# ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ ΤΜΗΜΑ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

ΚΥΚΛΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

# ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΑΝΑΛΥΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ Ν-BODY PROBLEM ΚΑΙ ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ BENCHMARKING ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ Ν-BODY PROBLEM

του ΤΣΑΜΟΥΡΗ ΠΑΝΑΓΙΩΤΗ ΑΕΜ 5512

Επιβλέπων ΠΙΤΣΙΑΝΗΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ ΕΠΙΚΟΥΡΟΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ 2012

# Κατάλογος περιεχομένων

Περίληψη Εισαγωγής	2
ΚΕΦΑΛΑΙΟ Ι	3
$EI\SigmaAI\OmegaIH$	3
1.1 Ορισμός του Προβλήματος Ν-σωμάτων	3
1.2 Μαθηματικές Περιγραφές Προβλημάτων	3
1.2.1 Μαθηματική Περιγραφή του Γενικού Βαρυτικού Προβλήματος	3
1.2.2 Πρόβλημα Ν-σωμάτων Ηλεκτροστατικού Πεδίου Coulomb	4
1.2.3 Πρόβλημα Ν-σωμάτων Εύρεσης Δυναμικού Yukawa	5
1.2.4 Πρόβλημα Ν-σωμάτων Λοιπές Εκδοχές	5
1.3 Ορισμός Προσομοίωσης Ν-σωμάτων	5
1.3.1 Πεδία Εφαρμογής και Παραδείγματα Χρήσης	6
1.4 Ιστορική Εξέλιξη Μεθόδων Επίλυσης Προβλήματος Ν-σωμάτων	7
1.4.1 Εξέλιξη Μεθόδων και Αλγορίθμων	7
1.4.2 Η Εισαγωγή του FFT	7
1.4.3 Διευκρινίσεις στην Περιγραφή των Συστημάτων	8
1.5 Μέθοδοι Ταχείας Άθροισης	8
1.5.1 Μη Ιεραρχικές Μέθοδοι Ταχείας Άθροισης	8
1.5.1.1 Η Μέθοδος Particle-Particle	9
1.5.1.2 Η Μέθοδος Particle-Mesh (PM)	10
1.5.1.3 Η Μέθοδος Particle-Particle/Particle-Mesh (P3M)	12
1.5.2.1 Η Μέθοδος Particle Multiple-Mesh (PM2)	14
1.5.2.2 Η Μέθοδος Nested Grid Particle-Mesh (NGPM)	15
1.5.2.3 Η Μέθοδος Tree-Code Particle Mesh (TPM)	16
1.5.2.4 Η Μέθοδος Self-Consistent Field (SCF)	17
Περίληψη Κεφαλαίου 2	20
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2	
TREE CODES	
2.1 Tree Codes των Appel, Jernigan και Porter	
2.1.1 Περιγραφή της Μεθόδου AJP	22
2.1.2 Εξέταση Στοιγείων της Μεθόδου AJP	23
2.1.2.1 Δομές Δεδομένων και Βελτιστοποίηση	23
2.1.2.2 Χρονικά Διαστήματα και Ορθότητα Προσομοίωσης	25
2.1.2.3 Περιορισμοί της Μεθόδου AJP στις Διάρκειες Βημάτων	
2.1.2.4 Ιεραργική Χρονική Δομή της Μεθόδου	27
2.2 Ιεραργικός Αλγόριθμος Υπολογισμού Δυνάμεων Πολυπλοκότητας O(NlogN)	
2.2.1 Γενικά Στοιχεία για τον Αλγόριθμο Tree Code των Barnes - Hut	
2.2.2 Περιγραφή του Αλγόριθμου Tree Code Barnes-Hut	
2.2.3 Εξέταση Στοιγείων της Μεθόδου ΒΗ	
2.2.3.1 Δομές Δεδομένων και Χωρισμός σε Κελιά	
2.2.3.2 Κριτήριο Ανοίνματος Βρόγγου	
2 2 3 3 Non-recursive tree walks	32
2.2.3.4 Ανάλυση Σωαλμάτων ΒΗ	33
2.2.3.5 Αιατήρηση Ενέργειας και Συμπεριφορά Διανυσμάτων Ταγύτητας	33
2.3 Σχολιασμός και Παρατηρήσεις στους Tree Codes	34
2 3 1 Σύγκριση των Μεθόδων ΒΗ - ΑΙΡ	34
2 4 Η Βελτιωμένη Έκδοση του Tree Code BH	35
Περίληψη Κεφαλαίου 3	38
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3	
	-

Η ΜΕΘΟΔΟΣ FAST MULTIPOLE	39	
3.1 Γρήγορος Αλγόριθμος για Σωματιδιακές Προσομοιώσεις	39	
3.1.1 Εισαγωνή		
3.1.2 Ανακεφαλαίωση Μαθηματικών Εννοιών και Λημμάτων		
3.1.3 Γενικά Στοιχεία για την Αργική Εκδοχή της Μεθόδου FMM	42	
3 1 4 Αλγοριθμική Περιγραφή της Αργικής Μεθόδου FMM		
3.1.5 Ανάλυση Πολυπλοκότητας.		
3.1.6 Οριακές Συνθήκες και Αντιμετώπισή τους.		
3 1 6 1 Περιοδικές Οριακές Συνθήκες	48	
3 1 6 2 Οριακές Συνθήκες Dirichlet	49	
3 1 6 3 Άλλες Οριακές Συνθήκες	50	
3.2 Εισανωνή Πινάκων στις Ιεραονικές Μεθόδους και Επέκταση στις Τρεις Διαστάσεις	51	
	51	
3.2.2 Ανακεωαλαίωση Μαθηματικών Εννοιών Πινάκων	51	
3.2.2 Ανακεφαλαίωση Μαθηματικών Εννοιών Μιναδικής Ανάλυσης	54	
3.2.5 A Alyoniauxí Egyradia The Medólon Barnes- Hut us Dívakse	56	
3.2.5 Σύγκοιση της Μεθόδου BH με Πίνακες με το Αργικό FMM		
3.2.6 Bs) tiwan ton A ovikoù EMM us Metatooth the Alarde Alarde tikoaran	58	
$3.3 \text{ FMM}$ us $\Pi$ (varse $\Pi$ solution)		
3.3.1 Θεωρήματα και Ορισμοί Μιναδικής Ανάλυσης	59	
3.3.2 Severá Stolycía vla te Néa Erdová tec Mchôdou	59	
3.3.5 Σύντομη ανάλυση πολυπλοκότητας	 60	
3.4 Επιπρόσθετα Βελτιωμένες Εκδογές ΕΜΜ	60	
3.5  Adaptive McAoSol FMM kai MaAnuatika Bs) trougues Eksosis	61	
3.5 1 A East Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions	01 61	
3.5.1.1 Περινοαφή της Μεθόδου	61	
3.5.1.1 Περιγραφή της Μεσούου	01	
3.5.2 Preconditioned Adaptive Multipole-accelerated Iterative Methods for Three-	02	
dimensional First-kind Integral Equations of Potential Theory	63	
2.5.2 A Free Space Adaptive FMM Based PDF Solver in Three Dimensions	05 64	
3.5.3 A Free-Space Adaptive Fivini-Based FDE Solver in Three Dimensions		
$3.5.3.1$ Teviku ju u u vieloooo $E hiboolog E hiboolog M \Delta E$		
3.5.3.2 Muoliputiki Avalooj Meooooo Entrooj MaE		
2.5.2.4 To Privato the McGoSon KIEMM	68	
5.5.5.4 Tu Diputu tiç Metodol Kir Min	08	
$V \in \Delta A A IO A$	12	
ΑΝΑΠΤΥΞΉ ΠΕΦΙΡΑΑΑΟΝΤΟΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΟΣΗΣ	73	
4.1 Γαμγά	73	
4.11 EVIKU	73	
4.2 2ωματισιακές και Γεωμετοίες Πορβλημάτων Επίδειξης	74	
4.2.1 Kutuvoueg Kut I empetpieg Hipophilputaw Entoetgig		
4.1.2 Κλιμακές Δεουμενών και Κλιμακολοιηση		
4.2.2 Κοινες και Γενικά Αποσεκτες Κατάνομες	73	
4.2.51 EVVI[tpta 10χαιων Δεουμενών	//	
$4.2.5$ Εί $\sigma$ οδος και Έξοδος Δυσδικών Δοδομώνων	00	
4.2.5 Διοθούς και Εςθούς Δυασικών Δεουμένων	60 0 <i>6</i>	
4.2.0 Αναλυση Δεουμενων	00 07	
4.3 Περιγραφη του περιραλλοντος	ð/ 07	
4.3.1 Προετοιμασία Βοησητικών Προγραμματών	/ ة	
4.5.2 Προετοιμασία $\Delta$ ετ $\Delta$ εουμενων.	ŏŏ	
4.5.5 Εκτελεση προγραμματων και ληψη Αποτελεσματων	88	

4.4 Τα προγράμματα του περιβάλλοντος	
4.4.1 Οι κώδικες Shootout	
4.4.2 Οι Κώδικες Επίλυσης FMM για Δυναμικό Yukawa	
4.4.2.1 Μετατροπές στα Προγράμματα	91
4.4.3 Οι Κώδικες Επίλυσης FMM για Δυναμικό Laplace	
4.4.3.1 Μετατροπές στα Προγράμματα	
4.5 Μετρήσεις Ακρίβειας και Ταχύτητας	96
4.5.1 Programming Language Shootout	
4.5.2 FMM-Yukawa Suite	
4.5.3 FMM-Laplace Suite, KIFMM3D, ExaFMM	
Παράρτημα 1	
Π.1.1 Η Άδεια ΜΙΤ	116
Π.1.2 Η Άδεια GPL	116
Π.1.3 Τα script του Περιβάλλοντος	
П.1.3.1 config.sh	
$\Pi.1.3.2$ generate.sh	
П.1.3.3 run.sh	
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

# Περίληψη Εισαγωγής

Περιγραφή του προβλήματος κλασικής φυσικής "n-body problem", στις βαρυτικές και ηλεκτροστατικές εκδοχές του, καθώς και μεθόδων επίλυσής του. Αναφορά σε εφαρμογές όμοιων μεθόδων επίλυσης, σε προβλήματα που κατατάσσονται ως προβλήματα n-body, σε γειτονικά επιστημονικά πεδία. Περιγραφή της έννοιας της προσομοίωσης για επίλυση του προβλήματος με υπολογιστή και σύντομη αναφορά και σύγκριση μεταξύ των ανά τα έτη μεθόδων προσομοίωσης, έως τη δημοσίευση των αλγορίθμων "Tree Code" και "Fast Multipole Method".

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

# ΕΙΣΑΓΩΓΗ

#### 1.1 Ορισμός του Προβλήματος Ν-σωμάτων

Το βαρυτικό/αστρικό πρόβλημα N-σωμάτων είναι το πρόβλημα της πρόβλεψης της κίνησης μίας ομάδας αστρικών σωμάτων που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους βαρυτικά. Συγκεκριμένα θα μπορούσε να οριστεί ως εξής: "για δεδομένες n σημειακές μάζες  $m_1, m_2, ..., m_n$  στον τρισδιάστατο φυσικό χώρο, θεωρώντας πως οι ελκτικές δυνάμεις που ασκούνται σε ζεύγη μεταξύ των σωματιδίων είναι Νευτώνιες και με δεδομένη την αρχική θέση και ταχύτητα του κάθε σωματιδίου για κάποια χρονική στιγμή  $t_0$ , να οριστεί η θέση και η ταχύτητα του κάθε σωματιδίου για κάθε

Η αναζήτηση της λύσης του προβλήματος ιστορικά κατευθύνθηκε από το καθαρά αστρονομικής φύσης ενδιαφέρον για την ανάγκη κατανόησης της κίνησης του Ήλιου, των πλανητών και ορατών αστέρων, και μάλιστα μία πρώτη προσπάθεια ορισμού και μαθηματικής περιγραφής έγινε από το Nέυτωνα στην *Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica* το 1713.

Στο έργο του ο Νεύτωνας, πέρα από τους Νόμους της Κίνησης και το Νόμο της Γενικής Βαρύτητας ασχολήθηκε με τη μαθηματική περιγραφή των Νόμων Πλανητικής Κίνησης του Kepler, τους οποίους ο ίδιος ο Kepler είχε μόνο εμπειρικά περιγράψει. Καθώς η βαρύτητα είναι κατά κύριο λόγο υπεύθυνη για την κίνηση των αστρικών σωμάτων, ο Νεύτωνας εξέφρασε τις βαρυτικές αλληλεπιδράσεις με όρους διαφορικών εξισώσεων και ήδη από το 1713 απέδειξε πως ένα σώμα με σφαιρική συμμετρία μπορεί να μοντελοποιηθεί ως σημειακή μάζα.

#### 1.2 Μαθηματικές Περιγραφές Προβλημάτων

#### 1.2.1 Μαθηματική Περιγραφή του Γενικού Βαρυτικού Προβλήματος

Η αστρική εκδοχή του προβλήματος των Ν-σωμάτων είναι ένα πρόβλημα αρχικών συνθηκών για κανονικές διαφορικές εξισώσεις. Θεωρώντας τις αρχικές θέσεις  $\boldsymbol{q}_{j}(0)$  και ταχύτητες  $\dot{\boldsymbol{q}}_{j}(0)$  των *n* σωματιδίων  $j=1,\ldots,n$  με  $\boldsymbol{q}_{j}(0)\neq \boldsymbol{q}_{k}(0)$ για  $j\neq k$ , ζητείται να βρεθεί η λύση του συστήματος δεύτερης τάξης :

$$m_{j} \ddot{\boldsymbol{q}}_{j}(0) = G \frac{\sum_{j \neq k} m_{j} m_{k} (\boldsymbol{q}_{k} - \boldsymbol{q}_{j})}{|\boldsymbol{q}_{k} - \boldsymbol{q}_{j}|^{3}}, \ j = 1, \dots, n \quad (1.1)$$

όπου  $m_1, m_2, ..., m_n$ είναι οι σταθερές που αντιπροσωπεύουν τις μάζες των n σωμάτων,  $q_1, q_2, ..., q_n$ είναι τρισδιάστατες διανυσματικές συναρτήσεις της μεταβλητής του χρόνου t, οι οποίες περιγράφουν τη θέση του κάθε σωματιδίου και G είναι η σταθερά της βαρύτητας  $G = 6,67384(80) 10^{-11} m^3 kg^{-1} s^{-2}$ . Η παραπάνω εξίσωση περιγράφει το δεύτερο Νόμο της Κίνησης του Νεύτωνα, στο αριστερό σκέλος βρίσκεται η μάζα επί την επιτάχυνση του κάθε j-οστού σωματιδίου και στο δεξιό το άθροισμα των δυνάμεων που ασκούνται στο σωματίδιο. Για τη θεώρηση αυτή οι δυνάμεις είναι αποκλειστικά βαρυτικές, συνεπώς ανάλογες των μαζών που εμπλέκονται και αντιστρόφως ανάλογες του τετραγώνου της απόστασης μεταξύ των εμπλεκομένων σωματιδίων. [1]

Σε αντιστοιχία με τον ορισμό του Γενικού Βαρυτικού Προβλήματος μπορούμε να ορίσουμε προβλήματα που παρουσιάζουν ομοιότητα με αυτό και κατατάσσονται ως "Προβλήματα Ν-

Σωμάτων, λόγω της αναλογίας που παρουσιάζουν με το κλασσικά ορισμένο πρόβλημα του Νεύτωνα. Καθώς οι κώδικες και αλγόριθμοι που αποτελούν τμήμα του αντικειμένου της παρούσας διπλωματικής εργασίας δεν περιορίζονται μόνο στο στενό επιστημονικό πεδίο του υπολογισμού βαρυτικών δυνάμεων και δυναμικών, κρίνεται σκόπιμο να γίνει σύντομη αναφορά στο σημείο αυτό, για λόγους σαφήνειας και πληρότητας, κάποιων άλλων επιστημονικών προβλημάτων Ν-σωμάτων.

#### 1.2.2 Πρόβλημα Ν-σωμάτων Ηλεκτροστατικού Πεδίου Coulomb

Ο Νόμος Αντιστρόφου Τετραγώνου του Coulomb είναι ο Νόμος της Φυσικής που περιγράφει την ηλεκτροστατική αλληλεπίδραση μεταξύ φορτισμένων σωματιδίων [2].

Σε αντιστοιχία με το Βαρυτικό Πρόβλημα N-σωμάτων, το Ηλεκτροστατικό Πρόβλημα N-σωμάτων, της εύρεσης του δυναμικού Coulomb ορίζεται ως εξής: "για δεδομένα *n* σημειακά φορτία  $q_1, q_2, ..., q_n$  στον τρισδιάστατο φυσικό χώρο, θεωρώντας πως οι ελκτικές ή απωστικές δυνάμεις που ασκούνται σε ζεύγη μεταξύ των σωματιδίων, είναι ηλεκτροστατικές (και με επιπρόσθετη ενδεχομένως βαρυτική επίδραση μεταξύ των σωματιδίων), με δεδομένη την αρχική θέση και ταχύτητα του κάθε σωματιδίου για κάποια χρονική στιγμή t<sub>0</sub>, να οριστεί η θέση και η ταχύτητα του κάθε σωματιδίου για κάθε μελλοντική ή παρελθοντική χρονική στιγμή".

Συμπληρωματικά ή αντί των παραπάνω, μπορεί να ενδιαφέρει μόνο η εκτίμηση των τιμών της συνάρτησης δυναμικού σε σημεία του χώρου, για διάφορες μελλοντικές ή παρελθοντικές τιμές.

Η ηλεκτροστατική εκδοχή του προβλήματος είναι και αυτή πρόβλημα αρχικών συνθηκών στο οποίο j=1,...,n. Εάν υποτεθεί, σύμφωνα με τα παραπάνω, πως υπάρχει ένα σύστημα αποτελούμενο από n φορτισμένα σωματίδια, το καθένα με φορτίο  $q_j$  στη θέση  $r_j$ , ως προς την αρχή του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων, τότε η συνολική ηλεκτροστατική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο i προκύπτει από τη σχέση

$$F(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1} q_i \frac{(r-r_i)}{|(r-r_i)|^3} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1} \frac{q_i}{R_i^2} \hat{R}_i \quad (1.2)$$

στην οποία *r* είναι η απόσταση μεταξύ των δύο εμπλεκόμενων φορτίων,  $\hat{r}$  το διάνυσμα της απόστασης του φορτίου ως προς την αρχή των αξόνων και  $\hat{R}$  το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση του  $\hat{R} = r - r_i$ . Στο SI θεωρώντας κενό ύλης χώρο και ταχύτητα διάδοσης του φωτός σε αυτόν ίση με  $c = 299.792.458 \, m \, s^{-1}$ , με μαγνητική διαπερατότητα κενού ίση με  $\mu_0 = 4 \pi \, 10^{-7} F \, m^{-1}$ , η διηλεκτρική σταθερά είναι ίση με:

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{m_0 c^2} = 8,85418782 \, 10^{-12} \, Fm^{-1}$$
 (1.3) [2]

Στα πλαίσια του ίδιου προβλήματος γίνεται συνήθως εκτίμηση του ηλεκτροστατικού πεδίου που προκαλείται από την ύπαρξη των σωματιδίων. Για λόγους πληρότητας γίνεται σύντομη αναφορά και στις έννοιες αυτές.

Σύμφωνα με το Νόμο του Coulomb το ηλεκτροστατικό πεδίο σε σημείο του χώρου, στον οποίο υπάρχει ένα και μοναδικό σωματίδιο θα είναι ίσο με:

$$E = \frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \frac{Q}{r^2} \hat{r} \quad (1.4), [2]$$

όπου Q είναι το φορτίο που δημιουργεί το πεδίο, r η απόσταση του φορτίου και του σημείου του τρισδιάστατου χώρου P(x, y, z) που είναι υπό εξέταση,  $\hat{r}$  το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση του Q και του σημείου P και  $\varepsilon_0$  η διηλεκτρική σταθερά. Αναλύοντας περεταίρω το συνολικό ηλεκτροστατικό πεδίο που δημιουργείται από σημειακά φορτία  $n_q$ , προκύπτει ίσο με το

αποτέλεσμα της υπέρθεσης της συνεισφοράς το καθενός σωματιδίου:

$$E = \sum_{i=1}^{i=n} E_i = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_i}{r_i^2} \,\hat{r}_i \quad (1.5) \, [2]$$

#### 1.2.3 Πρόβλημα Ν-σωμάτων Εύρεσης Δυναμικού Yukawa

Στη σωματιδιακή φυσική, κατά την αλληλεπίδραση δύο φερμιονίων, το δυναμικό Yukawa ορίζεται ως δυναμικό μεταξύ σωματιδίων, το οποίο προκύπτει από τη σχέση:

$$V(r) = -\frac{g^2}{4\pi} \frac{1}{r} e^{-mr} \quad (1.6) [3]$$

και όπως παρατηρείται, είναι σε αναλογία ίσο με το δυναμικό Coulomb με εξαίρεση το πρόσημο και τον εκθετικό παράγοντα, πρόκειται δηλαδή για το δυναμικό του ηλεκτροστατικού πεδίου, όταν έχουμε απόσβεση δυνάμεων λόγω επιφανειακών φαινομένων. Το αρνητικό πρόσημο οφείλεται στο γεγονός πως η αλληλεπίδραση είναι ελκτική για όλα τα υποατομικά σωματίδια και απωστική για πανομοιότυπα σωματίδια, δηλαδή αυτά τα οποία έχουν το ίδιο, μη ακέραιο spin [4]. Περεταίρω ανάλυση σε έννοιες και ορισμούς του Καθιερωμένου Μοντέλου της Κβαντικής Μηχανικής ξεφεύγουν από τα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Αυτή η εκδοχή του προβλήματος, σε αντιστοιχία με τους παραπάνω ορισμούς μπορεί να οριστεί ως "εύρεση του δυναμικού Yukawa και του σχετιζόμενου ηλεκτρικού πεδίου που δημιουργείται από *n* φορτισμένα σωματίδια". Στη σωματιδιακή φυσική, η συνάρτηση του Green αναφέρεται ως δυναμικό Yukawa και η αντίστοιχη διαφορική εξίσωση  $\nabla^2 \Phi - \lambda^2 \Phi = f(x)$ συναντάται σε συστήματα εξισώσεων Navier-Stokes, στη θεωρία Debye-Huckel ενώ αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως γραμμική εξίσωση Poisson-Boltzmann εάν πρόκειται για πρόβλημα βιοφυσικής ή βιοχημείας. [5-12]

#### 1.2.4 Πρόβλημα Ν-σωμάτων Λοιπές Εκδοχές

Όπως έχει καταστεί προφανές από την παραπάνω ανάλυση, πλήθος προβλημάτων φυσικής, χημείας και βιολογίας απαιτούν την επίλυση εξισώσεων και δυναμικών συστημάτων (εύρεση τροχιών, πεδίου δυναμικού και πεδίου δυνάμεων), παρόμοιων με αυτές του κλασσικού βαρυτικού προβλήματος Ν-σωμάτων. Επιπρόσθετα ως παραδείγματα αναφέρονται η εύρεση συνολικού εμπλεκόμενου φορτίου (Νόμος Biot-Savart) [13], η επίλυση εξίσωσης Laplace [14], Stokes [15] (ροή ασυμπίεστων υγρών) και η επίλυση εξίσωσης Navier [15] (μελέτη ελαστοστατικών ή ελαστοδυναμικών συστημάτων).

#### 1.3 Ορισμός Προσομοίωσης Ν-σωμάτων

Ο όρος "N-body simulation" αναφέρεται στην επίλυση των εξισώσεων που περιγράφουν ένα δυναμικό πρόβλημα N-σωμάτων, με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή και ενδεχομένως την απεικόνιση της χρονικής εξέλιξης των τροχιών των σωματιδίων με τη μορφή στιγμιότυπων, ή σε "πραγματικό" χρόνο [16] (με τις πρόσφατες εξελίξεις στον τομέα της απεικόνισης και την ανάπτυξη παντοδύναμων καρτών γραφικών). [17]

Οι προσομοιώσεις μπορούν να διαχωριστούν σε δύο βασικές κατηγορίες, στις δυναμικές, που ακολουθούν τις τροχιές των Ν-σωμάτων στο χρονικό διάστημα ενδιαφέροντος και στις στατικές, όταν το ενδιαφέρον στρέφεται στην τελική κατάσταση ισορροπίας του εξεταζόμενου συστήματος. Στις στατικές αξιοποιείται εναλλακτικά η μέθοδος Monte Carlo και εξετάζονται μία σειρά από τελικές καταστάσεις ισορροπίας για να βρεθεί το σύστημα με το ελάχιστο δυναμικό. [18]

#### 1.3.1 Πεδία Εφαρμογής και Παραδείγματα Χρήσης

Η προσομοίωση ενός προβλήματος Ν-σωμάτων αποσκοπεί κυρίως στην επίλυσή του για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των εξεταζόμενων σωμάτων/σωματιδίων. Ανάλογα με το επιστημονικό πεδίο εφαρμογής υπάρχουν αρκετές διαφοροποιήσεις στις υλοποιήσεις που έχουν κατά κύριο λόγο να κάνουν με την περιγραφή του φυσικού μοντέλου και την αλγοριθμική μέθοδο αντιμετώπισης. [19]

Βασικό σημείο διαχωρισμού των προσομοιώσεων είναι ο βαθμός στον οποίο τα σωματίδια της προσομοίωσης αντιστοιχούν σε υπαρκτά σώματα του προβλήματος. Παραδειγματικά αναφέρεται μια επίλυση βαρυτικού προβλήματος, στο οποίο το κάθε ουράνιο σώμα αντιστοιχίζεται με ένα σημειακό σωματίδιο και η προσομοίωση κίνησης ενός υγρού με μεγάλο ιξώδες, το οποίο προσεγγίζεται από έναν αριθμό σωματιδίων, που όμως ποτέ δε θα πλησιάσει τον αριθμό του Ανogadro ή τα άτομα/μόρια ενός αερίου, με αποτέλεσμα ένα "σωματίδιο" να αντιστοιχεί σε περισσότερα από ένα άτομα ή μόρια. Εισέρχεται λοιπόν σημαντικό σφάλμα εξαιτίας του συμβιβασμού που πρέπει να γίνει ανάμεσα στην ακρίβεια αναπαράστασης του αριθμού των σωματιδίων και στην απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ.

Συμπληρωματικά με τα παραπάνω βαρύνοντα ρόλο παίζει και η ακρίβεια του μοντέλου που χρησιμοποιείται αλλά και ο σκοπός της προσομοίωσης: διαφορετικό και πολύ ακριβέστερο μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί για την εύρεση της ακριβούς τροχιάς ενός κομήτη ή αστέρα, ενώ διαφορετικό και πολύ πιο εύκολα αλγοριθμικά υλοποιήσιμο εάν στόχος είναι η απλή επίδειξη των δυνατοτήτων μίας κάρτας γραφικών.

Στον τομέα της ακρίβειας του υπολογιστικού μοντέλου, θα πρέπει επίσης να παρατηρήσουμε πως πολλά μοντέλα προκειμένου να αντιμετωπίσουν ανακρίβειες ή απροσδιοριστίες των φυσικών μοντέλων καταφεύγουν σε τεχνάσματα, με κυριότερο παράδειγμα την αντιμετώπιση των συγκρούσεων σωματιδίων σε Νευτώνεια προβλήματα. Καθώς το φυσικό μοντέλο εμφανίζει απροσδιοριστία όταν η απόσταση μεταξύ δύο σωματιδίων τείνει στο μηδέν, προγραμματιστικά πρέπει να γίνει η χρήση κατάλληλου τεχνάσματος (της εξομάλυνσης που αναλύεται παρακάτω), ώστε αφενός να μην επηρεάζεται το σφάλμα της προσομοίωσης στον υπολογιστή και αφετέρου να προσπερνιέται το εμπόδιο επιτυχώς.

Από τις πλέον γνωστές και μεγάλου μεγέθους προσομοιώσεις προβλήματος Ν-σωμάτων ήταν η ονομαζόμενη Millennium Simulation ή Millennium Run η οποία εκτελέστηκε για να εξεταστεί η εξέλιξη της ύλης του σύμπαντος κατά την πάροδο του χρόνου. Τα αποτελέσματα της χρησιμοποιούνται για την θεωρητική επαλήθευση εμπειρικών παρατηρήσεων [20]. Η προσομοίωση εκτελέστηκε το 2005 και εκκίνησε από το χρονικό σημείο κατά το οποίο το σύμπαν ήταν 379.000 ετών, και εξέτασε την εξέλιξη οριακά πάνω από 10 δισεκατομμυρίων "σωματιδίων", με τη διαφορά πως το κάθε σωματίδιο αντιστοιχούσε σε περίπου 1 δισεκατομμύριο μάζες σκοτεινής ύλης.

Ο χώρος του προβλήματος ήταν κύβος με ακμή 2 δισεκατομμύρια έτη φωτός και στο συνολικό όγκο εάν θέλαμε να ομαδοποιήσουμε τα σωματίδια με τη λογική του clustering θα κάναμε λόγο για περίπου 20 εκατομμύρια "γαλαξίες"-clusters. Ο συνολικός χρόνος προσομοίωσης από υπερυπολογιστή ήταν λίγο περισσότερο από ένας μήνας. Η προσομοίωση έγινε με χρήση του λογισμικού GADGET - "GAlaxies with Dark matter and Gas intEracT" του Volker Springel στο ινστιτούτο Max Plank. Το λογισμικό GADGET χρησιμοποίησε ιεραρχικό Tree Code σε συνδυασμό με πλέγμα της μεθόδου PM (δηλαδή συνολικά την μέθοδο TPM). [21][22]



Εικόνα 1-1 Render της εζόδου της προσομοίωσης Millenium Simulation

### 1.4 Ιστορική Εξέλιξη Μεθόδων Επίλυσης Προβλήματος Ν-σωμάτων

#### 1.4.1 Εξέλιξη Μεθόδων και Αλγορίθμων

Ιστορικά το βαρυτικό πρόβλημα Ν-σωμάτων και τα παρεμφερή προβλήματα, όπως αυτά που αναφέρθηκαν, επιλυόταν με απευθείας υπολογισμό των δυνάμεων ή δυναμικών, κατά τον οποίο η υπολογιστική πολυπλοκότητα αυξάνεται κατά  $N^2$ , όπου N το μέγεθος του προβλήματος (αριθμός σωματιδίων). Ως επίλυση θεωρούμε, τη με ικανοποιητική απόκλιση, ή απολύτως ακριβή (στα πλαίσια ακρίβειας του υπολογιστή που χρησιμοποιείται) περιγραφή της δυναμικής εξέλιξης του προβλήματος στο χωροχρόνο, για δεδομένες αρχικές συνθήκες προβλήματος.

Προκειμένου να είναι εφικτή η επίλυση του προβλήματος των Ν-σωμάτων με μικρότερη υπολογιστική πολυπλοκότητα, καθώς με το περιορισμένων δυνατοτήτων υλικό υπολογιστών των προηγούμενων δεκαετιών, προβλήματα με μεγάλα μεγέθη ενδιαφέροντος παρέμεναν ουσιαστικά άλυτα, αναπτύχθηκαν μία σειρά από αλγόριθμοι γνωστοί και ως "αλγόριθμοι ταχείας άθροισης". Από την πληθώρα των αλγορίθμων αυτών, η παρούσα διπλωματική εργασία επικεντρώνεται στους αλγόριθμους Tree Code και Fast Multipole Method.

#### 1.4.2 Η Εισαγωγή του FFT

Η ανάπτυξη του Γρήγορου Μετασχηματισμού Fourier (Fast Fourier Transform), στις διάφορες εκδοχές του αλγόριθμου αποτέλεσε σημαντικό σημείο στην εξέλιξη των αλγοριθμικών μεθόδων, που στοχεύουν στην επίλυση του προβλήματος N-σωμάτων. Η ανάλυση του FFT στις διάφορες εκδοχές που προτάθηκαν ανά τα έτη ξεφεύγει από τα στενά όρια ενδιαφέροντος της παρούσας διπλωματικής, όμως αυτό που πρέπει να σημειωθεί είναι ότι πολλές από τις μεθόδους που αναλύονται παρακάτω κατέστησαν δυνατές ακριβώς επειδή υπήρχε διαθέσιμος ο FFT ως εύκολα ενσωματώσιμος κώδικας και οι ερευνητές μπορούσαν με διάφορα τεχνάσματα να ρίχνουν το βάρος του υπολογισμού των δυνάμεων ή των δυναμικών της προσομοίωσης, με κατάλληλη προετοιμασία των δεδομένων, στο FFT και να κερδίζουν με τον τρόπο αυτό σε συνολική πολυπλοκότητα για τη μέθοδο. [23] [24]

#### 1.4.3 Διευκρινίσεις στην Περιγραφή των Συστημάτων

Έως τη δεκαετία του 1980, λόγω της μειωμένης δυνατότητας των τότε υπολογιστών, η αναφορά στους όρους και τους ορισμούς της προσομοίωσης Ν-σωμάτων γινόταν με βάση την αστρονομία [48]. Αυτό δημιούργησε την εξής ενδιαφέρουσα παρανόηση [47]: στη βιβλιογραφία γινόταν αναφορές σε "συγκρουσιακά" και "μη συγκρουσιακά" συστήματα αστέρων, και σε συγκρούσεις μεταξύ σωμάτων της προσομοίωσης. Αυτή φυσικά ήταν η εντύπωση που αποκόμιζε ο αναγνώστης ο οποίος δεν είχε αστρονομικό υπόβαθρο, και για το λόγο αυτό χρησιμοποιήθηκε εν τέλει ο όρος "πυκνά αστρικά συστήματα" [47].

Η έννοια του "συγκρουσιακού" συστήματος αστέρων κατά την αστρονομία είναι πως: στο σύστημα ενδιαφέρουν επιστημονικά, λόγω συνολικής ποσοστιαίας εμφάνισης φαινομένων και λόγω έντασης φαινομένων, μόνο οι αλληλεπιδράσεις των σωμάτων σε ζεύγη ή καλύτερα οι αλληλεπιδράσεις ζευγών σωμάτων.

Αντίθετα στα "μη συγκρουσιακά συστήματα" οι αλληλεπιδράσεις ανά δύο δεν παίζουν ρόλο. Στα συγκρουσιακά συστήματα επιπρόσθετα γίνεται λόγος για ροή θερμότητας διαμέσου του συστήματος. Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας ο όρος συγκρουσιακό σύστημα διατηρεί την αρχική, αστρονομική έννοιά του.

Επομένως ο αναγνώστης πρέπει να έχει υπόψιν πως σε πολλές παλαιότερες βιβλιογραφικές αναφορές ο όρος "συγκρούσεις" αναφέρεται κωδικοποιημένα σε απλές βαρυτικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωμάτων της προσομοίωσης. Φυσικά με την έλευση της δεκαετίας του 1990 και τις μετέπειτα εξελίξεις στον τομέα του hardware και στις δυνατότητες των σύγχρονων υπολογιστών, έγινε δυνατός ο υπολογισμός και η ορθή μοντελοποίηση "πραγματικών" συγκρούσεων μεταξύ των σωμάτων μίας προσομοίωσης. Αυτό κατέστη δυνατό με τη χρήση πολυπλοκότερου κώδικα, και η χρήση του όρου, όσον αφορά την επιστήμη των υπολογιστών και την αλγοριθμική ανταποκρίνεται σε αυτό που θα περίμενε κανείς αρχικά.

#### 1.5 Μέθοδοι Ταχείας Άθροισης

#### 1.5.1 Μη Ιεραρχικές Μέθοδοι Ταχείας Άθροισης

Σύμφωνα με τις εναλλακτικές μεθόδους μειωμένης πολυπλοκότητας, το πρόβλημα αντιμετωπίζεται ως επαλληλία προβλημάτων, με διαχωρισμό σε μικρότερου μεγέθους τμήματα και επίλυση για το κάθε χρονικό στιγμιότυπο του υπό εξέταση μέρους προβλήματος: αρχικά υπολογίζεται η συνολική συνάρτηση βαρυτικού δυναμικού, για δεδομένο μοντέλο χώρου και με τις συγκεκριμένες συνθήκες του προς επίλυση προβλήματος να εισάγονται ως μία σειρά από παραμέτρους. Το κάθε σωματίδιο επιδρά στο συνολικό δυναμικό για μικρό χρονικό διάστημα και με επιθυμητή ακρίβεια, με την όλη διαδικασία να υπολογίζεται αναδρομικά. Η πολυπλοκότητα αυξάνει (συνήθως) κατά O(NlogN) και οι υπολογισμοί γίνονται ταχύτερα, με αντάλλαγμα τη μειωμένη ακρίβεια. Να σημειωθεί πως το κάθε υποπρόβλημα που επιλύεται στην περίπτωση αυτή είναι άμεσα εξαρτώμενο από τη γεωμετρία του χώρου και την κατανομή των σωματιδίων. [25]

Οι περισσότερες από τις μεθόδους ταχείας άθροισης δεν αξιοποιούσαν ιεραρχικές δομές, και όπως θα αναφερθεί στη συνέχεια σχετικά με τους αλγόριθμους ενδιαφέροντος, έπασχαν στον τομέα της κατανομής μαζών ή αντίστοιχα φορτίων, γεγονός που περιόριζε κατά πολύ το φάσμα της χρησιμότητάς τους.

Καθώς επικεντρωνόταν στην ταχεία προσέγγιση των τιμών δυναμικού και όχι τόσο στην ακριβή χάραξη της τροχιάς των σωματιδίων, ήταν ιδανικές για προβλήματα χωρίς συγκρούσεις μεταξύ σωματιδίων. Το εύρος των δυνατοτήτων χωρικής μοντελοποίησής τους ήταν πολύ περιορισμένο και κατά την εξέλιξη της επίλυσης εμφανιζόταν μεγάλες ανομοιογένιες στις κατανομές φορτίων ή η επίλυση επιβραδυνόταν υπερβολικά, και παρά το γεγονός ότι με διάφορα τεχνάσματα εν τέλει ξεπεράστηκαν πολλοί από τους αρχικούς περιορισμού των εν λόγω μεθόδων, αυτό κατέστη δυνατό μόνο για σφαιρικές κατανομές σωματιδίων με ένα ή δύο κέντρα. [26]

Ακολουθεί αναφορά και περιγραφή των σημαντικότερων από τις μη ιεραρχικές μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν ανά τα έτη για την προσομοίωση του προβλήματος των Ν-σωμάτων, ξεκινώντας για λόγους πληρότητας και σύγκρισης από τη μέθοδο του απευθείας υπολογισμού και συνεχίζοντας με κάποιες μεθόδους ταχείας άθροισης. Η περιγραφή των μεθόδων ταχείας άθροισης είναι αναφορική και συνοπτική, καθώς με εξαίρεση ορισμένα σημεία τους, ξεφεύγουν από τα στενά όρια ενδιαφέροντος της παρούσας διπλωματικής εργασίας και βασίζεται σε παλαιότερη βιβλιογραφική εργασία του ερευνητή Amara Graps, όπως αυτή αναφέρεται στη βιβλιογραφία [27].

Σκοπός της εισαγωγής αυτής είναι να εμπλουτίσει και να ενημερώσει την παλαιότερη εργασία και να παρουσιάσει το περιεχόμενό της στην Ελληνική Γλώσσα.



Εικόνα 1-2: Απεικόνιση στον υπολογιστή τρισδιάστατης προσομοίωσης σωματιδίων και εξέλιζης σε απέχουσες χρονικές στιγμές.

#### 1.5.1.1 Η Μέθοδος Particle-Particle

Η μέθοδος "σωματίδιο προς σωματίδιο" είναι η απλούστερη μέθοδος προσομοίωσης όσον αφορά την αλγοριθμική της υλοποίηση, και για την ακρίβεια αποτελεί τη μέθοδο επίλυσης πεδιακών προβλημάτων με αλληλεπιδράσεις σωματιδίων, με το χέρι, πριν την έλευση των υπολογιστών. Το κάθε σώμα του προβλήματος αντιστοιχίζεται σε ένα ή περισσότερα σωματίδια της εξομοίωσης, είτε εξαρχής υπάρχουν μόνο σωματιδιακές κατανομές στο χώρο του προβλήματος και οι τροχιές και θέσεις των σωματιδίων αναλύονται στο χώρο με χωρισμό της χρονικής μεταβλητής t σε στοιχειώδη χρονικά διαστήματα dt, με διάρκεια που καθορίζει την ακρίβεια υπολογισμού. Γίνεται δηλαδή υπολογισμός επαναλαμβανόμενων στιγμιότυπων του προβλήματος για διαδοχικές χρονικές στιγμές. [28] [29]

Η περιγραφή της συνοψίζεται στα εξής αλγοριθμικά βήματα:

1. Σε ένα σωματίδιο i, από όλα τα σωματίδια j του προβλήματος, για τα οποία  $i \neq j$  υπολογίζονται απευθείας οι ασκούμενες δυνάμεις F(i, j) και ακολούθως η υπέρθεσή τους, καταλήγοντας στο συνολικό μέτρο και όρισμα της συνισταμένης δύναμης.

2. Εισαγωγή και υπολογισμός των εξισώσεων κίνησης. Στο βήμα αυτό εισάγονται ενδεχομένως αριθμητικές μέθοδοι στις οποίες μεταφράζονται οι εξισώσεις κίνησης και επιλύονται τα συστήματα διαφορικών εξισώσεων που προκύπτουν.

3. Επανάληψη των παραπάνω βημάτων για την κάθε επόμενη χρονική στιγμή.

Σύμφωνα με την πρώτη μέθοδο του απευθείας υπολογισμού, για το βαρυτικό πρόβλημα υπολογίζονται αρχικά οι  $\frac{1}{2}N(N-1)$  δυνάμεις μεταξύ όλων των ζευγών σωματιδίων, γεγονός που επιτρέπει την αναλυτική περιγραφή της εξέλιξης του προβλήματος, αλλά με δραματικά αυξανόμενο υπολογιστικό κόστος καθώς αυξάνει το μέγεθος προβλήματος Ν. Η υπολογιστική πολυπλοκότητα είναι της τάξεως του  $O(N^2)$ .

Είναι προφανές ότι παρά την αλγοριθμική ευκολία περιγραφής, το αυξημένο υπολογιστικό κόστος δεν είναι ο μόνος αποτρεπτικός παράγοντας για τη χρήση της παραπάνω μεθόδου στην επίλυση προβλημάτων Ν-σωμάτων. Η μέθοδος δεν μπορεί να εφαρμοστεί εύκολα σε προβλήματα πέραν αυτών που περιγράφουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων και μάλιστα για ηλεκτροστατικά η βαρυτικά προβλήματα, καθώς η δυσκολία προσαρμογής της σε προβλήματα βιοϊατρικής ή χημικής φύσεως απαιτεί εισαγωγή πολύπλοκων μοντέλων αλληλεπιδράσεων και εκτεταμένη μετατροπή του κώδικα.

#### 1.5.1.2 Η Μέθοδος Particle-Mesh (PM)

Η μέθοδος "σωματίδιο-με-πλέγμα" θεωρεί το πεδίο ως ένα σύνολο από τιμές της πεδιακής ποσότητας ενδιαφέροντος, προσεγγίζοντας τις τιμές της ποσότητας αυτής πάνω σε ένα πλέγμα, το οποίο κατασκευάζεται αλγοριθμικά μέσα στο χώρο του υπό επίλυση προβλήματος. Τα συστήματα διαφορικών εξισώσεων αντικαθίστανται στο στάδιο της επίλυσης από συστήματα εξισώσεων διαφορών. Το δυναμικό, οι δυνάμεις και η πεδιακή ένταση στη θέση του κάθε σωματιδίου υπολογίζονται με γραμμική παρεμβολή με βάση τις περιβάλλουσες τιμές στους κόμβους του πλέγματος. Τα αλγοριθμικά βήματα υπολογισμού της προσομοίωσης είναι τα εξής:

- Στον κενό χώρο του προβλήματος κατασκευάζεται νοητό πλέγμα δύο ή τριών διαστάσεων ανάλογα με τη διαστασιμότητα του υπό εξέταση προβλήματος. Η πυκνότητα του πλέγματος και οι διαστάσεις των προκυπτουσών υποδιαιρέσεων του χώρου του προβλήματος προκαλούν αντίστοιχα ευθέως ανάλογη αύξηση ακριβείας και ευθέως ανάλογη αύξηση απαιτούμενου υπολογιστικού κόστους.
- Επίλυση των πεδιακών εξισώσεων και εύρεση των τιμών της συνάρτησης δυναμικού πάνω στο πλέγμα.
- 3. Υπολογισμός του πεδίου δυνάμεων από τις τιμές δυναμικού του πλέγματος.
- Εισαγωγή των σωματιδίων στο χώρο του προβλήματος και υπολογισμός των ασκούμενων σε αυτά δυνάμεων με γραμμική παρεμβολή από τις τιμές γειτονικών σημείων του πλέγματος.
- 5. Εισαγωγή των εξισώσεων κίνησης και υπολογισμός στιγμιοτύπων κίνησης των σωματιδίων, δηλαδή των θέσεων και των ταχυτήτων με μεθόδους γραμμικής παρεμβολής.
- 6. Εκτέλεση των παραπάνω βημάτων για την κάθε επόμενη χρονική στιγμή.

Βασικό στοιχείο της μεθόδου είναι το σχήμα του πλέγματος, το οποίο θα επιλεγεί, από τα πολλά πλέγματα που είναι διαθέσιμα, καθώς οι βέλτιστες δυνατές επιλογές αφορούν πλέγματα τα οποία επιτυγχάνουν εξομάλυνση χωρίς εισαγωγή παράγοντα εξομάλυνσης. Σε κάποιους υπολογισμούς θα προέκυπταν σημεία ασυνέχειας στις διαφορικές εξισώσεις και ως συνέπεια η κατάλληλη επιλογή πλέγματος εξασφαλίζει τη συνέχειά τους μέσω προσεγγίσεων.

Ενδεικτικά παραδείγματα τεχνικών επιλογής πλεγμάτων είναι οι μέθοδοι [30]:

1. Nearest-Grid-Point: η απλούστερη όσον αφορά την υλοποίηση μέθοδος, σύμφωνα με την

οποία η πυκνότητα φορτίου ενός σημείου του πλέγματος (κέντρου βάρους του κάθε κελιού) είναι το συνολικό φορτίο που έχει κατανεμηθεί στο κελί διαιρεμένο με το συνολικό όγκο αυτού, μέθοδος που παρόλ'αυτά δεν χρησιμοποιείται ευρέως καθώς, σε αντιπαραβολή με τα παραπάνω, παράγει δυνάμεις με ασυνέχειες και δεν κάνει χρήση εξομάλυνσης.

