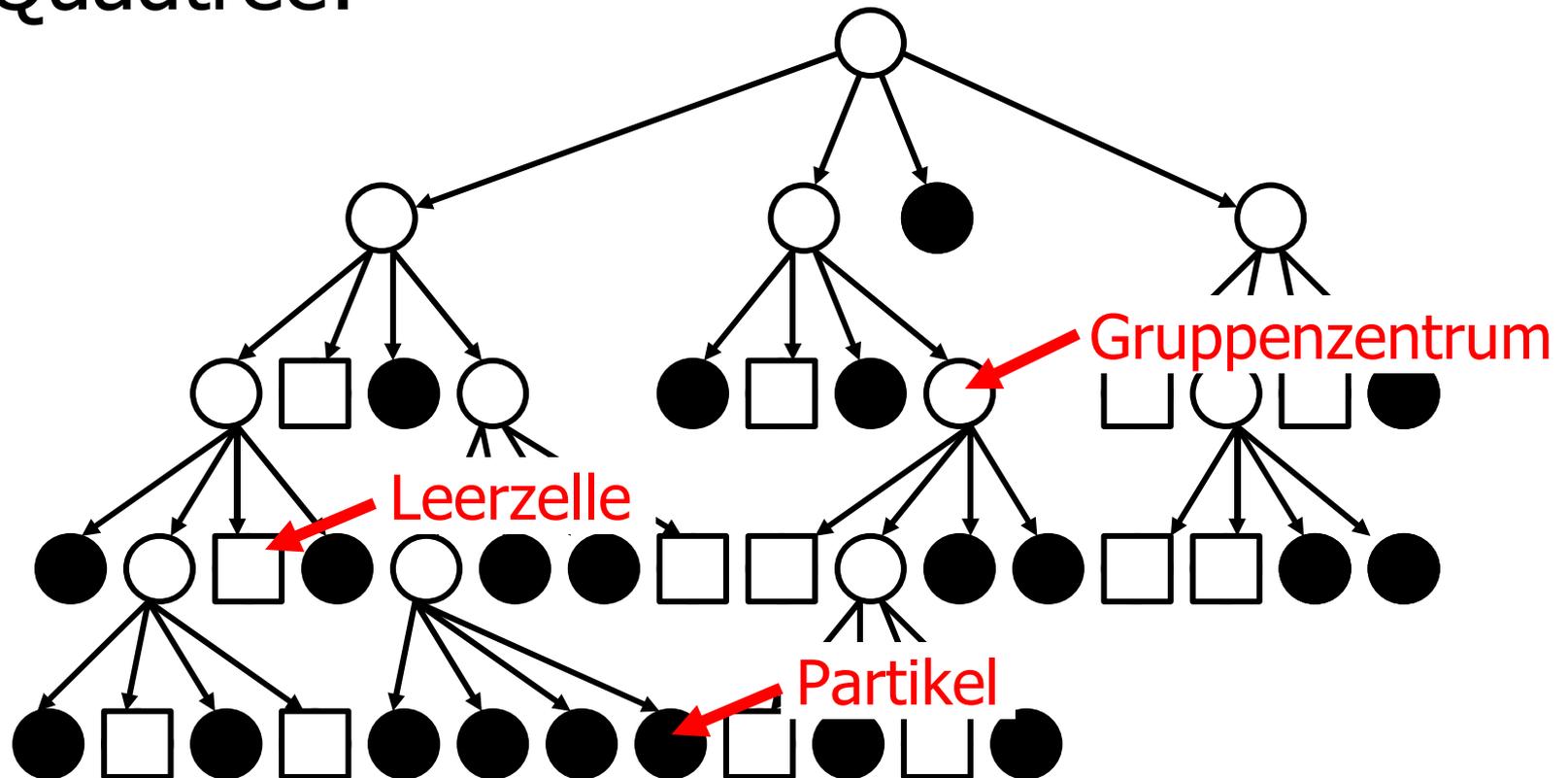


Barnes-Hut-Approximation



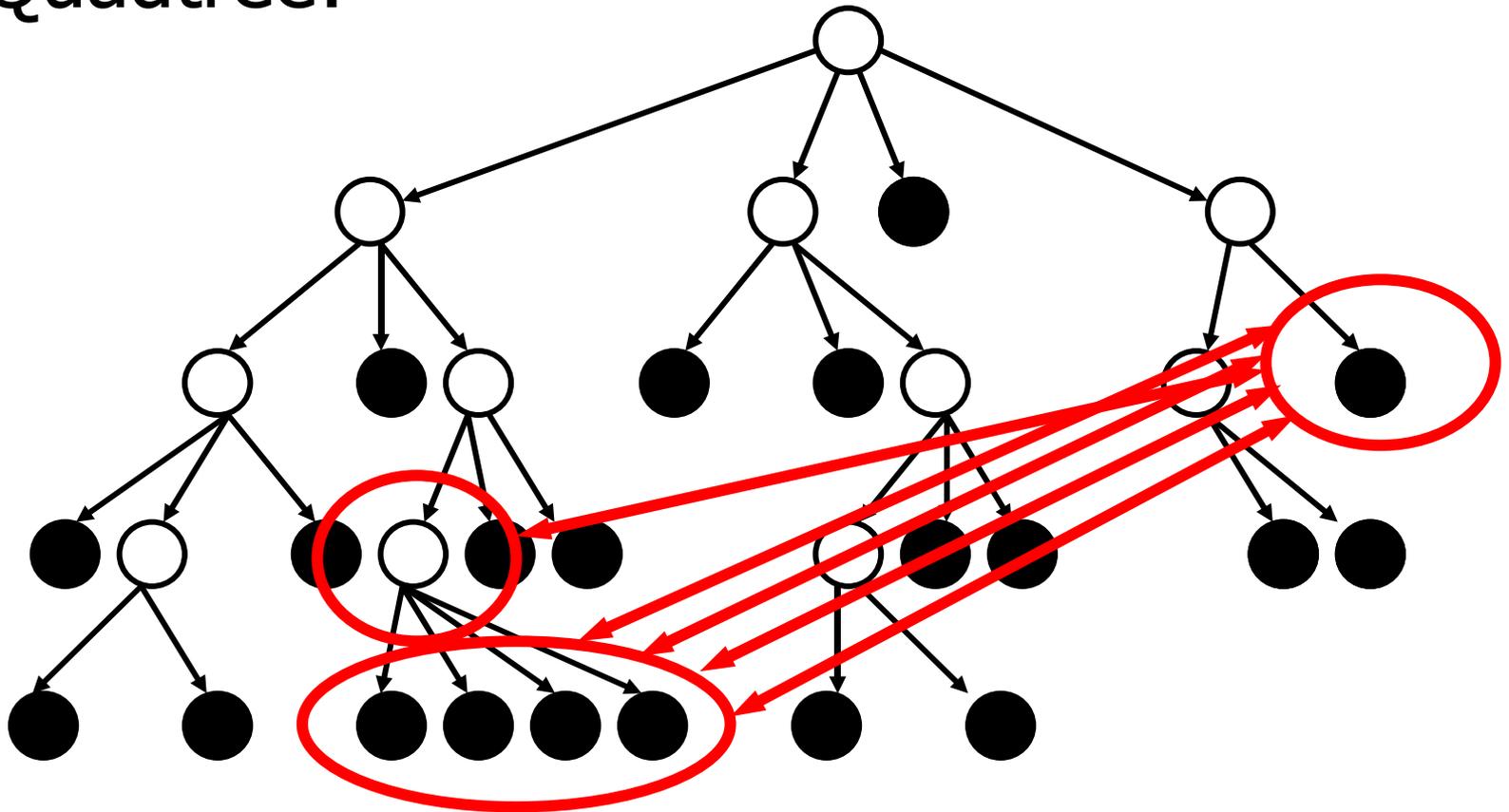
Barnes-Hut-Approximation

Quadtree:



Barnes-Hut-Approximation

Quadtree:



Barnes-Hut-Approximation

- Gruppierung der Partikel mittels "Quadtree" (bzw. "Octtree" in 3D-Räumen)
 - Berechnung der Massen und Positionen für die Gruppenzentren (Summe bzw. Mittelwert)
 - Sofern Distanz zwischen Partikel und Gruppenzentrum groß genug:
 - Berechne Kräfte zwischen Partikel P und Gruppenzentrum G ...
 - ...und nimm diese Kraftwirkung für alle Partikel im Baum unterhalb von G
-

Fazit

- *Scientific computing* befasst sich mit der Lösung/Approximation immens großer Probleme
 - Diese Lösung kann durch Einsatz paralleler/verteilter Algorithmen deutlich beschleunigt werden,
 - aber immer nur in konstanter Abhängigkeit von der Zahl der Prozessoren!
 - Effiziente Verbesserung kann nur durch die Wahl effizienterer Algorithmen erreicht werden,
 - nicht durch Einsatz von mehr/schnelleren Prozessoren!
-

Nachdenken statt Nachrüsten!

Vielen Dank
für die Aufmerksamkeit!

Quellen

- Andrews, Gregory R.: *Foundations of Multithreaded, Parallel, and Distributed Programming*, Addison-Wesley, 2000
 - Barnes, J. und Hut, P.: *A hierarchical $O(n \log n)$ force-calculation algorithm*, Nature, 324 (1986), pp. 446-449
 - Graps, A.: *Amara's Recap of Particle Simulation Methods*, <http://www.amara.com/papers/nbody.html>, 2000
 - Prins, J.F. und Simons, M.: *The Barnes-Hut Algorithm as a case study for parallel programming models*, Dagstuhl Seminar on High-level parallel programming models, April 1999
 - de.wikipedia.org
-