- Cloud-in-a-Cell: η μέθοδος αυτή στοχεύει σε καλύτερη προσέγγιση των δυνάμεων αντικαθιστώντας το κοντινότερο σημείο του πλέγματος από ένα σύστημα 2<sup>N</sup> γειτονικών κελιών και παράγοντας συνεχείς δυνάμεις με πιθανή ίσως ύπαρξη ασυνεχειών στην πρώτη τους παράγωγο.
- Triangular-Shaped-Cloud: στη μέθοδο αυτή χρησιμοποιείται συνάρτηση αντιστοίχισης για την παρεμβολή, η οποία χρησιμοποιεί πολυπολικά αναπτύγματα.

Το κύριο πλεονέκτημα των μεθόδων PM είναι η ταχύτητα, καθώς η υπολογιστική πολυπλοκότητά τους είναι της τάξης  $O(N + N_g \log N_g)$  όπου  $N_g$  είναι ο αριθμός κόμβων του πλέγματος. Το πιο αργό βήμα του αλγόριθμου είναι ο υπολογισμός της συνάρτησης δυναμικού, υπολογισμός ο οποίος κάνει χρήση του μετασχηματισμού Fourier, ή άλλων αριθμητικών μεθόδων, όπως μέθοδος finite element ή finite volume για να επιτύχει τη βέλτιστη δυνατή επιτάχυνση. Όλες οι παραλλαγές των μεθόδων είναι πάντως εξαιρετικά ταχείες για προβλήματα αντιστρόφου τετραγώνου καθώς η εξομάλυνση είναι απαραίτητη για τη μελέτη τους ούτως ή άλλως. [25]



Η μέθοδος ΡΜ είναι ακατάλληλη για τη μελέτη κοντινών επαφών μεταξύ σωματιδίων ή για προσεγγίσεις στις οποίες τα σωματίδια βρίσκονται σε πολύ κοντινές αποστάσεις, καθώς η θεώρηση που γίνεται είναι πως τα σωματίδια είναι ουσιαστικά ασαφή όσον αφορά το σχήμα τους, ανάλογα με την ακριβή παραλλαγή της μεθόδου που χρησιμοποιείται. Επίσης, υπάρχει ο περιορισμός πως το διάκενο των κελιών του πλέγματος θα πρέπει να είναι πάντα τάξεις μεγέθους μικρότερο από τυγόν μήκη κύματος ενδιαφέροντος του προβλήματος. Με τον τρόπο αυτό όμως δεν μπορεί να επιτευχθεί παρά περιορισμένης έκτασης ευκρίνεια και τυγόν απαιτούμενο επίπεδο υψηλής ακρίβειας επίλυσης δεν είναι εξασφαλισμένο. Με βάση την παρατήρηση αυτή είναι δυνατή η ανάπτυξη και adaptive τεχνικών πλέγματος αλλά ο περιορισμός παραμένει, και το σφάλμα για τις αραιές περιοχές είναι γειρότερο από ότι για τις πυκνές.

Να σημειωθεί στο σημείο αυτό πως με τον όρο adaptive εννοείται το πλέγμα μεταβλητής διάστασης, το οποίο ανάλογα με κάποιο κριτήριο, όπως για παράδειγμα πυκνότητα ή αριθμό σωματιδίων. Έτσι στις περιοχές όπου

Εικόνα 1-3 :Κατανομή σωματιδίων σε έχουμε πυκνή κατανομή σωματιδίων, το πλέγμα θα έχει δισδιάστατο χώρο, adaptive τεχνική μικρά κενά και θα είναι λεπτομερές, με μικρό σφάλμα πλέγματος λόγω γραμμικής παρεμβολής. Στις περιοχές με αραιή

κατανομή, τα κελιά θα είναι μεγαλύτερα, με ύπαρξη φυσικά άνω ορίου διάστασης, κάτι που επιταχύνει την προσομοίωση από άποψη απαιτήσεων και στο στάδιο της προετοιμασίας, όμως αυξάνει τα σφάλματα λόγω παρεμβολής στις αραιές περιοχές και μειώνει την ευκρίνεια.

Υπαρξη ανομοιόμορφων κατανομών σωματιδίων προκαλεί σημαντική μείωση επιδόσεων και μάλιστα με εμφανή αναλογία στην επιβράδυνση, μιας και οι κατανομές τείνουν σε μη ακραίες μορφές ανομοιογένειας. Επιπρόσθετα σφάλματα εισάγονται κατά το βήμα 4 λόγω της γραμμικής παρεμβολής που χρησιμοποιείται. Το γεγονός αυτό μειώνει ακόμα περισσότερο την ακρίβεια της μεθόδου.

Όσον αφορά την υπολογιστική πολυπλοκότητά της, η μέθοδος αυτή είναι μεν καλύτερη από  $O(N^2)$ , όμως με προσεκτική ανάλυση παρατηρείται πως: ο αριθμός  $N_g$ των κόμβων του πλέγματος θα πρέπει να επιλεγεί ώστε  $N_g \ll N$ . Παρά το γεγονός λοιπόν πως ασυμπτωτικά η πολυπλοκότητά τείνει στο  $O(N_g \log N_g)$ , το υπολογιστικό κόστος έχει παρατηρηθεί εμπειρικά να είναι ανάλογο του Ν. [25]

#### 1.5.1.3 Η Μέθοδος Particle-Particle/Particle-Mesh (P<sup>3</sup>M)

Το όνομα της μεθόδου μπορεί να μεταφραστεί ως "σωματίδιο προς σωματίδιο, με ταυτόχρονη ύπαρξη πλέγματος" και βασικός λόγος ανάπτυξης της ήταν η εγγενής αδυναμία της μεθόδου Particle-Mesh στον υπολογισμό δυνάμεων μεταξύ κοντινών σε απόσταση σωματιδίων, όπως περιγράφηκε στην παράγραφο 1.3.3. Στη μέθοδο P<sup>3</sup>M εάν υποτεθεί πως έχουμε σταθερή διάσταση κελιού έστω d, τότε τα ζεύγη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων που έχουν μεταξύ τους απόσταση μικρότερη από 3d αθροίζονται απευθείας με άμεσο άθροισμα. Οι δυνάμεις μεταξύ των σωματιδίων αναλύονται σε δύο συνιστώσες, τη συνιστώσα μικρής εμβέλειας που μεταβάλλεται γρήγορα και τη συνιστώσα μεγάλης εμβέλειας που μεταβάλλεται συγκριτικά αρκετά πιο αργά [24]. Το ολικό άθροισμα των συνιστωσών μικρής εμβέλειας βρίσκεται με τη μέθοδο PP ενώ το ολικό άθροισμα των συνιστωσών μεγάλης εμβέλειας βρίσκεται με τη μέθοδο PM.

Η μέθοδος P<sup>3</sup>M χρησιμοποιεί δύο διαφορετικά πλέγματα: το πλέγμα "φορτίων και δυναμικών" και το πλέγμα "δικτύωσης". Το πρώτο πλέγμα είναι μία δομή δεδομένων που περιέχει τις χωρικές πυκνότητες των κελιών, τις αρμονικές των φορτίων καθώς επίσης τις τιμές δυναμικού και τις αρμονικές του δυναμικού. Το δεύτερο πλέγμα είναι μία δομή δεδομένων που απεικονίζει και εντοπίζει τα γειτονικά σημεία για τον υπολογισμό κοντινών αποστάσεων. [31]

Συνοπτικά η μέθοδος Ρ<sup>3</sup>Μ μπορεί να αναλυθεί στα ακόλουθα βήματα:

- 1. Φόρτωση αρχικών θέσεων και αρχικών ταχυτήτων των σωματιδίων.
- 2. Υπολογισμός των PM δυνάμεων, με ανάθεση φορτίου στα κελιά και επίλυση δυναμικών, γραμμική παρεμβολή δυνάμεων και ανανέωση τιμών ταχυτήτων των σωματιδίων.
- 3. Υπολογισμός δυνάμεων PP, με ανάθεση στο πλέγμα PP, και μετέπειτα ανανέωση τιμών ταχυτήτων.
- 4. Εισαγωγή εξισώσεων κίνησης, με ενημέρωση θέσεων σωματιδίων, και εφαρμογή οριακών συνθηκών και υπολογισμό συγκεντρώσεων ενέργειας.
- 5. Εύρεση θέσεων και ταχυτήτων.
- 6. Επόμενη χρονική στιγμή και επιστροφή στο βήμα 2.

Ο συνολικός αριθμός πράξεων ανήκει στην τάξη  $O(N+N_g)$  όπου, όπως και παραπάνω, N είναι ο αριθμός σωματιδίων και  $N_g$ ο αριθμός κόμβων του πλέγματος. Η μέθοδος έχει βρει εφαρμογή ευρέως σε κοσμολογικές προσομοιώσεις και ενδείκνυται για προβλήματα όπου οι δυνάμεις μπορούν να αναλυθούν σε μικρού και μεγάλου βεληνεκούς. [32]



Εικόνα 1-3: Adaptive Mesh γύρω από clusters αερίων σωματιδίων κατά την προσομοίωση κίνησης αερίων μορίων.

Πλεονέκτημα της μεθόδου η επιτάχυνσή της με την μετατροπή του αλγορίθμου και την αξιοποίηση τεχνικών Fast Wavelet Transforms, ώστε να πέσει η πολυπλοκότητά της στην κατηγορία  $O(N_g)$ . Φυσικά ο κύριος λόγος εισαγωγής των PP υπολογισμών στη μέθοδο είναι η βελτίωση της PM μεθόδου στον τομέα της ακρίβειας και όχι της ταχύτητας, αλλά με το βασικό μειονέκτημα πως εύκολα η προσομοίωση μπορεί να εξελιχθεί σε απλό PP πρόβλημα (κατά την εξέλιξή της), οπότε και η πολυπλοκότητα ανεβαίνει πάλι σε  $O(N^2)$ . Πάντως ακόμα και με τη βελτιωμένη ακρίβεια, θεωρητικά μέθοδοι όπως η PM και P<sup>3</sup>M δεν επιτρέπουν αυθαίρετο καθορισμό της ακρίβειας, ούτε όμως και αυθαίρετα υψηλές τιμές ακρίβειας. [33]

Οι επιδόσεις της μεθόδου για χαμηλή απαιτούμενη ακρίβεια κρίνονται ικανοποιητικές όμως όταν η ακρίβεια της προσομοίωσης πρέπει είναι εξόχως λεπτομερής, οι απαιτήσεις της μεθόδου σε υπολογιστικούς πόρους καταλήγουν να είναι υπερβολικές. Παρατηρείται εύκολα τέλος πως καθώς στον αρχικό ορισμό της μεθόδου καθορίζονται οι διαστάσεις των κελιών, το γεγονός αυτό αποκλείει adaptive πλέγματα από μία άποψη, γεγονός που όμως δεν δυσκόλεψε τους ερευνητές στην εισάγωγής της adaptive τεχνικής στη μέθοδο παρά τη δυσκολία στην αλγοριθμική υλοποίηση λόγω της αντιμετώπισης των κατανομών με δύο πλέγματα.

#### 1.5.2 Ιεραρχικές Μέθοδοι Ταχείας Άθροισης

Στην εξέλιξη των μεθόδων η έρευνα εν τέλει οδηγήθηκε στο δρόμο των ιεραρχικών μεθόδων χωρισμού του χώρου του προβλήματος, όπως αυτές θα καλυφθούν στα επόμενα κεφάλαια της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Οι πρώτες προσπάθειες ανάπτυξης ιεραρχικών αλγορίθμων έγιναν από τον Appel [34][35], και από τους Jernigan και Porter [36].

Ο Appel ήταν ο πρώτος που χρησιμοποίησε τη δομή δεδομένων του δέντρου για την αναπαράσταση του προβλήματος, με τα σωματίδια να βρίσκονται στα φύλλα του δέντρου. Οι Jernigan και Porter υιοθέτησαν την κανονικοποίηση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ κοντινών

σωματιδίων. Παρόλ'αυτά οι πρώιμοι αυτοί αλγόριθμοι παρά την λογαριθμική πολυπλοκότητά τους, εισήγαγαν επιπρόσθετα και απρόβλεπτα σφάλματα, καθώς η δομή του δέντρου επιλεγόταν καταχρηστικά, και έπασχαν στον τομέα της ομαδοποίησης σωματιδίων, με συνενώσεις σωματιδίων που κατά την εξέλιξη της επίλυσης λάμβαναν απρόβλεπτα σχήματα και κατανομές, και καθιστούσαν τον a priori υπολογισμό των λαθών ακρίβειας δυσχερή ως αδύνατο.

Η ιεραρχική μέθοδος που έχει γίνει γνωστή ως AJP (από τα αρχικά Appel, Jernigan και Porter, παρά το γεγονός πως δεν αποτελεί ενιαία έρευνα, αλλά συνέχεια διαδοχικών ερευνητικών προσπαθειών και από μη συνεργαζόμενες ομάδες) εξετάζεται λεπτομερώς στο επόμενο κεφάλαιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Στο σημείο αυτό για λόγους αντιστοιχίας με την παρουσίαση των άλλων μεθόδων αναφέρεται απλά πως η μέθοδος AJP βασίζεται σε μονοπολική προσέγγιση κατά τον υπολογισμό (ισοδύναμο κέντρο μάζας) και εμφανίζει δραματική αύξηση ταχύτητας σε σχέση με την  $O(N^2)$  μέθοδο, αλλά μόνο σε συγκεκριμένες εφαρμογές και δη είναι λιγότερο αποδοτική σε ομοιόμορφες κατανομές σωματιδίων, με επιπρόσθετη επιβράδυνση εάν απαιτείται υψηλή ακρίβεια. [25]

#### 1.5.2.1 Η Μέθοδος Particle Multiple-Mesh (PM<sup>2</sup>)

Η μέθοδος Particle-Multiple Mesh, αποσκοπεί μέσω της χρήσης πολλαπλών ενσωματωμένων πλεγμάτων (με ιεραρχικό διαχωρισμό των κενών του πατρικού πλέγματος σε νέα πλέγματα-παιδιά) να αυξήσει το "δυναμικό εύρος" της εξομοίωσης, το οποίο ορίζεται ως ο λόγος του μεγέθους του συστήματος προς τη μικρότερη κλίμακα απεικόνισης κατά την προσομοίωση.

Επομένως εάν εξεταστεί ως παράδειγμα η μέθοδος PP ή PM, το δυναμικό έυρος είναι ο λόγος μεγέθους κελιού προς τον παράγοντα εξομάλυνσης ή (εναλλακτικά) προς την ελάχιστη δυνατή απόσταση μεταξύ σωματιδίων που επιτρέπει η επιθυμητή ακρίβεια της προσομοίωσης. Στις μεθόδους με ενσωματωμένα πλέγματα είναι ο λόγος κελιού για το ελάχιστο σε μέγεθος κελι προς τον παράγοντα εξομάλυνσης. [37]

Συνοπτικά η μέθοδος περιγράφεται από τα εξής βήματα [38]:

- 1. Ξεκινώντας από το πατρικό ή υψηλότερου επιπέδου κελί, τα φορτία (ή οι μάζες) εισάγονται στα κελιά και τα κελιά γεμίζουν από ισοδύναμες πυκνότητες φορτίων.
- 2. Εύρεση του δυναμικού πάνω στα σημεία του πλέγματος μέσω FFT και διακριτής συνάρτησης του Green, και απόκτηση επιταχύνσεων για το κάθε σωματίδιο
- 3. Δημιουργία οριακών συνθηκών για το πατρικό κελί.
- 4. Εισαγωγή υποπλεγμάτων μέσα στα κελία του πατρικού πλέγματος για τον υπολογισμό των δυνάμεων μεταξύ των σωματιδίων. Τα υποπλέγματα δημιουργούνται με βάση την κατανομή των σωματιδίων στο χώρο και με βάση παράμετρους που ορίζονται από το χρήστη κατά την αρχική ρύθμιση της προσομοίωσης.
- 5. Υπολογισμός δυνάμεων για τα σωματίδια που βρίσκονται μέσα στα υποδίκτυα. Σε κάθε δίκτυο δημιουργείται δομή δεδομένων που περιέχει της πυκνότητες των φορτίων, επιλύεται η συνάρτηση δυναμικού για το κάθε δίκτυο μέσω FFT, και τέλος επιβάλονται οι οριακές συνθήκες στο κάθε κελί
- 6. Ενσωμάτωση των δυνάμεων και εύρεση νέων θέσεων και ταχυτήτων των σωματιδίων.

Η μέθοδος PM<sup>2</sup> αξιοποιείται κυρίως στην προσομοίωση συστημάτων σωματιδίων χωρίς συγκρούσεις (με χρήση παράγοντα εξομάλυνσης και πάλι), και η μέθοδος στοχεύει στην προσομοίωση σχετικά μικρών όγκων του χώρου, με επιδόσεις αντίστοιχες με αυτές της μεθόδου

PM. Οι adaptive τεχνικές πλέγματος αποτελούν την καρδιά της μεθόδου, όπως φαίνεται από το βήμα 4, χωρίς ωστόσο να εφαρμόζονται άμεσα, αλλά έμμεσα, μεσω της ιεραρχικής δομής και μεσω της επιλογής παραμέτρων από τον ερευνητή για την λήψη εμπειρικά στοχευμένων στον παράγοντα ενδιαφέροντος αποτελεσμάτων προσομοίωσης. Κατάλληλη επιλογή επιταχύνει τους υπολογισμούς ή αυξάνει την ακρίβεια, αναλόγως του ενδιαφέροντος.

Η πολυπλοκότητα της μεθόδου είναι  $O(N_g \log N_g)$  για την επίλυση του δυναμικού στο πλέγμα και  $O(N_p)$  για την ανάθεση των σωματιδίων στα δίκτυα και την γραμμική παρεμβολή των δυνάμεων, όπου  $N_g$ ο αριθμός ζωνών του πλέγματος και  $N_p$ ο αριθμός σωματιδίων.

#### 1.5.2.2 Η Μέθοδος Nested Grid Particle-Mesh (NGPM)

Η πλέον πρόσφατη εκδοχή της μεθόδου χρησιμοποιεί μία σειρά από ενσωματωμένα πλέγματα στα οποία αναλύεται ισοδύναμα όχι μόνο το φορτίο αλλά και η μάζα των σωματιδίων, και μάλιστα η ανάλυση και η ακρίβεια τόσο των δυνάμεων μεταξύ σωματιδίων, όσο και της κατανομής των μαζών αυτών, αυξάνονται καθώς η εκτέλεση μετακινείται σε πιο μικρά μεγέθη πλέγματος [39]. Η εναλλακτική αυτή προσέγγιση, στην αντιμετώπιση της μάζας είναι η βασική διαφορά της μεθόδου NGPM από τις υλοποιήσεις Tree Codes και από τις μεθόδους όπως η P<sup>3</sup>M.

Συνοπτικά η μέθοδος μπορεί να περιγραφεί ως εξής [40]:

- Θεωρείται το πατρικό, αρχικό κελί που περιλαμβάνει όλα τα σωματίδια της προσομοίωσης, και, όπως και στις προηγούμενες μεθόδους, τα φορτία εισάγονται στο πλέγμα, με τη διαφορά πως και οι μάζες εισάγονται και αυτές σε πλέγμα μέσα στο αρχικό πλέγμα. Εκτός από την πυκνότητα φορτίων, πλέον γίνεται λόγος και για την πυκνότητα μάζας σε κάθε κελί του πλέγματος.
- Ορίζουμε υποπλέγμα οπουδήποτε μεγέθους μέσα στο αρχικό κελί, το οποίο αποτελείται από n<sup>3</sup> σωματίδια. Η μάζα των σωματιδίων στα κελιά του κάθε υποπλέγματος θα είναι μάζα πατρικού κελιού

αριθμός σωματιδίων υποκελιού<sup>3</sup>.

- 3. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί αυθαίρετος αριθμός πατρικών πλεγμάτων και πλεγμάτωνπαιδιών, με ομοιόμορφα όμως διάκενα μεταξύ και των δύο ειδών πλεγμάτων.
- 4. Υπολογισμός των δυνάμεων στα πλέγματα-γονείς από τον ορισμό του δυναμικού στα κελιά μέσα στα πλέγματα αυτά.
- 5. Υπολογισμός των δυνάμεων στα σωματίδια των δικτύων των πλεγμάτων-παιδιών: ορίζεται η πυκνότητα σε μία περιοχή ενός υποπλέγματος ίση με το μέσο όρο της πυκνότητας των υποπλεγμάτων. Με τον τρόπο αυτό εξαλείφονται όλες οι διακυμάνσεις στο υποπλέγμα, τη στιγμή που η μάζα παραμένει σταθερή. Ακολούθως επιλύεται η εξίσωση δυναμικού για το βαρυτικό δυναμικό μέσω FFT, και γίνεται γραμμική παρεμβολή μέσω τεχνικής Cloud-In-A-Cell, για να βρεθούν οι δυνάμεις στα σωματίδια των υποπλεγμάτων. Τέλος υπολογίζονται οι δυνάμεις πάνω στα σωματίδια των υποπλεγμάτων εξαιτίας των ιδίων, και πάλι μέσω FFT.
- 6. Εισαγωγή των δυνάμεων και υπολογισμός ταχυτήτων και νέων θέσεων/τροχιών των τροχιών, με ασύγχρονα χρονικά βήματα.

Το τελευταίο στοιχείο του αλγορίθμου, τα ασύγχρονα βήματα, αποτελούν ομολογουμένως ασυνήθιστη αλγοριθμική προσέγγιση (που δεν απαντάται σε καμία από τις προηγούμενες μεθόδους), εξηγείται από τους ερευνητές που ανέπτυξαν τη μέθοδο ως προσπάθεια να διατηρηθεί με ασφάλεια διαχωρισμένη η κατανομή σωματιδίων των υποπλεγμάτων από αυτή του πατρικού κελιού. [41]

#### 1.5.2.3 Η Μέθοδος Tree-Code Particle Mesh (TPM)

Πολλές μέθοδοι επιχείρησαν να συγκεράσουν τα πλεονεκτήματα των ιεραρχικών μεθόδων όπως οι Tree Codes με τεχνάσματα των μεθόδων με δίκτυα και ένα παράδειγμα της παραπάνω λογικής είναι η μέθοδος TPM, το όνομα της οποίας είναι ακριβώς "δένδρο με πλέγμα σωματιδίων". Από τις αρχικές προσεγγίσεις πάνω στη λογική αυτή ήταν οι εργασίες που αναφέρονται στη βιβλιογραφία στις πηγές [42].

Για την υλοποίηση της μεθόδου ορίζεται ένα αυθαίρετο όριο συγκέντρωσης μάζας και εξετάζονται οι περιοχές του χώρου του προβλήματος ώστε να βρεθούν αυτές στις οποίες η συγκέντρωση μάζας υπερβαίνει το όριο. Σε αυτές τις περιοχές η επίλυση γίνεται με τη μέθοδο Tree Code, ωστόσο με πολλαπλά δένδρα, ένα για κάθε υποπρόβλημα, ενώ στις περιοχές όπου η συγκέντρωση μάζας είναι μικρή η επίλυση γίνεται κατά τα όσα έχουν αναφερθεί σχετικά με τη μέθοδο PM. Οι κώδικες Particle-Mesh έχουν το πλεονέκτημα της αυξημένης ταχύτητας, με το μειονέκτημα της μειωμένης χωρικής ευκρίνειας και ακρίβειας. Αντίθετα οι Tree Codes έχουν αυξημένη χωρική ακρίβεια όμως συχνά δεν επιτυγχάνουν ακριβή αναπαράσταση της μάζας. [43]

Σύμφωνα με τα παραπάνω η συνολική δύναμη σε ένα σωματίδιο θα προκύπτει ως υπέρθεση των δυνάμεων που είναι αποτέλεσμα της άθροισης των δυνάμεων από τα γειτονικά σωματίδια :

 $F = F_{NEAR} + F_{FAR}$ , με διαχωρισμό των τεχνικών ανά περίπτωση.

Όσον αφορά τις δυνάμεις μικρού βεληνεκούς, από άμεσα γειτονικά σωματίδια και ομάδες σωματιδίων, αυτές κατά κύριο λόγο προέρχονται από περιοχές με πυκνή κατανομή σωματιδίων και ως αποτέλεσμα, με κατάλληλη επεξεργασία των δεδομένων του προβλήματος και αρχικό clustering, ώστε να υπάρξει η ανάθεση των επιθυμητών περιοχών του προβλήματος στην κατάλληλη μέθοδο, μπορούμε να εξασφαλίσουμε πως θα έχουμε χρήση της μεθόδου Tree Code εντός των πυκνών περιοχών, στις οποίες ο υπολογισμός θα γίνεται με δένδρα,και χρήση τεχνικής PM για τις άμεσα γειτονικές περιοχές των δένδρων,με αραιή πυκνότητα. Καθώς η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων.

Αντίστοιχα για τις δυνάμεις μεγάλου βεληνεκούς, και ιδίως εάν οι περιοχές εμφανίζουν αραιή κατανομή σωματιδίων, ο υπολογισμός ανατίθεται στη μέθοδο PM. Η επίλυση της εξίσωσης του Poisson γίνεται με τις τεχνικές της PM μεθόδου, συνήθως υπολογισμό μέσω FFT. Οι εξισώσεις κίνησης και η χάραξη των τροχιών και η αντιμετώπιση με στιγμιότυπα έχει ως αποτέλεσμα η συνολική έκφραση να συνοψίζεται στον παρακάτω τύπο:

$$F = \sum \left( w_i * w_j * w_k * del(\varphi) \right) + F_{Tree} \quad (1.5)$$

στον οποίο τα βάρη w υπολογίζονται με την τεχνική Cloud-In-Cell που αναφέρθηκε κατά την ανάλυση της μεθόδου PM.

Με βάση και τα όσα αναλύονται για τους Tree Codes στο επόμενο κεφάλαιο της παρούσας διπλωματικής για τη μέθοδο TPM αξιοποιείται το τέχνασμα της χρήσης διαφορετικών χρονικών κλιμάκων για την κάθε περιοχή του χώρου και πρωτίστως για τις περιοχές στις οποίες η κατανομή σωματιδίων είναι πυκνότερη: στις περιοχές αυτές, καθώς εμφανίζονται πιο έντονες δυναμικές συμπεριφορές και απαιτούνται μεγαλύτερης ακρίβειας περιγραφές των δυναμικών των υποσυστημάτων, το κάθε τοπικό δένδρο έχει ειδικά προσαρμοσμένη διάρκεια χρονικού βήματος που υπολογίζεται με αποκλειστικό σκοπό τη βελτιστοποίηση της προσομοίωσης και είναι υποπολλαπλάσια της διάρκειας των περιοχών PM, διατηρώντας τα συγκριτικά πλεονεκτήματα της μεθόδου, αλλά βελτιστοποιώντας μέσω των μεταβλητών χρονικών βημάτων το υπολογιστικό κόστος σε δένδρα με συγκριτικά αραιότερες κατανομές από ότι άλλα.

#### 1.5.2.4 Η Μέθοδος Self-Consistent Field (SCF)

Η μέθοδος SCF είναι ένας αλγόριθμος ταχείας άθροισης για αστρικά προβλήματα Νσωμάτων στα οποία δεν λαμβάνονται υπόψιν οι συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων. Όσον αφορά τη μέθοδο, τα μεμονωμένα σωματίδια αλγοριθμικά αντιμετωπίζονται ως μη αλληλεπιδρούσες υπάρξεις, αλλά αντίθετα λαμβάνεται υπόψιν η συνολική και συνδυασμένη συνεισφορά τους στο βαρυτικό πεδίο δυνάμεων και δυναμικών του προς προσομοίωση συστήματος. Το δυναμικό επομένως δεν εξαρτάται από τις σχετικές συντεταγμένες των σωματιδίων. [45]

Ο λόγος πίσω από το σκεπτικό ανάπτυξης της μεθόδου είναι πως σε ένα μη συγκρουσιακό σύστημα, όπως οι γαλαξίες από αστρικά σώματα που εξετάζονται στα πλαίσια μίας αστρονομικής προσομοίωσης, ή όπως τα ηλεκτρόνια σε καταστάσεις πυκνού πλάσματος,τα σωματίδια της προσομοίωσης κινούνται σε τροχιές οι οποίες δεν εξαρτώνται από μεμονωμένες αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο και μόνο σωματιδίων, αλλά αντίθετα η φυσική περιγραφή είναι πιο κοντά στη θεώρηση πως υπάρχει βαρυτικό δυναμικό που οφείλεται σε συνεχή, αδιάσπαστη κατανομή μάζας και προκύπτει ως μαθηματική ολοκλήρωση παρά σε αποτέλεσμα απλής διακριτής άθροισης.

Για τους παραπάνω λόγους η μέθοδος SCF εκκινεί από υπολογισμό για την εύρεση της μεταβαλλόμενης κατανομής πυκνότητας μάζας στο σύστημα, με βάση τις τροχιές των σωματιδίων. Η συνολική πυκνότητα, όπως ορίζεται από τις τροχιές, οδηγεί σε μία νέα "λογική" δυναμικού και η μέθοδος συνεχίζει επαναληπτικά έως ότου να καταλήξει σε οριακές συνθήκες ακρίβειας. Μετά την εύρεση του παραπάνω δυναμικού πεδίου, τα N σώματα της προσομοίωσης εισάγονται στο χώρο του πεδίου και ακολουθεί ανάλογη επίλυση με στιγμιότυπα δυναμικών για μελλοντικές χρονικές στιγμές.

Η μέθοδος SCF παρουσιάζει ομοιότητες με τους Tree Codes καθώς χρησιμοποιεί την ανάλυση με στιγμιότυπα και χρονικά βήματα αλλά και παρόμοια αντιμετώπιση σφαλμάτων στρογγυλοποίησης. Πλεονέκτημα της μεθόδου αποτελεί η χαμηλή πολυπλοκότητά της, η οποία είναι O(N) και το γεγονός πως, υπό όρους και ανάλογα με τις συνθήκες της προσομοίωσης, θα είναι δυνατό να προσομοιώσει πολύ πιο έντονες "εφαπτομενικά" κατανομές σε σχέση με αυτές που μπορούν να επιλύσουν άλλες μέθοδοι ταχείας άθροισης.



Εικόνα 1-5: Μέθοδος SCF για υπολογισμό πεδίου δυναμικού διεγερμένων μορίων σε εφαρμογή νανοτεχνολογίας

Το βασικό μειονέκτημα που έχει η μέθοδος είναι πως ο υπολογισμός των κατανομών πυκνοτήτων γίνεται με βάση την ισοδύναμη μαθηματική ανάλυση σε αναπτύγματα, και όλες οι βελτιστοποιήσεις της μεθόδου, όπως προκύπτει και από τη σχετική βιβλιογραφία, έγιναν με γνώμονα τη στοχευμένη αντιμετώπιση προβλημάτων με ιδανικές αναλύσεις των πεδιακών εννοιών και των κατανομών μαζών σε σειρές (με λογική παρόμοια με τις βελτιστοποιήσεις του FMM). Με εξαίρεση τις στοχευμένες περιπτώσεις αυτές, η μέθοδος δεν εμφανίζει ικανοποιητικά αποτελέσματα κατά την επίλυση τυχαίων προβλημάτων. [46]

Μέθοδος	Εφαρμογή
Particle-Particle	Οποιουδήποτε είδους υπολογισμοί
Particle-Mesh	Αναλόγως κατανομής και ύπαρξης αναπτυγμάτων. Ακατάλληλη για κοντινές αποστάσεις σωματιδίων. Ευρεία εφαρμογή σε προβλήματα με φυσική πλάσματος.
Particle-Particle/Particle-Mesh	Συνδυασμός των παραπάνω δύο μεθόδων. Συνακόλουθοι περιορισμοί.
Particle Multiple-Mesh	Συστήματα χωρίς συγκρούσεις. Προτιμάται για συστήματα μικρού όγκου.
Nested Grid Particle-Mesh	Μαθηματικοί περιορισμοί λόγω εξάρτησης από FFT.
Tree Code – Jernigan & Porter	Καλύτερα αποτελέσματα για προβλήματα αλληλεπίδρασης μεμονωμένων σωματιδίων με clusters από σωματίδια. Δυνατότητα μοντελοποίησης συγκρούσεων, ικανοποιητικά αποτελέσματα για πολύ πυκνές κατανομές μάζας.
Tree Code – Barnes & Hut	Ευρύ φάσμα δυνατοτήτων,σε ανομοιογενείς κατανομές σωματιδίων,προβλήματα με/χωρίς μοντελοποίηση συγκρούσεων με εισαγωγή παράγοντα εξομάλυνσης.
FMM	Διαφορετικές εφαρμογές ανά ειδική μέθοδο. Ανάπτυξη εξειδικευμένων και στοχευμένων αλγορίθμων. Πολύ κάλά αποτελέσματα προσομοιώσεων όσον αφορά χρόνους και ακρίβεια.
Tree-Code Particle Mesh	Συνδυασμός Tree Code και Particle Mesh, ισχύουν ανάλογα τα παραπάνω.
Self-Consistent Field	Προσομοιώσεις προβλημάτων αστρικών σωμάτων, σε συστήματα χωρίς συγκρούσεις.

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

# Περίληψη Κεφαλαίου 2

Εστίαση του ενδιαφέροντος στους αλγόριθμους Tree Code από τους Appel, Jernigan-Porter και Barnes-Hut. Αλγοριθμική περιγραφή, ανάλυση πολυπλοκότητας και σφαλμάτων, εξέταση και περιγραφή των δομών δεδομένων των αλγορίθμων. Σύγκριση των μεθόδων μεταξύ τους όσον αφορά τον τρόπον διαχωρισμού του χώρου προσομοίωσης, την ιεραρχικής τους δομή. Δυνατοτήτες αλγοριθμικής βελτιστοποίησης των δύο μεθόδων, όπως αυτές έχουν προταθεί ανά τα έτη και περιγραφή της τελικής, βελτιστοποίημένης εκδοχής της μεθόδου των Barnes-Hut.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

### TREE CODES

#### 2.1 Tree Codes των Appel, Jernigan και Porter

Σε μία προσπάθεια εύρεσης μίας μεθόδου που θα μπορούσε να υπολογίσει τις δυνάμεις σε ένα πρόβλημα Ν-σωμάτων, με επιθυμητή ακρίβεια, και να μειώσει σε ικανό βαθμό την πολυπλοκότητα, παρουσιάστηκαν ανά τα έτη αρκετές αλγοριθμικές προσεγγίσεις. Στόχος τους ήταν, μαζί με τα παραπάνω, να υπάρχει ικανότητα παρακολούθησης του προβλήματος τόσο χρονικά όσο και χωρικά, στις απαιτούμενες κλίμακες για κάθε προσομοίωση. Αξιοσημείωτες προσεγγίσεις έγιναν από τον Appel [49] και τους Jernigan και Porter, με τους τελευταίους να προτείνουν έναν αλγόριθμο [50] ο οποίος εκ των υστέρων αποκαλείται "ανάποδος αλγόριθμος Tree Code" [27].

Ορμώμενοι από τις έως τότε υπάρχουσες μεθόδους Particle-Mesh, Particle-Multiple Mesh και την τότε πρόσφατη εισαγωγή των ιεραρχικών δομών στους αλγορίθμους προσομοιώσεων Νσωμάτων, οι ερευνητές στόχευαν στη μείωση της πολυπλοκότητας μέσω της προσεγγιστικής εύρεσης των δυνάμεων μεταξύ απομακρυσμένων σωματιδίων και μέσω του απευθείας υπολογισμού δυνάμεων μόνο για γειτονικά σωματίδια, με σκοπό να παρέχουν αξιόπιστη μέθοδο προσομοίωσης η οποία θα επικεντρωνόταν σε βαρυτικά προβλήματα και αστροφυσικές εφαρμογές.



Εικόνα 2-1: Το δυαδικό δένδρο στο οποίο καταλήγει το βήμα 2 της μεθόδου AJP. Εμφανής η ιεραρχική δομή που είναι το μόνο ζητούμενο και η απουσία οποιασδήποτε άλλης πληροφορίας σχετικά με τα σωματίδια.

Οι ερευνητικές εργασίες των Appel, Jernigan και Porter βασίζονταν στην ιδέα του αναδρομικού μετασχηματισμού συντεταγμένων μέσω μετασχηματισμού κέντρου βάρους [49][50].

Για το λόγο αυτό και παρά τις μικρές αλγοριθμικές διαφορές στην υλοποίηση των μεθόδων, επικράτησε να γίνεται αναφορά σε μία μέθοδο με την ονομασία "μέθοδος AJP" [25].

#### 2.1.1 Περιγραφή της Μεθόδου AJP

Η μέθοδος επικεντρώνει αποκλειστικά στην περιγραφή συστημάτων Νευτώνειας Βαρύτητας, τα σώματα των οποίων μπορούν να απεικονιστούν ως σωματίδια [16]. Καθώς τα προς προσομοίωση αστροφυσικά συστήματα μπορεί να περιέχουν σώματα με πολύ μεγάλες τάξεις φυσικού μεγέθους, εισάγεται χωρική ιεραρχία. Λόγω του γνωστού χρονικού και χωρικού δυναμικού εύρους των προβλημάτων αυτής της φύσης [47], η επίλυση δε γίνεται με συγχρονισμένο τρόπο αλλά με μεταβλητά χρονικά βήματα. Η μέθοδος βασίζεται στο μετασχηματισμό των γραμμικών συντεταγμένων όπως αυτές προκύπτουν από το μετασχηματισμό των σωματιδίων σε ισοδύναμους κόμβους, με βάση το κέντρο μάζας των σωματιδίων, και με τον αναδρομικό υπολογισμό των μειώσεων των κέντρων βάρους των σωματιδίων, καταλήγει σε ένα σύνολο από διανύσματα μετατόπισης και κέντρα βάρους, το οποίο ονομάζεται "δυαδικό δένδρο κόμβων".

Τα βήματα της μεθόδου έχουν ως εξής [50]:

1. Τα *n* σωματίδια εισάγονται στον κενό ύλης χώρο της επίλυσης και κατασκευάζεται η δομή του δυαδικού δένδρου.



Εικόνα 2-2: Η διαδικασία επιλογής των κοντινότερων σωματιδίων κατά το βήμα 2 του αλγορίθμου. Τα σωματίδια απεικονίζονται ως ανοιχτόχρωμοι κύκλοι, τα ευθύγραμμα τμήματα συμβολίζουν τις αποστάσεις σωματιδίων ή κόμβων αντίστοιχα, ενώ ο σκούρος κύκλος συμβολίζει το κέντρο βάρους του υψηλότερου επιπέδου κόμβου, στον οποίο καταλήγει η κατασκευή του τμήματος του δένδρου.

- 2. Μέσω αναζήτησης στο δυαδικό δένδρο, βρίσκονται τα δύο σωματίδια με την κοντινότερη απόσταση, "ενώνονται" και αντικαθίστανται από έναν ισοδύναμο κόμβο στο κέντρο μάζας τους, και αναζητούνται ακολούθως οι κοντινότερες δυο οντότητες, είτε σωματίδια είτε κόμβοι είτε συνδυασμός των δύο. Το ζεύγος από σωματίδια ή/και κόμβους αντικαθίστανται και πάλι από έναν ισοδύναμο κόμβο. Κάθε ζεύγος από οντότητες αντιμετωπίζεται διαδοχικά με όμοιο τρόπο έως ότου τα αρχικά Ν σωματίδια να αντικατασταθούν από ένα νέο δυαδικό δένδρο Ν-1 κόμβων. Όλες οι εσωτερικές λεπτομέρειες του προβλήματος αγνοούνται πέρα από τις παραπάνω.
- 3. Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται σε κάθε χρονικό βήμα, και το δένδρο ξαναχτίζεται κάθε φορά από την αρχή. Η μέθοδος καταλήγει επαναληπτικά σε δύο ισοδύναμους κόμβους και σε ένα κοινό κέντρο βάρους.
- 4. Προσεγγιστικός υπολογισμός των δυνάμεων, με χρήση του δυαδικού δένδρου.
- 5. Επίλυση των εξισώσεων κίνησης και ενημέρωση των τροχιών/θέσεων.
- 6. Επόμενο στιγμιότυπο προβλήματος, με επιστροφή στο βήμα 1.

#### 2.1.2 Εξέταση Στοιχείων της Μεθόδου ΑJP

#### 2.1.2.1 Δομές Δεδομένων και Βελτιστοποίηση

Σύμφωνα με τη μέθοδο AJP το δένδρο ξαναχτίζεται κάθε φορά από την αρχή, κάτι που παρόλ'αυτά δεν καθυστερεί σημαντικά την αριθμητική μέθοδο. Το γεγονός αυτό οφείλεται στη δομή του δένδρου, καθώς κάθε φορά γίνονται λίγες μόνο αναζητήσεις για το κοντινότερο γειτονικό σωματίδιο, και η συνολική κατασκευή του δένδρου γίνεται σε  $O(N \log N)$  βήματα. Κεντρικό σημείο της μεθόδου είναι η αναδρομική διαδικασία και η λογική αναζήτησης των στοιχείων του προβλήματος. Το δένδρο εξετάζεται σε επίπεδα και εντός επιπέδου η εξέταση γίνεται με αναδρομικό τρόπο, επομένως όταν η εκτέλεση πηγαίνει σε ένα σωματίδιο n, λόγω της αναδρομικής διαδικασίας, όλοι οι κόμβοι κάτω από το σωματίδιο αυτό έχουν εξεταστεί και ο υπολογισμός έχει προχωρήσει έως εκείνο το σημείο, κάτι που φαίνεται στην Εικόνα 2-3.



Εικόνα 2-3: Σε πρόβλημα με n=20 σωματίδια, απεικονίζεται η φορά εξέτασης του δένδρου εκκινώντας από ένα σωματίδιο στο χαμηλότερο επίπεδο και σημειώνεται η συνολική διαδρομή εξέτασης έως τον επιθυμητό κόμβο υψηλότερου επιπέδου.

Καθώς τα χρονικά βήματα και η διάρκειά τους καθορίζονται ως παράμετροι κατά την προσομοίωση, είναι δυνατό να χρησιμοποιηθεί μικρή διάρκεια στα σημεία του προβλήματος όπου έχουμε πυκνή κατανομή και μεγαλύτερη διάρκεια σε αραιές κατανομές ή στα υψηλότερα επίπεδα του δένδρου. Επιπρόσθετα, καθώς τα επιθυμητά όρια σφάλματος ορίζονται κατά την προσομοίωση, εάν ένα σωματίδιο είναι πολύ μακρινό ή πολύ μικρότερο σε μάζα σε σχέση με τον εξεταζόμενο κόμβο, αγνοείται με μικρό προκύπτον σφάλμα, ενώ τα πολύ κοντινά σωματίδια δηλαδή αυτά με τις μεγαλύτερες δυνάμεις υπολογίζονται με μικρό ή καθόλου σφάλμα (με τη μέθοδο direct PP).



Εικόνα 2-4: Στο ίδιο με την εικόνα 2-3 πρόβλημα με n=20 σωματίδια, απεικονίζεται η φορά εξέτασης του δένδρου εκκινώντας από την κορυφή και καταλήγοντας στα μεμονωμένα σωματίδια στο χαμηλότερο επίπεδο. Σημειώνεται με βέλη η συνολική διαδρομή εξέτασης του δένδρου.

Από ένα σημείο και μετά με βάση τα περιθώρια σφάλματος, οι ασθενέστερες δυνάμεις αποκόπτονται από τον υπολογισμό, κάτι που βελτιώνει κατά πολύ την ταχύτητα για μεγαλύτερα μεγέθη προβλήματος.

Από τα ζητούμενα της μεθόδου είναι η όσο το δυνατό μη λεπτομερής κατασκευή του δένδρου, προκειμένου να ολοκληρωθεί το στάδιο αυτό όσο το δυνατόν γρηγορότερα. Όπως φαίνεται και στις εικόνες 2-1 και 2-2 δεν καταγράφονται στις νέες δομές δεδομένων οι θέσεις των αρχικών σωματιδίων και το μόνο που ενδιαφέρει είναι οι ιδιότητες του τελικού ισοδύναμου κόμβου. Αρχικά δεν καταβαλλόταν καμία προσπάθεια βελτιστοποίησης των δομών δεδομένων στο σημείο αυτό και καθώς τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων δεν ήταν τα ταχύτερα δυνατά, εισήχθη στη μέθοδο βελτιστοποίηση της δομής του δένδρου με διαδοχικά τρεξίματα της αρχικής διαδικασίας διαχωρισμού σε ζεύγη.

Με τον τρόπο αυτό, γίνεται ανακαθορισμός των ισοδύναμων κέντρων βάρους χωρίς να έχουμε μεταβολή στα επόμενα επίπεδα και προκύπτει δυαδικό δένδρο με πιο καθαρή και ευδιάκριτη αρχική δομή κάτι που γίνεται κατανοητό βλέποντας τις εικόνες 2-5α και 2-5b [49].

Εάν δε γίνει η βελτιστοποίηση αυτή είναι δυνατόν οι ομάδες (clusters) σωματιδίων που προκύπτουν να μην έχουν ιδανικά σχήματα (με βάση άλλες τεχνικές clustering) [25]. Όσον αφορά τα αριθμητικά λάθη, είναι δυνατός ο ορισμός αυθαίρετων άνω ορίων για τα αριθμητικά σφάλματα, και οι μετέπειτα επαναλαμβανόμενοι έλεγχοι με διαδοχικές προσομοιώσεις του ίδιου συστήματος για σύγκριση των αποτελεσμάτων, καθώς μεταβάλλονται τα περιθώρια ακρίβειας.



Εικόνα 2-5: Το αρχικό επίπεδο μετά από ένα (a) και περισσότερα (b) τρεζίματα του αρχικού αλγορίθμου χωρισμού σε ομάδες σωματιδίων

#### 2.1.2.2 Χρονικά Διαστήματα και Ορθότητα Προσομοίωσης

Οι στιγμιαίες τιμές των δυνάμεων και των παραγώγων τους ανταποκρίνονται στις σωστές τιμές κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης για μικρό μόνο χρονικό διάστημα. Κατά το διάστημα αυτό οι εξισώσεις κίνησης μπορούν να επιλυθούν και τα αποτελέσματα της επίλυσης θα είναι σωστά. Καθώς όμως ο αλγόριθμος πραγματοποιεί ομαδοποίηση (clustering) σωματιδίων, εισάγονται περιορισμοί στη μέγιστη διάρκεια κατά την οποία το σύστημα μπορεί να θεωρηθεί ότι βρίσκεται στο ίδιο στιγμιότυπο [50], καθώς λόγω των μεταβαλλόμενων τροχιών κάποια σωματίδια μπορεί να αλλάζουν ομάδες.

Το χρονικό διάστημα της κάθε μεταβλητής είναι διαφορετικό και υπάρχει ανάγκη εξαρχής υπολογισμού της διάρκειας των χρονικών βημάτων για την κάθε μεταβλητή. Για να υλοποιηθεί αλγοριθμικά ή ασύγχρονη φύση της αριθμητικής μεθόδου, χρησιμοποιούνται οι έννοιες του χρόνου "διάβασης" που είναι το άνω όριο του χρόνου στον οποίο το στιγμιότυπο του δένδρου αποτελεί σωστή απεικόνιση της χωρικής και ιεραρχικής κατανομής των σωματιδίων και κόμβων, και του "δυναμικού χρόνου" που είναι ο χρόνος για τον οποίο οι υπολογισμένες δυνάμεις περιγράφουν με ικανοποιητική ακρίβεια τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων. Υπενθυμίζεται πως η επίλυση εξισώσεων γίνεται όχι για καρτεσιανές συντεταγμένες αλλά για ισοδύναμα μετασχηματισμένες συντεταγμένες που βασίζονται σε διανύσματα μετατόπισης κέντρων βάρους των ισοδύναμων κόμβων και των θέσεων των σωματιδίων που ανήκουν στους κόμβους αυτούς, με το κάθε διάνυσμα να εξετάζεται ασύγχρονα, στη δική του χρονική κλίμακα.

Ο χρόνος "διάβασης" έχει την έννοια της παρατήρησης της θέσης του κάθε σωματιδίου καθώς αυτό αποτελεί παιδί ενός κόμβου. Εάν μετακινηθεί από κόμβο σε κόμβο λόγω της μεταβολής της τροχιάς του στο χώρο, καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση, προφανώς ο χρόνος διάβασης πρέπει να υπολογίζεται κατάλληλα, για να εξασφαλίζεται το ορθό της προσομοίωσης. Ο χρόνος διάβασης υπολογίζεται κατά το βήμα του υπολογισμού των δυνάμεων, με ισοδύναμη εύρεση της ταχύτητας του κάθε σωματιδίου και επιλύοντας την εξίσωση [50]:

$$\delta t_{c} = f_{c} \frac{|x_{Ni}| - S_{n}}{\dot{S}_{N} - v_{Ni} \frac{x_{Ni}}{|x_{Ni}|}} \quad (2.1) ,$$

όπου για το σωματίδιο i, που απέχει από τον κόμβο n απόσταση  $x_{Ni}$ , υπολογίζεται η σχετική ταχύτητα  $v_{Ni}$  και με βάση το μέγεθος  $S_n$  του κόμβου n και την παράγωγο  $\dot{S}_n$  (δηλαδή το ρυθμό αύξησης του μεγέθους του κόμβου), με τα  $S_n$  και  $\dot{S}_n$  να υπολογίζονται επαναληπτικά.

Εισάγεται ο αυθαίρετος παράγοντας  $f_c=0,5$  για να υπάρχει η βεβαιότητα πως ο υπολογισμός του  $\delta t_c$  θα αντιστοιχεί σε ορθή για τα πλαίσια της προσομοίωσης τιμή, και για να προβλεφθούν τυχόν μη γραμμικότητες και παρεμβολές στις εξεταζόμενες αλληλεπιδράσεις [50].

Ο "δυναμικός χρόνος", δηλαδή το διάστημα κατά το οποίο οι υπολογισμένες τιμές των δυνάμεων μέσω της μεθόδου αντιστοιχούν στις πραγματικές τιμές, όπως θα προέκυπταν αν γινόταν προσομοίωση του στιγμιότυπου με τη μέθοδο σωματίδιο προς σωματίδιο, είναι άμεσα συνδεδεμένος με τα σφάλματα της μεθόδου και τον υπολογισμό τους.

#### 2.1.2.3 Περιορισμοί της Μεθόδου AJP στις Διάρκειες Βημάτων

Από τον υπολογισμό της δύναμης και της παραγώγου της, με παραγώγιση προκύπτουν οι τιμές επιτάχυνσης του κάθε κόμβου, όμως όλες οι παράγωγοι τάξης μεγαλύτερης από δεύτερης, αγνοούνται εσκεμμένα κατά τον υπολογισμό (λόγω προσεγγίσεων), εισάγοντας παράγοντα σφάλματος, το άνω όριο του οποίου πρέπει να υπολογιστεί εξαρχής. Αθροίζοντας επαναληπτικά τις τιμές των δυνάμεων και των επιταχύνσεων του κάθε κόμβου και βρίσκοντας τις συνολικές σχετικές ταχύτητες και τα διανύσματα μετατόπισης για τον κάθε κόμβο, καταλήγουμε στον υπολογισμό της συνολικής ενέργειας του συστήματος Ν-σωμάτων, μέσω της ισοδύναμης απεικόνισης των σωματιδίων σε κόμβους.

Προκύπτει όμως από τη μαθηματική ανάλυση και τη βιβλιογραφία [25] πως τα σφάλματα εισάγονται στον υπολογισμό της κινητικής ενέργειας, και γράφοντας την εξίσωση της κινητικής ενέργειας στο ισοδύναμο σύστημα συντεταγμένων και υπολογίζοντας επαναληπτικά, μπορεί να εξαχθεί και το συνολικό χρονικό σφάλμα για τον κάθε κόμβο, επομένως με βάση τον υπολογισμό του άνω ορίου του χρονικού σφάλματος, του δυναμικού χρόνου και του χρόνου "διάβασης" εξάγεται η χρονική κλίμακα και το βήμα χρόνου για κάθε μεταβλητή της προσομοίωσης. [50]

Συμπληρωματικά, τα χρονικά βήματα υπόκεινται σε δύο ακόμη περιορισμούς. Αρχικά η διάρκειά τους να είναι δύναμη του 2, ώστε το κάθε χρονικό βήμα να είναι πολλαπλάσιο των μικρότερων βημάτων και το σύστημα να μπορεί να έρθει σε χρονισμό, κάτι αδύνατο εάν οι διάρκειες δεν είναι πολλαπλάσια σταθερού αριθμού.

Εύρεση μέγιστου κοινού διαιρέτη ή ελάχιστου κοινού πολλαπλάσιου, ή χρήση πρώτων αριθμών για τη χρονική διάρκεια βήματος υποπεριοχής του προβλήματος, θα σήμαινε πως το σύστημα ίσως δε θα συγχρονιζόταν "ακριβώς" ποτέ, με εισαγωγή επιπρόσθετου σφάλματος λόγω μη συγχρονισμού των δεδομένων μεταξύ τους.

Το χρονικό βήμα ενός κόμβου δε μπορεί να είναι μεγαλύτερο ή ίσο με αυτό του γονικού του κόμβου: με τον τρόπο αυτό όχι μόνο το κάθε υποδένδρο συγχρονίζεται όσο το δυνατόν πιο συχνά, αλλά κατά τον υπολογισμό του χρόνου διάβασης ενός κόμβου, μπορούν να ληφθούν υπόψιν οι εξωτερικοί περιορισμοί των χρόνων διάβασης όλων των κόμβων που βρίσκονται ιεραρχικά κάτω από αυτόν. Με τον παραπάνω τρόπο εξασφαλίζεται πως ακόμα και εάν ένας κόμβος σε υψηλό επίπεδο προσομοιώνεται με σχετικά μεγάλης διάρκειας χρονικά βήματα, το προκύπτων σφάλμα είναι μικρότερο το αναμενόμενου καθώς οι κόμβοι των χαμηλότερων επιπέδων λόγω των μικρότερω.



Εικόνα 2-6: Για πρόβλημα με n=512 σώματα απεικονίζονται τα υποδένδρα και οι ισοδύναμοι κόμβοι, με οδηγούς τα ευθύγραμμα τμήματα των αποστάσεων μεταξύ σωματιδίων και κόμβων. Απεικονίζονται επίσης ενδεικτικά ως κατευθύνσεις τα διανύσματα των υπολογισμένων δυνάμεων.

#### 2.1.2.4 Ιεραρχική Χρονική Δομή της Μεθόδου

Το δυαδικό δένδρο εισάγει σχέσεις χρονικής ιεραρχίας, κάτι που αποτελεί πλεονέκτημα της μεθόδου σε σύγκριση με παλαιότερες μεθόδους. Στην εξέλιξη της προσομοίωσης, όπως και κάθε φυσικού προβλήματος, είναι επόμενο πως τα υποσυστήματα, όταν εξεταστούν σε κλίμακα, εμφανίζουν πολύ πιο έντονες δυναμικές συμπεριφορές, που εξελίσσονται σε υποπολλαπλάσιο χρόνο σε σχέση με τα μεγαλύτερα συστήματα που τα περιέχουν. Προκειμένου να είναι ορθός ο υπολογισμός της χρονικής εξέλιξης του συστήματος, και να είναι όσο το δυνατόν περιορισμένη η διάσταση της ασύγχρονης ιδιότητας του συστήματος, εισάγεται ο περιορισμός: να μη γίνει υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων ενός κόμβου παρά μόνο εάν στο μισό του μέγιστου χρόνου υπολογισμού (διάβασης) έχουν προσομοιωθεί και συγχρονιστεί όλοι οι κόμβοι που βρίσκονται ιεραρχικά κάτω από τον εξεταζόμενο κόμβο (όπως αναλύθηκε και στην παράγραφο 2.1.2.2).

Βασικά πλεονεκτήματα της μεθόδου είναι το γεγονός πως κανονικοποιεί κάθε μεταβλητή στα πλαίσια της ιεραρχικής της δομής και με τον τρόπο αυτό ανταποκρίνεται ικανοποιητικά και σε προσομοιώσεις με πολύ πυκνά κατανεμημένα σωματίδια και σε προσομοιώσεις συστημάτων που μοντελοποιούν συγκρούσεις [49]. Οι συγκρούσεις μοντελοποιούνται σωστά με παράγοντες εξομάλυνσης.

Το βασικό της μειονέκτημα είναι η αλγοριθμική πολυπλοκότητά της, τα ανομοιογενή συσσωματώματα σωματιδίων που μπορεί να δημιουργηθούν και η αυξημένη δυσκολία στην μετατροπή του αλγορίθμου σε κώδικα και σε εκτελέσιμο πρόγραμμα λόγω πολυπλοκότητας και απαιτούμενων υπολογισμών.

# 2.2 Ιεραρχικός Αλγόριθμος Υπολογισμού Δυνάμεων Πολυπλοκότητας O(NlogN)

# Ο Αλγόριθμος "Tree Code"

#### 2.2.1 Γενικά Στοιχεία για τον Αλγόριθμο Tree Code των Barnes - Hut

Ο αλγόριθμος, στην αρχική του τη μορφή, προτάθηκε το 1986 από τους Josh Barnes και Piet Hut (για συντομία στο εξής BH), οι οποίοι ξεκίνησαν να υλοποιήσουν έναν αλγόριθμο για υπολογισμό δυνάμεων μεταξύ σωματιδίων κάνοντας χρήση ιεραρχικής δομής δένδρου, για χρήση σε προσομοιώσεις βαρυτικού προβλήματος N-σωμάτων και αστρικές εφαρμογές. Ζητούμενο του νέου αλγόριθμου ήταν η λογαριθμική πολυπλοκότητα  $O(N \log N)$ , όσον αφορά το μέγεθος του προβλήματος N, και η ανάπτυξη της μεθόδου με τρόπο ώστε να είναι δυνατή η a priori εξεύρεση των άνω ορίων για τα σφάλματα που προκύπτουν. Παράλληλα ήταν επιθυμητό να αγνοούνται τα εσωτερικά συσσωματώματα σωματιδίων, αλλά και να υπάρχει πρόνοια για τον υπολογισμό τυπικών και μέσων σφαλμάτων.

Τα κύρια στοιχεία του αλγόριθμου είναι [51]:

- Εικονικός διαχωρισμός του χώρου σε κελιά και υποκελιά γόνους που έχουν ακριβώς το μισό μήκος, ύψος και πλάτος των πατρικών – κελιών.
- Δημιουργία του δέντρου με κελιά από τον αρχικό εικονικό διαχωρισμό, αλλά αγνοώντας τα κενά κελιά, δεχόμενοι τα κελιά με ένα και μοναδικό σωματίδιο και διαχωρίζοντας σύμφωνα με τα παραπάνω, επαναληπτικά το κάθε κελί και υποκελί που έχει περισσότερα από ένα σωματίδια, έως του σημείου εξεύρεσης λύσης για τη δεδομένη στιγμή – στιγμιότυπο του προβλήματος.
- 3. Επανάληψη εξαρχής των παραπάνω βημάτων σε κάθε χρονικό βήμα.

Με βάση την παραπάνω στρατηγική, σε κάθε κελί με ένα ή περισσότερα σωματίδια και σε κάθε κελί υψηλότερου επιπέδου περιέχεται ένα (ψευδο-) σωματίδιο που περιέχει τη συνολική μάζα των σωματιδίων που έχουν κατανεμηθεί στα εν λόγω κελιά, τοποθετημένη στο κέντρο μάζας τους.

Το κάθε πραγματικό σωματίδιο ή ψευδοσωματίδιο θεωρείται πως δέχεται δυνάμεις από όλα τα σωματίδια ή ψευδοσωματίδια που αντιπροσωπεύουν κελιά ικανώς μικρά ή ικανώς μακρινά από το ισοδύναμο κέντρο μάζας, ώστε η περεταίρω λεπτομερέστερη ανάλυση τους και ο διαχωρισμός τους να καλύπτεται από τα όρια σφάλματος.

#### 2.2.2 Περιγραφή του Αλγόριθμου Tree Code Barnes-Hut

Η παρακάτω μέθοδος χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό δυνάμεων με χρονική πολυπλοκότητα  $O(N \log N)$  και βασίζεται στην απεικόνιση της συνολικής μάζας που είναι κατανεμημένη στο πρόβλημα με τη χρήση μίας δομής ιεραρχικού δέντρου [51].

- 1. Η εκτέλεση ξεκινάει με έναν άδειο κύβο, με διαστάσεις που ορίζονται ανάλογα με τα δεδομένα του προβλήματος, ώστε να περιλαμβάνουν το σύνολο των σωματιδίων.
- 2. Το ένα μετά το άλλο, τα σωματίδια φορτώνονται σε αυτό το κελί, το οποίο στο εξής θα ονομάζεται κελί-ριζά (root cell). Εάν δύο σωματίδια βρίσκονται στο ίδιο κελί, αυτό χωρίζεται σε οκτώ όμοια κελιά-γόνους του προηγούμενου [53]. Προφανώς ο πρώτος τέτοιος διαχωρισμός γίνεται με την εισαγωγή του δεύτερου σωματιδίου στο κελί ρίζα, επομένως το σύστημα διαχωρίζεται σε τουλάχιστον οκτώ τμήματα.
- 3. Η παραπάνω διαδικασία συνεχίζεται επαναληπτικά, έως ότου επιτευχθεί το επιθυμητό "βάθος" επίλυσης, δηλαδή μέχρι το μέγιστο επιτρεπόμενο επίπεδο διαχωρισμού υποκελιών

κατά το οποίο έχουμε μέγιστο ένα σωματίδιο κατανεμημένο ανά κελί. Από το τελικό λεπτομερέστερο επίπεδο και επάνω το κάθε κελί θα έχει περισσότερα από ένα σωματίδια.

- 4. Τα τελικά κελιά που περιέχουν ένα σωματίδιο έκαστο, ομαδοποιούνται σε μεγαλύτερα κελιά, τα οποία με τη σειρά τους ομαδοποιούνται σε ακόμα μεγαλύτερα κελιά, εκτελώντας την αντίστροφη διαδικασία του βήματος 3, έως το σημείο που καταλήγουμε και πάλι στο αρχικό κελί-ρίζα. Καθώς πηγαίνουμε προς τη ρίζα γίνεται ο υπολογισμός της ισοδύναμης μάζας που περιέχουν τα κελιά χαμηλότερων επιπέδων και η θέση της κάθε μάζας στο εκάστοτε ισοδύναμο κέντρο μάζας. Η πληροφορία ισοδύναμων θέσεων και μαζών διαδίδεται επομένως από τα στοιχειώδη κελιά προς τη ρίζα.
- 5. Έχοντας κατασκευάσει το παραπάνω δέντρο η δύναμη σε κάθε σωματίδιο *p* προσδιορίζεται μέσω απλού επαναληπτικού υπολογισμού. Ξεκινώντας από τη ρίζα που περιέχει όλο το σύστημα, θεωρώντας μήκος κελιού ίσο με τη μονάδα για το κελί που επεξεργαζόμαστε και *D*



Εικόνα 2-7: Χωρισμός του αρχικού χώρου του προβλήματος σε κελιά και υποκελιά

την απόσταση του κέντρου μάζας εν λόγω κελιού από το σωματίδιο p, τότε εάν  $\frac{l}{D} < \theta$ , όπου  $\theta$  δεδομένη παράμετρος προσδιορισμού ακρίβειας, συνήθως ~1, τότε η επίδραση μεταξύ κελιού και σωματιδίου p λαμβάνεται υπόψιν στον υπολογισμό του αθροίσματος δύναμης που συγκεντρώνεται. Σε άλλη περίπτωση, το κελί διαλύεται στα οκτώ υποκελιά του, και το καθένα από αυτά εξετάζεται επαναληπτικά με τον ίδιο τρόπο.

#### 2.2.3 Εξέταση Στοιχείων της Μεθόδου ΒΗ

#### 2.2.3.1 Δομές Δεδομένων και Χωρισμός σε Κελιά

Κατά την κατασκευή του δέντρου το κάθε κελί απεικονίζεται προγραμματιστικά ως μία δομή δεδομένων που περιέχει τη μάζα και το κέντρο μάζας του κελιού καθώς και δείκτες (pointers) στα κελιά – γόνους. Με προσπέλαση των δεικτών μπορούμε ανά πάσα στιγμή να εξετάσουμε τα δεδομένα και να λάβουμε λεπτομερείς πληροφορίες για τα στάδια επίλυσης και υπολογισμού της μεθόδου. Επίσης το μέγεθος κελιού και το "ύψος" του δέντρου που κατασκευάζεται ή ισοδύναμα ο αριθμός απαιτούμενων διαχωρισμών για να φτάσουμε ένα τυπικό κελί, που θα περιέχει ένα και μόνο σωματίδιο, έχει υπολογιστεί σε  $O(\log_2 N^{1/3}) = O(logN)$  και η χρονική πολυπλοκότητα που απαιτείται για την κατασκευή του δέντρου έχει υπολογιστεί σε  $O(N \log N)$ .

Το κάθε κελί υποδιαιρείται καθώς η εκτέλεση κατεβαίνει επίπεδα, προς την πιο λεπτομερή ανάλυση, σε οκτώ πανομοιότυπα κελιά που καταλαμβάνουν τον ίδιο με τον πατρικό κελί όγκο. Για το λόγο αυτό ο όρος που περιγράφει το δένδρο που δημιουργείται είναι "oct tree" ή "octree" [51] (δένδρο με γόνους σε οκτάδες, αν θέλαμε να αποδώσουμε τον όρο στα ελληνικά). Καθώς το κάθε κελί υποδιαιρείται επαναληπτικά σε οκτώ όμοια στον τρισδιάστατο χώρο, στο τελικό επίπεδο θα βρεθούν κελιά ή ακόμα και ολόκληρες περιοχές του προβλήματος που δεν θα περιέχουν κανένα σωματίδιο.

Πληροφορία σχετικά με τέτοιου είδους κελιά δεν αποθηκεύεται στο δέντρο, για τον προφανή λόγο ότι είναι ζητούμενο της μεθόδου, το κάθε τελικό φύλλο του δένδρου να περιέχει ένα και μόνο σωματίδιο. Επίσης δεν θα είχε νόημα να τηρείται πληροφορία σχετικά με τις άδειες περιοχές του χώρου, θα ήταν περιττή και ως περιεχόμενο στις περιπτώσεις αναζήτησης στο δένδρο αλλά και θα καταλάμβανε άσκοπα χώρο από τη μνήμη κατά την εκτέλεση της προσομοίωσης. Το τελικό δένδρο καταλήγει να έχει  $-O(log_sN)$  επίπεδα.



Εικόνα 2-8: Δύο σφαίρες από σωματίδια και ο χωρισμός του αρχικού κελιού σε γόνους. Τα αρχικά κελιά έχουν μεγάλες περιοχές που εν τέλει αγνοούνται πλήρως κατά τον υπολογισμό στην εσωτερική και μόνο περιοχή του κάθε cluster

Η βασική βελτίωση στην απόδοση που επιτυγχάνουν οι Tree Codes προέρχεται από τις προσεγγίσεις που γίνονται κατά το στάδιο του υπολογισμού των δυνάμεων, και συγκεκριμένα λόγω της εσκεμμένης παράλειψης τόσο της λεπτομερούς δομής των ομάδων (clusters) σωματιδίων, όσο και των απομακρυσμένων αλληλεπιδράσεων, που είναι τόσο ασθενείς ώστε να κινούνται στα όρια του σφάλματος, ή και κάτω από αυτά.

#### 2.2.3.2 Κριτήριο Ανοίγματος Βρόγχου

Ο όρος "κριτήριο ανοίγματος βρόγχου" (Cell Opening Criterion) έχει ως σκοπό να προσδιορίσει το κατά πόσον ένα κελί είναι αρκετά μακρινό για την εκτίμηση της αλληλεπίδρασης εξαιτίας των σωματιδίων του. Στους ανά τα έτη αλγόριθμους που προτάθηκαν ως βελτιστοποιήσεις το αρχικού Tree Code BH έχουν περιληφθεί μια σειρά από διαφορετικά κριτήρια. Απλούστερο όλων το αρχικό κριτήριο των BH σύμφωνα με το οποίο εξετάζεται, όπως αναφέρθηκε, ο λόγος 1/D ( ή ενδεχομένως s/D εάν οι διαστάσεις των κελιών του oct tree δεν είναι ίσες με τη μονάδα αλλά ίσες με μήκος s, σε τυχόν παραλλαγμένη μορφή του αλγόριθμου) [53][55] με τον παράγοντα Θ να είναι η δεδομένη τιμή ανοχής της μεθόδου.

Εάν ισχύει  $s/D < \Theta$  τότε η εσωτερική κατανομή των σωματιδίων αγνοείται και η αλληλεπίδραση υπολογίζεται με βάση ανάπτυγμα μειωμένης ακρίβειας του δυναμικού του cluster γύρω από το κέντρο μάζας του. Με τον τρόπο αυτό για δεδομένη τιμή Θ εξετάζουμε "περπατώντας το δένδρο", διαδοχικά τα σωματίδιά του, και στην περίπτωση που το παραπάνω κριτήριο ικανοποιείται, τότε η αλληλεπίδραση ανάμεσα στο σωματίδιο που εξετάζουμε και σε όλα τα σωματίδια σε επίπεδα κάτω από τον κόμβο, αντικαθίσταται από ένα και μοναδικό όρο στον υπολογισμό[51].

Διαφορετικές (μικρότερες) τιμές του Θ προκαλούν περισσότερα ανοίγματα κελιών και έχουν ως αποτέλεσμα πιο ακριβείς τιμές δυνάμεων [25]. Βέβαια αποδείχθηκε πειραματικά πως σε εξαιρετικά ανώμαλες περιπτώσεις – εξαιρέσεις, κατά τις οποίες το βαρύκεντρο βρίσκεται πολύ κοντά στα όρια του κελιού, είναι δυνατόν να προκληθούν μεγάλες τιμές σφάλματος [61].

Μετά από πολλές προτάσεις σχετικά με διαφοροποιημένα κριτήρια για να αποφευχθούν τα παραπάνω σφάλματα [61][62] κάποιες μέθοδοι μεταβλήθηκαν ώστε να περιλαμβάνουν το κριτήριο του Barnes [62] το οποίο είναι :

$$d > \frac{l}{\theta} + \delta \quad (2.2) [57] ,$$

όπου δ είναι η απόσταση ανάμεσα στο κέντρο μάζας και το γεωμετρικό κέντρο του κελιού. Με τον τρόπο αυτό εάν έχουμε κέντρο μάζας κοντά στα όρια του κελιού ξεπερνιέται η ανωμαλία και εάν τα δύο κέντρα βρίσκονται κοντά η συμπίπτουν, ουσιαστικά χρησιμοποιείται το παλιό κριτήριο.

Η εξέταση του δένδρου με την επαναληπτική ή αναδρομική μέθοδο για την εύρεση της τιμής μία παραμέτρου της δομής εισάγει ικανού μεγέθους overhead στον υπολογισμό καθώς για να καταλήξει στην τιμή της παραμέτρου ο αλγόριθμος πρέπει να υπολογίσει αρκετές φορές τη συνθήκη "ανοίγματος του βρόγχου".

Η τελική βελτιστοποίηση προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί η ανάγκη για αναζητήσεις στο δένδρο και να υπάρξει ξεκάθαρο καθαρό κέρδος στην ταχύτητα υπολογισμών εισήχθη από τον Barnes [59]. Η στρατηγική που προτάθηκε είναι να βρεθούν όλα τα κελιά που περιέχουν λιγότερα από  $N_{crit} \approx 32$  συνήθως.

Η προτεινόμενη μέθοδος ακολουθεί τα συνήθη βήματα με μόνη διαφοροποίηση τον ορισμό του d. Το νέο d δεν ορίζεται ως η απόσταση ανάμεσα στα σωματίδια και το κέντρο μάζας του κελιού, αλλά αντίθετα ως η απόσταση ανάμεσα στο κοντινότερο άκρο του κελιού που περιέχει ένα cluster σωματιδίων και το κέντρο μάζας των σωματιδίων. Η ίδια λίστα αλληλεπίδρασης χρησιμοποιείται για όλα τα σωματίδια του κάθε κελιού και δεν υπάρχει άλλη λίστα για το κάθε μεμονωμένο κελί. Με τον τρόπο αυτό επιτυγχάνεται πειραματικά διαπιστωμένη επιτάχυνση στην επίλυση για δεδομένη ακρίβεια. [59]
#### 2.2.3.3 Non-recursive tree walks

Αρκετοί αλγόριθμοι Tree Code στην προσπάθειά τους να βελτιώσουν τους αρχικούς, κατέληξαν στην υιοθέτηση της μη αναδρομικής αναζήτησης πάνω στο δένδρο. Το overhead που εισάγεται από τις αναδρομικές κλήσεις των συναρτήσεων αναζήτησης είναι μεγάλο και ακόμη χειρότερα καλούνται πολλές φορές για κάθε στιγμιότυπο της προσομοίωσης. Η μη αναδρομικές αναζητήσεις μπορούν να υλοποιηθούν εύκολα με τακτοποίηση των κόμβων της δενδρικής δομής δεδομένων σε συνδεδεμένη λίστα σύμφωνα με την περιγραφή που ακολουθεί [57] [58].

Ο κάθε κόμβος περιέχει έναν επιπρόσθετο pointer για τον πρώτο του γονικό κόμβο και για το διπλανό του στο ίδιο επίπεδο ιεραρχίας κόμβο. Εάν κάποιος κόμβος είναι ο τελευταίος σε κάποιο επίπεδο και δεν έχει "διπλανό" τότε γίνεται η ανάθεση του pointer με τρόπο ώστε να δείχνει στον αδελφό του πατρικού κόμβου. Κόμβοι με ένα σωματίδιο και μόνο θα έχουν διπλανούς αλλά όχι γονικούς κόμβους. Τα παραπάνω φαίνονται στην εικόνα 2-9.



Εικόνα 2-9 Η ανάθεση συμπληρωματικών pointers για να υλοποιηθεί non recursice tree walk[ 57]. Με C συμβολίζονται οι κόμβοι και με P τα σωματίδια.

Πρώτος κόμβος της λίστας ορίζεται το αρχικό κελί - ρίζα που περιέχει όλα τα σωματίδια. Η κάθοδος στο δένδρο για την κατασκευή της νέας δομής δεδομένων ξεκινάει στην αρχή της λίστας και συνεχίζει ως τον τρέχοντα κόμβο, ο οποίος προστίθεται στη λίστα. Εάν βρεθεί κόμβος που περιέχει ένα και μοναδικό σωματίδιο τότε ο pointer ορίζεται ώστε να δείχνει στο διπλανό σωματίδιο, ένδειξη ότι κατά τόπους έχουμε φτάσει στο κατώτατο και λεπτομερέστερο επίπεδο ανάλυσης. Με την ολοκλήρωση της ταξινόμησης των κόμβων με τον τρόπο αυτό ή κάθε διαδικασία εύρεσης της δύναμης ανάμεσα σε δύο κόμβους δεν είναι παρά μία ισοδύναμη αναζήτηση στη συνδεδεμένη λίστα. Εάν ένας κόμβος πρέπει να ανοιχθεί τότε με βάση τον pointer η εκτέλεση κινείται ένα επίπεδο κάτω στον πρώτο κόμβο - γόνο του τρέχοντος. Εάν ένας κόμβος μπορεί να χρησιμοποιηθεί τότε με βάση τον pointer υπάρχει άμεση μετάβαση στον επόμενο κόμβο του ίδιου επιπέδου.

Τέλος βασικό πλεονέκτημα της παρούσας δομής λίστας είναι η χρησιμότητά της στην αντίστροφή περίπτωση, κατά την οποία ζητούμενο είναι η κατασκευή του δένδρου με βάση αυτήν. Με εισαγωγή της συνδεδεμένης λίστας στον αρχικό αλγόριθμο BH επιτυγχάνεται σημαντική επιτάχυνση υπολογισμών για δεδομένη τιμή ακρίβειας. [57]

#### 2.2.3.4 Ανάλυση Σφαλμάτων ΒΗ

Λόγω της προσεγγιστικής φύσης του υπολογισμού των δυνάμεων και κατ' επέκτασιν των επιταχύνσεων των σωματιδίων, αυτές αποκλίνουν από τις τιμές που υπολογίζονται με απευθείας επίλυση του προβλήματος με την μέθοδο PP. Ο αριθμός επιδράσεων που αθροίζονται από τον αλγόριθμο για την εύρεση της συνολικής δύναμης στο σωματίδιο p ανήκει στην τάξη O(logN), για μεγάλες τιμές του N.

Θεωρώντας πως η κατανομή μάζας είναι ομοιόμορφη μέσα στο αρχικό κελί - ρίζα, τότε οκταπλασιασμός των σωματιδίων ισοδυναμεί προσεγγιστικά με συνένωση οκτώ όμοιων ριζών [51]. Τα επτά νέα κελιά που προκύπτουν και δεν περιέχουν το p, θα προσφέρουν σχετικά μικρό αριθμό dNt νέων όρων στο συνολικό προσεγγιστικό υπολογισμό δύναμης. Η τιμή που αναμένεται στατιστικά για την απόκλιση του dNt εξαρτάται από το Θ, αλλά όχι από το συνολικό αριθμό σωματιδίων ούτε από το μέγεθος της ρίζας. Για το λόγο αυτό ο χρόνος υπολογισμού αυξάνει σε σταθερά βήματα του dNt, εάν υποτεθεί πως το N αυξάνει σε βήματα πολλαπλασίου του 8, και ο συνολικός χρόνος υπολογισμού της δύναμης παραμένει στην τάξη του O(logN).

Καθώς το δέντρο είναι καλά ορισμένο και η πληροφορία ανανεώνεται σε κάθε βήμα του αλγόριθμου, είναι εφικτή η ανάλυση σφάλματος και ακρίβειας. Κάθε κελί που δεν διαχωρίζεται εισάγει μικρό σφάλμα λόγω των τετραπολικών ή ανωτέρων βαθμών ροπών που εισάγονται από τον υπολογισμό του κέντρου μάζας. Να σημειωθεί πως οι διπολικές ροπές απλοποιούνται κατά την επέκταση γύρω από το κέντρο μάζας. Το μέγεθος του σφάλματος έχει άνω όριο το οποίο βρίσκεται από την εξέταση του "worst case" ενδεχομένου όταν η τετραπολική ροπή μεγιστοποιείται, και υπολογίζεται προσεγγιστικά από περεταίρω ανάλυση RMS κυματώσεων μέσα σε κάθε κελί [63].

#### 2.2.3.5 Διατήρηση Ενέργειας και Συμπεριφορά Διανυσμάτων Ταχύτητας

Όσον αφορά τη διατήρηση ενέργειας του συστήματος κατά την προσομοίωση έχει παρατηρηθεί πως, όπως συμβαίνει και με άλλες τεχνικές, κατά την προσομοίωση με Tree Codes τα συστήματα οδηγούνται σε καταστάσεις στις οποίες παραβιάζεται η αρχή διατήρησης της ενέργειας, όσο και της γραμμικής και γωνιακής ταχύτητας. Το γεγονός αυτό οφείλεται σε μία σειρά από παράγοντες της μεθόδου όπως: τα σφάλματα λόγω στρογγυλοποίησης, τις προσεγγίσεων στον υπολογισμό των δυνάμεων, και τα σφάλματα λόγω αποκοπής παραγόντων. Τα παραπάνω φυσικά ισχύουν σε αντιπαραβολή με τη μέθοδο PP, η οποία θεωρείται πως λόγω της επακριβούς επίλυσης έχει τα πλέον ακριβέστερα αποτελέσματα στα οποία μπορεί να καταλήξει ο ηλεκτρονικός υπολογιστής. Φυσικά αποσιωπάται ουσιαστικά το γεγονός πως ο υπολογιστής έχει τον περιορισμό της ακρίβειας της κάθε μηχανής και επίσης η μοντελοποίηση του διακριτού χρόνου και η επίλυση μέσω στιγμιοτύπων εισάγουν με τη σειρά τους σφάλμα λόγω της διακριτής φύσης της χρονικής σταθεράς. [47]

Συνεχίζοντας το παραπάνω σκεπτικό δεν θα πρέπει να αποτελεί έκπληξη το γεγονός πως οι Tree Codes παραβιάζουν τους νόμους της φυσικής σε περιπτώσεις για Θ διάφορο του μηδενός. Εξετάζοντας την περίπτωση της προσομοίωσης μίας συμπαγούς ομάδας από σωματίδια και ενός απομονωμένου σωματιδίου, καταλήγουμε πως η επιτάχυνση σε κάθε μεμονωμένο σωματίδιο της ομάδας εξαιτίας του μεμονωμένου σωματιδίου θα έχει τη σωστή τιμή, όμως κατά τον υπολογισμό μέσω ανάπτυξης όρων του δυναμικού στο μεμονωμένο σωματίδιο, εξαιτίας των σωματιδίων της ομάδας σαν ομάδα, η επίδραση του κάθε σωματιδίου της ομάδας υπολογίζεται μαζί με τη συνολική επίδραση της ομάδας κάτι που δεν αντιστοιχεί στην επακριβή και πιστή τήρηση του φυσικού μοντέλου. 'Ως αποτέλεσμα, η γωνιακές και γραμμικές ταχύτητες δεν υπολογίζονται επακριβώς. Τα παραπάνω φυσικά αποκτούν βαρύνουσα σημασία σε περιπτώσεις προσομοιώσεων με μοντέλα αστρικής κυρίως φύσης όπου και καταβάλλεται κάθε δυνατή προσπάθεια το μοντέλο να αντιστοιχεί στην πραγματικότητα όσο κατά το δυνατό περισσότερο. [47] Σημαντικό θέμα που ανακύπτει στις προσομοιώσεις με Tree Codes είναι η σχέση μεταξύ της έντασης και του αριθμού των "συγκρούσεων" του συστήματος. Καθώς στη μέθοδο BH οι ομάδες σωματιδίων αντικαθίστανται από ψευδοσωματίδια, στην ουσία η κάθε ομάδα αντικαθίσταται από ένα σύστημα, και η προσομοίωση καταλήγει να προσομοιώνει ένα νέο σύστημα με όσα σωματίδια όσες οι ομάδες του αρχικού συστήματος (πάντα εξετάζοντας από τη σκοπιά του συγκρουσιακού αστρονομικού συστήματος αστέρων). Καθώς ο χρόνος χαλάρωσης tr έχει υπολογιστεί πως αυξάνεται ανάλογα με αύξηση του αριθμού Ν των σωματιδίων του προβλήματος, είναι δυνατόν να υπάρξουν προσομοιώσεις στις οποίες ο χρόνος χαλάρωσης θα απέχει αρκετά από τον πραγματικό. [56]

## 2.3 Σχολιασμός και Παρατηρήσεις στους Tree Codes

Οι περισσότεροι ιεραρχικοί κώδικες για την προσομοίωση του προβλήματος N-σωμάτων και συγκεκριμένα των Jernigan και Porter αλλά και ο εν λόγω, των Barnes Hut, κάνουν χρήση δένδρων ως δομών δεδομένων για την υλοποίηση της εκάστοτε μεθόδου, πρέπει όμως να τονιστεί πως το δένδρο δεν είναι στην ουσία παράγοντας βαρύνουσας σημασίας για τη μέθοδο. Αυτό που απαιτείται είναι η ύπαρξη μίας δομής που θα επιτρέπει την ιεραρχική εκτέλεση των βημάτων και την ιεραρχική μετάδοση πληροφορίας από τα κελιά-παιδιά προς το κελί ρίζα, και υπάρχουν και άλλες τεχνικές, όπως για παράδειγμα ανάλυση με γράφους και σύνδεση μέσω γράφων των εσωτερικών κόμβων για πιο αποδοτική επικοινωνία μεταξύ των εσωτερικών ομάδων (clusters) σωματιδίων. [63]

#### 2.3.1 Σύγκριση των Μεθόδων BH - AJP

Συγκρίνοντας τις δύο εκδοχές, των Jernigan και Porter και Barnes και Hut, παρατηρούμε πως παρά την προφανή εξωτερική ομοιότητα, της χρήσης δένδρων και στις δύο περιπτώσεις, με τα σωματίδια στα φύλλα των δένδρων και τους εσωτερικούς κόμβους να αποτελούν δομές με ψευδοσωματιδιακές συμπεριφορές (κατά προσέγγιση), εν τούτοις υπάρχουν σημαντικές διαφορές που, παρά το γεγονός πως δεν επιτρέπουν την ανάδειξη εμφανώς υπερέχουσας μεθόδου μεταξύ των δύο, καθιστούν την καθεμία αποδοτικότερη για διαφορετικής φύσης προβλήματα.

Συγκεκριμένα, στη μέθοδο BH το δένδρο είναι πιο απλό και λιτό σε δομή και η ανάλυση σφαλμάτων καθίσταται απλούστερη, όπως έχει αναλυθεί λεπτομερώς στην προηγούμενη παράγραφο. Επίσης η κατασκευή του δένδρου είναι αποδοτικότερη καθώς το δένδρο BH κατασκευάζεται με τεχνικές δυαδικής αριθμητικής (στη δεύτερη, βελτιωμένη εκδοχή του αλγόριθμου που αναλύεται στην παράγραφο 2.3.1).

Η μέθοδος JP εμφανίζει το βασικό πλεονέκτημα της διατήρησης της χωρικής σχέσης των ισοδύναμων κόμβων που χρησιμοποιεί με τις θέσεις των αρχικών σωματιδίων, και την αρχική δομή σε clusters, κάτι που δεν εξασφαλίζεται από τη μέθοδο BH για όλες τις περιπτώσεις προσομοιώσεων. Για παράδειγμα εάν έχουμε clusters με πολλά σε αριθμό κοντινά σωματίδια που βρίσκονται σε μικρή έκταση, είναι δυνατόν κοντινά σωματίδια, λόγω του χωρισμού που γίνεται στα ανώτερα επίπεδα, στο κατώτατο επίπεδο του δένδρου να απέχουν μέσα στη δομή δεδομένων πολύ μεγάλη απόσταση. Ομοίως θα απέχουν και στην ισοδύναμη μάζα για τους υπολογισμούς, παρά το γεγονός ότι στον φυσικό χώρο βρίσκονται πολύ κοντά μεταξύ τους.

Το clustering που κάνει η μέθοδος JP και ο χωρισμός σε κελιά της μεθόδου BH εμφανίζουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα, ανάλογα με την περίσταση. Είναι δυνατόν σωματίδια να ξεπεράσουν τα όρια των κελιών στη μέθοδο BH, και να ξεπεράσουν τα όρια και των πατρικών κελιών, καθιστώντας την ανακατασκευή του δένδρου αναγκαία για την εξασφάλιση της σωστής λύσης του προβλήματος. Στη μέθοδο JP εάν οι ομάδες σωματιδίων εξελιχθούν σε ανομοιογενείς ή λανθασμένους clusters είναι επίσης αναγκαία η ανακατασκευή του δένδρου για τη σωστή επίλυση. Συνοψίζοντας η έρευνα έχει καταλήξει πως η μέθοδος BH είναι προτιμότερη για προβλήματα γενικής φύσεως ή γενικής εξέτασης συστημάτων, ενώ η μέθοδος JP φαίνεται να παρέχει ακριβέστερα αποτελέσματα σε προβλήματα που εκτός των συγκεντρωμένων σωματιδίων περιλαμβάνουν και ανάμεικτα, μεμονωμένα, σωματίδια ή αντίστοιχα πολλούς clusters διαφορετικών μεγεθών. Και οι δύο υλοποιήσεις προσομοίωσης με χρήση δένδρου είναι ταχύτατες σε σχέση με προηγούμενες μεθόδους εξαιτίας της προσεγγιστικής φύσης του υπολογισμού των δυνάμεων. [25]

Η απουσία πλεγμάτων, δικτύων και προτιμώμενων γεωμετριών καθιστά πολύ πιο ευέλικτους τους κώδικες και διευρύνει τους ορίζοντες χρήσης τους σε πληθώρα προβλημάτων απροσπέλαστων από κάποιες από τις προηγούμενες μεθόδους, που εξετάστηκαν στο Κεφάλαιο 1.

Τέλος προσεκτική επιλογή του παράγοντα εξομάλυνσης στη μέθοδο BH ή και στη μέθοδο JP επιτρέπει ουσιαστικά αύξηση της λεπτομέρειας του δυναμικού εύρους στο σημείο που είναι επιθυμητό για την εκάστοτε προσομοίωση. Καθώς δεν υπάρχουν οι επιπλοκές της χρήσης μετασχηματισμού Fourier, οι Tree Codes μπορούν να χρησιμοποιηθούν για ευρύ φάσμα προσομοιώσεων, ακόμα και σε ανομοιογενείς κατανομές σωματιδίων, σε προβλήματα με ή χωρίς μοντελοποίηση συγκρούσεων. Βέβαια η απόδοσή τους τον καιρό που η έρευνα σε αυτούς ήταν πρόσφατη ήταν ~10 φορές χειρότερη από ότι οι μέθοδοι που έκαναν χρήση FFT, και επιπρόσθετα εμπειρικά προέκυψε το συμπέρασμα πως οι Tree Codes είναι προτιμότεροι κατά τις προσομοιώσεις συμμετρικών συστημάτων. [52]

### 2.4 Η Βελτιωμένη Έκδοση του Tree Code BH

Η μέθοδος ΒΗ σε ύστερο χρόνο από την αρχική της δημοσίευση εμπλουτίστηκε σε μία προσπάθεια αποδοτικότερης προσέγγισης. Ακολουθεί σύντομη περιγραφή της για λόγους πληρότητας και αντιπαραβολής με την αρχική μέθοδο. [52]

Η δομή του δένδρου περιγράφεται ως ένα σύνολο κελιών που αντιστοιχούν στους εσωτερικούς κόμβους του δένδρου και ένα σύνολο από σωματίδια τα οποία αντιστοιχούν στα φύλλα στο τέλος του δένδρου. Το κάθε κελί έχει κατά τα γνωστά οκτώ γόνους, που μπορεί να είναι με τη σειρά τους κελιά ή και μεμονωμένα σωματίδια, ή συνδυασμός των δύο. Τα κελιά του δένδρου (όπως είχε άλλωστε προταθεί [51]) περιέχουν και πάλι pointers που συνδέονται μέσω γράφου, ο οποίος είναι κατευθυντικός και μπορεί να ακολουθηθεί από τη ρίζα του δένδρου έως τα φύλλα. Τα σωματίδια αλλά και τα κελιά αντιμετωπίζονται με τον ίδιο τρόπο, και η αλγοριθμική απεικόνιση του καθενός περιλαμβάνει τόσο μάζα όσο και διάνυσμα θέσης. Εάν είναι επιθυμητή η επίλυση με τις τετραπολικές ροπές να συμπεριλαμβάνονται , υπάρχει πρόβλεψη ώστε αυτές περιέχονται στα κελιά.

Σε κάθε χρονικό βήμα της προσομοίωσης προτού να υπολογιστούν οι δυνάμεις, το δένδρο κατασκευάζεται εξαρχής με βάση τις συντεταγμένες των σωματιδίων. Όπως και στον αρχικό αλγόριθμος η προσομοίωση εκκινεί από ένα άδειο χώρο και τα σωματίδια εισάγονται διαδοχικά στο δένδρο. Διαφοροποίηση της βελτιωμένης μεθόδου αποτελεί η εισαγωγή των σωματιδίων με βάση τον υπολογισμό κλίμακας των συντεταγμένων (x, y, z) στο διάστημα [0,1) και θεωρώντας δυαδική απεικόνιση των συντεταγμένων [52] ώς εξής:  $x = 0.x_1x_2x_3...x_n$ , όπου το  $x_i$  είναι 0 ή 1, και αντίστοιχα για τις συντεταγμένες *y* και *z*.

Τα υψηλότερα bit της κάθε μεταβλητής σχηματίζουν μία τριάδα η οποία ορίζει σε ποιο από τα οκτώ γονικά κελιά του αρχικού κελιού ρίζα θα πάει το σωματίδιο. Εάν το κελί είναι κατειλημμένο τότε σύμφωνα με τα βήματα του αλγόριθμου, η εκτέλεση κατεβαίνει ένα επίπεδο, εξετάζοντας τα τρία bit  $x_2$ ,  $y_2$  και  $z_2$ . Εάν υπάρχει διαθέσιμο κελί (δηλαδή άδειο χωρίς σωματίδιο), τότε το σωματίδιο εισάγεται σε αυτό, ενώ σε άλλη περίπτωση ακολουθώντας τη νοητή διαδρομή μέσω των bit των μεταβλητών εν τέλει το σωματίδιο καταλήγει στην κατάλληλη θέση

κατεβαίνοντας επίπεδα ανάλογα στα  $x_i$ ,  $y_i$  και  $z_i$ . Ο αλγόριθμος εξετάζει λοιπόν ολόκληρο το δένδρο και το επεκτείνει ανάλογα, κάθε φορά που απαιτείται επέκταση.

Μετά την κατασκευή του δένδρου υπολογίζονται οι τιμές των μεταβλητών που είναι απαραίτητες για τους προσεγγιστικούς υπολογισμούς των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματιδίων. Οι μεταβλητές αυτές είναι η μάζα, τα διανύσματα θέσης των κέντρων μάζας και τα βέλτιστα αναπτύγματα τετραπολικών ροπών για το κάθε κελί.

Σε σχέση με την αρχική εκδοχή του αλγόριθμου υπάρχει πρόβλεψη για σωματίδια τα οποία πρέπει να τοποθετηθούν εκτός του κελιού ρίζα. Σε μία τέτοια περίπτωση, δημιουργείται νέο κελί ρίζα το οποίο περιλαμβάνει το προηγούμενο με μία αντίστροφη διαδικασία διαχωρισμού σε oct tree, και το έως εκείνη τη στιγμή δένδρο γίνεται πλέον ένα υποδένδρο στο νέο κελί ρίζα [52].

Η αρχική αναδρομική διαδικασία εξέτασης του δένδρου για την εισαγωγή νέων σωματιδίων έχει αντικατασταθεί με επαναληπτική διαδικασία με το τέχνασμα των δυαδικών συντεταγμένων, και κατά την κωδικοποίηση των ιεραρχικών σχέσεων, τα κελιά τοποθετούνται σε λίστα με βάση αυξανόμενο μέγεθος κελιού. Με τον τρόπο αυτό όσον αφορά τις μεταβλητές που απαιτούνται για τους υπολογισμούς, και καθώς ο υπολογισμός προχωράει με βάση τη σειρά των κελιών στη λίστα, η πληροφορία των χαμηλότερων επιπέδων είναι διαθέσιμη στα κελιά των αμέσως ανώτερων επιπέδων σειριακά. Παρόμοιες μέθοδοι για την εξέταση του δένδρου έχουν προταθεί και από άλλους ερευνητές είτε με χρήση διανυσμάτων είτε με τη χρήση πινάκων, αναλόγως και με την αρχιτεκτονική στην οποία απευθύνεται ο τελικός κώδικας που προκύπτει [55][60].

Εναλλακτικά μπορεί το δένδρο να κατασκευαστεί αφού πρώτα γίνει ταξινόμηση (sorting) των σωματιδίων με βάση τα bits των συντεταγμένων τους όπως για παράδειγμα:

$$(0.x_1x_2x_3..., 0.y_1y_2y_{3...0}, z_1z_2z_3...) \rightarrow 0.x_1y_1z_1x_2y_2z_2x_3y_3z_3...,$$

με το επόμενο βήμα να είναι σύμφωνα με τα παραπάνω η ομαδοποίηση των σωματιδίων σε κελιά από κάτω προς τα επάνω.

Για να προσεγγιστεί η τιμή της δύναμης σε ένα σωματίδιο *p* ο αλγόριθμος εκτελεί αναδρομικό πέρασμα στη δομή του δένδρου ξεκινώντας από το αρχικό κελί ρίζα και εξερευνώντας διαφορετικές περιοχές του δένδρου σε διαφορετικά επίπεδα ευκρίνειας. Εάν υποτεθεί λοιπόν πως ο αλγόριθμος εξετάζει τον κόμβο *q* ενός δένδρου είναι δυνατόν να υπάρξουν τρία ενδεχόμενα:

- 1. εάν ο κόμβος q είναι σωματίδιο υπολογίζεται η αλληλεπίδραση μεταξύ p και q
- 2. εάν ο κόμβος q είναι κελί για το οποίο η συνθήκη canaccept ( $q, p; \theta$ ) είναι αληθής υπολογίζεται η αλληλεπίδραση μεταξύ p και q, λαμβάνοντας υπόψιν την διόρθωση της τετραπολικής ροπής του κόμβου q
- εάν ο κόμβος q είναι κόμβος για τον οποίο η συνάρτηση δεν είναι αληθής, τότε δεν γίνεται υπολογισμός αλληλεπίδρασης, αλλά εξετάζονται τα υποκελία του q, με βάση τις παραπάνω περιπτώσεις.

Η εκτιμήτρια συνθήκη canaccept ( q, p; θ) είναι η υλοποίηση του κριτηρίου ανοίγματος βρόγχου που αναφέρθηκε στην παράγραφο 2.2.1.4) και είναι ένας γρήγορος τρόπος ώστε να είναι εκ των προτέρων γνωστό το κατά πόσον τα σωματίδ p ιακ q αι είναι καλά διαχωρισμένα και ο υπολογισμός της δύναμης μπορεί να γίνει με μια και μοναδική προσέγγιση. Ουσιαστικά στα πλαίσια της εκτιμήτριας συνθήκης εξετάζεται η παρακάτω εκδοχή του κριτηρίου ως μία απλή γεωμετρική συνθήκη που πρέπει να ισχύει: εάν  $d_{qp}$ είναι η απόσταση ανάμεσα στα κέντρα μάζας των p και q και  $l_q$  η πλευρά του κελιού q, τότε η canaccept (q, p; θ) =  $l_q < \theta \cdot d_{pq}$ ορίζει το κατά πόσο πρέπει ή όχι να υπάρξει άνοιγμα του βρόγχου.

Τέλος να σημειωθεί πως στη βιβλιογραφία έχουν προταθεί πολλές εναλλακτικές λογικές και τεχνικές έκφρασης των διανυσμάτων θέσης των σωματιδίων και των κόμβων [55][59][60].

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

# Περίληψη Κεφαλαίου 3

Εστίαση στην αρχική, δισδιάστατη, εκδοχή της μεθόδου FMM και αναλυτική εξέταση των θεωρημάτων και λημμάτων που την καθιστούν δυνατή. Αλγοριθμική περιγραφή και ανάλυση πολυπλοκότητας. Περιγραφή της λογικής της εισαγωγής πινάκων στη μέθοδο FMM, βελτίωση της μεθόδου Barnes-Hut, με παρόμοιο τρόπο με εισαγωγή πινάκων, και σύγκριση μεταξύ των δύο. Ανάλυση της εκδοχής της μεθόδου "FMM με Πίνακες Περιστροφής", για τρεις διαστάσεις, και εξέταση των κατευθύνσεων που έλαβαν οι προσπάθειες βελτιστοποίησής της, όσον αφορά την εισαγωγή adaptive ιεραρχίας επίλυσης και βελτίωσης του μαθηματικού της υποβάθρου. Αναφορά σε αλγόριθμους γειτονικών επιστημονικών πεδίων που κάνουν χρήση παραλλαγών της μεθόδου FMM σε τρεις διαστάσεις, για να εκτελέσουν τάχιστα υπολογισμούς δυναμικών και πεδίων.

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

# Η ΜΕΘΟΔΟΣ FAST MULTIPOLE

## 3.1 Γρήγορος Αλγόριθμος για Σωματιδιακές Προσομοιώσεις

#### 3.1.1 Εισαγωγή

Το 1987 οι Greengard και Rokhlin δημοσίευσαν την ερευνητική τους εργασία, η οποία περιέγραφε μία νέα μέθοδο προσομοίωσης του προβλήματος Ν-σωμάτων την οποία τιτλοφόρησαν "Γρήγορος Αλγόριθμος για Σωματιδιακές Προσομοιώσεις" [64]. Η μέθοδος που πρότειναν σύντομα έγινε ευρέως γνωστή με το όνομα "Fast Multipole Method", λόγω των πολυπολικών αναπτυγμάτων που χρησιμοποιεί κατά το στάδιο των υπολογισμών και ήταν τέτοια η σημασία της, ώστε να ανακηρυχθεί ένας από τους πλέον σημαντικούς αλγόριθμους του περασμένου αιώνα [65]. Για το υπόλοιπο της παρούσας διπλωματικής εργασίας, η μέθοδος στο εξής θα αποκαλείται για συντομία με τα αρχικά της, απλά "FMM".

Η μέθοδος στοχεύει στην εκτίμηση του πεδίου δυναμικού και δυνάμεων ενός προβλήματος Ν-σωμάτων, στο οποίο το δυναμικό ή η δύναμη σε κάθε σωματίδιο, είναι αποτέλεσμα υπέρθεσης σημειακών αλληλεπιδράσεων, που περιλαμβάνουν το σωματίδιο ενδιαφέροντος και άλλα, σε ζεύγη σωματίδια. Τα παραπάνω σύμφωνα με όσα έχουν αναλυθεί στην εισαγωγή της παρούσας διπλωματικής εργασίας περί συγκρούσεων στην παράγραφο 1.4.3. Το ενδιαφέρον της αρχικής εκδοχής της μεθόδου ήταν στραμμένο αποκλειστικά σε πεδία στα οποία το δυναμικό μπορούσε να εκφραστεί στη μορφή:

$$\Phi = \Phi_{far} + (\Phi_{near} + \Phi_{external}) \quad (3.1)$$

στην οποία μορφή τα δυναμικά είναι αντίστοιχα:  $\Phi_{near}$ , ταχέως μειούμενο, όπως για παράδειγμα πεδίο δυνάμεων Van Der Waals,  $\Phi_{external}$ , που είναι αποτέλεσμα εξωτερικής επίδρασης από πεδίο ανεξάρτητο από την κατανομή σωματιδίων του προβλήματος, τέτοιο ώστε να επηρεάζει όλα τα σωματίδια με τον ίδιο τρόπο, και τέλος  $\Phi_{far}$ , το δυναμικό ενδιαφέροντος, δηλαδή δυναμικό Coulomb ή βαρυτικό δυναμικό, και υπακούει στο νόμο αντιστρόφου τετραγώνου.

Σε μία προσομοίωση συστήματος αποτελούμενου από N σωματίδια, ο υπολογισμός του  $\Phi_{near}$  εμφανίζει πολυπλοκότητα O(N), όπως και ο υπολογισμός του  $\Phi_{external}$ . Βέβαια, η εκτίμηση του  $\Phi_{far}$ , λόγω του αντιστρόφου τετραγώνου που περιλαμβάνεται στον υπολογισμό του, αλλά και της υποχρεωτικής εξέτασης όλων των σωματιδίων σε ζεύγη και του αθροίσματος όλων των ζευγών των αλληλεπιδράσεων, σύμφωνα με την ανάλυση στην εισαγωγή της παρούσας διπλωματικής εργασίας θα έχει πολυπλοκότητα που ανήκει στην τάξη  $O(N^2)$ .

Σκοπός της μεθόδου είναι καταστεί δυνατή η ταχεία εκτίμηση των δυνάμεων και δυναμικών, που σε απευθείας υπολογισμό θα είχαν πολυπλοκότητα  $O(N^2)$ , με μειωμένη πολυπλοκότητα O(N) [64]. Η ανάπτυξη και εξέλιξη της μεθόδου οφείλεται σε μεγάλο βαθμό στα μειονεκτήματα που εμφάνιζαν οι έως τότε διαθέσιμες μέθοδοι. [27] [64]

#### 3.1.2 Ανακεφαλαίωση Μαθηματικών Εννοιών και Λημμάτων

Για λόγους πληρότητας, καθώς οι απαιτούμενες για την κατανόηση της μεθόδου έννοιες εμφανίζουν άνω του μέσου δυσκολία, κρίνεται σκόπιμο να μην αναφερθούν ως απλή βιβλιογραφική παραπομπή, και να γίνει παρουσίασή τους στο σημείο αυτό και όχι σε παράρτημα, για διευκόλυνση του αναγνώστη. Οι αποδείξεις των θεωρημάτων θεωρείται πως ξεφεύγουν από τα

πλαίσια ενδιαφέροντος της παρούσας εργασίας και θα πρέπει να αναζητηθούν από τον αναγνώστη.

Η αναφορά βασίζεται στην παρουσίαση της μαθηματικής ανάλυσης όπως αυτή γίνεται στην ερευνητική εργασία των Greengard και Rokhlin, και από τον γράφοντα γίνεται προσπάθεια για την κατά το δυνατό αναλυτικότερη και επεζηγηματικότερη παρουσίαση των εννοιών.

Θεωρώντας πως ένα σημειακό σωματίδιο με μοναδιαίο φορτίο βρίσκεται στο σημείο  $(x_0, y_0) = x_0 \in \mathbb{R}^2$ , τότε για κάθε x = (x, y) με  $x \in \mathbb{R}^2$  και  $x \neq x_0$  το ηλεκτροστατικό δυναμικό και το ηλεκτροστατικό πεδίο που αναπτύσσονται εξαιτίας αυτού του φορτίου, περιγράφονται αντίστοιχα από τις εξισώσεις:

$$\Phi_{X_0}(x, y) = -\log(||x - x_0||) \quad (3.2)$$
  
Kal  $E_{X_0}(x, y) = \frac{(x - x_0)}{||x - x_0||^2} \quad (3.3).$ 

Η  $\Phi_{X_0}$ είναι αρμονική για κάθε περιοχή του χώρου, εφόσον αυτή δεν περιέχει το  $X_0$ . Επιπρόσθετα για κάθε αρμονική συνάρτηση u είναι γνωστό από τη μιγαδική ανάλυση, πως υπάρχει αναλυτική συνάρτηση  $w: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ , τέτοια ώστε:  $u(x, y) = \Re(w(x, y))$ , με την w να είναι μοναδική, με εξαίρεση την ύπαρξη τυχόν προσθετικής σταθεράς. Για την υπόλοιπη ανάλυση θα θεωρηθούν ισοδύναμες οι παρακάτω μορφές μιγαδικής έκφρασης:  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  και  $x + iy = z \in \mathbb{C}$ . Επίσης η αναλυτική συνάρτηση log(z) θα αναφέρεται ως "δυναμικό λόγω φορτίου", και οι αναλυτικές συναρτήσεις θα αποκαλούνται στο εξής "δυναμικά".

Λήμμα 10 : Εάν η αναλυτική συνάρτηση  $u(x, y) = \Re(w(x, y))$  περιγράφει το δυναμικό ενός ηλεκτροστατικού πεδίου στο σημείο (x, y) το προκύπτων πεδίο δυνάμεων στο σημείο θα είναι ίσο με:

$$\nabla u = (u_x, u_y) = (\Re(w') - \Im(w')) \quad (3.4),$$

όπου με w'συμβολίζεται η παράγωγος της w. Το λήμμα αυτό προκύπτει απευθείας από τις εξισώσεις Cauchy-Riemann [66].

 $\Lambda \dot{\eta} \mu \mu a$  20: Εάν σημειακό φορτίο qβρίσκεται στο σημείο  $z_0$ , τότε για κάθε zμε  $z>z_0$ , θα ισχύει:

$$\Phi_{Z_0}(z) = q \log(z - z_0) = q \left(\log(z) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \left(\frac{z_0}{z}\right)^k\right) \quad (3.5).$$

Το λήμμα αυτό χρησιμοποιείται για να αποκτηθεί το πολυπολικό ανάπτυγμα εξαιτίας *m* φορτίων.

Θεώρημα Πολυπολικής Ανάπτυζης: Θεωρώντας πως m φορτία με τιμές φορτίου  $q_i, i = 1, ..., m$  βρίσκονται στις θέσεις  $z_i, i = 1, ..., m$ , για τις οποίες  $|z_i| < r$ , για κάθε  $z \in \mathbb{C}$ : |z| > r το δυναμικό  $\Phi(z)$  θα δίνεται από τη σχέση:

$$\Phi(z) = Q \log(z) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_k}{z_k} \quad (3.6) \text{ órov} \quad Q = \sum_{i=1}^m q_i, a_k = \sum_{i=1}^m \frac{-q_i z_i^k}{k} \quad (3.7).$$

Θα ισχύει επίσης για κάθε  $p \ge 1$  η σχέση:

$$|\Phi(z) - Q\log(z) - \sum_{k=1}^{p} \frac{a_{k}}{z^{k}}| \le a \left|\frac{r}{z}\right|^{p+1}$$
(3.8)  
$$\delta\pi o c = \left|\frac{z}{r}\right|, A = \sum_{i=1}^{m} |q_{i}| \kappa \alpha a = \frac{A}{1 - \left|\frac{r}{z}\right|}$$
(3.9).

Από την ανάλυση προκύπτει ο τύπος:  $|\Phi(z) - Qlog(z) - \sum_{k=1}^{p} \frac{a_k}{z^k}| = |\sum_{k=p+1}^{\infty} \frac{a_k}{z^k}|$  (3.10), οποίος χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό του άνω ορίου του σφάλματος της μεθόδου.

Λήμμα 30 : Το λήμμα αυτό επιτρέπει τη μετατόπιση του κέντρου ενός πολυπολικού αναπτύγματος. Χρησιμοποιείται όταν το ανάπτυγμα είναι γνωστό και υπολογισμένο ώστε αντί να υπολογιστεί εξαρχής το δυναμικό σε νέο σημείο του χώρου, να αρκεί μία απλή μετατόπιση για να ληφθεί η νέα έκφραση.

Εάν η έκφραση  $\Phi(z) = \alpha_0 \log(z-z_0) + \sum_{k=1}^p \frac{a_k}{(z-z_0)^k}$  (3.11) είναι ένα πολυπολικό

ανάπτυγμα δυναμικού εξαιτίας μίας ομάδας *m* φορτίων, με τιμές φορτίου  $q_i$ , i = 1, ..., m, και με όλα τα φορτία να βρίσκονται εντός κύκλου *D* ακτίνας *R* με κέντρο στο σημείο  $z_0$ , τότε για το σημείο *z* έξω από τον κύκλο  $D_i$  ακτίνας  $(R + |z_0|)$ , με το κέντρο του  $D_i$  να είναι το σημείο O(0,0), το δυναμικό  $\Phi(z)$  θα εκφράζεται ισοδύναμα από τη σχέση:

$$\Phi(z) = \alpha_0 \log(z - z_0) + \sum_{l=1}^p \frac{b_l}{(z)^l} \quad (3.12)$$
  

$$\delta \pi o \omega \quad b_l = \left(\sum_{k=1}^l a_k z_0^{(l-k)} \left(\frac{l-1}{k-1}\right)\right) - \frac{a_0 z_0^l}{0} \quad (3.13)$$

με  $\left(\frac{l}{k}\right)$  να είναι διωνυμικοί συντελεστές.

Θα ισχύει επίσης για κάθε  $p \ge 1$  η σχέση:

$$|\Phi(z) - a_0 \log(z) - \sum_{l=1}^p \frac{b_l}{z^l}| \le \left(\frac{A}{\left(1 - \left|\frac{|z_0| + R}{z}\right|\right)}\right) \left|\frac{|z_0| + R}{z}\right|^{(p+1)}$$
(3.14),

με το Α να ορίζεται στην εξίσωση (3.9).

Εύκολα παρατηρείται πως, με βάση την εξίσωση (3.11), όταν οι τιμές  $\alpha_i$ , i = 1, ..., m για ανάπτυγμα γύρω από το σημείο  $z_0$  έχουν υπολογιστεί, αποκτούμε τις επακριβείς τιμές των  $b_i$ , i = 1, ..., m με αντικατάσταση στην (3.13). Καθώς το ανάπτυγμά έχει ήδη υποστεί αποκοπή των ανώτερης τάξης όρων, με εξέταση των εξισώσεων γίνεται κατανοητό πως η μετατόπιση δεν προκαλεί περεταίρω απώλεια ακρίβειας.

 $\Lambda$ ήμμα 40: Αν υποτεθεί πως m σημειακά φορτία με τιμές φορτίου  $q_i$ , i = 1,..., m βρίσκονται μέσα σε κύκλο  $D_1$ , ακτίνας R, με κέντρο στο σημείο  $z_0$ :  $|z_0| > (c+1)R$ , c > 1 τότε το αντίστοιχο πολυπολικό ανάπτυγμα της σχέσης (3.11) συγκλίνει μέσα σε κύκλο  $D_2$  ακτίνας  $R_2$ , με

κέντρο του  $D_2$  την αρχή των αξόνων O(0,0). Εντός του κύκλου  $D_2$  το δυναμικό που προκαλείται από τα σημειακά φορτία είναι ίσο με :

$$\Phi(z) = \sum_{l=0}^{\infty} b_l z^l$$
 (3.15),

με τις τιμές των συντελεστών να προκύπτουν από τις σχέσεις:

$$b_{l} = \left(\frac{1}{z_{0}^{l}}\sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_{k}}{z_{0}^{k}} \binom{l+k-1}{k-1} (-1)^{k}\right) - \frac{a_{0}}{l z_{0}^{l}}, \ \gamma \alpha \ l \ge 1 \quad (3.16)$$
  
Kal  $b_{0} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_{k}}{z_{0}^{k}} (-1)^{k} + a_{0} \log(-z_{0}) \quad (3.17).$ 

Το άνω όριο του σφάλματος αποκοπής των υψηλότερης τάξης πολυπολικών όρων υπολογίζεται για  $p \ge (max 2, \frac{2c}{(c-1)})$  από τη σχέση:

$$\left| \Phi(z) - \sum_{l=0}^{p} b_{l} z^{l} \right| < \frac{A(4e(p+c)(c+1) + c^{2})}{c} (c-1) \left(\frac{1}{c}\right)^{p+1}$$
(3.18),

στην οποία ομοίως με τα παραπάνω ο όρος Α ορίζεται από την εξίσωση (3.9).

Λήμμα 50: Το λήμμα αυτό προκύπτει ως απευθείας αποτέλεσμα του θεωρήματος MacLaurin, και περιγράφει μια επακριβή διαδικασία "μετάφρασης" ενός τοπικού αναπτύγματος, χωρίς επιπρόσθετο σφάλμα και με πεπερασμένο αριθμό όρων:

Για οποιουσδήποτε μιγαδικούς  $z_0$ , z και όρους  $\{a_k\}$ , k = 0, 1, ..., n, ισχύει :

$$\sum_{k=0}^{n} a_{k} (z-z_{0})^{k} = \sum_{l=0}^{n} \left( \sum_{k=1}^{n} a_{k} \binom{k}{l} (-z_{0})^{k-1} \right) z^{l} \quad (3.19)$$

#### 3.1.3 Γενικά Στοιχεία για την Αρχική Εκδοχή της Μεθόδου FMM

Η στρατηγική της μεθόδου μοιάζει σε κάποιο βαθμό με αυτή των μεθόδων P<sup>3</sup>M που αναλύθηκαν στο Κεφάλαιο 1, δηλαδή μετά από ένα αρχικό clustering των σωματιδίων της προσομοίωσης και τον χωρισμό τους σε ομάδες, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στις ομάδες που βρίσκονται σε ικανοποιητικά μεγάλες αποστάσεις υπολογίζονται με ανάλυση σε πολυπολικά αναπτύγματα, ενώ για σωματίδια που βρίσκονται σε κοντινές μεταξύ τους αποστάσεις ο υπολογισμός γίνεται απευθείας μέσω της (3.2). Για λόγους απλότητας η περιγραφή της μεθόδου γίνεται για πρόβλημα δύο διαστάσεων, με τα όσα αναλύονται να μην ισχύουν για τρισδιάστατες προσομοιώσεις, και στο σημείο αυτό πρέπει να σημειωθεί πως το αρχικό paper των Greengard και Rokhlin και ο κώδικας που το συνόδευε στόχευαν αποκλειστικά σε δισδιάστατα προβλήματα.

Στην εικόνα 3-1 απεικονίζεται ο χώρος επίλυσης προβλημάτων της μεθόδου FMM: πρόκειται για ένα τετράγωνο με μοναδιαίο μήκος πλευράς, που περιέχει τα Ν σωματίδια που προσομοιώνονται, και στην εικόνα απεικονίζεται γραμμοσκιασμένο. Στην εικόνα φαίνονται επίσης τα οκτώ άμεσα γειτονικά τετράγωνα του χώρου του προβλήματος, τα οποία θα εξεταστούν στα πλαίσια περιγραφής των οριακών συνθηκών του προβλήματος στην παράγραφο 3.1.6. Αρχικά περιγράφεται η μέθοδος υποθέτοντας επίλυση σε κενό ύλης χώρο στον οποίο οι οριακές συνθήκες δεν απασχολούν.



Εικόνα 3-1: Ο χώρος επίλυσης της μεθόδου FMM

Η μέθοδος εκκινεί από την επιλογή ακρίβειας ε, για την οποία ζητούμενη ακρίβεια επιλέγεται ο όρος  $p \approx \log_2(\varepsilon)$  και καθορίζεται ρητά πως δεν θα γίνει υπολογισμός αλληλεπιδράσεων μεταξύ ομάδων σωματιδίων, παρά μόνο εάν οι ομάδες είναι "καλά διαχωρισμένες" μεταξύ τους. Η συνθήκη διαχωρισμού αυτή χρειάζεται για τον υπολογισμό των άνω ορίων σφάλματος της μεθόδου, όπως αυτά αναλύθηκαν στην παράγραφο 3.1.2 και υπολογίζονται από τις εξισώσεις (3.8), (3.14), (3.18), με εφαρμογή κατά την επίλυση για c = 2, προκειμένου το σφάλμα να περιορίζεται από το όριο του  $2^{-p}$  και να είναι δυνατό να επιτευχθεί η ζητούμενη ακρίβεια.

Για να μπορεί να επιβληθεί η συνθήκη, εισάγεται μία ιεραρχία από πλέγματα που διαχωρίζουν το τετράγωνο επίλυσης του προβλήματος σε όμοιους, ολοένα και μικρότερους τετράγωνους υποχώρους. Το επίπεδο στο οποίο εκκινεί η επίλυση και περιλαμβάνει όλο τον αρχικό χώρο του προβλήματος, ονομάζεται επίπεδο 0 (μηδέν) και με βάση αυτό, το κάθε επόμενο επίπεδο αποτελεί διαχωρισμό του προηγούμενου σε 4 (τέσσερα) ίσα τετράγωνα, καταλήγοντας στο επίπεδο x να υπάρχουν 4<sup>x</sup> διακριτοί τετράγωνοι υποχώροι. Στην ιεραρχία των επιπέδων επιβάλλεται, μετά την κατασκευή, ιεραρχία δένδρου, σύμφωνα με την οποία, εάν υποτεθεί πως ένα τετράγωνο έστω *ibox* ανήκει στο επίπεδο *l*, τα τέσσερα τετράγωνα ( ή και "κουτιά" σύμφωνα με τους ερευνητές) [64] του επιπέδων *l* + *l* που προκύπτουν με άμεσο διαχωρισμό του, καλούνται στο εξής "παιδιά ή γόνοι" του.

Οι κύριοι όροι που χρησιμοποιούνται για τους υπολογισμούς της μεθόδου είναι οι εξής:

- 1. ως  $\Phi_{l,i}$  σημειώνεται το πολυπολικό ανάπτυγμα έως p όρων (γύρω από το κέντρο ενός τετραγώνου) του πεδίου δυναμικού από τα σωματίδια που βρίσκονται μέσα στο κουτί i το οποίο ανήκει στο επίπεδο l.
- 2. ως  $\Psi_{l,i}$  σημειώνεται το πολυπολικό ανάπτυγμα έως p όρων (γύρω από το κέντρο ενός τετραγώνου) του πεδίου δυναμικού από τα σωματίδια που βρίσκονται έξω από το κουτί i το οποίο ανήκει στο επίπεδο l.
- 3. ως  $\Psi_{I,i}$  σημειώνεται το πολυπολικό ανάπτυγμα έως *p* όρων (γύρω από το κέντρο ενός τετραγώνου) του πεδίου δυναμικού από τα σωματίδια που βρίσκονται έξω από το κουτί το οποίο είναι πατρικό του, *i* και έξω από όλα τα κουτιά που είναι άμεσα γειτονικά του πατρικού του *i*.
- 4. λίστα αλληλεπίδρασης (interaction list) : για κουτί i στο επίπεδο l η λίστα αλληλεπίδρασης

είναι το σύνολο από κουτιά τα οποία είναι παιδιά των άμεσα γειτονικών κουτιών του πατρικού κουτιού του κουτιού *i*, και τα οποία είναι "καλά διαχωρισμένα" από το *i*. Για καλύτερη κατανόηση ο αναγνώστης μπορεί να κοιτάξει την εικόνα 3-2 που ακολουθεί.

Η μέθοδος κάνει υπολογισμούς όχι με απευθείας αντικατάσταση στις σχέσεις και κάνοντας πράξεις μεταξύ σωματιδίων ή clusters του δένδρου, αλλά βασιζόμενη στα λήμματα που αναλύθηκαν παραπάνω. Ακολουθούν σύντομα παραδείγματα για την καλύτερη κατανόηση από μέρους του αναγνώστη πριν την λεπτομερή ανάλυση της μεθόδου στην επόμενη παράγραφο.



Εικόνα 3-2 Λίστα αλληλεπίδρασης του κουτιού b (α)στο δεύτερο επίπεδο διαχωρισμού (β) στο τρίτο επίπεδο διαχωρισμού

Υποθέτοντας πως η εκτέλεση βρίσκεται στο επίπεδο l - l και έχει υπολογιστεί η έκφραση  $\Psi_{l-l,i}$  για όλα τα κουτιά του επιπέδου. Με τη χρήση του λήμματος 5 της προηγούμενης παραγράφου, μετακινείται για κάθε κουτί του επιπέδου, i, η έκφραση  $\Psi_{l-l,i}$  στα παιδιά του κουτιού. Με τον τρόπο αυτό για κάθε κουτί j στο ακριβώς από κάτω επίπεδο , l, έχει βρεθεί η τοπική έκφραση του δυναμικού από όλα τα σωματίδια κουτιών που είναι γειτονικά των γόνων του j, δηλαδή η τιμή  $\Psi_{l,i}$ .

Επομένως η λίστα αλληλεπίδρασης περιγράφει ακριβώς το σύνολο από κουτιά, η συμβολή των οποίων στο δυναμικό πρέπει να υπολογιστεί, ώστε από το  $\Psi_{l,i}$ , με την προσθήκη της συμβολής των κουτιών της λίστας, να δημιουργηθεί η  $\Psi_{l,i}$ . Η δημιουργία της  $\Psi_{l,i}$  γίνεται με χρήση του λήμματος 4, σύμφωνα με το οποίο, το πολυπολικό ανάπτυγμα σε ένα κουτί μετατρέπεται σε τοπικό ανάπτυγμα με βάση το κέντρο κάποιου άλλου εξεταζόμενου κουτιού, με ταυτόχρονη πρόσθεση των αναπτυγμάτων ανώτερου επιπέδου από το γονικό κουτί. Για την έκδοση της μεθόδου στην οποία θεωρείται πως αγνοούνται οι αρχικές συνθήκες και εξωτερικές οριακές συνθήκες, η εκτέλεση εκκινεί με  $\Psi_{0,i}$  και  $\Psi_{1,i}$  ίσα με το μηδέν, μιας και δεν υπάρχουν "καλώς διαχωρισμένα" κουτιά πριν φτάσουμε στο επίπεδο 2.

## 3.1.4 Αλγοριθμική Περιγραφή της Αρχικής Μεθόδου FMM

Ακολουθεί η αλγοριθμική περιγραφή σε βήματα της αρχικής μεθόδου Fast Multipole [64]. Η μέθοδος βασίζεται περισσότερο στη μεταφορά πληροφορίας μεταξύ επιπέδων παρά στον απευθείας υπολογισμό αλληλεπιδράσεων μεταξύ σωματιδίων, και η ροή πληροφορίας αυτή ξεκινάει στα αντίστοιχα "περάσματα του αλγόριθμου" ανάλογα από το κατώτερο ή το ανώτερο επίπεδο. Με βάση τα λήμματα της παραγράφου 3.1.2 ,η πληροφορία ρέει μεταξύ των επιπέδων με βάση τις μαθηματικές ιδιότητες.

Είναι χρήσιμο να σημειωθεί εξαρχής πως το κάθε τοπικό ανάπτυγμα περιγράφεται από συντελεστές ενός πολυωνύμου αποτελούμενου από *p* όρους. Επίλυση του πολυωνύμου με εκτίμηση της επακριβούς του τιμής δίνει άμεσα το δυναμικό σε ένα σημείο. Με βάση το λήμμα *I* η δύναμη στο σημείο προκύπτει με παραγώγιση η οποία είναι διαθέσιμη στην αναλυτική της μορφή, και άρα ομοίως επιλύσιμη. Επομένως δεν υπάρχει λόγος για παραγώγιση με μεθόδους αριθμητικής ανάλυσης.

Επιπρόσθετα, λόγω της αναλυτικής φύσης της Φ' και σύμφωνα και με την ανάλυση στην παράγραφο 3.1.2 τα όρια σφάλματος είναι άμεσα, a priori γνωστά, από την αρχική επίλυση των σχέσεων (3.8), (3.14), (3.18).

- Εκκίνηση της μεθόδου: Επιλέγονται το επίπεδο λεπτομέρειας  $n \approx \log_4 N$ , η ακρίβεια ε και ορίζεται ο αριθμός όρων  $p \approx \log_2(\varepsilon)$ .
- Πέρασμα προς τα πάνω:
  - Βήμα 1: Με βάση το Θεώρημα Πολυπολικής Ανάπτυξης, για κάθε κουτί *ibox* = 1,...,4<sup>n</sup>, δηλαδή στο κατώτερο και λεπτομερέστερο επίπεδο του δένδρου, υπολογίζεται το ανάπτυγμα p όρων  $Φ_{n,ibox}$
  - Βήμα 2: Από το επίπεδο l = n l και ανεβαίνοντας διαδοχικά τα επίπεδα έως το επίπεδο 0, σε κάθε επίπεδο l, για τα κουτιά  $ibox = 1, ..., 4^l$  από το πολυπολικό ανάπτυγμα των παιδιών με βάση το λήμμα 3, μεταφέρεται το κέντρο της κάθε έκφρασης στο κέντρο του γονικού κελιού και αθροίζονται οι επιμέρους εκφράσεις
- Πέρασμα προς τα κάτω: Στο πέρασμα προς τα κάτω οι αλληλεπιδράσεις υπολογίζονται στο πιο μη ακριβές δυνατό επίπεδο. Για κάποιο κουτί ο υπολογισμός καθίσταται δυνατός λαμβάνοντας υπόψιν τα καλά διαχωρισμένα κουτιά και τα κουτιά οι αλληλεπιδράσεις των οποίων δεν έχουν ληφθεί υπόψιν στο επίπεδο του πατρικού τους κουτιού.
  - Βήμα 3: Σχηματίζεται στο κέντρο κάθε κουτιού σε κάθε επίπεδο πλέγματος η ισοδύναμη έκφραση τοπικού αναπτύγματος. Η έκφραση αυτή (όπως αναφέρεται και στο σχόλιο παραπάνω) αποτελεί το συνολικό πεδίο εξαιτίας των σωματιδίων του συστήματος που δεν περιλαμβάνονται στο τρέχον κουτί, όπου γίνεται ο υπολογισμός ή στα άμεσα γειτονικά του τρέχοντος κουτιά. Άπαξ και υπολογιστεί το τοπικό ανάπτυγμα σε ένα επίπεδο l, μετακινείται με τη βοήθεια των λημμάτων στα κέντρα των κουτιών στο από κάτω επίπεδο l + l. Με τον τρόπο αυτό σχηματίζεται σε κάθε κουτί η αρχή της συνολικής έκφρασης του πεδίου και δυναμικού.

Τίθενται  $\tilde{\Psi_{l,l}} = \tilde{\Psi_{l,2}} = \tilde{\Psi_{l,3}} = \tilde{\Psi_{l,4}} = (0,0,\dots,0)$ . Για τα επίπεδα  $l = 1,\dots, n-1$  και για τα κουτιά  $ibox = 1,\dots,4^l$  σχηματίζεται η έκφραση του  $\Psi_{l,ibox}$ , με χρήση του λήμματος 4, προκειμένου να μετασχηματιστεί η έκφραση  $\Phi_{l,j}$  του κάθε κουτιού j στη λίστα αλληλεπίδρασης του κουτιού ibox, γύρω από το κέντρο του ibox, και αθροίζονται όλες οι τοπικές εκφράσεις, με κατάληξη τη δημιουργία της τιμής του  $\Psi_{l,ibox}$ .

Για το κάθε κουτί *ibox* = 1,...,4<sup>l</sup> από τα παιδιά του και τις εκφράσεις  $\Psi_{l,ibox}$  με χρήση του λήμματος 5, εφαρμοζόμενου γύρω από το κέντρο του καθενός κελιού που είναι παιδί του *ibox* σχηματίζονται οι εκφράσεις  $\Psi_{l+l,i}$ .

 Βήμα 4: Στο στάδιο αυτό γίνεται ο υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων στο κατώτατο και λεπτομερέστερο επίπεδο.

Για το κάθε κουτί *ibox* = 1,...,4<sup>n</sup> με χρήση του λήμματος 4, η πολυπολική έκφραση  $\Phi_{l,j}$  για κάθε κουτί *j* στη λίστα αλληλεπίδρασης του κουτιού *ibox*, μετατρέπεται σε τοπικό ανάπτυγμα γύρω από το κέντρο του κουτιού *ibox* και ακολούθως προστίθενται όλα τα τοπικά αναπτύγματα, ώστε να βρεθεί η συνολική  $\Psi_{l,ibox}$ . Με τον τρόπο αυτό, όταν η εκτέλεση φτάσει στο κατώτατο επίπεδο, είναι διαθέσιμα τα τοπικά αναπτύγματα όλων των *ibox* = 1,...,4<sup>n</sup> κουτιών. Αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν ώστε να βρεθεί το δυναμικό ή η δύναμη σε ένα σημείο εξαιτίας όλων των σωματιδίων εκτός των γειτονικών κουτιών στο κατώτατο επίπεδο.

- Βήμα 5: Εκτίμηση όλων των τοπικών αναπτυγμάτων, με απευθείας αντικατάσταση των συντεταγμένων του κάθε σημείου του κάθε κουτιού. Για το κάθε κουτί  $ibox = 1, ..., 4^n$  και για το κάθε σωματίδιο  $P_j$  σε σημείο  $z_j$  του μιγαδικού επιπέδου, εντός του κουτιού ibox, η μέθοδος καταλήγει στην τιμή  $\Phi_{n,ibox}(z_j)$
- Βήμα 6: Υπολογισμός δυναμικού (ή δύναμης αναλόγως ενδιαφέροντος) εξαιτίας των κοντινότερων, γειτονικών κουτιών, απευθείας). Για το κάθε σωματίδιο p<sub>j</sub> σε κάθε κουτί ibox = 1,...,4<sup>n</sup>, υπολογίζονται απευθείας οι αλληλεπιδράσεις με τα υπόλοιπα σωματίδια εντός του κουτιού και εντός των άμεσα γειτονικών κουτιών.
- Βήμα 7: Για το κάθε κουτί ibox = 1,...,4<sup>n</sup>, άθροιση των όρων μακρινής και κοντινής αλληλεπίδρασης, όπως αυτοί έχουν αντίστοιχα προκύψει για το κάθε κουτί από τα βήματα 5 και 6. Λήξη υπολογισμών και τελικό αποτέλεσμα.

#### 3.1.5 Ανάλυση Πολυπλοκότητας

Στο βήμα 1, το κάθε σωματίδιο συνεισφέρει σε μια αναλυτική έκφραση στο κατώτατο, λεπτομερέστατο επίπεδο, με πολυπλοκότητα O(Np). Στο βήμα 2 στο επίπεδο l εκτελούνται  $4^l$  μετατοπίσεις, καθεμία από τις οποίες απαιτεί  $O(p^2)$  πολυπλοκότητα, δηλαδή συνολικά η τάξη του βήματος 2 θα είναι  $O(Np^2)$ . Στα βήματα 3, 4 και 5 υπάρχουν αντίστοιχα έως 27 δυνατές περιπτώσεις στη λίστα αλληλεπίδρασης για το κάθε κουτί *ibox* στο κάθε επίπεδο l, επομένως υπολογίζεται πως: για τον εσωτερικό βρόγχο του βήματος 3 απαιτείται επιπλέον  $O(Np^2)$  κόστος, (συνολική πολυπλοκότητά  $\leq 28Np^2$ ), για το βήμα 4  $\approx N$  κουτιά των 27 περιπτώσεων με πολυπλοκότητα  $\leq 27Np^2$ , και για το βήμα 5 του υπολογισμού των αναπτυγμάτων έως p όρων για κάθε σωματίδιο, επίσης πολυπλοκότητα  $\leq 27Np^2$ . Στο βήμα 6 η πολυπλοκότητα θα είναι  $O\left(\frac{9}{2}N\cdot k_n\right)$ , όπου  $k_n$  είναι το άνω όριο στον αριθμό σωματιδίων εντός κάθε κουτιού στο

λεπτομερέστατο επίπεδο.

Οι αλληλεπιδράσεις εντός κάθε κουτιού και μεταξύ γειτονικών κουτιών υπενθυμίζεται πως υπολογίζονται με την απευθείας μέθοδο PP, και με βάση το Νόμο Δράσης και Αντίδρασης του Νεύτωνα, γίνονται οι υπολογισμοί μόνο των μισών αλληλεπιδράσεων. Στο τελικό και 7° βήμα, για Ν σωματίδια αθροίζονται 2 τελικές τιμές, με κόστος O(N).

Εάν εισάγουμε τη σταθερά s, που θα ισούται με το μέσο όρο σωματιδίων ανά κουτί στο τελικό λεπτομερέστερο επίπεδο διαχωρισμού, συνολικά, στο βήμα 1 η εργασία που απαιτείται είναι

 $Np^2$ , στο βήμα 2  $(N/s) p^4$ , στο βήμα 3 189  $(N/s) p^4$ , στο βήμα 4  $Np^2$  και στο βήμα 5 27Ns. Το τελικό κόστος μπορεί να εκφραστεί ως προσεγγιστικά ίσο με:  $191\left(\frac{N}{s}\right)P^4 + 2Np^2 + 27Ns$ , επομένως εάν  $s \approx 2p^2$  το συνολικό κόστος προσεγγίζει την τιμή 150Np<sup>2</sup>.

Ο συνολικός χρόνος εκτέλεσης εκτιμήθηκε από τους ερευνητές ως προκύπτων από τη σχέση:

$$N(-2\alpha \log_2(\varepsilon) + 56b (\log_2(\varepsilon))^2 + 4.5 d k_n + e) \quad (3.20)$$

με τις σταθερές a, b, c, d, e να εξαρτώνται από το υπολογιστικό σύστημα, τη γλώσσα προγραμματισμού, και λοιπές λεπτομέρειες της αλγοριθμικής υλοποίησης και μεταφοράς σε κώδικα.

Εκτός από την ασυμπτωτική χρονική πολυπλοκότητα, επίσης ασυμπτωτικές είναι και οι απαιτήσεις του κώδικα σε αποθηκευτικό χώρο. Στα πλαίσια της προσομοίωσης ο αλγόριθμος πρέπει να αποθηκεύει τις τιμές των  $\Phi_{l,j}$ ,  $\Psi_{l,j}$  αλλά και τις θέσεις των σωματιδίων στο χώρο, τις τιμές φορτίου και τα αποτελέσματα των υπολογισμών, δηλαδή την τιμή του δυναμικού ή/και την ένταση του ηλεκτροστατικού πεδίου στο κάθε σημείο εκτίμησης. Το κάθε κουτί στο κάθε επίπεδο έχει ένα ζευγάρι από αναπτύγματα p-όρων και τιμές  $\Phi$  και  $\Psi$  σχετιζόμενες με αυτά, καθώς και τα μήκη όλων των άλλων πινάκων αποθήκευσης δεδομένων του προγράμματος που έχουν μέγεθος ανάλογο του μεγέθους του προβλήματος δηλαδή του Ν. Οι ασυμπτωτικές απαιτήσεις του αλγόριθμου είναι της μορφής:

$$(\alpha + \beta \cdot p) N \eta (\alpha - \beta \cdot \log_2(\varepsilon)) N (3.21)$$

με τους συντελεστές α και β να καθορίζονται με όμοιο τρόπο από το υπολογιστικό σύστημα, τη γλώσσα προγραμματισμού, και λοιπές λεπτομέρειες της αλγοριθμικής υλοποίησης και μεταφοράς σε κώδικα.

Πρέπει να σημειωθεί τέλος πως το βήμα 6 του αλγόριθμου προαπαιτεί σε ένα βαθμό ομοιόμορφη κατανομή σωματιδίων[76]. Σε περίπτωση που η κατανομή είναι ανομοιόμορφη τότε οι περιοχές του χώρου με μεγαλύτερη πυκνότητα σωματιδίων θα πρέπει να αναλυθούν περισσότερο σχολαστικά, με προτεινόμενο τρόπο αντιμετώπισης την adaptive σχεδίαση του αλγορίθμου όσον αφορά το χωρισμό σε κουτιά μεταβλητού μεγέθους και με βάση τη μεταβλητή καθορισμού του αριθμού σωματιδίων ανά κουτί[64]. Παρά την πρόταση αυτή από μέρους των ερευνητών, χρειάστηκαν χρόνια για την επιτυχή και λειτουργική εισαγωγή της στη μέθοδο [77].

Ο αλγόριθμος αναφέρεται συνολικά από τους ερευνητές ως ανήκων στην πολυπλοκότητα O(N). Παρόλ'αυτά η αναφορά αυτή βασίζεται στον χωρισμό του quadtree, και στη θεώρηση πως το δένδρο δεν θα αυξηθεί πιο γρήγορα από N καθώς το περιορίζει η ακρίβεια όπως αυτή επιβάλλεται από το p. Στην πράξη κάτι τέτοιο σημαίνει πως ο αριθμός των σωματιδίων σε γειτονικά κουτιά θα αυξάνει κατά O(N) και όχι κατά σταθερά s που θα καθορίζει το χωρισμό σε κουτιά για παράδειγμα σε μία adaptive προσέγγιση. Υπάρχει άμεση εξάρτηση λοιπόν από την κατανομή σωματιδίων όσο και από το χωρισμό σε κουτιά. Τα παραπάνω σε συνδυασμό με τον ορισμό της σταθεράς s από τους ερευνητές αποτελούσαν αντίφαση του αρχικού paper που οδήγησε σε έντονες διαφωνίες και στην τελική αναθεώρηση της μεθόδου όσον αφορά αυτή τη λεπτομέρεια. [74]

#### 3.1.6 Οριακές Συνθήκες και Αντιμετώπισή τους

Κατά τις εκτελέσεις προσομοιώσεων σωματιδίων είναι δυνατό να ενδιαφέρει η μεταβολή συμπεριφοράς των σωματιδίων καθώς αυτή εξετάζεται σε μία σειρά από δυνατές οριακές συνθήκες. Οριακές συνθήκες ενδιαφέροντος μπορεί να είναι οι περιοδικές οριακές συνθήκες, οι ομογενείς οριακές συνθήκες Dirichlet ή Neumann και περιπτώσεις μικτών οριακών συνθηκών. Τα παραπάνω ισχύουν για την αρχική μέθοδο FMM, και προφανώς για διαφορετικές εκδόσεις της μεθόδου μπορεί να επεκτείνονται ή να περιορίζονται ανάλογα με την εφαρμογή ή τους σκοπούς του κάθε ερευνητή. [67] [68]

#### 3.1.6.1 Περιοδικές Οριακές Συνθήκες

Οι περιοδικές οριακές συνθήκες είναι ένα είδος οριακών συνθηκών που χρησιμοποιούνται κατά κόρον σε μαθηματικά μοντέλα ή σε προσομοιώσεις μοντέλων με υπολογιστή, και χρησιμοποιούνται για να προσομοιωθεί ένα μεγάλων διαστάσεων σύστημα με βάση την ανάλυση μικρού τμήματός του μόνο, το οποίο τμήμα βρίσκεται μακρυά από τα άκρα του συστήματος. [69]

Συχνά ένα τέτοιο τμήμα αναφέρεται ως μοναδιαίο κελί ή ως μοναδιαίος κύβος ή απλά ως κουτί προσομοίωσης σύμφωνα με κάποιες πηγές, με σκοπό να είναι δυνατός ο τέλειος διαχωρισμός του αρχικού μοντέλου σε ακέραια πολλαπλάσια του όποιου μοναδιαίου κελιού. Η συνολική προσομοίωση θεωρεί πως υπάρχει ακριβής ή εναλλακτικά άπειρος αριθμός τέτοιων κελιών/κουτιών, ενώ γεωμετρικά ο χώρος συνήθως θεωρείται χαρτογραφημένος σε τρισδιάστατο τόρο. Αντικείμενα που διέρχονται από μία πλευρά του κελιού εμφανίζονται για τις ανάγκες της προσομοίωσης στην απέναντι πλευρά με διάνυσμα ταχύτητας ίδιο με το προηγούμενο. Για λόγους γενίκευσης και γενικότητας η προσομοίωση εκτελείται στο μοναδιαίο κελί μόνο και τα αποτελέσματά της θεωρείται πως ισχύουν αναλογικά ή σε κλίμακα για το συνολικό σύστημα. [70]

Με βάση την ανάλυση που έγινε ως τώρα για τον αλγόριθμο, επικεντρώνουμε στο σημείο ροής του αλγορίθμου στο οποίο, στο τέλος του περάσματος προς τα επάνω η έκφραση για το πολυπολικό ανάπτυγμα είναι:

$$\Phi_{0,1}(z) = \sum_{k=1}^{p} \frac{a_k}{z^k} \quad (3.22)$$

για όλο τον τετράγωνο χώρο επίλυσης του προβλήματος (καθώς είμαστε στο mesh επιπέδου μηδέν).

Εξετάζουμε τα διάφορα στιγμιότυπα με βάση την εικόνα 3-2, που απεικονίζει τη λίστα αλληλεπίδρασης. Η έκφραση αυτή αποτελεί το ανάπτυγμα για καθεμία από τις περιοδικές εικόνες του κουτιού, εκφρασμένες ως προς το κέντρο του κουτιού. Όταν η εκτέλεση βρίσκεται στο εσωτερικό κουτί της εικόνας 3-2 τα γραμμοσκιασμένα κουτιά θεωρείται πως είναι καλά διαχωρισμένα από το κουτί στο οποίο εκτελείται ο υπολογισμός, επομένως οι τιμές πεδίων και δυναμικών που προκύπτουν, θα είναι δυνατόν να εκφραστούν με ορθό τρόπο από το τοπικό ανάπτυγμα p-όρων, για το οποίο όπως και προηγουμένως, θα ισχύει ότι  $p \approx \log_2(\varepsilon)$  είναι ο αριθμός όρων που απαιτείται , προκειμένου να μπορεί να επιτευχθεί η ακρίβεια ανάλυσης ε.

Θεωρώντας πως δεν υπάρχει, στατική συγκέντρωση φορτίου εντός του κουτιού που εξετάζεται, με βάση το λήμμα 4 το τοπικό ανάπτυγμα θα είναι :

n

$$\Psi_{0,1}(z) = \sum_{m=1}^{p} \frac{b_m}{z^m}, \ \mu \varepsilon \ b_m = \frac{1}{z_0^m} \frac{\sum_{k=1}^{p} a_k}{z_0^k} \binom{m+5-1}{k-1} (-1)^k, \ \gamma \iota \alpha \ m = 0, 1, \dots, p$$
(3.23)

στην οποία σχέση, ως  $z_0$  αναφέρεται το κέντρο του συγκεκριμένου κουτιού. Ο λόγος για τον περιορισμό στην κατανομή του φορτίου είναι πως κατά την εξέλιξη του υπολογισμού το δυναμικό παύει να είναι καλά ορισμένο καθώς ο λογαριθμικός όρος τείνει στο άπειρο και δεν έχει άνω όριο.

Παρόλ'αυτά καθώς οι  $\Phi_{l,i}$ ,  $\Psi_{l,i}$ ,  $\tilde{\Psi}_{l,i}$  είναι εκφράσεις αναλυτικών συναρτήσεων και μάλιστα συναρτήσεων δυναμικού, όπως ήδη αναλύθηκε, με τη βοήθεια του λήμματος 1, οι πρώτες τους παράγωγοι θα είναι επίσης αναλυτικές στον ίδιο μιγαδικό χώρο.

Από το Θεώρημα Πολυπολικής Ανάπτυξης και τη δομή του αλγορίθμου, είναι προφανές πως η ίδια αλγοριθμική διαδικασία μπορεί, πάντα λόγω του λήμματος 1, να χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση όχι του δυναμικού αλλά του πεδίου δυνάμεων στον ίδιο χώρο επίλυσης, ξεπερνώντας τη δυσκολία του λογαριθμικού όρου, με μόνη απαίτηση τον υπολογισμό στο αρχικό στάδιο των παραγώγων των πολυπολικών αναπτυγμάτων και όχι των ίδιων των αναπτυγμάτων. Περεταίρω ανάλυση μπορεί να αναζητηθεί στη βιβλιογραφία. [64]

#### 3.1.6.2 Οριακές Συνθήκες Dirichlet

Οι οριακές συνθήκες Dirichlet ή "πρώτου τύπου" αποτελούν ένα είδος οριακών συνθηκών κανονικών ή μερικών διαφορικών εξισώσεων, που τιμητικά φέρουν το όνομα του μαθηματικού Johan Peter Dirichlet. Με την εφαρμογή τους σε μία διαφορική εξίσωση ή σε ένα σύστημα εξισώσεων καθορίζονται οι τιμές λύσης στο όριο του χωρίου επίλυσης [71].

Σε μία κανονική διαφορική εξίσωση όπως η  $\ddot{y} + y = 0$ , οι οριακές συνθήκες Dirichlet παίρνουν τη μορφή y(a) = a και  $y(b) = \beta$ , για δεδομένους αριθμούς a, b στο διάστημα [a, b][72]. Γενικότερα μπορεί να ειπωθεί πως καθορίζουν την τιμή της συνάρτησης σε μία επιφάνεια  $T = f(\mathbf{r}, t)$  [73]

Η ύπαρξη ομογενών οριακών συνθηκών Dirichlet σημαίνει πως θα ισχύει στο χώρο του προβλήματος πως:  $\Phi(x, y) = 0$  για  $(x, y) \in \partial D$ , όπου  $\partial D$  θα είναι το όριο του χώρου υπολογισμού. Από την αναλυτική σκοπιά η επιβολή των οριακών συνθηκών μπορεί να επιτευχθεί με τη μέθοδο των εικόνων, σύμφωνα με την οποία το δυναμικό προέρχεται από τις πηγές, δηλαδή σωματίδια εντός του κουτιού επίλυσης και τις εικόνες των πηγών, δηλαδή σωματίδια που βρίσκονται εκτός του κουτιού υπολογισμού.

Τα σωματίδια εικόνες, σύμφωνα με τη μέθοδο εικόνων επιλέγονται έτσι ώστε:

$$\Phi = \Phi_{sources} + \Phi_{images} \quad (3.24)$$
$$\Phi_{sources}(x, y) = -\Phi_{images}(x, y) \quad \gamma i \alpha \quad (x, y) \in \partial D \quad (3.25)$$

Τα σωματίδια που χρησιμοποιούνται ως εικόνες λαμβάνονται με μία επαναληπτική διαδικασία που φαίνεται στην Εικόνα 3-3

Για το κάθε σωματίδιο  $P_i$  με φορτίο  $\sigma_i$  εκτελούνται μία σειρά από "ανακλάσεις" ξεκινώντας από την ακμή που ορίζει το όριο του κουτιού στην πάνω μεριά του. Απέναντι από το σωματίδιο  $P_i$ και στην έξω μεριά του ορίου τοποθετείται νοητά σωματίδιο-εικόνα, με φορτίο  $-\sigma_i$  δημιουργώντας με τον τρόπο αυτό το "κουτί" εικόνα το οποίο στην εικόνα 3-3 συμβολίζεται με  $\overline{C}$ . Το σύνολο των φορτίων εικόνων συμβολίζεται ως  $V_1$  και το πεδίο που προκαλούν ως  $\Phi_{V_i}$ .

Με πρόσθεση του  $\Phi_{V_1}$  στο υπάρχον πεδίο  $\Phi_{sources}$ , η οριακή συνθήκη εφαρμόζεται για την άνω οριακή πλευρά. Με παρόμοιο τρόπο και διαδοχικές ανακλάσεις των σωματιδίων του κουτιού υπολογισμού στις κάτω, δεξιές και αριστερές πλευρές προκύπτει όπως φαίνεται και στην εικόνα 3-3 μία ομάδα από σύνολα φορτίων, τα οποία με συνολική υπέρθεση παρέχουν τη συνθήκη για να εφαρμόζεται σε όλες τις πλευρές του κουτιού υπολογισμού η ομοιογένεια των οριακών συνθηκών Dirichlet.



Εικόνα 3-3 : Η μέθοδος των εικόνων, μέσω της οποίας εξασφαλίζονται οι οριακές συνθήκες Dirichlet

Επομένως συνολικά στο όριο  $\partial D$  από όλες τις πλευρές, θα ισχύει πως  $\Phi_{sources}(x, y) + \Phi_{images} = 0$ , και παρά το γεγονός πως η παραπάνω διαδικασία συγκλίνει στη λύση της πολύ αργά, αποτελεί σημαντικό αριθμητικό εργαλείο. Όλα τα εικονικά κουτιά με εξαίρεση τα άμεσα γειτονικά είναι καλά διαχωρισμένα από τα πεδία που υπάρχουν μέσα τους, επομένως το συνολικό πεδίο σε κάθε κουτί μπορεί να εκφραστεί ισοδύναμα με τη μορφή του αναπτύγματος  $\Psi_{0,1}$ . Για να ολοκληρωθεί ο κατά τόπους υπολογισμός αυτός απαιτείται εκτός από την εκτίμηση των αλληλεπιδράσεων των κοντινών σωματιδίων. Αυτό επιτυγχάνεται με κατάλληλη μετατροπή των λιστών αλληλεπιδράσεων.

#### 3.1.6.3 Άλλες Οριακές Συνθήκες

Οι οριακές συνθήκες Neumann ή "δεύτερου τύπου" αποτελούν ένα είδος οριακών συνθηκών κανονικών ή μερικών διαφορικών εξισώσεων, που τιμητικά φέρουν το όνομα του μαθηματικού Carl Neumann. Με την εφαρμογή τους σε μία διαφορική εξίσωση ή σε ένα σύστημα εξισώσεων καθορίζονται οι τιμές επίλυσης της πρώτης παραγώγου μίας λύσης στο όριο του χωρίου

επίλυσης [71] . Για παράδειγμα  $\frac{\partial T}{\partial n} = \hat{n} \cdot \nabla T = f(\mathbf{r}, t)$  (3.26) [73]

Είναι δυνατόν ανάλογα με την εφαρμογή για την οποία προορίζεται η προσομοίωση να ενδιαφέρουν άλλες οριακές συνθήκες από τις παραπάνω ή συνδυασμός τους, για παράδειγμα συνθήκες Neumann πάνω και κάτω σε κάθε κουτί αλλά συνθήκες Dirichlet δεξιά και αριστερά ή ενδεχομένως περιοδικές συνθήκες πάνω και κάτω και συνθήκες Dirichlet δεξιά και αριστερά.

Τέτοιου είδους προβλήματα αντιμετωπίζονται με ανάλυση αντίστοιχα όπως στις δύο προηγούμενες παραγράφους, με συνδυασμό των μεθόδων. Πρώτα γίνεται επίλυση σε ολόκληρο το επίπεδο για το ένα είδος συνθηκών και στη συνέχεια σε ολόκληρο το επίπεδο για το δεύτερο είδος συνθηκών, με συνολική άθροιση-υπέρθεση τοπικών αναπτυγμάτων  $\Psi_{0,1}$  με βάση καλά διαχωρισμένα κουτιά και ανάλογη αντιμετώπιση των κοντινότερων σωματιδίων.

# 3.2 Εισαγωγή Πινάκων στις Ιεραρχικές Μεθόδους και Επέκταση στις Τρεις Διαστάσεις

#### 3.2.1 Εισαγωγή

Οι Greendgard και Rokhlin πρότειναν το 1997 μία νέα έκδοση της μεθόδου FMM, με την ερευνητική τους εργασία η οποία παράλληλα παρουσίασε την ανάλυση της μεθόδου για τρεις διαστάσεις [74]. Η εργασία τους ξεκίνησε από την παρατήρηση που έκαναν πως σχεδόν 10 χρόνια μετά την αρχική τους δημοσίευση για δισδιάστατα προβλήματα, είχαν προταθεί πολλές εκδοχές του αρχικού δισδιάστατου FMM, που μπορούσαν να παρέχουν αξιόπιστα αποτελέσματα, με υψηλή ταχύτητα υπολογισμού και σχεδόν αυθαίρετα υψηλά επίπεδα ακρίβειας. Παρολ'αυτά απουσίαζαν το ίδιο αποδοτικές μέθοδοι για προβλήματα τριών διαστάσεων, τα οποία είναι άλλωστε η πλειοψηφία των προβλημάτων που έχουν ουσιαστικές εφαρμογές σε προβλήματα του πραγματικού κόσμου[74].

Η τρισδιάστατη εκδοχή των Greengard και Rokhlin, σε αναλογία με την δισδιάστατη, στοχεύει στην ταχεία εκτίμηση όλων των ανά ζεύγη αλληλεπιδράσεων μεταξύ σωματιδίων με δυναμικό της μορφής:

$$\Phi(x_{j}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{q_{i}}{\|x_{j} - x_{i}\|}, i \neq j \quad (3.27)$$

εάν το πεδίο είναι ηλεκτροστατικό ή βαρυτικό. Η ένταση του πεδίου δίνεται σε τέτοια προβλήματα από τη σχέση:

$$E(x_{j}) = \sum_{i=1}^{n} q_{i} \frac{x_{j} - x_{i}}{\|x_{i} - x_{i}\|^{3}}, i \neq j \quad (3.28)$$

Στις δύο παραπάνω σχέσεις με  $x_1, x_{2,...}, x_n$  συμβολίζονται σημεία στον  $\mathbb{R}^3$  χώρο και με  $q_1, q_{2,...}, q_n$  συμβολίζονται ένα σύνολο από πραγματικούς ( $\in \mathbb{R}^3$ ) συντελεστές. Για την περίπτωση που λαμβάνονται υπόψιν συγκεκριμένες κοντινής μορφής αλληλεπιδράσεις, επιπρόσθετα με τις βαρυτικές ή ηλεκτροστατικές δυνάμεις, τότε η (3.27) αντικαθίσταται από την:

$$\Phi(x_{j}) = \sum_{i=1}^{n} q_{i} \frac{\varepsilon^{i \cdot k \|x_{j} - x_{i}\|}}{\|x_{j} - x_{i}\|}, \ i \neq j \quad (3.29)$$

Η παρούσα μέθοδος χρησιμοποιεί εξόχως πολύπλοκο μαθηματικό και αριθμητικό υπόβαθρο ακόμα και σε σύγκριση με άλλες μεθόδους FMM.

#### 3.2.2 Ανακεφαλαίωση Μαθηματικών Εννοιών Πινάκων

Η μέθοδος FMM σε τρεις διαστάσεις, όπως αναλύεται στην παράγραφο3.3, βασίζεται σε επιταχύνσεις των υπολογισμών κάνοντας μία διαφορετική θεώρηση του προβλήματος. Η επίλυση γίνεται με χρήση πινάκων, κάτι που δεν έχει αναφερθεί έως το σημείο αυτό στην παρούσα εργασία. Για λόγους πληρότητας και για την καλύτερη κατανόηση από μέρους του αναγνώστη στο σημείο αυτό γίνεται παρουσίαση της μαθηματικής ανάλυσης και του απαιτούμενου υπόβαθρου ανάλυσης των εννοιών των πινάκων, όπως εμφανίζεται στην ερευνητική εργασία των Greengard και Rohklin.

Ένας πίνακας, έστω Α, διαστάσεων n×n . Ο πίνακας αυτός θα ορίζεται από τη σχέση:

$$A_{ij} = \frac{1}{\|x_j - x_i\|} \quad (3.30)$$

και επομένως η (3.27) γράφεται στη μορφή:

$$\Phi = A \cdot q \quad (3.31)$$

Τα παραπάνω εκτός από τον τρισδιάστατο χώρο θα ισχύουν και εάν Φ,  $q \in \mathbb{R}^n$ , και με την (3.28) να μπορεί να ξαναγραφτεί με ανάλογο τρόπο. Όπως έχει ήδη αναφερθεί από την εισαγωγή της παρούσας διπλωματικής εργασίας, οι (3.27) και (3.28) μπορούν να υπολογιστούν απευθείας με πολυπλοκότητα  $O(N^2)$ , γεγονός που καθιστά απαγορευτικά αργή την επίλυση προβλημάτων μεγάλου μεγέθους. Μεγάλη πληθώρα αλγορίθμων της τάξης O(N) ή O(NlogN) έχουν προταθεί, βασιζόμενοι στην παρατήρηση πως τα δυναμικά είναι λείες συναρτήσεις στον  $\mathbb{R}^3$  χώρο, με εξαίρεση περιπτώσεις κατά τις οποίες τα σημεία  $x_i$  και  $x_j$  βρίσκονται πολύ κοντά το ένα στο άλλο, οπότε και μεγάλα τμήματα υποπινάκων του Α είναι χαμηλότερων βαθμών (ανάλογα με τη ζητούμενη ακρίβεια).

Είναι προφανές πως ο πολλαπλασιασμός του πίνακα A,  $n \times n$ , βαθμού J, με διάνυσμα απαιτεί συνολικά  $n \cdot J$  και όχι  $n^2$  πράξεις. Με βάση την παρατήρηση αυτή μπορεί να δημιουργηθεί ένα πλήθος γρήγορων τρόπων εκτίμησης της (3.27) όπως αυτός που παραδειγματικά παρουσιάζεται παρακάτω.

Ας υποτεθεί πως τα σημεία  $x_{1,}x_{2,...}$ ,  $x_n$  βρίσκονται στο διάστημα [-1,1] με τρόπο ώστε να ισχύει  $x_1 = -1, x_2 = -1+h$ , ...,  $x_{n-1} = 1-h$ ,  $x_n = 1$ , με h = 2/(n-1). Οι ακέραιοι l, m, k δίνονται με τιμές τέτοιες ώστε :

$$1 \le l \le n,$$
  

$$1 \le m \le n,$$
  

$$1 \le k \le n - l, \quad (3.32)$$
  

$$1 \le k \le n - m,$$

Οι υποπίνακες  $A_{l,m,k}$  του Α αποτελούνται από στοιχεία  $A_{i,j}$  τέτοια ώστε :

$$l \le i \le l + k - 1, m \le j \le m + k - 1$$
(3.33)

με τον κάθε τέτοιο υποπίνακα να απέχει από τη διαγώνιο συνολικά απόσταση:

$$\frac{|l - (m + k - 1)| > k}{|m - (l + k - 1)| > k},$$
 (3.34)

Οι παραπάνω σχέσεις συνοψίζονται στην παρατήρηση πως ένας υποπίνακας του Α είναι καλά διαχωρισμένος από τη διαγώνιο του πίνακα εάν η απόστασή του από αυτήν είναι μεγαλύτερη ή ίση από τη διάσταση της πλευράς του, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3-4.



Εικόνα 3-4: Διαχωρισμός του χώρου επίλυσης σε κουτιά, όπου με Χ συμβολίζονται αυτά που με βάση τα κριτήρια της μεθόδου δεν είναι καλά διαχωρισμένα από τη διαγώνιο.

Λήμμα 60 : Για οποιονδήποτε ακέραιο  $p \le 1$  και οποιουσδήποτε ακέραιους l, m, k που ικανοποιούν τις (3.33) και (3.34), θα υπάρχει υποπίνακας έστω  $B_{l,m,k}$  ο οποίος διαστάσεων  $k \times k$  και βαθμού J για τον οποίον θα ισχύει:

$$||a_{l,m,k} - B_{l,m,k}|| \le \frac{1}{4^J}$$
 (3.35)

δηλαδή ο Β είναι κάθε υποπίνακας του Α αρκεί να είναι καλά διαχωρισμένος από τη διαγώνιο και να είναι βαθμού J, και 1/4<sup>J</sup> είναι η ελάχιστη επιτρεπόμενη ακρίβεια. Η απόδειξη του παρόντος κρίνεται εκτός ενδιαφέροντος της παρούσας διπλωματικής εργασίας λόγω πολυπλοκότητας.

Για να δημιουργηθεί ένας γρήγορος αλγόριθμος αρχικά διαχωρίζεται ο πίνακας Α σε ένα σύνολο από υποπίνακες όπως φαίνεται στην εικόνα 3-4. Όπως έχει ήδη αναφερθεί η πλειονότητα των υποπινάκων είναι καλά διαχωρισμένοι από τη διαγώνιο του Α, επομένως με βάση το λήμμα 6 ο κάθε υποπίνακας είναι βαθμού J και ακρίβειας  $1/4^J$ . Για να πολλαπλασιαστεί ο Α με τυχαίο διάνυσμα και με πεπερασμένη ακρίβεια, πολλαπλασιάζεται ο κάθε υποπίνακας με το αντίστοιχο τμήμα του διανύσματος, με κόστος ανάλογο του  $k \cdot J$ , όπου k το η διάσταση, σύμφωνα με τα παραπάνω, του υποπίνακα. Προσθέτοντας όλα τα κόστη για όλους τους υποπίνακες, το συνολικό κόστος προκύπτει ίσο με:

$$J \cdot n \cdot \log(n) \approx \log(\frac{1}{\varepsilon}) \cdot n \cdot \log(n)$$
 (3.36)

σε αντιπαραβολή με την αρχικό κόστος επίλυσης που είναι ίσο με  $n^2$ . Φυσικά η περιγραφή αυτή είναι σε μεγάλο βαθμό απλουστευμένη και θα πρέπει να θεωρηθεί ενδεικτική του τρόπου σχεδίασης και μόνο.

Ο πίνακας Α, ο διαχωρισμός του και η συνακόλουθη περιγραφή της αλγοριθμικής σχεδίασης εξαρτώνται από την κατανομή των σωματιδίων του προβλήματος. Ο πίνακας Α είναι πίνακας Toeplitz και ο πολλαπλασιασμός του με τυχαίο διάνυσμα γίνεται με κόστος  $n \cdot \log(n)$  μέσω μετασχηματισμού FFT. Φυσικά η ιδιότητα του πίνακα και η Toeplitz φύση του χάνεται για ανομοιόμορφες κατανομές σωματιδίων καθιστώντας αδύνατες τις μεθόδους με βάση τη χρήση FFT στις περιπτώσεις αυτές.

Ο παραπάνω σχεδιασμός εφαρμόζεται μόνο σε μονοδιάστατα προβλήματα και σε συγκεκριμένες και μόνο περιπτώσεις. Σε διαφορετική περίπτωση ο διαχωρισμός του πίνακα θα πρέπει να αλλάξει, λαμβάνοντας υπόψιν την κατανομή των σωματιδίων, ώστε μικρότερες περιοχές με ομοιογενή κατά τόπους κατανομή σωματιδίων να μπορούν να μετατραπούν σε κατάλληλους υποπίνακες με χαμηλό αριθμητικά βαθμό.

Επίσης θα λειτουργεί ασχέτως των λεπτομερειών του πίνακα Α, με μόνες απαιτήσεις τα περιεχόμενά του να είναι λείες συναρτήσεις στις περιοχές μακρυά από τη διαγώνιο, ή καλύτερα αρκούντως λεία σε αρκούντως μεγάλες περιοχές του πίνακα.

#### 3.2.3 Ανακεφαλαίωση Μαθηματικών Εννοιών Μιγαδικής Ανάλυσης

Στην παράγραφό αυτή, σε αναλογία με την παράγραφο 3.1.2 δίνονται οι βασικές μαθηματικές έννοιες για την τρισδιάστατη ανάλυση της μεθόδου FMM. Η έμφαση στη λεπτομέρεια είναι περιορισμένης έκτασης καθώς πολλές από τις έννοιες αναφέρθηκαν ήδη στην παράγραφο 3.1.2.

Θεωρώντας πως στο σημείο  $P_0 = (x_0, y_0, z_0)$ βρίσκεται σωματίδιο με φορτίο q, το ηλεκτροστατικό δυναμικό και το ηλεκτροστατικό πεδίο σε άλλο σημείο του τρισδιάστατου χώρου, έστω P = (x, y, z)δίνονται αντίστοιχα από τις σχέσεις:

$$\Phi = \frac{1}{R} \quad (3.37) \quad \vec{E} = -\nabla \Phi = \left(\frac{x - x_0}{R^3}, \frac{y - y_0}{R^3}, \frac{z - z_0}{R^3}\right) \quad (3.38)$$

όπου με R συμβολίζεται η απόσταση στο χώρο μεταξύ των  $P_0$  και P.

Στα πλαίσια της υπό εξέτασης έκδοσης του αλγόριθμου, το ζητούμενο είναι το δυναμικό στο σημείο P να εκφραστεί ως ανάπτυγμα σειράς εκφρασμένο με όρους απόστασης του σημείου P από την αρχή r. Για το λόγο αυτό οι συντεταγμένες των σημείων εκφράζονται στο σφαιρικό σύστημα και λαμβάνεται ισοδύναμα στο σύστημα αυτό:  $P_0 = (\rho, \alpha, \beta)$  και  $P = (r, \theta, \varphi)$ , με τη γωνία μεταξύ των  $P_0$  και P να συμβολίζεται ως γ.

Από το νόμο των συνημίτονων έχουμε:

$$R^{2} = r^{2} + p^{2} - 2 \cdot r \cdot p \cdot \cos(\gamma) \quad (3.39)$$

και άρα θέτοντας  $\mu = \rho / r$  και  $u = cos \gamma$ :

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{r\sqrt{1 - 2\frac{p}{r}\cos\gamma + \frac{p^2}{r^2}}} = \frac{1}{r\sqrt{1 - 2u\mu + \mu^2}} \quad (3.40)$$

Για  $\mu < 1$  το αντίστροφο τετράγωνο μπορεί να αναλυθεί σε όρους δυνάμεων του  $\mu$  με αποτέλεσμα να προκύπτει μία σειρά της μορφής :

$$\frac{1}{\sqrt{1-2u\mu+\mu^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(u) \mu^n \quad (3.41)$$

$$\mu \varepsilon P_0(u) = 1, P_1(u) = u, P_2(u) = 3 \text{ over } 2(u^2 - \frac{1}{3}) \dots (3.42)$$

Στη σειρά αυτή με  $P_n(u)$  συμβολίζεται το n-οστού βαθμού πολυώνυμο Legendre, και η έκφραση του πεδίου πλέον έχει μετασχηματιστεί στη μορφή:

$$\frac{1}{R} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p^n}{r^{n+1}} P_n(u) \quad (3.43)$$

Η γωνιακή παράμετρος u εξαρτάται από τις θέσεις τόσο των πηγών όσο και των σημείων στα οποία γίνεται η εκτίμηση του πεδίου, γεγονός που δεν ενδείκνυται για τη συνέχιση της αλγοριθμικής μεθόδου. Για να ξεπεραστεί το πρόβλημα αυτό εισάγεται η έννοια των σφαιρικών αρμονικών, που είναι οι λύσεις της εξίσωσης Laplace όπως αυτές προκύπτουν εάν εφαρμοστεί διαχωρισμός μεταβλητών σε σφαιρικές συντεταγμένες. Κάθε αρμονική συνάρτηση Φ μπορεί να εκφραστεί ως ανάπτυγμα:

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} L_n^m r^n + \frac{M_n^m}{r^{n+1}} Y_n^m(\theta, \varphi) \quad (3.44)$$

Οι όροι  $Y_n^m(\theta, \varphi)$  ονομάζονται σφαιρικές αρμονικές βαθμού n ή αλλιώς συμπαγείς αρμονικές, οι όροι  $\frac{Y_n^m(\theta, \varphi)}{r^{n+1}}$  ονομάζονται σφαιρικές αρμονικές βαθμού -n-1 ή πολύπολα, και οι συντελεστές  $L_n^m$  και  $M_n^m$  ροπές του αναπτύγματος. Οι σφαιρικές αρμονικές με τη σειρά τους μπορούν να εκφραστούν με όρους μερικών διαφορικών εξισώσεων του 1/r με τελική κατάληξη τις μορφές:

$$\frac{Y_n^0(\theta, \varphi)}{r^{n+1}} = A_n^0 \frac{\partial^n}{\partial z^n} \left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.45), \text{ Kat } \gamma \text{ia } m > 0$$

$$\frac{Y_n^m(\theta, \varphi)}{r^{n+1}} = A_n^m \left(\frac{\partial}{\partial} x + i\frac{\partial}{\partial} y^m\right) \left(\frac{\partial}{\partial} z\right)^{n-m} \left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.46)$$

$$\frac{Y_n^{-m}(\theta, \varphi)}{r^{n+1}} = A_n^m \left(\frac{\partial}{\partial} x - i\frac{\partial}{\partial} y^m\right) \left(\frac{\partial}{\partial} z\right)^{n-m} \left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.47), \quad \mu \epsilon \text{:}$$

$$A_n^m = \frac{(-1)^n}{\sqrt{(n-m)! \cdot (n+m)!}} \quad (3.48)$$

Επιπρόσθετα με τα παραπάνω οι σφαιρικές αρμονικές ικανοποιούν τη σχέση :

 $Y_n^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} P_n^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} (3.49),$ με τις τις ειδικές συναρτήσεις  $P_n^m$  να ονομάζονται συσχετισμένες συναρτήσεις Legendre και να ορίζονται από τη φόρμουλα του Rodrigues.

Θεώρημα Πρόσθεσης για Πολυώνυμα Legendre: Για σημεία P και Q με σφαιρικές συντεταγμένες  $(r, \theta, \varphi)$  και  $(\rho, \alpha, \beta)$  αντίστοιχα, με γ τη μεταξύ τους γωνία, τότε :

$$P_n(\cos\gamma) = \sum_{m=-n}^n Y_n^{-m}(\alpha, \beta) \cdot Y_n^m(\theta, \varphi) \quad (3.50).$$

Συνδυάζοντας το θεώρημα αυτό με τη σχέση (3.40) προκύπτει πως:

$$\frac{1}{R} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \rho^{n} Y_{n}^{-m}(\alpha, \beta) \cdot \frac{Y_{n}^{m}(\theta, \varphi)}{r^{n+1}} \quad (3.51)$$

επομένως το πεδίο εξαιτίας ενός συνόλου φορτισμένων σωματιδίων μπορεί να αναλυθεί με πολυπολικούς όρους.

Θεώρημα Πολυπολικής Ανάπτυξης: Ας υποτεθεί πως ένα σύνολο από k σωματίδια, με φορτία  $q_i$ , i = 1, 2, ..., k, βρίσκονται στα σημεία  $Q_i = (\rho_i, \alpha_i, \beta_i)$ , i = 1, 2, ..., k με  $|\rho_i| < \alpha$ . Τότε για κάθε σημείο  $P = (\rho, \alpha, \beta) \in \mathbb{R}^3$  με  $r > \alpha$  το δυναμικό  $\Phi(P)$  θα δίνεται από τη σχέση:

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{P}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{\boldsymbol{M}_{n}^{m}}{\boldsymbol{r}^{n+1}} \boldsymbol{Y}_{n}^{m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}), \ \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\varepsilon} \ \boldsymbol{M}_{n}^{m} = \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{q}_{i} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{p}_{i}^{n} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{Y}_{n}^{-m}\left(\boldsymbol{\alpha}_{i},\boldsymbol{\beta}_{i}\right)$$
(3.52)

Η ακρίβεια του υπολογισμού προκύπτει επίσης από την ανάλυση ίση με:

$$\left| \Phi(P) - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{M_{n}^{m}}{r^{n+1}} Y_{n}^{m}(\theta, \varphi) \right| \leq \frac{A}{r-\alpha} \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{p+1} \quad (3.53), \text{ ónow } A = \sum_{i=1}^{k} |q_{i}| \quad (3.54)$$

#### 3.2.4 Αλγοριθμική Περιγραφή Της Μεθόδου Barnes- Hut με Πίνακες

Η μέθοδος FMM στις τρεις διαστάσεις μοιράζεται τη λογική και τη δομή της αρχικής δισδιάστατης μεθόδου. Ο χώρος του προβλήματος θεωρείται πως είναι ένας κύβος, και το κάθε τρισδιάστατο κουτί χωρίζεται σε 8 όμοια, όπως ακριβώς στον αρχικό αλγόριθμο Tree Code των Barnes και Hut. Γίνεται διάκριση σε κοντινούς γείτονες και καλά διαχωρισμένα κουτιά, χρησιμοποιείται και πάλι λίστα αλληλεπίδρασης και πολυπολικά αναπτύγματα  $Φ_{1,i}$ γύρω από το κέντρο του κάθε κουτιού τα οποία περιγράφουν το πεδίο σε μακρινές αποστάσεις από το κέντρο του κουτιού, εξαιτίας των σωματιδίων που βρίσκονται μέσα σε αυτό. Ο διαχωρισμός σε κουτιά και η εξέταση του καθενός γίνονται πλέον με αναδρομικό τρόπο.[74]

Με βάση τη μαθηματική ανάλυση της προηγούμενης παραγράφου, το όριο της (3.48) εφαρμόζεται για α /  $r < 1 / \sqrt{3}$  επομένως για να επιτευχθεί ακρίβεια ε χρειάζονται  $p = \log_{\sqrt{3}}(1 / \varepsilon)$  όροι.

Όπως και με την αρχική μέθοδο σε κάθε επίπεδο σχηματίζονται τα πολυπολικά αναπτύγματα και επιλύονται αριθμητικά με βάση τη λίστα αλληλεπίδρασης, δηλαδή τα κουτιά που δεν είναι ούτε κοντινοί γείτονες αλλά ούτε και πολύ μακρινοί.

Η αναδρομική διαδικασία διαχωρισμού σε κουτιά σταματάει μετά από  $\log_8 N$  επίπεδα. Σε κάθε επίπεδο οι υπολογισμοί και η προετοιμασία των εκφράσεων απαιτούν κόστος O(N). Το κόστος αυτό προκύπτει εάν θεωρηθεί πως για τα Ν σωματίδια του προβλήματος απαιτείται να δημιουργηθούν όλα τα αναπτύγματα, με κόστος  $Np^2$  αφού το κάθε σωματίδιο συνεισφέρει  $p^2$  συντελεστές στα αναπτύγματα. Επίσης εάν θεωρηθεί πως η εξέταση γίνεται από τη σκοπιά ενός μεμονωμένου σωματιδίου, στην περίπτωση αυτή το μέγιστο μέγεθος της λίστας αλληλεπίδρασης είναι 189 κουτιά και άρα για να εκτιμηθούν όλες οι τιμές των αναπτυγμάτων θα απαιτηθούν 189Np<sup>2</sup> πράξεις.

Στο τελικό και λεπτομερέστερο επίπεδο ο αλγόριθμος δημιουργεί 8<sup>log<sub>s</sub>N</sup> = N κουτιά και το τελικό βήμα είναι ο υπολογισμός της αλληλεπίδρασης μεταξύ άμεσα γειτονικών σωματιδίων και μόνο. Στο σημείο αυτό οι ερευνητές και πάλι κάνουν τη θεώρηση πως, εάν η κατανομή είναι ομοιόμορφη, λόγω ομοιογένειας στις θέσεις και αποστάσεις μεταξύ των σωματιδίων θα υπάρχουν O(1) σωματίδια ανά κουτί και το τελικό βήμα απαιτεί 27N πράξεις, με το συνολικό κόστος να προσεγγίζεται επομένως από την έκφραση 189Np<sup>2</sup> + 27N.

Ο αλγόριθμος όπως περιγράφηκε παραπάνω δεν είναι παρά μία non-adaptive έκδοση του αλγόριθμου των Barnes και Hut. Με βάση την ανάλυση παραπάνω και πειραματικά δεδομένα των ερευνητών, αυτή η εκδοχή δεν ήταν παρά ίσως 2 ή 3 φορές ταχύτερη από την αρχική Particle-Particle μέθοδο, πολυπλοκότητας  $O(N^2)$ . Αυτό φυσικά συμβαίνει επειδή με εξαίρεση την ανάλυση των πολυπόλων και τις σφαιρικές αρμονικές, η έκδοση αυτή δε χρησιμοποίησε κανενός είδους θεώρημα μιγαδικής ανάλυσης σε αντιστοιχία με αυτά της παραγράφου 3.1.2. Το μόνο που έκανε ήταν να αποφύγει το clustering των Barnes-Hut με τεχνάσματα πινάκων και να εκτιμηθούν οι τιμές δυναμικού μέσω αναπτυγμάτων. Δεν υπάρχει ροή πληροφορίας μεταξύ των επιπέδων όπως στο αρχικό FMM. [74]

#### 3.2.5 Σύγκριση της Μεθόδου BH με Πίνακες με το Αρχικό FMM

Σύμφωνα με την παράγραφο 3.1.5 και τον υπολογισμό κόστους του αρχικού FMM, η μέθοδος BH, στη βελτιωμένη έκδοσή της με χρήση πινάκων, απαιτεί μικρότερο αριθμό όρων *p* σε σχέση με το αρχικό FMM (δηλαδή εάν συγκριθεί η αρχική μέθοδος FMM της παραγράφου 3.1.4 επαναδιατυπωμένη για χρήση σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις.)



(a) Treecode: a cluster interacts with each far-away evaluation point



(b) FMM: a cluster interacts with the center of a far-away cluster, which is translated via local expansion to the evaluation points

Εικόνα 3-5: Αντιμετώπιση των σωματιδίων-στόχων από έναν Tree Code(a) και από τη μέθοδο FMM(b)

Το γεγονός αυτό μπορεί να γίνει αντιληπτό καλύτερα εάν εξεταστεί με ένα παράδειγμα. Έστω δύο σφαίρες A και B, μοναδιαίου όγκου, σε χώρο όπου αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και με την υπόθεση πως η σφαίρα A περιέχει φορτίο και η σφαίρα B περιέχει σημεία ενδιαφέροντος, η τιμή του δυναμικού των οποίων πρέπει να εκτιμηθεί. Το worst-case πολυπολικό σφάλμα ελαττώνεται σύμφωνα με την  $(\sqrt{3}/3)^p$  καθώς η ελάχιστη δυνατή ακτίνα της μικρότερης σφαίρας που περιέχει τον κύβο A είναι  $\sqrt{3}/2$  και η μικρότερη απόσταση σε ένα σωματίδιο ενδιαφέροντος εντός της σφαίρας B είναι 3/2. Η μετατροπή ενός πολυπολικού αναπτύγματος εντός της σφάιρας Α σε τοπικό ανάπτυγμα στη σφαίρα Β υπόκειται σε σφάλμα το οποίο εξαρτάται από την ελάχιστη σφαίρα που περιέχει σημεία της σφαίρας Β και την ελάχιστη σφαίρα που περιέχει σημεία της σφαίρας Α. Με βάση την εκτίμηση σφάλματος από τις ανισότητες εύρεσής του, στην ανάλυση του FMM, το χειρότερο σφάλμα είναι μικρότερο από  $(0.76)^p$ .

Να σημειωθεί τέλος στο σημείο αυτό πως παρά τη διαφορά των δύο μεθόδων στον τρόπο υπολογισμού των αλληλεπιδράσεων με τα σωματίδια στόχους (εικόνα 3-5), με την εισαγωγή πινάκων στην τεχνική επίλυσης καθίσταται εφικτός ο έλεγχος των επιδόσεων των δύο μεθόδων μεταξύ τους, απευθείας και με επιστημονικά κριτήρια.

#### 3.2.6 Βελτίωση του Αρχικού FMM με Μετατροπή της Λίστας Αλληλεπίδρασης

Στα πλαίσια του αρχικού FMM προτάθηκε η μετατροπή της λίστας αλληλεπίδρασης ώστε η λίστα κοντινών γειτόνων να περιέχει περισσότερους κοντινούς γείτονες, δεύτερης τάξης, ώστε τα κουτιά η αλληλεπίδραση των οποίων υπολογίζεται μέσω πολυπολικών αναπτυγμάτων, να διαχωρίζονται από τουλάχιστον δύο ακόμη κουτιά ίδιου μεγέθους. Με τον τρόπο αυτό το σφάλμα έχει ως άνω όριο την τιμή  $(0.4)^p$ . Παρόλ'αυτά ο αριθμός κοντινότερων γειτόνων αυξάνει από 27 σε 125 και η λίστα αλληλεπίδρασης αυξάνει από το να περιέχει 189 κουτιά στο σημείο να περιέχει 875 κουτιά.

Να σημειωθεί τέλος πως το βασικό εμπόδιο για την επίτευξη υψηλής ταχύτητας υπολογισμών, όταν η ζητούμενη ακρίβεια είναι υψηλή, είναι το αυξημένο υπολογιστικό κόστος της μετατροπής του πολυπολικού αναπτύγματος σε τοπικό ανάπτυγμα καθώς απαιτεί 189  $Np^4$  πράξεις ανά κουτί. Έχουν προταθεί μία σειρά από τρόποι μείωσης αυτού του κόστους, με κυριότερο αυτόν που βασίζεται σε περιστροφή του συστήματος συντεταγμένων ώστε το διάνυσμα που ενώνει το κουτί των εκάστοτε πηγών και των εκάστοτε στόχων βρίσκεται πάνω στον άξονα των z, και τα αναπτύγματα επίσης εκφράζονται πάνω στον άξονα των z, με συνακόλουθη τελική περιστροφή και πάλι στις αρχικές συντεταγμένες. [74]

# 3.3 FMM με Πίνακες Περιστροφής

#### 3.3.1 Θεωρήματα και Ορισμοί Μιγαδικής Ανάλυσης

Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, η μέθοδος FMM βασίζεται σε μαθηματικά λήμματα και θεωρήματα, με βάση τα οποία είναι δυνατό να επιταχυνθεί σημαντικά ο συνολικός χρόνος της μεθόδου [75]. Καθώς όμως η τεχνική είναι αντίστοιχη με αυτή της παραγράφου 3.1.2 και ξεφεύγει από τα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, θα πρέπει να αναζητηθεί στη βιβλιογραφία από τον αναγνώστη.

#### 3.3.2 Γενικά Στοιχεία για τη Νέα Εκδοχή της Μεθόδου

Η νέα εκδοχή της μεθόδου ακολουθεί τη λογική και στρατηγική της αρχικής, δισδιάστατης εκδοχής. Στην ανάλυση που ακολουθεί το πατρικό κουτί ενός δεδομένου κουτιού *j* συμβολίζεται ως p(j). Η λίστα κουτιών-γόνων του κουτιού *j* συμβολίζεται ως c(j) και τέλος, όσον αφορά τους όρους των εκθετικών αναπτυγμάτων των δυναμικών, όταν έχουμε εξερχόμενο εκθετικό ανάπτυγμα με όρους W(n, m) για  $v = 1,...,s(\varepsilon)$ ; m = 1,...,M(n), αυτό συμβολίζεται ως  $W_j$ , ενώ το εισερχόμενο εκθετικό ανάπτυγμα συμβολίζεται ως  $V_j$ .

Τα βήματα του αλγόριθμου αντιστοιχίζονται με τα βήματα της αρχικής εκδοχής [74] :

- Πέρασμα προς τα πάνω: Επιλέγεται ο αριθμός επιπέδων ανάλυσης ίσος με  $n \approx \log_8 N$  και η επιθυμητή τάξη του πολυπολικού αναπτύγματος, p. Ο αριθμός κουτιών στο τελικό, λεπτομερέστερο επίπεδο θα είναι ίσο με  $8^n$  και στην περίπτωση της ομοιόμορφης κατανομής ο μέσος αριθμός σωματιδίων ανά κουτί προκύπτει ίσος με  $s = N / (8^n)$ .
- Εκκίνηση:
  - Bήμα I: Στο λεπτομερέστερο επίπεδο σχηματίζονται τα πολυπολικά αναπτύγματα  $Φ_{n,i}$  του δυναμικού, εξαιτίας των σωματιδίων εντός του κάθε κουτιού, εκφρασμένα ως προς το κέντρο του κουτιού.
  - Βήμα 2: Για τα επίπεδα l = n 1,...,2 σχηματίζονται τα πολυπολικά αναπτύγματα  $\Phi_{l,j}$ εκφρασμένα ως προς το κέντρο του κάθε κουτιού στο επίπεδο l, με συνένωση των αναπτυγμάτων των οκτώ κουτιών-γόνων, με μετάφραση των πολυπολικών αναπτυγμάτων σύμφωνα με την  $\Phi_{l,j} = \sum_{k \in child(j)} T_{MM} \Phi_{l+1,k}$  (3.55)
- Πέρασμα προς τα κάτω:
- $E \kappa \kappa i \nu \eta \sigma \eta$ :  $T i \theta_{\epsilon \tau \alpha i} \Psi_{I,I} = \Psi_{I,2} = ... = \Psi_{I,s} = (0,0,...,0)$ 
  - Βήμα 3A: Για τα επίπεδα l = 2,..., n σχηματίζεται το ανάπτυγμα Ψ<sub>l,j</sub> για κάθε κουτί j σε κάθε επίπεδο l, με τρόπο ώστε το τοπικό ανάπτυγμα Ψ του πατρικού κουτιού του j, να περάσει στο j με παραγοντοποίηση local-to-local: Ψ<sub>l,j</sub> = T<sub>LL</sub>Ψ<sub>l-1,p(j)</sub> (3.56). Ακολούθως τίθεται Ψ<sub>l,j</sub> = Ψ<sub>l,j</sub>.
  - Βήμα 3B: Καθεμία από τις κατευθύνσεις πάνω, κάτω, δεξιά και αριστερά συμβολίζεται ως Dir και με Dir συμβολίζεται η αντίθετή της κατεύθυνση. Επομένως εάν ένα κουτί έστω B έχει εξερχόμενο ανάπτυγμα στην κατεύθυνση κουτιού C, τότε το C θα φαίνεται να έχει εισερχόμενο ανάπτυγμα από την αντίθετη κατεύθυνση.
  - Για καθεμία από τις τέσσερις κατευθύνσεις, για κάθε κουτί j σε κάθε επίπεδο l, το πολυπολικό ανάπτυγμα  $\Phi_{l,j}$  μετατρέπεται σε εξερχόμενο εκθετικό ανάπτυγμα στην

συγκεκριμένη κατεύθυνση, σύμφωνα με τη σχέση  $W_i = P^{Dir} \Phi_{l,i}$  (3.57)

- Ομοίως για κάθε κουτί j σε κάθε επίπεδο l συγκεντρώνονται τα εξερχόμενα εκθετικά αναπτύγματα αρνητικής κατεύθυνσης ως εισερχόμενα πλέον αναπτύγματα σύμφωνα με τη σχέση:  $V_j = \sum_{k \in -Dirlist} D_{\tilde{k_j}} W_k$  (3.58). Ως  $\tilde{k_j}$  συμβολίζεται το σε κατάλληλη κλίμακα εκφρασμένο διάνυσμα το οποίο συνδέει το κέντρο του κουτιού k με το κουτί j, στο περιστραμμένο σύστημα συντεταγμένων.
- Σχηματίζεται το ανάπτυγμα  $\Psi_{l,j}$  με μετατροπή του πολυπολικού αναπτύγματος  $\Phi_{l,k}$  του κάθε κουτιού k στη λίστα αλληλεπίδρασης του κουτιού j σε τοπικό ανάπτυγμα εκφρασμένο ως προς το κέντρο του j. Με συνολική άθροιση όλων των τοπικών αναπτυγμάτων προκύπτει πως:  $\Psi_{l,j} = \Psi_{l,j}^{-1} + \sum_{k \in child(j)} T_{MM} \Phi_{l+1,k}$  (3.59)
- Βήμα 4: Για κάθε σωματίδιο στο λε j πτομερέστερο επίπεδο n γίνεται υπολογισμός της τιμής του Ψ<sub>n, j</sub> στη θέση του σωματιδίου.
- Βήμα 5: Για κάθε σωματίδιο σε κάθε κουτί j στο λεπτομερέστερο επίπεδο, υπολογίζονται απευθείας οι αλληλεπιδράσεις με τα σωματίδια στα γειτονικά κουτιά.

#### 3.3.3 Σύντομη ανάλυση πολυπλοκότητας

Λόγω της χρήσης της μεθόδου περιστροφής με βάση τις παραγοντοποιήσεις  $T_{MM}$  και  $T_{LL}$ , τα βήματα 2 και 3Α πλέον απαιτούν συνολική εργασία ίση με  $3p^3(N / s)$ , όπου s είναι ο αριθμός σωματιδίων ανά κουτί, στο λεπτομερέστερο επίπεδο του αλγόριθμου. Στο βήμα 3B η εφαρμογή του τελεστή  $P^{Dir}$  και του τελεστή  $Q^{Dir}$  απαιτεί συνολική εργασία  $6p^3(N / s)$  και οι τελικές εκθετικές μεταφράσεις απαιτούν εργασία 189  $p^2(N / s)$ , διαμορφώνοντας το συνολικό κόστος σε 189  $\frac{N}{s}p^2 + 2Np^2 + 27$  N s + 6  $\frac{N}{s}$   $p^3$  (3.60). Εάν για λόγους γενίκευσης γίνει η αντικατάσταση s = 2p, τότε το συνολικό κόστος διαμορφώνεται σε 150 Np + 5  $Np^2$ 

## 3.4 Επιπρόσθετα Βελτιωμένες Εκδοχές FMM

Οι Greengard και Rokhlin εξαρχής αναγνώρισαν την αδυναμία της νέας εκδοχής της μεθόδου όσον αφορά τις σωματιδιακές κατανομές τις οποίες μπορεί να αντιμετωπίσει με ορθό τρόπο[74]. Όπως γίνεται προφανές και από την ανάλυση πολυπλοκότητας, η μέθοδος σε αυτή την εκδοχή της είναι σχεδιασμένη για ομοιόμορφες κατανομές, που παρόλ'αυτά δεν απαντώνται συχνά σε πραγματικά προβλήματα.

Για το λόγο αυτό εξαρχής, στις μετέπειτα προσπάθειες που έγιναν, τόσο από τους ίδιους όσο και από άλλους ερευνητές, η μία κατεύθυνση περεταίρω βελτίωσης της μεθόδου ήταν η εισαγωγή adaptive τρόπου διαχωρισμού σε κουτιά εντός των επιπέδων [68][76][77]. Λεπτομέρειες σχετικά με το ερευνητικό σκέλος των adaptive πλεγμάτων, ιεραρχικών και μη, μπορούν να αναζητηθούν στη βιβλιογραφία [88][89]. Επιπρόσθετα, όπως θα ήταν αναμενόμενο, λόγω των πολύ άνω της μέσης δυσκολίας μαθηματικών εννοιών που πραγματεύεται η μέθοδος, μία άλλη κατεύθυνση περεταίρω βελτίωσης ήταν η πρόταση νέων μαθηματικών και υπολογιστικών βελτιστοποιήσεων.

Τρίτη κατεύθυνση βελτίωσης αυτή της μεθόδου είναι η γενίκευσή της, για εφαρμογή σε προβλήματα σκέδασης με σωματίδια υψηλών συχνοτήτων και δυναμικά που εκφράζονται από την εξίσωση Helmhotlz για χαμηλές συχνότητες [78][79]. Προβλήματα δηλαδή, στα οποία η περιοχή ενδιαφέροντος δεν έχει διαστάσεις στην ίδια τάξη μεγέθους με τα μήκη κύματος των σωματιδίων, ούτε περιορίζεται σε διαστάσεις μερικών μηκών κύματος, αλλά αντίθετα περιέχει πολύ μεγάλο αριθμό διακριτών σημείων, τα οποία για παράδειγμα αποτελούν δομή – τμήμα μεγαλύτερου

συστήματος.

Ακολουθεί σύντομη αναφορά σε εκδοχές της μεθόδου FMM που εμφανίζουν ενδιαφέρον είτε όσον αφορά την εισαγωγή adaptive τεχνικής είτε όσον αφορά την μαθηματική βελτιστοποίηση. Η αναφορά δεν επιχειρεί να καλύψει όλες τις υπάρχουσες μεθόδους ή τις δυνατότητες βελτίωσης που έχουν προκύψει ανά τα έτη, καθώς εκτός από το μεγάλο πλήθος μεθόδων, κατά κανόνα τα ερευνητικά papers που τις παρουσιάζουν δεν συνοδεύονται από κώδικες, γεγονός που καθιστά την εξακρίβωση της απόδοσης και της επίδοσής τους αδύνατη. Επιπρόσθετα είναι σύνηθες το φαινόμενο πρότασης μικρών αλλαγών που δεν προκαλούν ουσιαστική βελτίωση επιδόσεων. Για το λόγο αυτό η παρούσα αναφορά στοχεύει κυρίως στο να ενημερώσει τον αναγνώστη σχετικά με τις κεντρικές έννοιες και τις βασικές δυνατότητες βελτιωμένης υλοποίησης πάνω στις δύο πρώτες κατευθύνσεις.

## 3.5 Adaptive Μέθοδοι FMM και Μαθηματικά Βελτιωμένες Εκδόσεις

Από την εισαγωγή της αρχικής εκδοχής της μεθόδου FMM το 1987 και όσον αφορά τις μετέπειτα εκδοχές που επικεντρωνόταν σε δισδιάστατα προβλήματα, ήταν δυνατή η λήψη πολύ ακριβών αποτελεσμάτων και με αποδεκτό κόστος ακόμα και με το υλικό υπολογιστών που ήταν διαθέσιμο στα μέσα και τέλη της δεκαετίας του 1980 [74][80]. Αντίθετα και όσον αφορά εκδοχές της μεθόδου για τρισδιάστατα προβλήματα, οι σύγχρονοι των παραπάνω προτεινόμενοι αλγόριθμοι ήταν πολύ λιγότερο αποδοτικοί, με εξαίρεση περιπτώσεις στις οποίες η απαιτούμενη ακρίβεια ήταν χαμηλή [80].

Η κατάσταση άλλαξε ριζικά με την εισαγωγή της νέας, τρισδιάστατης εκδοχής του FMM, από τους Greengard και Rokhlin, το 1997, η οποία αποδείχθηκε αποδοτική σε μία πληθώρα ζητούμενων ακριβειών. Καθώς όμως η εν λόγω εκδοχή απευθυνόταν σε ομοιόμορφες κατανομές και δεν περιέγραφε παρά την απλούστερη non-adaptive εκδοχή του χωρισμού σε επίπεδα και κουτιά, όπως αναφέρθηκε στην ανάλυση παραπάνω, ήταν άμεση η ζήτηση για αλγόριθμους και κώδικες που θα μπορούσαν να αντεπεξέλθουν σε ρεαλιστικές εφαρμογές, με κύριο γνώρισμα την (άκρως) μη ομοιόμορφη φύση των κατανομών.

#### 3.5.1 A Fast Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions

#### των H. Cheng, L. Greengard, και V. Rokhlin.

#### 3.5.1.1 Περιγραφή της Μεθόδου

Η εκδοχή του αλγόριθμου FMM των Cheng, Greengard και Rokhlin εισάγει μία μέθοδο αντιμετώπισης των σωματιδιακών κατανομών που είναι δυνατόν να εφαρμοστεί σε όλες τις κατανομές ασχέτως βαθμού ανομοιομορφίας. Επίσης βελτιώνει το μαθηματικό υπόβαθρο της αρχικής μεθόδου με εισαγωγή μίας "συμπιεσμένης" εκδοχής των τελεστών μετάφρασης, γεγονός που βελτιώνει κατά πολύ τα χρονικά αποτέλεσμα της μεθόδου [76].

Ο χώρος υπολογισμού της μεθόδου ορίζεται κατά την εκκίνηση της προσομοίωσης ίσος με τον εκάστοτε ελαχίστων δυνατών διαστάσεων κύβο, που να περιέχει όλα τα σημεία του προβλήματος. Η ιεραρχία κουτιών χτίζεται όπως και στις προγενέστερες μορφές FMM, με όλο και πιο μικρά κουτιά. Εκκινώντας από το επίπεδο 0 και για όλο τον κύβο, καταλήγει στο τελικό επίπεδο μετά από *l*+1 διαχωρισμούς των κουτιών, όπου *l* το κάθε επίπεδο.

Επιπρόσθετα με τους ορισμούς του αρχικού FMM τριών διαστάσεων εισάγονται οι έννοιες των λιστών αλληλεπίδρασης σε λεπτομερέστερες κατευθύνσεις με συνδυασμούς διευθύνσεων πάνω κάτω και δεξιά αριστερά με διαφορετικό από τον αρχικό τρόπο. Η μέθοδος αποκτά έτσι τις

λεγόμενες γενικευμένες λίστες αλληλεπίδρασης.

Σε αντίθεση με την απλή "naive" στρατηγική της εφαρμογής του τελεστή  $T_{ML}$  189 φορές ανά κουτί με κόστος 189· $p^4$ , με διαφοροποίηση του κώδικα και χρήση μίας παρατήρησης είναι δυνατό να πέσει το υπολογιστικό κόστος σε 189·3· $p^3$ . Με πρόσθετη βελτιστοποίηση και χωρίζοντας τον υπολογισμό σε τμήματα, σύμφωνα με τις λίστες αλληλεπίδρασης σε κατευθύνσεις, είναι δυνατό το συνολικό κόστος να πέσει σε 20· $p^3$ +189· $p^2$  πράξεις ανά κουτί.

Ο διαχωρισμός των σωματιδίων σε κουτιά γίνεται σύμφωνα με την αρχική μέθοδο: εάν το εξεταζόμενο κουτί δεν έχει σωματίδια στο εσωτερικό του η ύπαρξή του αγνοείται. Εάν αντίθετα έχει, αλλά τα σωματίδιά του είναι λιγότερα από κάποιον αυθαίρετο αριθμό s, τότε ονομάζεται "κουτί χωρίς γόνους" και ο διαχωρισμός του σταματάει στο παρόν επίπεδο. Διαφορετικά το κουτί διαχωρίζεται και τα νέα κουτιά που προκύπτουν εξετάζονται με την ίδια συνθήκη. Τέλος όσον αφορά τις απαιτούμενες δομές δεδομένων η παρούσα μέθοδος καταγράφει ξεχωριστά τα κουτιά χωρίς γόνους και αυτά με γόνους, ακολουθώντας πάντα την βελτιωμένη μέθοδο τρισδιάστατου FMM Greengard και Rokhlin όσον αφορά τη διαχείριση μνήμης και τους δείκτες εντός δομών.

#### 3.5.1.2 Ανάλυση Πολυπλοκότητας και Σύγκριση με Tree Codes

Το κόστος της εκδοχής αυτής της μεθόδου, μπορεί να αναλυθεί σε δύο όρους,με τον πρώτο να αφορά την κατασκευή της δομής δεδομένων στο αρχικό βήμα και τον δεύτερο τον υπολογισμό των δυναμικών.

Εάν Ν είναι ο αριθμός σωματιδίων του υπό προσομοίωση συστήματος, τότε για σχετικά ομοιόμορφες κατανομές στις οποίες μπορεί να χρησιμοποιηθεί ταξινόμηση των κελιών και όχι αναδρομικός διαχωρισμός, ο χρόνος εκτέλεσης για το πρώτο βήμα ανήκει στην τάξη  $O(N \log N)$  και για το δεύτερο βήμα στην τάξη O(N). Για τις υπό εξέτασιν σχετικά ομοιόμορφες κατανομές το υπολογιστικό κόστος είναι προσεγγιστικά ίσο με :

$$27Ns + 2Np^2 + 189\frac{N}{s}p^2 + \frac{20N}{s}p^3 \quad (3.61)$$

με τη μεταβλητή s va αποτελεί τον αριθμό σωματιδίων ανά κουτί και ταυτόχρονα το κριτήριο διαχωρισμού σε επίπεδα για τη μέθοδο. Οι όροι αντίστοιχα προέρχονται από την απευθείας αλληλεπίδραση με άμεσα γειτονικά κουτιά, από το σχηματισμό και τον υπολογισμό των πολυπολικών αναπτυγμάτων και των τοπικών αναπτυγμάτων στο λεπτομερέστερο επίπεδο, οι τελευταίοι δύο από τη μετάφραση μέσω του τελεστή  $T_{ML}$  [56].

Με βάση τις παρατηρήσεις που αναφέρθηκαν παραπάνω και θέτοντας  $s \approx p^{3/2}$  η συνολική εργασία του FMM είναι  $O(Np^{3/2})$ , και το κόστος αποθήκευσης στη μνήμη

$$O\left(\frac{N}{s}p^2\right) \approx O(N^{3/2}) \quad (3.62)$$

Η μέθοδος FMM επιτρέπει διάφορους τρόπους για τον υπολογισμό αλληλεπιδράσεων μεταξύ δύο κουτιών, έστω του κουτιού-πηγή b και του κουτιού-στόχου c:

- 1. Απευθείας υπολογισμό μεταξύ των κουτιών.
- 2. Εκτίμηση του πολυπολικού αναπτύγματος για το b απευθείας στο c.
- 3. Μετατροπή του πεδίου εξαιτίας του *b* σε τοπικό ανάπτυγμα εντός του *c*, με ακόλουθη εκτίμηση σε διαφορετικό χρόνο (λόγω αλγοριθμικής δομής)
- 4. Μετατροπή του πολυπολικού αναπτύγματος του *b* σε τοπικό ανάπτυγμα εντός του *c*, με ακόλουθη εκτίμηση σε διαφορετικό χρόνο (λόγω αλγοριθμικής δομής)

Όσον αφορά τη σύγκριση με Tree Codes ή Clustering Codes γίνεται αντιληπτό πως, με τους

Tree Codes οι αλληλεπιδράσεις υπολογίζονται είτε απευθείας μεταξύ κοντινών σωματιδίων είτε με υπολογισμό πολυπολικών αναπτυγμάτων μεταξύ καλά διαχωρισμένων κουτιών (σύμφωνα με την επιλογή 2 παραπάνω) ενώ με τους κώδικες Clustering [18] (όπως οι μέθοδοι που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 1 της παρούσας διπλωματικής εργασίας) οι αλληλεπιδράσεις γίνονται είτε με απευθείας υπολογισμό, είτε με υπολογισμό τοπικού αναπτύγματος (σύμφωνα με την επιλογή 3 παραπάνω), σε συνδυασμό πάντα με την ανάλυση της παραγράφου 3.2.7.

Είναι εμφανές ότι με κατάλληλη πρόβλεψη στην υλοποίηση, η μέθοδος FMM που προτείνεται θα επιτρέπει την επιλογή ελαχίστου κόστους μεταξύ των παραπάνω και για το λόγο αυτό θα είναι χρήσιμη τόσο σε μεμονωμένες περιοχές του χώρου επίλυσης, όσο και συνολικά αποδοτικότερη και από τους Tree Codes και από τους κώδικες Clustering.

#### 3.5.2 Preconditioned, Adaptive, Multipole-accelerated Iterative Methods for Threedimensional First-kind Integral Equations of Potential Theory

#### των K. Nabors,F.T. Korsmyeyer,F.T. Leighton και J.White

Ο παρών αλγόριθμος δεν αποτελεί ανάπτυξη μίας νέας μεμονωμένης, βελτιωμένης μεθόδου FMM αλλά αντίθετα χρησιμοποιεί στοχευμένα τη βελτιωμένη μέθοδο, σε ένα αλγοριθμικό κομμάτι του και μόνο, με σκοπό την ταχύτερη δυνατή επίλυση πυκνού πίνακα  $N \times N$ , ο οποίος μπορεί να είναι συμμετρικός ή όχι [68]. Ο συνολικός αλγόριθμος είναι αλγόριθμος GMRES επαναληπτικής επίλυσης για πυκνό πίνακα  $N \times N$  και ο adaptive FMM αλγόριθμος, σύμφωνα με τους ερευνητές εμφανίζει κόστος της τάξης O(N) και στόχος του είναι να επιλύσει ολοκληρωματικές εξισώσεις που περιέχουν τους παράγοντες  $\frac{1}{r}$  και  $\frac{\partial}{\partial n} \frac{1}{r}$ . Με την εφαρμογή των παραγόντων αυτών σε μία διαφορική εξίσωση ή σε ένα σύστημα εξισώσεων καθορίζονται οι τιμές λύσης στο όριο του χωρίου επίλυσης.

Η μέθοδος FMM αποτελεί προσεγγιστικό τρόπο εύρεσης του δυναμικού εξαιτίας μίας κατανομής σωματιδίων με την προσέγγιση να είναι γραμμική συνάρτηση των φορτίων. Ο γραμμικός μετασχηματισμός εκφράζεται άμεσα με όρους πινάκων μετασχηματισμού, τα στοιχεία των οποίων είναι εξαρτώμενα από τη γεωμετρία του προβλήματος και μόνο. Το γεγονός αυτό με τη σειρά του σημαίνει πως:

- 1. Οι πίνακες απαιτείται να υπολογιστούν μία και μόνο φορά και να χρησιμοποιηθούν σε κάθε επανάληψη της μεθόδου GMRES.
- 2. Γραφή του αλγόριθμου με χρήση πινάκων καθιστά εμφανή την adaptive δομή του εσωτερικού υπολογισμού μέσω FMM.

Ο αλγόριθμος εκκινεί ακριβώς όπως η μέθοδος που περιγράφεται στην παράγραφο 3.4.1. με τη διαφορά πως ο χωρισμός σε επίπεδα γίνεται με κριτήρια όγκου και όχι διαστάσεων πλευρών, και πως στο τελικό επίπεδο διαχωρισμού έχουμε τμήση σε 8<sup>l</sup> κομμάτια της αρχικής δομής του GMRES προβλήματος, όπου με l συμβολίζεται το κάθε επίπεδο. Το τελικό επίπεδο καθορίζεται με τρόπο ώστε, με βάση το αρχικό πρόβλημα, στο λεπτομερέστερο επίπεδο να μην υπάρξουν περισσότερα "σωματίδια" από ότι όροι πολυπολικού αναπτύγματος. Ο όρος σωματίδια χρησιμοποιείται με αρκετή χαλαρότητα καθώς δεν έχουμε σημειακά φορτία αλλά καλύτερα επιφανειακές πυκνότητες πάνω σε δισδιάστατα πάνελ (στοιχειώδη πεπερασμένα επίπεδα) [68].

Η γενική αντιμετώπιση του προβλήματος μέσω adaptive τεχνικής σημαίνει πως ο χώρος του προβλήματος διαχωρίζεται σε κουτιά ανισομερώς, με τρόπο που το κάθε λεπτομερέστερου επιπέδου κουτί να έχει τον ελάχιστο δυνατό όγκο. Παρόλ'αυτά καθώς το συνολικό πρόβλημα αποτελεί πρόβλημα οριακών συνθηκών, σε πολλές περιπτώσεις είναι δυνατόν η adaptive τεχνική να

απαιτεί πολλαπλάσιο υπολογιστικό κόστος σε σχέση με την non-adaptive [81][82].

Για το λόγο αυτό και με συνακόλουθη δυσκολία στην μετατροπή του αλγόριθμου σε κώδικα, προτιμάται από μέρους των ερευνητών να διατηρηθεί στις περιπτώσεις αυτές η δομή του επιφανειακού φορτίου, και να μη γίνει καν μετατροπή της σε πολυπολικό ανάπτυγμα. Ο λόγος είναι πως η πληροφορία πυκνότητας φορτίου μπορεί να ρέει μεταξύ των επιπέδων ευκολότερα σε αντίθεση με το πολυπολικό ανάπτυγμα [68].

#### 3.5.3 A Free-Space Adaptive FMM-Based PDE Solver in Three Dimensions

#### των H. Langston, L. Greengard και D. Zorin

Όπως παρουσιάστηκε στην παράγραφο 3.1.6 και όπως αναφέρεται στη βιβλιογραφία [83] [84], σε ένα κανονικό πλέγμα με οριακές συνθήκες Dirichlet, Neumann ή περιοδικές οριακές συνθήκες, είναι δυνατός ο υπολογισμός γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με μεθόδους ταχείας άθροισης. Αντίθετα για τον υπολογισμό σε συστήματα χωρίς οριακές συνθήκες, με μη ομοιόμορφες κατανομές σωματιδίων πάνω σε adaptive ή μη οργανωμένα πλέγματα, απαιτούνται εναλλακτικές στρατηγικές [85][86]. Η ερευνητική εργασία των Lagnston et al, επικεντρώνει στην παρουσίαση μίας μεθόδου για άμεση υψηλής τάξης επίλυση μη ομογενών γραμμικών μερικών διαφορικών εξισώσεων (ΜΔΕ) με σταθερούς όρους, σε συστήματα τριών διαστάσεων και με χώρο εξασθένισης των φαινομένων στο άπειρο.

Η μέθοδος χρησιμοποιεί τον kernel-indepedent FMM αλγόριθμο των Ying, Biros και Zorin [87], ο οποίος επιτρέπει την επίλυση οποιασδήποτε ελλειπτικής μερικής διαφορικής εξίσωσης, αρκεί να υπάρχει διαθέσιμη κάποια ρουτίνα εκτίμησης της συνάρτησης του Green για την εξίσωση. Ομοίως με τον αλγόριθμο της παραγράφου 3.5.2. έχουμε έναν εξωτερικό αλγόριθμο ο οποίος για να επιταχύνει τμήμα των υπολογισμών του, με ζητούμενη αυθαίρετη τιμή ακρίβειας, καταφεύγει στην χρήση FMM ως αξιόπιστης και αποδοτικής μεθόδου επίλυσης μέρους του προβλήματος [80].

#### 3.5.3.1 Γενικά για τις Μεθόδους Επίλυσης ΜΔΕ

Υπάρχει διαθέσιμο πλήθος μεθόδων για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων σε διαχωρίσιμα συστήματα συντεταγμένων. Οι μέθοδοι αυτές εφαρμόζονται σε πλέγματα σταθερών διαστάσεων και κατά κύριο λόγο βασίζονται στη χρήση κυκλικής μείωσης [85][86] ή στη χρήση FFT για να πετύχουν σχεδόν γραμμική κλιμακοποίηση κόστους [87].

Σε πολλά προβλήματα στα οποία όμως είναι απαραίτητη η χρήση adaptive πλέγματος έχουν προταθεί μέθοδοι που βασίζονται σε στρατηγικές κατακερματισμού του πεδίου επίλυσης [88][89] ή σε επιτάχυνση με χρήση πολλαπλών πλεγμάτων [90][91]. Ειδικά σε περιπτώσεις μιγαδικής γεωμετρίας γίνεται χρήση τεχνικών μη δομημένου πλέγματος, όμως τόσο η διαδικασία κατασκευής του πλέγματος και των συνακόλουθων δομών δεδομένων, όσο και τα προκύπτοντα γραμμικά συστήματα απαιτούν υψηλό υπολογιστικό κόστος.

#### 3.5.3.2 Μαθηματική Ανάλυση Μεθόδου Επίλυσης ΜΔΕ

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία για μία ΜΔΕ με σταθερούς όρους όπως η:

$$L(u)(x) = g(x)$$
 (3.63)

υπάρχουν κλασσικές μαθηματικές μέθοδοι που παρέχουν την αντίστοιχη συνάρτηση του Green K(x, y) στον ελεύθερο χώρο. Με βάση τις μεθόδους αυτές μπορεί να γίνει απευθείας υπολογισμός της λύσης:

$$u(x) = \int_{\Omega} K(x, y)g(y)dy \quad (3.64)$$

με το Ω να ανήκει στο πεδίο υποστήριξης του g. Επομένως καθώς η K(x, y) είναι γενικά ασθενώς μοναδική (weakly singular), με χρήση κατάλληλης quadrature προσέγγισης, η (3.64) δίνει μία χρήσιμη αριθμητική μέθοδο. Απαιτείται ταυτόχρονα η ύπαρξη γρήγορου αλγόριθμου, επειδή ο μη τοπικός χαρακτήρας της ολοκληρωματικής αναπαράστασης θα οδηγούσε σε μέθοδο με κόστος  $O(N^2)$ , μιας και προφανώς έχουμε επίλυση με βάση N σημεία και επιθυμητή εύρεση λύση σε N σημεία.

Εάν τα παραπάνω προβλήματα ξεπεραστούν προκύπτει μία σειρά από πλεονεκτήματα. Δεν απαιτείται επίλυση γραμμικού συστήματος και μπορεί να γίνει χρήση adaptive quadrature κανόνα. και επίσης κατά τον υπολογισμό των παραγώγων υπάρχει απώλεια ακρίβειας καθώς αυτός γίνεται με απλή διαφόριση:

$$\nabla u(x) = \nabla \int_{\Omega} K(x, y) g(y) dy \quad (3.65)$$

Ακολούθως λόγω της χρήσης του FMM υπάρχει a priori υπολογισμός σφάλματος και μάλιστα το τελικό σφάλμα προκύπτει ίσο με:

$$e(x) = u(x) - \hat{u}(x) = \int_{\Omega} K(x, y)g(y)dy - \int_{\Omega} \hat{K}(x, y)\hat{g}(y)dy \quad (3.66)$$
$$= \int_{\Omega} K(x, y)[g(y) - \hat{g}(y)]dy + \int_{\Omega} |K(x, y) - \hat{K}(x, y)||\hat{g}(y)|dy$$
$$\delta\piov C_{1} = \frac{max}{x}\int K(x, y)dy$$

και η παράμετρος *e* προκύπτει ως σφάλμα της προσέγγισης του πυρήνα K(x, y), και λαμβάνει τιμές ανάλογα με τη ζητούμενη ακρίβεια, μέσω της μεθόδου FMM. Το παρόν σφάλμα είναι παρόλ'αυτά μικρότερο από το αναμενόμενο για άλλες μεθόδους επίλυσης MΔE, καθώς συνήθως καθορίζεται από τις υψηλότερου βαθμού παραγώγους της λύσης, ενώ στην παρούσα μέθοδο εξαρτάται από την ποιότητα της προσέγγισης.

Για τις εξισώσεις Poisson, Helmholtz και Stokes που ακολουθούν:

$$-\Delta u(x) = g(x) \quad (3.67)$$
$$a \cdot u(x) - \Delta u(x) = g(x) \quad (3.68)$$
$$\nabla p(x) - \Delta u(x) = g(x), \nabla \cdot u(x) = 0 \quad (3.69)$$

οι αντίστοιχοι πυρήνες της 3.64 θα είναι:

$$K(x, y) = \frac{1}{4\pi r} \quad (3.70)$$
$$K(x, y) = \frac{1}{4\pi r} e^{-\sqrt{ar}} \quad (3.71)$$
$$K(x, y) = \frac{1}{8\pi\mu} \left(\frac{1}{r}I + \frac{\vec{r} \otimes \vec{r}}{r^{3}}\right) \quad (3.72)$$

Η μέθοδος χρησιμοποιεί εκδοχή του FMM που είναι ανεξάρτητη από τον πυρήνα K(x, y). Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας περεταίρω μαθηματική ανάλυση ή διευκρινίσεις πάνω στη μέθοδο επίλυσης MΔE κρίνονται υπερβολικές και θα πρέπει να αναζητηθούν από τον αναγνώστη στη βιβλιογραφία.

#### 3.5.3.3 Ανάλυση Kernel-Independent Μεθόδου FMM (KIFMM)

Η παρούσα ανάλυση ακολουθεί τη αλγοριθμική δομή βημάτων της αρχικής εκδοχής της μεθόδου FMM για την εξίσωση Poisson σε δύο διαστάσεις με ακόλουθη γενίκευση για τις τρεις διαστάσεις.

Εάν με g συμβολίζεται η κατανομή δυνάμεων στα σημεία πηγές  $N_{src}$  και ζητείται η εκτίμηση των δυναμικών λόγω των παραπάνω πηγών  $u_j$  στα σημεία στόχους  $N_{trg}$ , που βρίσκονται στα σημεία  $x_j$  του χώρου τότε:

$$u_{j} = u_{j}(x) = \int_{\mathbb{R}^{2}} K(x, y) g(y) dy \approx \sum_{i=1}^{N_{m}} K(x_{j}, y_{i}) g(y_{i}) w_{i}, j = , ..., N_{trg} \quad (3.73)$$

όπου σύμφωνα με την παράγραφο 3.1.2 της παρούσας διπλωματικής εργασίας:

$$K(x, y) = -\log \frac{||x - y||}{2\pi}$$
 (3.74)



Εικόνα 3-6 : Χωρισμός του χώρου επίλυσης, από το αρχικό κουτί ρίζα σε τρία επίπεδα.

και  $w_i$  το βάρος της κάθε πηγής στην τοποθεσία  $y_i$ . Εάν γίνει η προσέγγιση  $N_{src} \approx N_{trg} \approx N$ η μέθοδος FMM μειώνει το υπολογιστικό κόστος από  $O(N^2)$  σε O(N), και με επίπεδο ακρίβειας καθοριζόμενο από το χρήστη.

Η μέθοδος αρχικοποιεί το χώρο επίλυσης στον ελάχιστων διαστάσεων κύβο, που περιέχει όλα τα σημεία  $N_{src}$ , με τρόπο που τα  $N_{trg}$  να βρίσκονται και αυτά εντός του αρχικού κύβου. Ο χωρισμός του octree σε επίπεδα γίνεται με αναδρομικό τρόπο, με δυνατότητα επιλογής πλέγματος ανάλογα με την κατανομή των σημείων. Επομένως μπορεί ο ερευνητής κατά την εκτέλεση να επιλέξει είτε adaptive είτε uniform grid.

i	i	i	i	i	i	
i	i	n	n	n	i	
i	i	n	в	n	i	
i i	i i	n n	B n	n n	i i	
i i i	i i i	n n i	B n i	n n i	i i i	

Εικόνα 3-7 : Το κουτί Β, η λίστα γειτόνων, οι οποίοι συμβολίζονται με η και η λίστα αλληλεπίδρασης, τα κουτιά της οποίας συμβολίζονται με i. Για απλότητα εικονίζεται nonadaptive πλέγμα.

Για κάθε κουτί έστω B, με διάμετρο H, το πεδίο κοντινών αλληλεπιδράσεων ορίζεται ως το πεδίο των κουτιών που περιέχονται εντός του κύβου που έχει το ίδιο κέντρο βάρους με το B, αλλά διάμετρο 3H. Η λίστα γειτόνων αποτελείται από τα κουτιά που ανήκουν στο κοντινό πεδίο και έχουν ένα κοινό σημείο επαφής με το αρχικό κουτί. Η λίστα αλληλεπίδρασης αποτελείται από τα παιδιά του πατρικού του B κουτιού, που δεν είναι όμως γείτονες του B, αποτελεί δηλαδή υπερσύνολο του πεδίου κοντινών αλληλεπίδράσεων. Ομοίως το πεδίο μακρινών αλληλεπίδράσεων είναι το υπόλοιπο του αρχικού κουτιού, αν εξαιρεθεί η λίστα αλληλεπίδρασης και το πεδίο κοντινών αλληλεπίδρασης και το πεδίο κοντινών αλληλεπίδράσεων.

Ομοίως με άλλες εκδοχές FMM το μέγιστο βάθος δένδρου καθορίζεται με βάση τη μεταβλητή s, που ισούται με τον επιθυμητό αριθμό σημείων ανά κουτί στο λεπτομερέστερο επίπεδο διαχωρισμού. Σε κάθε δομή δεδομένων του δένδρου η μέθοδος συσχετίζει και περιέχει δύο αναπτύγματα σειρών, το τοπικό ανάπτυγμα σειράς Taylor και το πολυπολικό ανάπτυγμα

Το τοπικό ανάπτυγμα αντιπροσωπεύει την επίδραση όλων των πηγών που ανήκουν στο πεδίο μακρινής αλληλεπίδρασης του κουτιού Β. Καθώς η συνάρτηση του πεδίου είναι αρμονική μπορεί να γραφεί σε μορφή πραγματικού μέρους μίας μιγαδικής συνάρτησης Taylor

$$u(x)_{loc}^{B} = \Re \left[ \sum_{k=0}^{p} c_{k} ((x_{1} + ix_{2}) - z_{b})^{k} \right] \quad (3.75)$$

όπου το σημείο  $Z_B$  είναι το κέντρο του κουτιού B και  $x = (x_1, x_2)$ . Το σφάλμα στο τοπικό ανάπτυγμα είναι της τάξης  $O(\frac{1}{2})^p$ , με τρόπο ώστε θέτοντας  $p = \log_2(1 / e)$ , να είναι εξασφαλισμένη η ακρίβεια e.

Το πολυπολικό ανάπτυγμα γύρω από το Z<sub>B</sub> αντιπροσωπεύει την επίδραση όλων των πηγών
εντός του κουτιού *B* πάνω στα κουτιά του μακρινού πεδίου. Ομοίως με το τοπικό ανάπτυγμα και καθώς ισχύουν οι ίδιες συνθήκες, το ανάπτυγμα γράφεται σε μορφή πραγματικού μέρους μιγαδικής σειράς Laurent:

$$u(x)_{far}^{B} = \Re \left[ a_{0} \log(x_{1} + ix_{2} - \boldsymbol{Z}_{B}) + \sum_{k=1}^{p} \frac{a_{k}}{(x_{1} + ix_{2} - \boldsymbol{Z}_{B})^{k}} \right]$$
(3.76)

Οι ροπές του αναπτύγματος υπολογίζονται από τις κατανομές των πηγών σύμφωνα με τις εξισώσεις:

$$\alpha_{0} = -\frac{1}{2\pi} \int_{B} f(y) d(y) , \ \alpha_{k} = -\frac{1}{2\pi} \int_{B} f(y) \frac{\left((y_{1} + iy_{2}) - Z_{B}\right)^{k}}{k} \quad (3.77)$$

## 3.5.3.4 Τα Βήματα της Μεθόδου KIFMM

Πέρασμα προς τα πάνω: Εκκινώντας στο κατώτατο και λεπτομερέστατο επίπεδο της δενδρικής δομής, η μέθοδος μετατρέπει τις τιμές της δύναμης στα σημεία πηγές σε πολυπολικές εκφράσεις, για κάθε κουτί-φύλλο του δένδρου. Ο υπολογισμός αυτός γίνεται με τον τελεστή source-to-multipole (S2M) με πολλαπλασιασμό πινάκων  $p \, x \, s_B$  όπου  $s_B$  είναι ο αριθμός των πηγών στο εκάστοτε κελί B. Με αναδρομικό τρόπο και μετακινώντας τις εκφράσεις από τα κέντρα των κελιών γόνων προς τα κέντρα των πατρικών κελιών, η μέθοδος ανεβαίνει επίπεδα με εφαρμογή του τελεστή multipole-to-multipole (M2M), με πολλαπλασιασμό πινάκων  $p \, x \, p$ .



Εικόνα 3-8: Ισοδύναμες επιφάνειες και έλεγχος επιφανειών κατά το πέρασμα προς τα πάνω. Εικονίζεται με βέλη η φορά εφαρμογής των τελεστών S2M και M2M.

Πέρασμα προς τα κάτω: Εκκινώντας από το αρχικό κελί της δομής, και για κάθε κελί B, το τοπικό ανάπτυγμα λόγω του πεδίου μακρινών αλληλεπιδράσεων λαμβάνεται μετακινώντας αρχικά το τοπικό ανάπτυγμα από το πατρικό κελί του B στο κέντρο του B. Αυτό γίνεται με εφαρμογή του τελεστή local-to-local (L2L). Στη συνέχεια προστίθενται οι συμμετοχές από τα πολυπολικά

αναπτύγματα των κέντρων των γονικών του B κελιών, βάσει της λίστας αλληλεπίδρασης του B.

Οι συμμετοχές αυτές είναι η ακριβής διαφορά ανάμεσα στο μακρινό πεδίο του B και το μακρινό πεδίο του γονέα του B. Για κάθε κουτί στη λίστα αλληλεπίδρασης του B το πολυπολικό ανάπτυγμα μετατρέπεται σε τοπικό, εκφρασμένο ως προς κέντρο του B, με εφαρμογή του τελεστή multipole-to-local (M2L) με όμοιο πολλαπλασιασμό πινάκων  $p \ge p$ .

Στο τέλος του περάσματος, σε όλα τα φύλλα του δένδρου έχουν υπολογιστεί τα τοπικά αναπτύγματα και μένει μόνο να υπολογιστεί η τιμή του δυναμικού στα σημεία στόχους. Αυτό γίνεται με εφαρμογή του τελεστή local-to-targer (L2T), με πολλαπλασιασμό πίνακα επί διάνυσμα  $p \ x \ t_{B}$ 



Εικόνα 3-9: Ισοδύναμες επιφάνειες κατά το πέρασμα προς τα κάτω. Εικονίζεται η εφαρμογή των τελεστών M2L και L2L.

Συνοψίζοντας καταλήγουμε πως η μέθοδος μπορεί να εκφραστεί ως αλληλουχία εφαρμογών των τελεστών S2M, M2M, M2L, L2L, L2T που είναι όλοι γραμμικοί . Για τους τελεστές M2M και L2L ο κάθε πίνακας υπολογίζεται από τη σχετική θέση του κουτιού και του γονέα του, επομένως υπάρχουν 8 πίνακες για κάθε κουτί στη δομή από octrees. Όσον αφορά την εφαρμογή των τελεστών M2L ο κάθε πίνακας αντιστοιχεί στη σχετική θέση του κουτιού στη λίστα αλληλεπιδράσεων, επομένως υπάρχουν 189 πίνακες για το κάθε κουτί. Οι αριθμοί αυτοί μικραίνουν αισθητά εάν ληφθεί υπόψιν η συμμετρία του προβλήματος, σε περίπτωση που αυτή υπάρχει. Για σταθερά s και p ο υπολογισμός είναι σταθερού χρόνου και η συνολική μέθοδος FMM έχει πολυπλοκότητα O(N). Η ροή της πληροφορίας μεταξύ των τελεστών απεικονίζεται στις εικόνες 3-8, 3-9, 3-10.



Εικόνα 3-10: Η εφαρμογή του τελεστή L2T στο τελικό στάδιο της μεθόδου.

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

# Περίληψη Κεφαλαίου 4

Σε αυτό το κεφάλαιο γίνεται αναφορά σε κώδικες που επιτελούν σωματιδιακές προσομοιώσεις ή επιλύουν το συνολικό δυναμικό πεδίο και πεδίο δυνάμεων για σωματιδιακές κατανομές, με χρήση των μεθόδων Barnes-Hut και FMM. Γίνεται αναλυτική περιγραφή των κωδίκων που γράφτηκαν κατά την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας προς την κατεύθυνση της ανάπτυξης ενός περιβάλλοντος benchmarking με βάση τους εξεταζόμενους κώδικες, καθώς και των μετατροπών που απαιτήθηκαν στους υφιστάμενους κώδικες. Παρατίθενται τμηματικά οι κώδικες και τα script που επιτελούν τις λειτουργίες του εργαλείου, καθώς και αναλυτικές μετρήσεις χρόνου εκτέλεσης και σφαλμάτων για τα προγράμματα του περιβάλλοντος και σχολιασμός των αποτελεσμάτων.

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

# ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

## 4.1 Γενικά

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας απαιτήθηκε από τον γράφοντα η συγγραφή πλήθους προγραμμάτων και scripts. Γλώσσα επιλογής για τη συγγραφή από μέρους του γράφοντος ήταν εξαρχής η C, καθώς για τις απαιτούμενες χρήσεις των προγραμμάτων δεν υπήρχε λόγος για χρήση αντικειμενοστραφούς προγραμματισμού. Τα διαγράμματα του παρόντος κεφαλαίου έγιναν με εισαγωγή των δεδομένων των κατανομών στη Matlab.

Βασικές απαιτήσεις των κωδίκων που συγγράφηκαν ήταν η δυαδική είσοδος και έξοδος σε αρχεία καταγραφής, η ευκολία προσαρμογής και η ταχύτητα δημιουργίας σετ δεδομένων, αλλά και αντίστροφα, η ευκολία φόρτωσης δεδομένων από αρχεία σε ήδη έτοιμα προγράμματα καθώς και η ευκολία ανάλυσης αποτελεσμάτων από τα αρχεία καταγραφής.

Όλες οι παραπάνω απαιτήσεις σε συνδυασμό με τη χαλαρότητα της απαίτησης αντικειμενοστράφειας ή κλάσεων και κληρονομικότητας καθιστούν τη C ιδανική επιλογή, σε συνδυασμό με την ευρεία αποδοχή της από την επιστημονική κοινότητα. Η τελευταία παρατήρηση αυξάνει την πιθανότητα ο αναγνώστης να είναι ήδη γνώστης της γλώσσας ή εύκολα να μπορεί, με αναζήτηση στις βιβλιογραφικές πηγές ή απλά στο διαδίκτυο, να κατανοήσει τους κώδικες του γράφοντος και να τους παραμετροποιήσει όπως επιθυμεί..

Θα πρέπει να σημειωθεί πως τα προγράμματα που τροποποιήθηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, ήταν γραμμένα κατά κύριο λόγο σε C, C++ ή FORTRAN. Αυτός είναι και ο τελικός λόγος επιλογής της C, καθώς είναι εύκολη η επέκταση του ήδη έτοιμου κώδικα σε C και C++, με απλή διόρθωση και χωρίς αλλαγές στα αντίστοιχα makefiles αφενός και αφετέρου είναι ομοίως εύκολη η υλοποίηση crosscompilation εάν αυτό απαιτηθεί από κάποιον χρήστη ή μελλοντικό συνεχιστή του εγχειρήματος.

Όλα τα scripts είναι γραμμένα σε φλοιό bash λειτουργικού συστήματος GNU/Linux, για τον απλό λόγο της ευρείας και ελεύθερης διάθεσης των προγραμμάτων σε εκδοχές για Linux και μόνο. Με τη χρήση του όρου Linux υπονοείται σε αρκετές περιπτώσεις (για τα απλούστερα προγράμματα) δυνατότητα compilation και εκτέλεσης σε παρεμφερή λειτουργικά συστήματα, όπως BSD, MacOS ή τον προσομοιωτή cygwin. Στα scripts γίνεται χρήση των ιδιοτήτων και λειτουργιών του φλοιού για την επίτευξη της δημιουργίας και παραμετροποίησης του περιβάλλοντος. Ομοίως με παραπάνω, η επιλογή του φλοιού bash καθιστά ευκολότερη την παραμετροποίηση και συνέχιση του εγχειρήματος, καθώς αποτελεί τον πλέον διαδεδομένο φλοιό, ο οποίος έχει μεταφερθεί τόσο στο Unix όσο και στο Mac OS και το cygwin και επιτρέπει την εκτέλεση του περιβάλλοντος σε ευρύ φάσμα υπολογιστών.

Το σύνολο των αρχικών προγραμμάτων είναι διαθέσιμα με άδεια GNU GPL ή MIT License, γεγονός που επιτρέπει τη μετατροπή τους στα πλαίσια της αρχικής τους χρήσης, και την ελεύθερη διάθεση του μεταποιημένου κώδικα, με ταυτόχρονη παροχή, από τον αρχικό συγγραφέα ή τον γράφοντα, αντιγράφων των παραπάνω αδειών.

Η παρούσα διπλωματική εργασία και όλοι οι κώδικες γράφτηκαν εξολοκλήρου σε περιβάλλον GNU/Linux.

## 4.2 Σωματιδιακές Κατανομές

## 4.2.1 Κατανομές και Γεωμετρίες Προβλημάτων Επίδειξης

Ο έλεγχος της απόδοσης και της ακρίβειας επίλυσης ή προσομοίωσης είθισται να γίνεται με βάση συγκεκριμένες σωματιδιακές κατανομές, προκειμένου να υπάρχει δυνατότητα άμεσης σύγκρισης και διαπίστωσης της ορθότητας των αποτελεσμάτων. Οι κατανομές βρίσκονται σε όγκους εγγεγραμμένους σε μοναδιαίους κύβους (ή κύβους μεγαλύτερου όγκου), που τροποποιούνται όπως αναφέρεται παρακάτω, και είναι συγκεκριμένα:

- 1. Εντός κύβου μοναδιαίας πλευράς, με κέντρο την αρχή τον αξόνων, άκρα [-0.5, 0.5] στις τρεις διαστάσεις και συνολικό όγκο ίσο με τη μονάδα, τυχαία κατανομή σωματιδίων.
- 2. Εντός σφαίρας μοναδιαίας διαμέτρου, με κέντρο στην αρχή των αξόνων, τυχαία κατανομή σωματιδίων.
- 3. Εντός σφαίρας μοναδιαίας διαμέτρου, με κέντρο στην αρχή των αξόνων, κατανομή σύμφωνη με το Μοντέλο Αστρικών Ομάδων του Plummer.
- 4. Εντός κυλίνδρου με βάση μοναδιαίας διαμέτρου, τυχαία κατανομή.
- Πάνω σε δίσκο αμελητέου πάχους, μοναδιαίας διαμέτρου, ο οποίος βρίσκεται στο επίπεδο xy μοναδιαίου κύβου, με το κέντρο του δίσκου να συμπίπτει με το κέντρο της αρχής των αξόνων.
- 6. Εντός μοναδιαίου κύβου, δομή διπλής έλικας, ή πρωτεϊνικές δομές που παρατηρούνται στη φύση, οι λεπτομέρειες των οποίων δεν εμπίπτουν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας.
- 7. Τυχαίες κατανομές σε πλέγματα lattice ή άλλες που απαντώνται σε μεμονωμένα παραδείγματα προγραμμάτων.
- 8. Σε κάποια προγράμματα που στοχεύουν στην επίλυση ηλεκτρικών πεδίων και δυναμικών για εφαρμογές όπως αυτές των παραγράφων 3.5.2 και 3.5.3, έχουμε όγκους, όμως οι κατανομές των σωματιδίων γίνονται πάνω στις επιφάνειες που ορίζουν τους όγκους και μόνο.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις προκύπτουν από το σύνολο των papers που αποτελούν τη βιβλιογραφία της παρούσας διπλωματικής εργασίας, αλλά και από το documentation που παρατίθεται από τους συγγραφείς των προγραμμάτων.

## 4.1.2 Κλίμακες Δεδομένων και Κλιμακοποίηση

Σε αρκετές περιπτώσεις, προκειμένου να υπάρξει δυνατότητα φόρτωσης διαφορετικού σετ δεδομένων οι συγγραφείς του προγράμματος επιτρέπουν οποιοδήποτε αρχικό όγκο κατανομής στο χώρο, συνήθως με κέντρο την αρχή των αξόνων.

Ακολούθως κατά το τελικό στάδιο της προετοιμασίας των δεδομένων και πριν την έναρξη της προσομοίωσης, γίνεται υπολογισμός του λόγου του αρχικού όγκου προς το μοναδιαίο και ακολούθως γίνεται κλιμακοποίηση των δεδομένων σε μοναδιαίο όγκο. Με τον τρόπο αυτό το πρόγραμμα κάνει επίλυση ή προσομοίωση πάντα εντός μοναδιαίου όγκου και στο τελικό στάδιο, με αποκλιμακοποίηση με βάση τον αντίστροφο λόγο, εξάγει αποτελέσματα ορθά ως προς το αρχικό πρόβλημα.

Η παραπάνω διαδικασία έχει στόχο να απλοποιήσει τη δομή των προγραμμάτων και να

αποτρέψει σε πολλές περιπτώσεις μετατοπισμένες γεωμετρίες και χρήση διανυσμάτων μετατόπισης, κάτι που θα έκανε αρκετά πιο δύσκολη τη συγγραφή του κώδικα και το συνακόλουθο debugging, και θα αποτελούσε παράγοντα επιπρόσθετων καθυστερήσεων και απαιτήσεων σε μνήμη κατά την εκτέλεση.

## 4.2.2 Κοινές και Γενικά Αποδεκτές Κατανομές

Τα προγράμματα στα οποία γίνεται αναφορά στις παρακάτω παραγράφους έχουν όλα μέσα τους συναρτήσεις ή ρουτίνες δημιουργίας σετ δεδομένων. Η υπάρχουσα αυτή υποδομή δυστυχώς δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί στα πλαίσια της ανάπτυξης περιβάλλοντος benchmarking για τους κάτωθι λόγους:

- 1. Η διαδικασία δημιουργίας τυχαίων δεδομένων δεν είναι σε όλες τις περιπτώσεις ικανοποιητική, όσον αφορά τη γεννήτρια τυχαίων δεδομένων του προγράμματος.
- 2. Δεν υπάρχουν κοινές επιλογές κατανομών, ούτε και όλες οι επιθυμητές δυνατότητες παραμετροποίησης σε όλα τα προγράμματα, τη στιγμή που σε πολλές περιπτώσεις απουσιάζουν βασικές δυνατότητες, καθώς οι γεννήτριες κατανομών έχουν συγγραφεί για λόγους επίδειξης και όχι επίλυσης.
- 3. Αντίθετα με την παραπάνω παρατήρηση οι κώδικες αστρικών προσομοιώσεων όσο και επίλυσης περίπλοκων ηλεκτροστατικών πεδίων (για εφαρμογές βιομηχανίας) τείνουν να κινούνται στο αντίθετο άκρο: φόρτωση αρχείων έτοιμων δεδομένων με παραμέτρους που είναι περίπλοκες και απαιτούν εμβάθυνση στην επιστήμη του αστρονόμου ή του ηλεκτρολόγου μηχανικού, δεν αποτελούν όμως τυχαίες κατανομές. Αποτελούν για παράδειγμα στιγμιότυπα τροχιών πλανητικών συστημάτων, οι τροχιές των οποίων υπολογίζονται για λόγους αστρικών παρατηρήσεων και όχι εκτίμησης απόδοσης κώδικα.
- 4. Τα δεδομένα που δημιουργούνται είναι "εσωτερικά" των προγραμμάτων. Δύο τυχαίες μοναδιαίες κατανομές απέχουν μεταξύ τους λόγω της διαδικασίας της τυχαίας δημιουργίας των αριθμών και επιπρόσθετα τα δεδομένα χάνονται με το πέρας της εκτέλεσης του προγράμματος και δεν υπάρχει δυνατότητα εκ των υστέρων ελέγχου ορθότητας των προσεγγίσεων με ακριβή επίλυση για το σετ δεδομένων.
- 5. Δεν υπάρχει εκ των προτέρων δυνατότητα για αποθήκευση των σετ δεδομένων ή των αποτελεσμάτων σε εξωτερικά αρχεία: καθώς σκοπός των συγγραφέων είναι η επίδειξη της μεθόδου με τα ελάχιστα δυνατά "περιτυλίγματα", τέτοιες λειτουργίες συχνά απουσιάζουν, και η μοναδική δυνατότητα είναι η εκτύπωση στην οθόνη του σφάλματος της προσέγγισης ή του τελικού αποτελέσματος.
- 6. Καθώς ορισμένες κατανομές αποτελούν στάνταρ όσον αφορά την εκτίμηση ταχύτητας των προγραμμάτων, όπου αυτές απουσίαζαν έπρεπε να ξαναγραφούν, εσωτερικά σε κάθε πρόγραμμα.
- 7. Τυχόν αλλαγές σε παραμέτρους για αλλαγή του σετ δεδομένων θα έπρεπε να γίνονται με αντικατάσταση κώδικα στα ήδη έτοιμα αρχεία, κάτι που απαιτεί επακριβή γνώση του που βρίσκονται οι επιλογές εντός κάθε φακέλου με αρχεία πηγαίου κώδικα, και συνακόλουθο compilation μετά από κάθε αλλαγή. Τα παραπάνω απαιτούν γνώση όλων των προγραμμάτων σε βάθος, καθιστώντας αδύνατη την άμεση παρακολούθηση ή μετατροπή της εκτέλεσης από κάποιον με ελαφρώς αδύναμη γνώση προγραμματισμού.



Εικόνα 4-1: Παράδειγμα κατανομής 1000 σωματιδίων πάνω σε επίπεδη επιφάνεια



Εικόνα 4-2: Παράδειγμα κατανομής 1000 σωματιδίων σε Αστρικό Μοντέλο Plummer, εν κινήσει, με φορά διανύσματος ταχύτηταςπρος τα κάτω.



Εικόνα 4-3: Παράδειγμα κατανομής 1000 σωματιδίων πάνω στην εζωτερική επιφάνεια κυλίδρου.

## 4.2.3 Γεννήτρια Τυχαίων Δεδομένων

Για τις ανάγκες της παρούσας διπλωματικής εργασίας δεν υπήρχε λόγος για δημιουργία απολύτως τυχαίων αριθμών. Αρκετά από τα προγράμματα του περιβάλλοντος είχαν μία απλή κλήση συνάρτησης τυχαίας δημιουργίας διπλής ακρίβειας αριθμών της εκάστοτε γλώσσας προγραμματισμού (για παράδειγμα στη C++ απλή κλήση της srand(0)) για τη δημιουργία σετ τυχαίων δεδομένων κάτι που κρίθηκε ως υπεραπλούστευση.

Η δημιουργία τυχαίων σημείων στα πλαίσια των συντεταγμένων των κατανομών καλύπτεται ικανοποιητικά από τον έτοιμο αλγόριθμο των Parker και Miller που μπορεί να εντοπιστεί στη βιβλιογραφία. Ο κώδικας παρατίθεται αυτούσιος και σε όσα σημεία γίνεται χρήση του υπάρχει αντίστοιχη αναφορά στην αρχή του πηγαίου κώδικα του προγράμματος δημιουργίας της κατανομής.

Τα τυχαία σωματίδια τοποθετούνται στον άδειο χώρο με βάση τυχαίες θέσεις και με το συνολικό φορτίο να είναι ίσο με τη μοναδιαία τιμή (αντίστοιχα μάζα για τις βαρυτικές προσομοιώσεις). Οι θέσεις καθορίζονται από τις τιμές της συνάρτησης δημιουργίας τυχαίων αριθμών των Parker και Miller, όπως διαμορφώθηκε από τον Schrage και με χρήση του κώδικα των συγγραφέων του βιβλίου "Numeric Recipes in C" [108].

Το φορτίο του κάθε σωματιδίου θα είναι είτε ίσο με το φορτίο όλων των άλλων σωματιδίων και ίσο με  $\frac{1.0}{N_{src}}$ , είτε μπορεί να παίρνει τυχαίες τιμές οι οποίες αθροίζονται και στη συνέχεια η κάθε τιμή διαιρείται με το συνολικό άθροισμα ώστε το νέο συνολικό άθροισμα να είναι ίσο με τη μονάδα.

### Παρατίθεται αυτούσιος ο κώδικας:

- \* The code utilizes the Minimal Standard Random Number Generator
- \* by Parker and Miller, as adapted by Schrage and code by

```
* the writers of "Numeric Recipes in C"
#define IM1 2147483563
#define IM2 2147483399
#define AM (1.0/IM1)
#define IMM1 (IM1-1)
#define IA1 40014
#define IA2 40692
#define IQ1 53668
#define IQ2 52774
#define IR1 12211
#define IR2 3791
#define NTAB 32
#define NDIV (1+IMM1/NTAB)
#define EPS 1.2e-7
#define RNMX (1.0-EPS)
#define PI 3.14159265
```

```
float ran2(long *idum)
```

```
/* Long period (> 2 × 1018) random number generator of L'Ecuyer with Bays-Durham shuffle
* and added safeguards. Returns a uniform random deviate between 0.0 and 1.0 (exclusive
of
* the endpoint values). Call with idum a negative integer to initialize; thereafter, do
not alter
* idum between successive deviates in a sequence. RNMX should approximate the largest
floating
* value that is less than 1.
*/
{
    int j;
   long k;
   static long idum2=123456789;
    static long iy=0;
    static long iv[NTAB];
    float temp;
    if (*idum <= 0) {
                                              // Initialize.
      if (-(*idum) < 1) *idum=1;
                                                 //Be sure to prevent idum = 0.
      else *idum = -(*idum);
      idum2=(*idum);
      for (j=NTAB+7;j>=0;j--) {
                                                //Load the shuffle table (after 8 warm-
ups).
```

```
k=(*idum)/IQ1;
            *idum=IA1*(*idum-k*IQ1)-k*IR1;
            if (*idum < 0) *idum += IM1;
            if (j < NTAB) iv[j] = *idum;</pre>
            }
      iy=iv[0];
    }
    k=(*idum)/IQ1;
                                        //Start here when not initializing.
    *idum=IA1*(*idum-k*IQ1)-k*IR1;
                                                 //Compute idum=(IA1*idum) % IM1 without
    if (*idum < 0) *idum += IM1;
                                        //overflows by Schrage's method.
    k=idum2/IQ2;
    idum2=IA2*(idum2-k*IQ2)-k*IR2;
     if (idum2 < 0) idum2 += IM2;
                                                        // Compute idum2=(IA2*idum) % IM2
likewise.
    j=iy/NDIV;
                                               // Will be in the range 0..NTAB-1.
                                        //Here idum is shuffled, idum and idum2 are
    iy=iv[j]-idum2;
    iv[j] = *idum;
                                        //combined to generate output.
    if (iy < 1) iy += IMM1;
    if ((temp=AM*iy) > RNMX) return RNMX;
                                                   //Because users don't expect endpoint
values.
    else return temp;
```



Εικόνα 4-5: Παράδειγμα τυχαίας κατανομής 1000 σωματιδίων σε μοναδιαίο κύβο, με τη χρήση του αλγορίθμου των Parker και Miller. Στην εικόνα παρατηρείται η ανάλυση της κατανομής σε στιγμιότυπα επιπέδων και στα διαγράμματα η κατανομή των σωματιδίων αντίστοιχα για τα επίπεδα xy, xz, και yz σε καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων.



Εικόνα 4-6: Παράδειγμα τυχαίας κατανομής 1000 σωματιδίων σε μοναδιαία σφαίρα, με τη χρήση του αλγορίθμου των Parker και Miller. Στην εικόνα παρατηρείται η ανάλυση της κατανομής σε στιγμιότυπα επιπέδων και στα διαγράμματα η κατανομή των σωματιδίων αντίστοιχα για την ακτίνα ρ,τη γωνία θ και τη γωνία φ, σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων.

## 4.2.4 Όγκοι και Κατανομές του Περιβάλλοντος

}

Για όλους τους λόγους που αναφέρονται στην παράγραφο 4.2.2 κρίθηκε αναγκαίο, στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, πολλές από τις κατανομές, και ιδίως αυτές που θεωρούνται κοινά αποδεκτές, να υποστηρίζονται για όλα τα προγράμματα του περιβάλλοντος. Επομένως έπρεπε να γραφούν εξωτερικά αρχεία δημιουργίας κατανομών σε C, όλες οι παράμετροι των οποίων να είναι άμεσα ελέγξιμες. Με τον τρόπο αυτό εξασφαλίζεται η ομοιομορφία των εισόδων άμεσα και δεν υπάρχει λόγος ο χρήστης να γνωρίζει την εσωτερική δομή του κάθε προγράμματος.

Η έξοδος των σετ δεδομένων γίνεται ανάλογα με το πρόγραμμα εισόδου η απόδοση του οποίου μετράται κάθε φορά. Στην περίπτωση που μετρώνται ταυτόχρονα περισσότερα από ένα προγράμματα, από τη στιγμή που σκοπός είναι η εύρεση του ταχύτερου προγράμματος επίλυσης και ο εντοπισμός των σφαλμάτων ή τυχόν ανακριβειών στη συμπεριφορά του κάθε κώδικα,για το ίδιο πρόβλημα, επιστρατεύονται τα scripts που υλοποιούν το περιβάλλον, ώστε να αντιγράφονται τα ίδια αρχεία εισόδου σε όλους τους φακέλους.

Για λόγους ακρίβειας και για να μην εισαχθεί περεταίρω σφάλμα στους υπολογισμούς, τα

σετ εισόδου των προγραμμάτων είναι σε δυαδική μορφή (binary δεδομένα) τόσο για τις συντεταγμένες όσο και για τις τιμές φορτίου ή μάζας.

Παρατίθενται στο σημείο αυτό δειγματοληπτικά τμήματα από τους κώδικες που δημιουργούν κατανομές:

## 1. Σε μοναδιαίο κύβο:

```
int res = 0;
long int seed=0;
double charge_sum=0.0;
for (int i = 0 ; i < part ; i++ ){
      pinakas[i].x = x0 + mhkos * (ran2( &seed ) - 0.5) ;
      pinakas[i].y = y0 + mhkos * (ran2( &seed ) - 0.5) ;
      pinakas[i].z = z0 + mhkos * (ran2( &seed ) - 0.5) ;
      //pinakas[i].charge = 1.0/part;
      pinakas[i].charge = ran2( &seed );
      charge_sum = charge_sum + pinakas[i].charge;
}
for (int i = 0 ; i < part ; i++ ){
    pinakas[i].charge = pinakas[i].charge_sum;
      }
```



Εικόνα 4-7: Παράδειγμα κατανομής 1000 σωματιδίων σε μοναδιαίο κύβο. Τα δεδομένα εξάγονται από πρόγραμμα δημιουργίας κατανομής σε C και η απεικόνισή τους γίνεται με χρήση της συνάρτησης της Matlab scatter3.

#### 2. Σε μοναδιαία σφαίρα.

```
int res = 0;
long int seed=0;
double charge_sum=0.0;
for (int i = 0; i < part; i++) {
      double phi = ran2( &seed ) * 2 * PI;
      double theta = ran2( &seed ) * PI ;
      pinakas[i].x = x0 + rad * (sin(phi) * sin(theta));
      pinakas[i].y = y0 + rad * (cos(phi) * sin(theta));
      pinakas[i].z = z0 + rad * (cos (theta));
      //pinakas[i].charge = 1.0/part;
      pinakas[i].charge = ran2( &seed );
      charge_sum = charge_sum + pinakas[i].charge;
}
 for (int i = 0 ; i < part ; i++ ) {
pinakas[i].charge= pinakas[i].charge/charge_sum;
  }
```



Εικόνα 4-8:Παράδειγμα κατανομής 1000 σωματιδίων σε μοναδιαία σφαίρα. Τα δεδομένα εζάγονται από πρόγραμμα δημιουργίας κατανομής σε C και η απεικόνισή τους γίνεται με χρήση της συνάρτησης της Matlab scatter3.

```
3. Σε μοντέλο Plummer:
```

```
int res = 0;
long int seed=0;
double radius = 0.0;
double theta = 0.0;
double velocity = 0.0;
double phi = 0.0;
double x = -2.0/3.0;
double sum = 0.0;
for (int i = 0; i < particles; i++) {
      //pinakas[i].charge = 1.0/particles;
      pinakas[i].charge =ran2(&seed);
      sum = sum + pinakas[i].charge;
      radius = pow (ran2(&seed), x) -1;
      radius = 1.0 / sqrt (radius);
      if (radius >1.0) radius = 0.5;
      printf("%f \n", radius);
      theta = acos(xx(-1.0, 1.0));
      phi = xx (0, 2*M PI);
      pinakas[i].x = radius * sin ( theta ) * cos (phi);
      pinakas[i].y = radius * sin ( theta ) * sin (phi);
      pinakas[i].z = radius * cos ( theta );
      double x1 = 0.0;
      double y1 = 0.1;
      while ( y1 > (x1 * x1 * pow ( (1.0 - (x1 * x1)), 3.5) )
                                                                  )
      {
             x1 = xx(0, 1);
             y1 = xx(0, 0.1);
      }
      velocity = x1 * sqrt(2.0) * pow(( 1.0 + radius*radius), -0.25);
      theta = acos (xx(-1, 1));
      phi = xx(0, 2 * M PI);
      pinakas[i].vx = velocity * sin( theta ) * cos( phi );
      pinakas[i].vy = velocity * sin( theta ) * sin( phi );
      pinakas[i].vz = velocity * cos( theta );
}
for (int i = 0; i < particles; i++) {
      pinakas[i].charge =pinakas[i].charge/sum ;
}
```



Εικόνα 4-9:Παράδειγμα κατανομής 1000 σωματιδίων σε μοντέλο Plummer.Τα δεδομένα εζάγονται από πρόγραμμα δημιουργίας κατανομής σε C και η απεικόνισή τους γίνεται με χρήση της συνάρτησης της Matlab scatter3.



Εικόνα 4-10: Η κατανομή της εικόνας 4-9 σε κάτοψη.

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφερθεί πως το μοντέλο Plummer ένα μοντέλο που μπορεί να δημιουργηθεί με τυχαίο τρόπο, καθώς στην ουσία έχει προκύψει από αστρονομικές παρατηρήσεις και η δημιουργία μοντέλου που να αντιστοιχεί στην πραγματικότητα δεν είναι απλή διαδικασία που βασίζεται σε δημιουργία random δεδομένων και μόνο. Η στρατηγικές με βάση τις οποίες δημιουργείται ένα ακριβές μοντέλο περιγράφονται λεπτομερώς στο σύγγραμμα "The Art of Scientific Computing Vol 9" των Makino και Hut [109]. Οι κώδικες του συγγράμματος μεταφέρθηκαν από ruby και java σε C για τις ανάγκες της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

## 4.2.5 Είσοδος και Έξοδος Δυαδικών Δεδομένων

Όπως αναφέρθηκε στις παραγράφους 4.2.2 και 4.2.4 τα προγράμματα του περιβάλλοντος τροποποιήθηκαν ώστε να μπορούν να διαβάζουν δυαδικά αρχεία που περιέχουν τις μεταβλητές των κατανομών αντίστοιχα τις συντεταγμένες x, y, z και το φορτίο ή τη μάζα του κάθε σωματιδίου. Με όμοιο τρόπο τα προγράμματα δημιουργίας κατανομών καταγράφουν τις συντεταγμένες και τη μάζα ή το φορτίο στα αρχεία καταγραφής, σε δυαδική μορφή, με αριθμούς διπλής ακρίβειας (double, 8 bytes).

Έγινε προσπάθεια σε όλες τις τροποποιήσεις να υπάρχει όμοια σύνταξη και χρήση του ίδιου code snippet, για λόγους άμεσου εντοπισμού των τροποποιήσεων και debugging. Παρατίθενται υποδείγματα του κώδικα:

Για καταγραφή γραμμικού μονοδιάστατου πίνακα δεδομένων σε ενιαία γραμμική εγγραφή σε αρχείο, με κλήση της συνάρτησης furite:

```
// binary file output
FILE *fp ;
if ((fp = fopen("binary_x","wb"))==NULL) {
    printf("Cannot open file.\n");
    exit(1);
    }
fwrite( output_x, 1 , part * sizeof(double),fp);
fclose( fp );
```

Για καταγραφή πίνακα δεδομένων ως ενιαία γραμμική εγγραφή σε αρχείο, με κλήση των συναρτήσεων ftell για το διάβασμα του συνολικού μήκους αρχείου σε byte και fread για ανάγνωση σειριακής εγγραφής από αρχείο και τοποθέτηση σε σειριακό πίνακα δεδομένων στη μνήμη :

```
/* allocate memory to contain the whole file:*/
if (( buffer =(double *) malloc( file_size)) == NULL) {
    printf("Cannot open file.\n");
    exit(1);
}
/* copy the file into the buffer: */
if ((result = fread ( buffer , sizeof ( double ) , file_size / sizeof ( double ) , fp))
!= (file_size/sizeof(double)) ) {
    printf("Read Error fread crash.\n");
    exit(1);
}
fclose ( fp );
printf("%ld doubles read\n",(long)result);
```

#### 4.2.6 Ανάλυση Δεδομένων

Όλα τα προγράμματα του περιβάλλοντος επιτρέπουν την άμεση λήψη ακριβών αποτελεσμάτων με τη μέθοδο του απευθείας  $N^2$  υπολογισμού, μετά τον προσεγγιστικό υπολογισμό. Έτσι μετά τον προσεγγιστικό υπολογισμό, ο έλεγχος περνάει στις συναρτήσεις που λύνουν το πρόβλημα με απευθείας υπολογισμούς και καταλήγουν σε εύρεση τιμών σφαλμάτων και σύγκριση αποτελεσμάτων και ακρίβειας μεταξύ της αρχικής μεθόδου και των απευθείας πράξεων.

Λόγω του κόστους του απευθείας υπολογισμού, πολλές από τις ρουτίνες δεν κάνουν επίλυση όλου του σετ δεδομένων, παρά μόνο για κάποια ελάχιστα συγκριτικά σωματίδια, κάτι που δεν επιτρέπει λήψη σαφών και οριστικών αποτελεσμάτων. Με όμοιο τρόπο με τα παραπάνω και καθώς οι συναρτήσεις υπολογισμού σφαλμάτων και αποκλίσεων είναι και πάλι εσωτερικές των προγραμμάτων δεν υπάρχει κοινό μέτρο ούτε και δυνατότητα απευθείας σύγκρισης.

Για το λόγο αυτό κρίθηκε αναγκαίο να γραφεί κώδικας που συγκρίνει τα αποτελέσματα των μεθόδων μεταξύ τους. Το προκύπτων πρόγραμμα διαβάζει τη δυαδική έξοδο από δύο σετ τιμών εξόδου και τα συγκρίνει μεταξύ τους, σημείο προς σημείο, όσον αφορά τις τιμές του δυναμικού και της πεδιακής έντασης σε κάθε σημείο evaluation του σετ εξόδου. Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατό να προκύψουν μετρήσεις μετά από επιλύσεις για διαφορετικές τιμές ακρίβειας, χωρίς να είναι απαραίτητο να γίνεται κάθε φορά ο απευθείας υπολογισμός. Ομοίως είναι δυνατό ο απευθείας υπολογισμός να γίνει μία και μόνο φορά, και έπειτα τα αποτελέσματα εξόδου του κάθε προγράμματος να συγκριθούν, με μεγάλη οικονομία σε χρόνο.

Εύκολα ο κώδικας μπορεί να επεκταθεί για να δέχεται περισσότερα ορίσματα και να υπολογίζει περισσότερα σφάλματα εκτός από το απόλυτο σφάλμα ανά σημείο, το μέγιστο απόλυτο σφάλμα και το μέσο απόλυτο σφάλμα, καθώς και τις αντίστοιχες τιμές για τα τετραγωνικά σφάλματα, δηλαδή απόλυτο τετραγωνικό σφάλμα ανά σημείο, μέγιστο τετραγωνικό σφάλμα και μέσο τετραγωνικό σφάλμα για όλο το σετ δεδομένων.

Παρατίθεται δειγματοληπτικά το snippet που κάνει τον υπολογισμό του σφάλματος απόλυτης διαφοράς ανά σημείο και του μέγιστου απόλυτου σφάλματος :

```
if ( diff_final_direct[i] > max_diff) max_diff= diff_final_direct[i];
sum = sum + diff_final_direct[i]; //sum abs diff
}
mean abs diff = (sum / (double) file size potential );
```

Ο κώδικας περιέχεται στο αρχείο result\_analysis.c και κατά τη διαδικασία προετοιμασίας του περιβάλλοντος και της εκτίμησης της απόδοσης των προγραμμάτων, όπως αυτή θα περιγραφεί παρακάτω, το εκτελέσιμο αρχείο που προκύπτει είναι άμεσα και ξεχωριστά διαθέσιμο για την λήψη αποτελεσμάτων ακρίβειας και σφαλμάτων.

## 4.3 Περιγραφή του Περιβάλλοντος

### 4.3.1 Προετοιμασία Βοηθητικών Προγραμμάτων

Στον εκάστοτε φάκελο περιλαμβάνονται εκτός από τα αρχεία tar με τον πηγαίο κώδικα των προγραμμάτων που αξιολογούνται, ένας φάκελος με τίτλο "additions" καθώς και τέσσερα scripts που ονομάζονται: config.sh, generate.sh, run.sh και autoclean.sh. Τα scripts ακολουθούν την ίδια βηματική διαδικασία σε όλες τις περιπτώσεις.

Το πρώτο σε σειρά εκτέλεσης script είναι το config.sh. Κατά την εκτέλεση του script ορίζεται ως μεταβλητή φλοιού η διαδρομή του κεντρικού φακέλου που περιέχει το περιβάλλον και επίσης ορίζονται ως μεταβλητές φλοιού οι διαδρομές των προγραμμάτων όταν αυτά εξαχθούν από τα αντίστοιχα αρχεία tar και αποσυμπιεστούν. Σκοπός των μεταβλητών αυτών είναι να διευκολύνουν την πλοήγηση μεταξύ φακέλων στα διάφορα σημεία της προετοιμασίας και εκτέλεσης και να μπορεί η πλοήγηση να γίνεται με αυτόματο τρόπο χωρίς να απαιτούνται απόλυτες διευθύνσεις φλοιού.

Μετά την αποσυμπίεση του πηγαίου κώδικα του κάθε προγράμματος σε ξεχωριστό φάκελο, το script πηγαίνει στο φάκελο additions όπου και με χρήση makefile κάνει compilation σε όλα τα βοηθητικά προγράμματα που περιγράφηκαν παραπάνω: προγράμματα δημιουργίας κατανομών, ελέγχου ακεραιότητας των σετ δεδομένων αλλά και το πρόγραμμα ανάλυσης αποτελεσμάτων. Σκοπός είναι τα βήματα να είναι όσο το δυνατό συμπαγή και να εκτελούν μαζικά τις λειτουργίες τους ώστε να μην υπάρχουν παρά λεπτομέρειες ρυθμίσεων για την ολική λειτουργία του περιβάλλοντος και τη λήψη μετρήσεων από το χρήστη.

Παρατίθεται σε μορφή παραδείγματος ένα υπόδειγμα Makefile του περιβάλλοντος:

```
#NAME = bench dump generator makefile
```

```
CC = gcc
FLG = -04 -lm -std=c99 -Wformat
all:
   $(CC) 3dCubeElectric.c $(FLG) -o cube.o
   $(CC) 3dSphereElectric.c $(FLG) -o sphere.o
   $(CC) 3dPlummer.c $(FLG) -o plummer.o
   $(CC) result_analysis.c $(FLG) -o result_analysis.o
   $(CC) dump_fread_3d_x.c $(FLG) -o dump_validator_x.o
```

```
$(CC) dump_fread_3d_y.c $(FLG) -o dump_validator_y.o
$(CC) dump_fread_3d_z.c $(FLG) -o dump_validator_z.o
$(CC) dump_fread_3d_charge.c $(FLG) -o dump_validator_charge.o
```

clean:

rm -f \*.o

Έχοντας επομένως προετοιμάσει με την κλήση του παραπάνω script όλα τα εκτελέσιμα προγράμματα υποβάθρου του περιβάλλοντος, ο έλεγχος περνάει στο script generate.sh.

## 4.3.2 Προετοιμασία Σετ Δεδομένων

To script generate.sh εκκινεί με τις ίδιες μεταβλητές περιβάλλοντος που του παρέχονται από το config.sh. Εάν αυτό δεν είναι επιθυμητό θα πρέπει να τροποποιηθεί από το χρήστη με απλή αντικατάσταση των διαδρομών που χρησιμοποιεί, η με αντιγραφή του στον κατάλληλο φάκελο.

Αρχικά γίνεται ερώτηση στο χρήστη για την κατανομή που επιθυμεί να έχει το σετ δεδομένων, με διαθέσιμες επιλογές: κύβο, σφαίρα, ή μοντέλο Plummer. Αντίστοιχα από το φάκελο additions καλείται το έτοιμο από το προηγούμενο βήμα πρόγραμμα για την δημιουργία της κατανομής.

Στο σημείο αυτό τόσο το script όσο και το πρόγραμμα κάνουν χρήση μόνο ενός integer που έχει ως σκοπό την απλοϊκή περιγραφή του αριθμού σωματιδίων της κατανομής. Καθώς υπήρχε εξαρχής διάθεση για υποστήριξη κατανομών πέρα από τις βασικές, και το ίδιο για τους διαθέσιμους όγκους και τις επιφάνειες, υπάρχουν στον κώδικα των προγραμμάτων δημιουργίας κατανομής επιλογές για διαφορετικά μήκη πλευρών, άλλα ως προεπιλογή έχει γίνει η επιλογή της απενεργοποίησης τους, μιας και η χρησιμότητά τους απευθύνεται σε απαιτητικές εφαρμογές και μόνο και δεν ενδείκνυται για την εν προκειμένω απλή επίδειξη των λειτουργιών του περιβάλλοντος.

Ο επιθυμητός αριθμός σωματιδίων διαβάζεται με κλήση της read από το φλοιό, αποθηκεύεται στη μεταβλητή \$particles του φλοιού και περνάει ως όρισμα γραμμής εντολής με χρήση της συνάρτησης atoi της C (για παράδειγμα με εκτέλεση της "./cube.o \$particles"). Πέραν τούτου οι ξεχωριστές επιλογές γίνονται με χρήση της scanf εντός του προγράμματος δημιουργίας κατανομής.

Στο επόμενο βήμα του script τα binary αρχεία που προκύπτουν αντιγράφονται στους φακέλους των εκάστοτε υπό αξιολόγηση προγραμμάτων του περιβάλλοντος. Ακολουθώντας τα μονοπάτια με βάση της μεταβλητές περιβάλλοντος, γίνεται compilation στα εν προκειμένω προγράμματα και με αυτό το βήμα ολοκληρώνεται η λειτουργία του script generate.sh. Ο έλεγχος περνάει στο script run.sh.

## 4.3.3 Εκτέλεση Προγραμμάτων και Λήψη Αποτελεσμάτων

Με την κλήση του run.sh ο έλεγχος περνάει στο εκάστοτε πρόγραμμα που βρίσκεται στις μεταβλητές του script. Το πρόγραμμα εκκινεί και λόγω των τροποποιήσεών που έχουν γίνει φορτώνει το δυαδικό σετ δεδομένων που έχει δημιουργηθεί και αντιγραφεί από το generate.sh.

Επίσης λόγω των τροποποιήσεων, μετά το πέρας των υπολογισμών και της χρονομέτρησης τους, γίνεται δυαδική έξοδος των αποτελεσμάτων για το δυναμικό και το πεδίο στο χώρο του αρχικού σετ δεδομένων. Με την ακόλουθη κλήση από το script του προγράμματος ανάλυσης

αποτελεσμάτων, είναι δυνατή εν τέλει η λήψη μετρήσεων που επιτρέπουν την πλήρη περιγραφή της απόδοσης και επίδοσης του εκάστοτε προγράμματος, τόσο όσον αφορά την απόλυτη χρονική επίδοση της μεθόδου και το σφάλμα του προσεγγιστικού υπολογισμού, όσο και συγκριτικά, μεταξύ προγραμμάτων που διατείνονται πως επιτελούν την ίδια λειτουργία για την ίδια επιθυμητή ακρίβεια.

Για τη χρονομέτρηση των αποτελεσμάτων των υπολογισμών και των ενδιάμεσων σταδίων των αλγορίθμων του περιβάλλοντος, έγινε χρήση έτοιμων υπορουτινών Fortran 77:

#### FUNCTION **SECOND()**

С

```
RETURN
END
```

Αντίθετα με τη Fortran, για τα προγράμματα που είναι γραμμένα σε C ή C++ δεν απαιτείται υλοποίηση ξεχωριστής υπορουτίνας ή συνάρτησης παρά μόνο χρήση του παρακάτω snippet γύρω από τα σημεία ενδιαφέροντος:

```
struct timeval first, second, lapsed;
struct timezone tzp;
gettimeofday(&first, &tzp);
gettimeofday(&second, &tzp);
if(first.tv_usec>second.tv_usec){
   second.tv_usec += 1000000;
   second.tv_sec--;
}
lapsed.tv_usec = second.tv_usec - first.tv_usec;
lapsed.tv_sec = second.tv_sec - first.tv_sec;
printf("Time elapsed: %d, %d s\n", lapsed.tv_sec, lapsed.tv_usec);
```

Οι συνολικοί κώδικες των scripts βρίσκονται στο παράρτημα 1.3 της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

## 4.4 Τα προγράμματα του περιβάλλοντος

## 4.4.1 Οι κώδικες Shootout

Οι κώδικες του εγχειρήματος Programming Language Shootout (http://shootout.alioth.debian.org) αποτελούν μία προσπάθεια για benchmarking υπολογιστών, με αξιολόγηση ταχύτητας ως προς τη γλώσσα προγραμματισμού στην οποία είναι γραμμένο το εκάστοτε πρόγραμμα. Για το λόγο αυτό οι επιλεγμένοι αλγόριθμοι γράφονται σε μία σειρά από γλώσσες προγραμματισμού με σκοπό την αναζήτηση δυνατοτήτων βέλτιστης χρονικής απόδοσης ως προς τα διαθέσιμα προγραμματιστικά εργαλεία που παρέχει η κάθε γλώσσα για τη μετατροπή του αλγόριθμου σε κώδικα. Καθώς υπάρχουν πλέον διαθέσιμα τα εκτελέσιμα προγράμματα που υλοποιούν τον ίδιο αλγόριθμο, στη συνέχεια ακολουθούν οι μετρήσεις χρόνου και η λήψη αποτελεσμάτων.

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας παρουσιάζουν οι κώδικες "nbody", οι οποίοι υλοποιούν τη μοντελοποίηση και την χάραξη τροχιάς ουρανίων σωμάτων, και συγκεκριμένα των πλανητών Δία, Ουρανού Κρόνου και Ποσειδώνα, μαζί με τον Ήλιο. Από τις 26 διαθέσιμες γλώσσες προγραμματισμού το ενδιαφέρον της παρούσας εργασίας επικεντρώνεται στις εκδόσεις στις γλώσσες Fortran, C, C++ και Java.

Η μοντελοποίηση του προβλήματος περιλαμβάνει άδειο χώρο χωρίς κανένα άλλο σώμα ή σωματίδιο και λαμβάνει υπόψιν τις μάζες, τις τροχιές και τις ταχύτητες των σωμάτων. Παρόλ'αυτά δεν υπάρχει υπολογισμός δυναμικών ή πεδίου δυνάμεων, παρά μόνο υπολογισμός αποστάσεων και ενημέρωση των διανυσμάτων ταχύτητας και θέσης.

Οι κώδικες περιλαμβάνονται ως υπόδειγμα προγραμμάτων που να μοντελοποιούν και να προσομοιώνουν ένα σύστημα Ν-σωμάτων, με τον απλοϊκότερο δυνατό τρόπο. Η προσομοίωση γίνεται με την τεχνική leap-frog δηλαδή των διαδοχικών στιγμιοτύπων, όπως αναφέρθηκε σε πληθώρα μεθόδων στο κεφάλαιο 1 της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Μετά από τις απαιτούμενες χρονικές στιγμές που αποτελούν την είσοδο του προγράμματος με κλήση με όρισμα στο φλοιό, μετράται ο χρόνος τον οποίο χρειάστηκε ώστε να χαραχθούν οι τροχιές των σωμάτων.

Τα αποτελέσματα χρόνου για διαφορετικό πλήθος χρονικών στιγμών βρίσκονται στην παράγραφο 4.5.1.

## 4.4.2 Οι Κώδικες Επίλυσης FMM για Δυναμικό Yukawa

Το φαινόμενο Yukawa αναλύθηκε σύντομα στην παράγραφο 1.2.3 της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Οι Huang, Jia, και Zhang [5] ανέπτυξαν ένα πακέτο προγραμμάτων για την ταχεία εκτίμηση του ηλεκτροστατικού δυναμικού και της έντασης του ηλεκτροστατικού πεδίου, όταν υπάρχει απόσβεση δυνάμεων λόγω επιφανειακών φαινομένων, κατά την αλληλεπίδραση μεταξύ φερμιονίων σε προσομοιώσεις σωματιδιακής φυσικής.

Οι κώδικες είναι γραμμένοι σε Fortan 77 και Fortran 90, η αναλυτική τους περιγραφή υπάρχει διαθέσιμη στη βιβλιογραφία [5], και είναι ελεύθερα διαθέσιμοι υπό άδεια GPL 2.0. Η βασική δομή του προγράμματος αποτελείται από κώδικες F77 με εισαγωγή υπορουτινών F90 μόνο για τη διαχείριση της μνήμης σε συγκεκριμένα σημεία.

Η εκτίμηση του ηλεκτροστατικού φορτίου και του πεδίου δυνάμεων από κατανομή Ν σωματιδίων απαιτεί την εκτίμηση μίας ολοκληρωματικής συνάρτησης, η οποία αποτελεί είδος συνέλιξης. Για την εν λόγω εξίσωση η συνάρτηση του Green είναι η βασική λύση της τροποποιημένης εξίσωσης Helmholtz [5]. Η επίλυση βασίζεται σε adaptive ιεραρχική δομή από octrees και χρησιμοποιεί την προτεινόμενη από τους Huang, Jia, και Zhang εκδοχή της μεθόδου FMM, η οποία στοχεύοντας στη βελτιστοποίηση των μαθηματικών υπολογισμών χρησιμοποιεί διαγωνοποιημένη μορφή του τελεστή "multipole-to-local" για επίτευξη καλύτερης χρονικής απόδοσης.

Το πακέτο προγραμμάτων περιέχει μία εκδοχή του προγράμματος επίλυσης με χρήση uniform octrees και μία εκδοχή με χρήση adaptive octrees.

#### 4.4.2.1 Μετατροπές στα Προγράμματα

Για τις ανάγκες της παρούσας διπλωματικής εργασίας, έγινε μεταβολή στις ρουτίνες δημιουργίας τυχαίων δεδομένων, με υπόδειγμα τις οποίες γράφτηκαν νέες ρουτίνες δυαδικής εισόδου από binary αρχεία. Ταυτόχρονα έγιναν εκτεταμένες μετατροπές ώστε το πακέτο να επιλύει τον απευθείας υπολογισμό για το ίδιο πρόβλημα και με μετατροπή των ρουτινών εξόδου, υπάρχει πλέον δυνατότητα για δυαδική έξοδο σε αρχεία τόσο των προσεγγιστικών αποτελεσμάτων του FMM όσο και των απευθείας αποτελεσμάτων, για το δυναμικό και για το πεδίο δυνάμεων.

Παρατίθενται οι κώδικες FORTRAN για τη δυαδική είσοδο και έξοδο από/σε αρχεία:

```
SUBROUTINE INPUT (NMOLS, ZAT, CHARGE)
c Binary input
    IMPLICIT NONE
INTEGER *4 NMOLS
    REAL *8 VAL
    REAL *8 ZAT(3, NMOLS), CHARGE(NMOLS)
    REAL *8 X(NMOLS)
    REAL *8 Y(NMOLS)
    REAL *8 Z(NMOLS)
c----local variables
С
    INTEGER *4 J
    REAL *4 RAND
    REAL *8 THETA, PHI
    OPEN (UNIT = 8 , FILE = "binary x", FORM = 'unformatted',
         access = 'direct' , recl = 8)
   1
    OPEN (UNIT = 7 , FILE = "binary y", FORM = 'unformatted',
   1
         access = 'direct' , recl = 8)
    OPEN (UNIT = 6 , FILE = "binary z", FORM = 'unformatted',
         access = 'direct' , recl = 8)
   1
    OPEN (UNIT = 5 , FILE = "binary charge", FORM = 'unformatted',
   1
         access = 'direct' , recl = 8)
```

```
OPEN (UNIT = 9, FILE = "test")
     do J = 1, NMOLS
     read(8, rec = J) ZAT(1,J)
      read(7, rec = J) ZAT(2, J)
     read( 6, rec = J) ZAT(3, j)
     read(5, rec = J) CHARGE(J)
     WRITE (9,*) ZAT(1,J), ZAT(2,J), ZAT(3,J), CHARGE(J)
     end do
     CLOSE (9)
     CLOSE (5)
     CLOSE (6)
     CLOSE (7)
     CLOSE (8)
     RETURN
     END
SUBROUTINE OUTPUT (NMOLS, ZAT, CHARGE)
OPEN (UNIT = 14 , FILE = 'points in space1', FORM = 'unformatted',
    1
          access = 'direct' , recl = 8*3*size)
    OPEN (UNIT = 15 , FILE = 'final potential', FORM = 'unformatted',
    1
          access = 'direct' , recl = 8*size)
     OPEN (UNIT = 16 , FILE = 'final field', FORM = 'unformatted',
          access = 'direct' , recl = 8*3*size)
    1
     OPEN (UNIT = 17 , FILE = 'final_test_output')
     WRITE (14, rec = 1) ZAT
     WRITE (15, rec = 1) POT
     WRITE( 16 , rec = 1 ) FIELD
     CLOSE (16)
     CLOSE (15)
     CLOSE (14)
     DO 3001 I = 1, NATOMS
   WRITE (17,*) ZAT(1,I) , ZAT(2,I) , ZAT(3,I) , POT(I) , FIELD(1,I),
    1
          FIELD(2,I), FIELD(3,I)
```

С

С

```
92
```

```
3001 continue

CLOSE(17)

c

RETURN

END

c

cc

cc
```

Το πακέτο υποστηρίζει υπολογισμούς ακρίβειας τριών και έξι δεκαδικών ψηφίων, με αλλαγή παραμέτρων εντός των αρχείων της σουίτας. Στην παράγραφο 4.5.2 βρίσκονται οι αναλυτικές τιμές μετρήσεων των δύο προγραμμάτων για καθεμία από τις δύο δυνατότητες ακρίβειας, για διαφορετικές τιμές σωματιδίων, και επίλυση του ίδιου ακριβώς προβλήματος, από πλευράς κατανομής και φορτίων.

## 4.4.3 Οι Κώδικες Επίλυσης FMM για Δυναμικό Laplace

Οι Huang, Jia, και Zhang ανέπτυξαν ένα πακέτο προγραμμάτων για την ταχεία εκτίμηση του δυναμικού Laplace και της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, σε τρισδιάστατο χώρο.Οι κώδικες είναι γραμμένοι σε Fortan 77 και Fortran 90, η αναλυτική τους περιγραφή υπάρχει διαθέσιμη στη βιβλιογραφία, και είναι ελεύθερα διαθέσιμοι υπό άδεια GPL 2.0. Η βασική δομή του προγράμματος αποτελείται από κώδικες F77 με εισαγωγή υπορουτινών F90 μόνο για τη διαχείριση της μνήμης σε συγκεκριμένα σημεία.

Το πακέτο προγραμμάτων περιέχει μία εκδοχή του προγράμματος επίλυσης με χρήση uniform octrees και μία εκδοχή με χρήση adaptive octrees.

Στην ίδια κατηγορία και για την επίλυση του ίδου προβλήματος υπάρχουν διαθέσιμοι οι κώδικες KIFMM3D και ExaFMM.

Ο κώδικας του KIFMM3D (http://mrl.nyu.edu/~harper/kifmm3d/ documentation/documentation.html), ο αλγόριθμος του οποίου αναλύθηκε στην παράγραφο 3.5.3.3 γράφτηκε από τους Zorin, Ying και Biros, επιλύει το πρόβλημα της εύρεσης του δυναμικού Laplace με την kernel-independent μέθοδο.

Οι κώδικες ExaFMM αποτελούν ένα πακέτο βιβλιοθήκης και παραδειγμάτων, με σκοπό τη με εύκολο τρόπο μετατροπή τους για επίλυση συγκεκριμένων προβλημάτων. Το πακέτο περιέχει μία σειρά από εφαρμογές FMM και παρόμοιων μεθόδων ταχείας άθροισης, το οποίο μπορεί μετά την εγκατάστασή του να επιλύσει το ίδιο πρόβλημα με παραπάνω, της εύρεσης του δυναμικού Laplace σε τρισδιάστατο χώρο. Αναπτύχθηκαν από την ερευνητική ομάδα της Lorena Barba.

#### 4.4.3.1 Μετατροπές στα Προγράμματα

Για τις ανάγκες της παρούσας διπλωματικής εργασίας, έγινε μεταβολή στις ρουτίνες δημιουργίας τυχαίων δεδομένων, με υπόδειγμα τις οποίες γράφτηκαν νέες ρουτίνες δυαδικής εισόδου από binary αρχεία. Ταυτόχρονα έγιναν εκτεταμένες μετατροπές ώστε το πακέτο να επιλύει τον απευθείας υπολογισμό για το ίδιο πρόβλημα και με μετατροπή των ρουτινών εξόδου, υπάρχει πλέον δυνατότητα για δυαδική έξοδο σε αρχεία τόσο των προσεγγιστικών αποτελεσμάτων του FMM όσο και των απευθείας αποτελεσμάτων, για το δυναμικό και για το πεδίο δυνάμεων.

Οι κώδικες που εισήχθησαν στο πακέτο FMM-Laplace έγινε προσπάθεια να είναι κατά το δυνατόν όμοιοι με αυτούς που τροποποιούν το πακέτο FMM-Yukawa, και για το λόγο αυτό δεν

αναφέρονται στο σημείο αυτό

Το πακέτο FMM-Laplace υποστηρίζει υπολογισμούς ακρίβειας τριών και έξι δεκαδικών ψηφίων. Στην παράγραφο 4.5.2 βρίσκονται οι αναλυτικές τιμές μετρήσεων των δύο προγραμμάτων για καθεμία από τις δύο δυνατότητες ακρίβειας, για διαφορετικές τιμές σωματιδίων, και επίλυση του ίδιου ακριβώς προβλήματος, από πλευράς κατανομής και φορτίων.

Για τους σκοπούς και τις ανάγκες τις παρούσας διπλωματικής εργασίας η προσοχή εστιάστηκε στη δυνατότητα επίλυσης του δυναμικού Laplace και μόνο όσον αφορά το KIFMM3D, παραβλέποντας τις δυνατότητες για επίλυση προβλημάτων Navier-Stokes και MΔE. Το έτοιμο παράδειγμα των ερευνητών για εύρεση του δυναμικού Laplace, γραμμένο σε C++, τροποποιήθηκε με τρόπο που, σε αναλογία και αντιστοιχία με τα παραπάνω πακέτα της παραγράφου 4.4.2 και σύμφωνα με τις παραγράφους 4.2.2, 4.2.5, 4.2.6 να υποστηρίζει δυαδική είσοδο και έξοδο από και σε αρχεία κατανομών και αποτελεσμάτων. Παρατίθενται στο σημείο αυτό δειγματοληπτικά οι τροποποιήσεις σε μορφή κώδικα με έμφαση στο γεγονός πως, όπως και στην παράγραφηο 4.2.5 γίνεται χρήση των δομών file pointers και κλήσεων fread και fwrite σε C:

```
for(int i=0; i<numSrc; i++) {
    srcPos(0,i) = buffer[i];
    srcPos(1,i) = buffer1[i];
    srcPos(2,i) = buffer2[i];
}
for(int i=0; i<numTrg; i++) {
    trgPos(0,i) = buffer[i];
    trgPos(1,i) = buffer1[i];
    trgPos(2,i) = buffer2[i];
}
for(int i=0; i<numSrc; i++) {
    for(int d=0; d<srcDOF; d++)
        srcDen(d + i*srcDOF) = buffer3[i];
}</pre>
```

Θα πρέπει να σημειωθεί στο σημείο αυτό πως η κατεύθυνση των κωδίκων ExaFMM διαφέρει αρκετά από αυτή των υπολοίπων τριών όσον αφορά το σκέλος επίλυσης δυναμικού Laplace. Δεν διαθέτουν επιλογές για διαφορετικές τιμές ακρίβειας και επιμένουν στην κίνηση των σωματιδίων, και για το λόγο αυτό απαιτείθηκαν αλλαγές σε διάφορα αρχεία της βιβλιοθήκης προκειμένου να απενεργοποιηθούν δυνατότητες κίνησης και ενημέρωσης των τροχιών των σωματιδίων. Στο σημείο αυτό γίνεται προσπάθεια από μέρους των ερευνητών να μετατοπίσουν το βάρος από μία απλή επίλυση προς την κατεύθυνση της ολοκληρωμένης προσομοίωσης. Ταυτόχρονα η εκδοχή της μεθόδου FMM που χρησιμοποιούν διαφοροποιείται όσον αφορά το στάδιο του ανοίγματος του βρόγχου με τρόπο που να ευνοείται η ταχύτητα σε βάρος της ακρίβειας επίλυσης.

Επιπρόσθετα το πακέτο ExaFMM είναι γραμμένο με τη λογική της ολοκληρωμένης βιβλιοθήκης. Υπάρχουν κλάσεις C++ που αρχικοποιούν το περιβάλλον και τα σώματίδια, με τις αντίστοιχες δημιουργίες κατανομών και φορτίων, με τελικό σκοπό τα εκτελέσιμα οι κώδικες των προσομοιώσεων και τα εκτελέσιμα αρχεία να έχουν πάντα την ίδια δομή, συγκεκριμένα: αρχικοποίηση με βάση συναρτήσεις του περιβάλλοντος, χρονομέτρηση με όμοιο τρόπο και στο ίδιο μοτίβο υλοποίηση όλων των βημάτων των αλγορίθμων με τρόπο που να είναι δυνατή η πλήρης εποπτεία του κώδικα σε κάθε σημείο. Η παραπάνω λογική υλοποίησης σε συνδυασμό με την πρόσφατη συγγραφή του κώδικα και την επιλογή της γλώσσας προγραμματισμού δικαιολογούν σε μεγάλο βαθμό τα πολύ καλά χρονικά αποτελέσματα του ExaFMM όσον αφορά το FMM μέρος των μετρήσεων χρόνου αλλά και τη διαφορά στην υλοποίηση της  $O(N^2)$  επιλυσης.

Με όμοιο τρόπο με παραπάνω παρατίθενται οι μετατροπές του κώδικα ExaFMM:

```
void initSource(Bodies &bodies) {
. . . . .
int ii=0;
    for( B iter B=bodies.begin(); B!=bodies.end(); ++B ) {
      B->IBODY = B-bodies.begin();
      B->IPROC = MPIRANK;
      B->SRC = buffer[ii];
    ii++;
   }
}
void initTarget(Bodies &bodies, bool leqJ=true) {
. . . .
for( B_iter B=bodies.begin(); B!=bodies.end(); ++B ) {
B->IBODY = B-bodies.begin();
B->IPROC = MPIRANK;
if( EPS2 != 0 ) B->TRG[0] = B->SRC / std::sqrt(EPS2) * IeqJ;
      }
}
void random(Bodies &bodies) {
. . . . .
  int ii = 0;
  for( B iter B=bodies.begin(); B!=bodies.end(); ++B) {
  B->X[0] = buffer[ii];
  B->X[1] = buffer1[ii];
  B->X[2] = buffer2[ii];
 ii++;
  }
}
```

# 4.5 Μετρήσεις Ακρίβειας και Ταχύτητας

## 4.5.1 Programming Language Shootout



Διάγραμμα 4-1: Χρονικά αποτελέσματα του πακέτου Programming Language Shootout, για όλο το σετ μετρήσεων, σε λογαριθμική κλίμακα χρόνου.

Programming Language Shootout Codes



Διάγραμμα 4-2: Χρονικά αποτελέσματα του πακέτου Programming Language Shootout, για μικρές τιμές χρόνων προσομοίωσης του σετ δεδομένων.Οι χρόνοι εμφανίζονται ομοιογενείς και δεν υπάρχει μεγάλη απόκλιση στα αποτελέσματα, γεγονός που οφείλεται κυρίως στην μικρή εξάρτηση του χρόνου από την αρχικοποίηση των δεδομένων από το λειτουργικό σύστημα και τη RAM, και την ουσιαστική εξάρτηση από την χρονική επίδοση της CPU, που για τόσο μικρούς αριθμούς επαναλήψεων δεν επιτρέπει ξεκάθαρη διάκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων.



Διάγραμμα 4-3: Χρονικά αποτελέσματα του πακέτου Programming Language Shootout, για μεγάλες τιμές χρόνων προσομοίωσης του σετ δεδομένων.

Fortran Leap Frog Times

FORTRAN



Διάγραμμα 4-4: Χρονικά αποτελέσματα της υλοποίησης σε Fortran του αλγόριθμου nbody του πακέτου Programming Language Shootout, για όλες τις τιμές του σετ δεδομένων.



C Leap Frog Times

Διάγραμμα 4-5: Χρονικά αποτελέσματα της υλοποίησης σε C του αλγόριθμου nbody του πακέτου Programming Language Shootout, για όλες τις τιμές του σετ δεδομένων.

Time in Secons ,280000 ,0000 ,60000 Number of Timesteps

C++ Leap Frog Times

Διάγραμμα 4-6: Χρονικά αποτελέσματα της υλοποίησης σε C++ του αλγόριθμου nbody του πακέτου Programming Language Shootout, για όλες τις τιμές του σετ δεδομένων.

Java Leap Frog Times



Διάγραμμα 4-7: Χρονικά αποτελέσματα της υλοποίησης σε Java του αλγόριθμου nbody του πακέτου Programming Language Shootout, για όλες τις τιμές του σετ δεδομένων.

Number of Time Steps	FORTRAN	C++	С	JAVA
100000	0,055	0,024	0,021	0,099
200000	0,071	0,049	0,053	0,149
400000	0,133	0,084	0,083	0,163
800000	0,251	0,159	0,164	0,259
1600000	0,488	0,307	0,327	0,441
3200000	0,966	0,596	0,655	0,81
6400000	1,947	1,173	1,301	1,536
12800000	3,844	2,354	2,575	2,986
25600000	7,702	4,717	5,164	5,89
51200000	15,352	9,43	10,384	11,767

Πίνακας 4-1: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα των υλοποιήσεων σε Fortran, C, C++ και Java, του αλγόριθμου nbody του πακέτου Programming Language Shootout. Παρατιρείται παρόμοια απόδοση σε ταχύτητα των C και C++ με την υλοποίηση σε Java να ακολουθεί, και την υλοποίηση σε Fortran να είναι η πλέον αργή σε χρόνο.

## 4.5.2 FMM-Yukawa Suite

Number of Particles	Uniform FMM	Adaptive FMM	<b>Direct Calculation</b>
1000	16,84	0,776	0,064
2000	17,774	0,824	0,244
4000	17,899	1,044	0,924
8000	18,865	1,133	3,708
16000	19,273	1,558	14,877
32000	20,779	4,562	58,724
64000	23,413	3,591	237,439
128000	29,494	4,182	953,352

Πίνακας 4-2: Συνολικά χρονικά αποτελέσματα για τα προγράμματα της σουίτας FMM-Yukawa. Στον πίνακα σημειώνεται η χρονική επίδοση για την υλοποίηση του αλγόριθμου του πακέτου με Uniform και Adaptive δομή octrees αντίστοιχα, σε άμεση σύγκριση με την χρονική επίδοση του απευθείας υπολογισμού της λύσης για το ίδιο σετ δεδομένων, χωρίς χρήση FMM. Τα χρονικά αποτελέσματα ελήφθησαν την επιλογή για ακρίβεια επίλυσης 3 δεκαδικών ψηφίων.

Number of Particles	Max Abs Potential Error	Moon Abs Potential Error	Max Abs Field Error	Moan Abs Field Error
Number of Particles	Wax ADS POLEIILIAI EITOI	Mean ADS POLENILIAI ENOI	WAX ADS FIEIU EITUI	Weall ADS FIELD EITOR

1000	2,55E-003	1,23E-004	2,80E-002	1,07E-003
2000	2,58E-003	1,19E-004	2,70E-002	1,07E-003
4000	2,57E-003	1,20E-004	2,80E-002	1,09E-003
8000	3,66E-003	1,61E-004	3,67E-002	1,62E-003
16000	3,59E-003	1,60E-004	3,35E-002	1,63E-003
32000	3,52E-003	1,61E-004	3,39E-002	1,62E-003
64000	3,79E-003	1,75E-004	3,86E-002	1,80E-003
128000	3,77E-003	1,75E-004	3,69E-002	1,80E-003

Πίνακας 4-3: FMM-Yukawa Adaptive FMM, ακρίβεια επίλυσης 3 δεκαδικών ψηφίων. Στον πίνακα εικονίζονται τα αποτελέσματα ακρίβειας για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το δυναμικό και την πεδιακή ένταση, και για το μέσο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το κάθε σετ δεδομένων, για τις ίδιες μεταβλητές. Παρατηρείται πως το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι μία τάζη μεγέθους μεγαλύτερο από το μέσο απόλυτο σφάλμα, τόσο όσον αφορά το δυναμικό όσο και την πεδιακή ένταση ( αντίστοιχα διαγράμματα 4-10 και 4-12) αυζάνει με την αύζηση του αριθμού σωματιδίων της επίλυσης. Το μέγιστο απόλυτο σφάλμα ζυναμικού (διάγραμμα 4-9) παρουσιάζει εμφανή αύζηση, όμως όσον αφορά το μέγιστο απόλυτο σφάλμα το μέγιστο απόλυτο σφάλμα το αταθερές καθώς αυζάνει ο αριθμός σωματιδίων.

Number of Particles	Max Abs Potential Error	Mean Abs Potential Error	Max Abs Field Error	Mean Abs Field Error
1000	3,77E-003	1,80E-004	6,15E-001	3,24E-003
2000	3,97E-003	1,74E-004	5,20E-001	2,89E-003
4000	3,80E-003	1,77E-004	2,78E-001	2,46E-003
8000	3,97E-003	1,79E-004	2,43E-001	2,21E-003
16000	3,94E-003	1,78E-004	1,04E-001	2,02E-003
32000	3,87E-003	1,79E-004	7,76E-002	1,93E-003
64000	3,86E-003	1,80E-004	5,70E-002	1,89E-003
128000	3,82E-003	1,80E-004	5,04E-002	1,88E-003

Πίνακας 4-4: FMM-Yukawa Uniform FMM, ακρίβεια επίλυσης 3 δεκαδικών ψηφίων. Στον πίνακα εικονίζονται τα αποτελέσματα ακρίβειας για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το δυναμικό και την πεδιακή ένταση, και για το μέσο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το κάθε σετ δεδομένων, για τις ίδιες μεταβλητές. Παρατηρείται πως το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι μία τάζη μεγέθους μεγαλύτερο από το μέσο απόλυτο σφάλμα, τόσο όσον αφορά το δυναμικό όσο και την πεδιακή ένταση. Το μέσο απόλυτο σφάλμα το δυναμικό σο απόλυτο σφάλμα, τόσο όσον αφορά το δυναμικό όσο και την πεδιακή ένταση. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού παραμένει σχεδόν σταθερό καθώς ο αριθμός σωματιδίων αυζάνει, σε αντίθεση με το μέσο απόλυτο σφάλμα πεδίακής έντασης το οποίο εμφανίζει μείωση με την αύζηση των σωματιδίων. Το μέγιστο απόλυτο σφάλμα δυναμικού παραμένει σχεδιακής έντασης το οποίο εμφανίζει μείωση με το μέσο απόλυτο σφάλμα πεδιακής έντασης που μειώνεται δραματικά.



Διάγραμμα 4-8: Συνολικά χρονικά αποτελέσματα του Πίνακα 4-2. Οι χρονικές τιμές ακρίβειας 3 δεκαδικών ψηφίων για τα προγράμματα Uniform και Adaptive FMM απευθύνονται στο δευτερεύοντα άζονα y στη δεξιά πλευρά του διαγράμματος, ενώ οι χρονικές τιμές της απευθείας επίλυσης απευθύνονται στον πρωτεύοντα άζονα y στην αριστερή πλευρά του διαγράμματος.



Max Absolute Error in Potential

Διάγραμμα 4-9: Η συνολική επίδοση για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα δυναμικού στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων που προσομοιώθηκαν. Εμφανής η διασπορά τιμών για την Uniform επίλυση, το σφάλμα επίλυσης της οποίας δεν μπορεί να σχολιαστεί παρά ως οριακά σταθερό. Για την Adaptive επίλυση αντίθετα παρατηρείται εμφανώς πως λόγω της εσωτερικής δομής του προγράμματος και της adaptive δομής του octree το σφάλμα αυζάνει με αύζηση των σωματιδίων.



Διάγραμμα 4-10: Η συνολική επίδοση για το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων. Το σφάλμα της Uniform επίλυσης παραμένει σταθερό ενώ το σφάλμα της Adaptive επίλυσης αυζάνει.


### Max Absolute Error in Field Value

Διάγραμμα 4-11: Η συνολική επίδοση για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα πεδιακής έντασης στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων της κάθε προσομοίωσης. Εμφανής η διασπορά τιμών για την Adaptive επίλυση, το σφάλμα επίλυσης της οποίας δεν μπορεί να σχολιαστεί παρά ως οριακά σταθερό. Για τη Uniform επίλυση αντίθετα παρατηρείται εμφανώς μείωση του σφάλματος καθώς αυξάνει ο αριθμός σωματιδίων.



Διάγραμμα 4-12: Η συνολική επίδοση για το μέσο απόλυτο σφάλμα πεδιακής έντασης στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων. Το σφάλμα της Uniform επίλυσης εμφανίζει μείωση ενώ το σφάλμα της Adaptive επίλυσης αυζάνει.

Number of Particles	Adaptive FMM 3digits	Adaptive FMM 6digits
1000	0,776	0,816
2000	0,824	0,902
4000	1,044	1,113
8000	1,133	1,416
16000	1,558	2,009
32000	4,562	4,421
64000	3,591	6,819
128000	4,182	15,267

Πίνακας 4-5: Χρονικά αποτελέσματα για την επίλυση του ίδιου επακριβώς προβλήματος από το πρόγραμμα Adaptive FMM του πακέτου FMM-Yukawa, αντίστοιχα για ακρίβεια επίλυσης 3 και 6 δεκαδικών ψηφίων. Είναι εμφανής από τα δεδομένα η αύζηση του χρόνου εκτέλεσης για μεγαλύτερη απαιτούμενη τιμή ακρίβειας.

Number of Particles	Uniform FMM 3 digits	Uniform FMM 6digits
1000	16,84	17,02
2000	17,774	17,992
4000	17,899	18,029
8000	18,865	19,535
16000	19,273	19,987
32000	20,779	21,099
64000	23,413	26,68
128000	29,494	39,686

Πίνακας 4-6: Χρονικά αποτελέσματα για την επίλυση του ίδιου επακριβώς προβλήματος από το πρόγραμμα Uniform FMM του πακέτου FMM-Yukawa, αντίστοιχα για ακρίβεια επίλυσης 3 και 6 δεκαδικών ψηφίων. Είναι εμφανής από τα δεδομένα η αύζηση του χρόνου εκτέλεσης για μεγαλύτερη απαιτούμενη τιμή ακρίβειας.

Number of Particles	Max Abs Potential Error	Mean Abs Potential Error	Max Abs Field Error	Mean Abs Field Error
1000	2,69E-006	1,81E-007	6,17E-005	4,25E-007
2000	2,37E-006	1,82E-007	4,07E-005	3,60E-007
4000	2,32E-006	1,81E-007	2,14E-005	2,92E-007
8000	3,60E-006	2,95E-007	4,50E-005	4,49E-007
16000	3,60E-006	2,95E-007	3,51E-005	3,72E-007
32000	3,63E-006	2,95E-007	2,49E-005	3,18E-007
64000	4,07E-006	3,37E-007	2,87E-005	3,76E-007
128000	3,60E-006	2,95E-007	2,14E-005	3,60E-007

Πίνακας 4-7: FMM-Yukawa Adaptive FMM, ακρίβεια επίλυσης 6 δεκαδικών ψηφίων. Στον πίνακα εικονίζονται τα αποτελέσματα ακρίβειας για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το δυναμικό και την πεδιακή ένταση, και για το μέσο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το κάθε σετ δεδομένων, για τις ίδιες μεταβλητές. Παρατηρείται πως το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι μία τάζη μεγέθους μεγαλύτερο από το μέσο απόλυτο σφάλμα, τόσο όσον αφορά το δυναμικό όσο και την πεδιακή ένταση. Το μέσο απόλυτο σφάλμα, και για το δυναμικό και για την πεδιακή ένταση. Το μέσο απόλυτο σφάλμα, τόσο όσον αφορά το δυναμικό όσο και την πεδιακή ένταση. Το μέσο απόλυτο σφάλμα, το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι μία τάζη μεγέθους μεγαλύτερο απόλυτο σφάλμα, και για το δυναμικό και για την πεδιακή ένταση ( αντίστοιχα διαγράμματα 4-15 και 4-17) αυζάνει με την αύζηση του αριθμού σωματιδίων της επίλυσης. Το μέγιστο απόλυτο σφάλμα δυναμικού (διάγραμμα 4-14) παρουσιάζει εμφανή αύζηση, όμως όσον αφορά το μέγιστο απόλυτο σφάλμα για την πεδιακή ένταση (διάγραμμα 4-16) οι τιμές εμφανίζονται οριακά σταθερές καθώς αυζάνει ο αριθμός σωματιδίων

Number of Particles	Max Abs Potential Error	Mean Abs Potential Error	Max Abs Field Error	Mean Abs Field Error
1000	3,77E-005	1,80E-007	5,15E-004	3,24E-006
2000	3,97E-005	1,74E-007	4,20E-004	2,89E-006
4000	3,80E-005	1,77E-007	2,78E-004	2,46E-006
8000	3,97E-005	1,79E-007	2,43E-004	2,21E-006
16000	3,94E-005	1,78E-007	1,04E-004	2,02E-006
32000	3,87E-005	1,79E-007	7,76E-005	1,93E-006
64000	3,86E-005	1,80E-007	5,70E-005	1,89E-006
128000	3.82E-005	1.80E-007	5.04E-005	1.88E-006

Πίνακας 4-8: FMM-Yukawa Uniform FMM, ακρίβεια επίλυσης 6 δεκαδικών ψηφίων. Στον πίνακα εικονίζονται τα αποτελέσματα ακρίβειας για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το δυναμικό και την πεδιακή ένταση, και για το μέσο απόλυτο σφάλμα επίλυσης για το κάθε σετ δεδομένων, για τις ίδιες μεταβλητές. Παρατηρείται πως το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι μία τάζη μεγέθους μεγαλύτερο από το μέσο απόλυτο σφάλμα, τόσο όσον αφορά το δυναμικό όσο και την πεδιακή ένταση. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού παραμένει σχεδόν σταθερό καθώς ο αριθμός σωματιδίων αυζάνει, σε αντίθεση με το μέσο απόλυτο σφάλμα πεδίακής έντασης το οποίο εμφανίζει μείωση με την αύζηση των σωματιδίων. Το μέγιστο απόλυτο σφάλμα πεδιακής έντασης που εμφανίζεται να μειώνεται, έως του σημείου να αλλάζει τάζη μεγέθους.



#### FMM Solvers 3digits vs 6digits

Διάγραμμα 4-13: Η συνολική χρονική επίδοση των δύο προγραμμάτων για τις δύο δυνατότητες ακρίβειας αποτελεσμάτων. Οι χρόνοι για την Adaptive υλοποίηση βρίσκονται στο δευτερεύοντα άζονα y στη δεξιά μεριά του διαγράμματος, ενώ οι χρόνοι για την Uniform υλοποίηση βρίσκονται στον πρωτεύοντα άζονα y στην αριστερή μεριά του διαγράμματος. Εμφανής από τους πίνακες 4-5 και 4-6 η αύζηση χρόνου που συνεπάγεται η απαίτηση αυζημένης ακρίβειας.



#### Max Absolute Error in Potential

Διάγραμμα 4-14: Η συνολική επίδοση για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα δυναμικού στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων που προσομοιώθηκαν. Εμφανής η διασπορά τιμών για την Uniform επίλυση, το σφάλμα επίλυσης της οποίας δεν μπορεί να σχολιαστεί παρά ως οριακά σταθερό. Σε αντίθεση με τις τιμές σφάλματος για την επίλυση ακρίβειας 3 δεκαδικών, με την ακρίβεια των 6 δεκαδικών ψηφίων, για την Adaptive επίλυση παρατηρείται εμφανώς πως το σφάλμα αυξάνει, αλλά καθώς βρισκόμαστε στην τάξη μεγέθους  $10^{-7}$  και δύο τάξεις μεγέθους κάτω από το σφάλμα της Uniform επίλυσης, ουσιαστικά μπορεί να γίνει λόγος για σταθερό σφάλμα επίλυσης.

Mean Absolute Error in Potential

#### Uniform FMM 6dig Adaptive FMM 6dig 4,00E-007 3,00E-007 Volts 2,00E-007 1,00E-007 0.00E+000 1000 2000 4000 8000 16000 32000 64000 128000 Number of Particles

Διάγραμμα 4-15: Η συνολική επίδοση για το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων. Τα δύο σφάλματα βρίσκονται στην ίδια τάξη μεγέθους όσον αφορά το σύνολο του σετ δεδομένων. Το σφάλμα της Uniform επίλυσης παραμένει σταθερό οριακά ενώ το σφάλμα της Adaptive επίλυσης αυζάνει ανομοιόμορφα.



Max Absolute Error in Field Value

Διάγραμμα 4-16: Η συνολική επίδοση για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα πεδιακής έντασης στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων της κάθε προσομοίωσης. Εμφανής η διασπορά τιμών για την Adaptive επίλυση, το σφάλμα επίλυσης της οποίας δεν μπορεί να σχολιαστεί παρά ως οριακά σταθερό. Για τη Uniform επίλυση αντίθετα παρατηρείται εμφανώς μείωση του σφάλματος καθώς αυζάνει ο αριθμός σωματιδίων



Mean Absolute Error in Field Value

Διάγραμμα 4-17: Η συνολική επίδοση για το μέσο απόλυτο σφάλμα πεδιακής έντασης στο κάθε σετ δεδομένων επίλυσης, για όλες τις τιμές σωματιδίων του συνόλου δεδομένων. Το σφάλμα της Uniform επίλυσης εμφανίζει μείωση ενώ το σφάλμα της Adaptive επίλυσης αυζάνει. Τα αποτελέσματα συμφωνούν αναλογικά με αυτα της επίλυσης μικρής ακρίβειας.

### Uniform Yukawa Solver





Διάγραμμα4-18: Τα συνολικά αποτελέσματα χρόνου για το πρόγραμμα FMM-Uniform, στις δύο τιμές ακρίβειας, για επίλυση ακριβώς του ίδιου προβλήματος ηλεκτροστατικού δυναμικού

### Adaptive Yukawa Solver



Yukawa με δομή Uniform octree.

Διάγραμμα 4-19: Τα συνολικά αποτελέσματα χρόνου για το πρόγραμμα FMM-Adaptive, στις δύο τιμές ακρίβειας, για επίλυση ακριβώς του ίδιου προβλήματος ηλεκτροστατικού δυναμικού Yukawa με δομή Adaptive octree.

#### 4.5.3 FMM-Laplace Suite, KIFMM3D, ExaFMM

KIFMM3D	Low Accuracy	
Number of Particles	FMM Evaluation	Mean Absolute Potential Error
5000	0,05	1.181660e-05
10000	1,06	2.326354e-05
20000	1,6	1.761172e-05
30000	2,98	2.916932e-05
40000	4,9	2.842619e-05
50000	7,26	3.223151e-05
60000	9,58	2.186067e-05
70000	10,94	4.215159e-05
80000	10,95	2.731158e-05
90000	10,17	3.048908e-05
100000	10,73	3.523444e-05
200000	19,98	2.302853e-05
250000	28,82	2.606831e-05
300000	39,72	3.677648e-05

Πίνακας 4-9: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα της μεθόδου KIFMM3D για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την επιλογή "χαμηλής ακρίβειας" κατά τον προσεγγιστικό υπολογισμό. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού κινείται στα όρια του πέμπτου δεκαδικού ψηφίου.

KIFMM3D Number of Particles	Med Accuracy	Maan Absolute Potential Error
5000	0,75	1.1497086-07
10000	1,72	1.247934e-07
20000	2,65	2.511599e-07
30000	4,09	1.412176e-07
40000	6,18	7.588280e-08
50000	8,95	6.194858e-08
60000	12,03	1.528244e-07
70000	14,59	1.197036e-07
80000	16,14	9.661712e-08
90000	16,33	1.478020e-07
100000	16,81	1.623435e-07
200000	38,32	1.442733e-07
250000	38,37	1.052624e-07
300000	50,16	1.291323e-07

Πίνακας 4-10: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα της μεθόδου KIFMM3D για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την επιλογή "μέσης ακρίβειας" κατά τον προσεγγιστικό υπολογισμό. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού κινείται στα όρια του εβδόμου και όγδοου δεκαδικού ψηφίου.

KIFMM3D	High Accuracy	
Number of Particles	FMM Evaluation	Mean Absolute Potential Error
5000	1,45	6.647802e-10
10000	3,19	1.747249e-09
20000	4,54	9.736025e-10
30000	6,32	1.411024e-09
40000	8,85	1.604812e-09
50000	12,25	1.016570e-09
60000	16,87	2.988079e-09
70000	21,76	2.341864e-09
80000	25,96	2.364487e-09
90000	28,53	1.461121e-09
100000	30,16	1.812334e-09
200000	45,35	1.463780e-09
250000	56,07	1.060541e-09
300000	69,35	1.204738e-09

Πίνακας 4-11: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα της μεθόδου KIFMM3D για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την επιλογή "υψηλής ακρίβειας" κατά τον προσεγγιστικό υπολογισμό. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού κινείται στα όρια του ένατου και δέκατου δεκαδικού ψηφίου.



#### KIFMM3D Laplace Solver

Διάγραμμα 4-20: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα επίλυσης τρισδιάστατου προβλήματος εύρεσης δυναμικού Laplace από το πρόγραμμα KIFMM3D, σε απευθείας χρονική σύγκριση, με βάση τα δεδομένα των πινάκων 4-9, 4-10, και 4-11. Για μικρά μεγέθη προβλήματος οι χρόνοι μεταζύ των τριών επιλογών ακρίβειας είναι συγκρίσιμοι, καθώς όμως το σετ δεδομένων αυζάνει σε αριθμό σωματιδίων οι χρόνοι αυζάνουν και εμφανίζουν μεγάλη διαφορά. Αντίστοιχα πρέπει να σημειωθεί πως όπως προκύπτει από τους πίνακες η κάθε αύζηση του χρόνου εκτέλεσης έχει ως συνακόλουθο τη μείωση του σφάλματος κατά δύο τάζεις μεγέθους.

#### ExaFMM

Number of Particles	FMM Evaluation	Mean Absolute Error in Potential
5000	0,026766	2,54E-004
10000	0,063211	2,41E-004
20000	0,08794	2,32E-004
30000	0,14009	2,33E-004
40000	0,1687	2,34E-004
50000	0,3265	2,33E-004
60000	0,3781	2,30E-004
70000	0,4111	2,29E-004
80000	0,4347	2,29E-004
90000	0,4711	2,27E-004
100000	0,5099	2,26E-004
130000	0,581	2,25E-004
200000	0,789	2,25E-004
250000	1,008	2,25E-004
300000	1,225	2,26E-004

Πίνακας 4-12: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα του προγράμματος ExaFMM για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την μοναδική επιλογή ακρίβειας που υποστηρίζει το πακέτο. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού σε όλο το σετ δεδομένων κινείται στα όρια του τέταρτου δεκαδικού ψηφίου.

Number of Particles	<b>Direct Calculation</b>	FMM Evaluation	Mean Abs Potential Error
5000	0,604	2,279	1,06E-005
10000	2,442	2,349	1,06E-005
20000	9,992	2,929	1,07E-005
30000	22,381	2,861	1,07E-005
40000	39,08	3,712	1,07E-005
50000	61,61	3,676	1,07E-005
60000	87,85	4,234	1,07E-005
70000	118,43	4,745	1,07E-005
80000	155,96	5,032	1,07E-005
90000	198,24	5,05	1,07E-005
100000	244,58	5,404	1,07E-005

Πίνακας 4-13: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα του προγράμματος FMM-Laplace για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων, με χρήση Uniform Octrees. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την επιλογή ακρίβειας τριών δεκαδικών ψηφίων που υποστηρίζει το πακέτο. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού σε όλο το σετ δεδομένων κινείται στα όρια του πέμπτου δεκαδικού ψηφίου. Πρόκειται για τη μόνη επιλογή ακρίβειας στην οποία ταυτίζονται οι δυνατότητες των προγραμμάτων ώστε να προκύψουν αζιόπιστα αποτελέσματα που να επιτρέπουν τη σύγκριση επιδόσεων μεταζύ των πακέτων FMM-Laplace, ExaFMM και KIFMM3D.

#### Uniform FMM Laplace Solver 6dig

Number of Particles	<b>Direct Calculation</b>	FMM Evaluation	Mean Abs Potential Error
5000	0,604	11,893	2,39E-008
10000	2,442	11,996	2,39E-008
20000	9,992	12,115	2,39E-008
30000	22,381	12,114	2,39E-008
40000	39,08	12,699	2,39E-008
50000	61,61	12,315	2,39E-008
60000	87,85	13,032	2,39E-008
70000	118,43	14,233	2,39E-008
80000	155,96	15,348	2,39E-008
90000	198.24	17.265	2.39E-008

Πίνακας 4-14: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα του προγράμματος FMM-Laplace για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων, με χρήση Uniform Octrees. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την επιλογή ακρίβειας έξι δεκαδικών ψηφίων που υποστηρίζει το πακέτο. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού σε όλο το σετ δεδομένων κινείται στα όρια του όγδοου δεκαδικού ψηφίου. Πρόκειται για τη μόνη επιλογή ακρίβειας στην οποία ταυτίζονται οι δυνατότητες των προγραμμάτων ώστε να προκύψουν αζιόπιστα αποτελέσματα που να επιτρέπουν τη σύγκριση επιδόσεων μεταξύ των πακέτων FMM-Laplace και KIFMM3D. Το πακέτο ExaFMM δε συγκρίνεται στην ακρίβεια αυτή.

Adaptive Laplace Solv	/er 3dig		
Number of Particles	<b>Direct Calculation</b>	FMM Evaluation	Max Abs Potential Error
5000	0,604	0,841	2,50E-004
10000	2,442	0,946	2,55E-004
20000	9,992	1,583	2,50E-004
30000	22,381	2,637	2,47E-004
40000	39,08	4,023	2,50E-004
50000	61,61	3,584	2,47E-004
60000	87,85	4,629	2,46E-004
70000	118,43	5,484	2,46E-004
80000	155,96	5,083	2,46E-004
90000	198,24	5,818	2,43E-004
100000	244,58	6,704	2,43E-004

Πίνακας 4-15: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα του προγράμματος FMM-Laplace για την επίλυση προβλήματος δυναμικού Laplace σε χώρο τριών διαστάσεων, με χρήση Adaptive Octrees. Οι χρόνοι ελήφθησαν με την επιλογή ακρίβειας τριών δεκαδικών ψηφίων που υποστηρίζει το πακέτο. Το μέσο απόλυτο σφάλμα δυναμικού σε όλο το σετ δεδομένων κινείται στα όρια του πέμπτου δεκαδικού ψηφίου. Πρόκειται για τη μόνη επιλογή ακρίβειας στην οποία ταυτίζονται οι δυνατότητες των προγραμμάτων ώστε να προκύψουν αξιόπιστα αποτελέσματα που να επιτρέπουν τη σύγκριση επιδόσεων μεταξύ των πακέτων FMM-Laplace, ExaFMM και KIFMM3D.



Laplace Solvers

Διάγραμμα 4-21: Τα συνολικά χρονικά αποτελέσματα για τα τέσσερα υπό σύγκριση προγράμματα. Οι δύο εκδοχές σε Fortran παρουσιάζουν πανομοιότυπη χρονική συμπεριφορά, ενώ το KIFMM3D εμφανίζεται αργότερο μεταξύ των τεσσάρων, κάτι που δικαιολογείται από την kernel-independent υλοποίησή του, που δεν επιτρέπει βελτιστοποίηση της αλγοριθμικής επίλυσης. Το ExaFMM εμφανίζει την απολύτως ταχύτερη επίδοση όμως η ακρίβειά του είναι μία τάζη μεγέθους μικρότερη από αυτές των άλλων προγραμμάτων.



#### Διάγραμμα 4-22: Τα συνολικά αποτελέσματα ακρίβειας των τεσσάρων υπό σύγκριση προγραμμάτων. Σε αντιστοιχία με την ανάλυση της παραγράφου 4.4.3 και τα αποτελέσματα του διαγράμματος 4-21, υπάρχει μεγάλη αναντιστοιχία στην ακρίβεια μεταξύ του ExaFMM και των υπόλοιπων τριών προγραμμάτων.



Διάγραμμα 4-23: Τα χρονικά αποτελέσματα της σύγκρισης των προγραμμάτων KIFMM3D και Uniform Laplace Solver: Η επιλεγόμενη ακρίβεια για το KIFMM3D ήταν η "medium" ενώ για το FMM-Laplace επιλέχθηκε η ακρίβεια 6 δεκαδικών ψηφίων.

# Παράρτημα 1

### Π.1.1 Η Άδεια ΜΙΤ

Copyright (c)

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

## Π.1.2 Η Άδεια GPL

GNU GENERAL PUBLIC LICENSE

Version 3, 29 June 2007

Copyright (C) 2007 Free Software Foundation, Inc. <http://fsf.org/>

Everyone is permitted to copy and distribute verbatim copies of this license document, but changing it is not allowed.

Preamble

The GNU General Public License is a free, copyleft license for software and other kinds of works.

The licenses for most software and other practical works are designed to take away your freedom to share and change the works. By contrast, the GNU General Public License is intended to guarantee your freedom to share and change all versions of a program--to make sure it remains free software for all its users. We, the Free Software Foundation, use the GNU General Public License for most of our software; it applies also to any other work released this way by its authors. You can apply it to your programs, too.

When we speak of free software, we are referring to freedom, not price. Our General Public Licenses are designed to make sure that you have the freedom to distribute copies of free software (and charge for them if you wish), that you receive source code or can get it if you want it, that you can change the software or use pieces of it in new free programs, and that you know you can do these things.

To protect your rights, we need to prevent others from denying you these rights or asking you to surrender the rights. Therefore, you have certain responsibilities if you distribute copies of the software, or if you modify it: responsibilities to respect the freedom of others.

For example, if you distribute copies of such a program, whether gratis or for a fee, you must pass on to the recipients the same freedoms that you received. You must make sure that they, too, receive or can get the source code. And you must show them these terms so they know their rights.

Developers that use the GNU GPL protect your rights with two steps: (1) assert copyright on the software, and (2) offer you this License giving you legal permission to copy, distribute and/or modify it.

For the developers' and authors' protection, the GPL clearly explains that there is no warranty for this free software. For both users' and authors' sake, the GPL requires that modified versions be marked as changed, so that their problems will not be attributed erroneously to authors of previous versions.

Some devices are designed to deny users access to install or run modified versions of the software inside them, although the manufacturer can do so. This is fundamentally incompatible with the aim of protecting users' freedom to change the software. The systematic pattern of such abuse occurs in the area of products for individuals to use, which is precisely where it is most unacceptable. Therefore, we have designed this version of the GPL to prohibit the practice for those products. If such problems arise substantially in other domains, we stand ready to extend this provision to those domains in future versions of the GPL, as needed to protect the freedom of users.

Finally, every program is threatened constantly by software patents. States should not allow patents to restrict development and use of software on general-purpose computers, but in those that do, we wish to avoid the special danger that patents applied to a free program could make it effectively proprietary. To prevent this, the GPL assures that patents cannot be used to render the program non-free.

The precise terms and conditions for copying, distribution and modification follow.

TERMS AND CONDITIONS

0. Definitions.

"This License" refers to version 3 of the GNU General Public License.

"Copyright" also means copyright-like laws that apply to other kinds of works, such as semiconductor masks.

"The Program" refers to any copyrightable work licensed under this License. Each licensee is addressed as "you". "Licensees" and "recipients" may be individuals or organizations.

To "modify" a work means to copy from or adapt all or part of the work in a fashion requiring copyright permission, other than the making of an exact copy. The resulting work is called a "modified version" of the earlier work or a work "based on" the earlier work.

A "covered work" means either the unmodified Program or a work based on the Program.

To "propagate" a work means to do anything with it that, without permission, would make you directly or secondarily liable for infringement under applicable copyright law, except executing it on a computer or modifying a private copy. Propagation includes copying, distribution (with or without modification), making available to the public, and in some countries other activities as well.

To "convey" a work means any kind of propagation that enables other parties to make or receive copies. Mere interaction with a user through a computer network, with no transfer of a copy, is not conveying.

An interactive user interface displays "Appropriate Legal Notices" to the extent that it includes a convenient and prominently visible feature that (1) displays an appropriate copyright notice, and (2) tells the user that there is no warranty for the work (except to the extent that warranties are provided), that licensees may convey the work under this License, and how to view a copy of this License. If the interface presents a list of user commands or options, such as a menu, a prominent item in the list meets this criterion.

1. Source Code.

The "source code" for a work means the preferred form of the work for making modifications to it. "Object code" means any non-source form of a work.

A "Standard Interface" means an interface that either is an official standard defined by a recognized standards body, or, in the case of interfaces specified for a particular programming language, one that is widely used among developers working in that language.

The "System Libraries" of an executable work include anything, other than the work as a whole, that (a) is included in the normal form of packaging a Major Component, but which is not part of that Major Component, and (b) serves only to enable use of the work with that Major Component, or to implement a Standard Interface for which an implementation is available to the public in source code form. A "Major Component", in this context, means a major essential component (kernel, window system, and so on) of the specific operating system (if any) on which the executable work runs, or a compiler used to produce the work, or an object code interpreter used to run it.

The "Corresponding Source" for a work in object code form means all the source code needed to generate, install, and (for an executable work) run the object code and to modify the work, including scripts to control those activities. However, it does not include the work's System Libraries, or general-purpose tools or generally available free programs which are used unmodified in performing those activities but which are not part of the work. For example, Corresponding Source includes interface definition files associated with source files for the work, and the source code for shared libraries and dynamically linked subprograms that the work is specifically designed to require, such as by intimate data communication or control flow between those subprograms and other parts of the work.

The Corresponding Source need not include anything that users can regenerate automatically from other parts of the Corresponding Source.

The Corresponding Source for a work in source code form is that same work.

2. Basic Permissions.

All rights granted under this License are granted for the term of copyright on the Program, and are irrevocable provided the stated conditions are met. This License explicitly affirms your unlimited permission to run the unmodified Program. The output from running a covered work is covered by this License only if the output, given its content, constitutes a covered work. This License acknowledges your rights of fair use or other equivalent, as provided by copyright law.

You may make, run and propagate covered works that you do not convey, without conditions so long as your license otherwise remains in force. You may convey covered works to others for the sole purpose of having them make modifications exclusively for you, or provide you with facilities for running those works, provided that you comply with the terms of this License in conveying all material for which you do not control copyright. Those thus making or running the covered works for you must do so exclusively on your behalf, under your direction and control, on terms that prohibit them from making any copies of your copyrighted material outside their relationship with you.

Conveying under any other circumstances is permitted solely under the conditions stated below. Sublicensing is not allowed; section 10 makes it unnecessary.

3. Protecting Users' Legal Rights From Anti-Circumvention Law.

No covered work shall be deemed part of an effective technological measure under any applicable law fulfilling obligations under article 11 of the WIPO copyright treaty adopted on 20 December 1996, or similar laws prohibiting or restricting circumvention of such measures.

When you convey a covered work, you waive any legal power to forbid circumvention of technological measures to the extent such circumvention is effected by exercising rights under this License with respect to the covered work, and you disclaim any intention to limit operation or modification of the work as a means of enforcing, against the work's users, your or third parties' legal rights to forbid circumvention of technological measures.

4. Conveying Verbatim Copies.

You may convey verbatim copies of the Program's source code as you receive it, in any medium, provided that you conspicuously and appropriately publish on each copy an appropriate copyright notice; keep intact all notices stating that this License and any non-permissive terms added in accord with section 7 apply to the code; keep intact all notices of the absence of any warranty; and give all recipients a copy of this License along with the Program.

You may charge any price or no price for each copy that you convey, and you may offer support or warranty protection for a fee.

5. Conveying Modified Source Versions.

You may convey a work based on the Program, or the modifications to produce it from the Program, in the form of source code under the terms of section 4, provided that you also meet all of these conditions:

- a) The work must carry prominent notices stating that you modified it, and giving a relevant date.
- b) The work must carry prominent notices stating that it is released under this License and any conditions added under section 7. This requirement modifies the requirement in section 4 to "keep intact all notices".
- c) You must license the entire work, as a whole, under this License to anyone who comes into possession of a copy. This License will therefore apply, along with any applicable section 7 additional terms, to the whole of the work, and all its parts, regardless of how they are packaged. This License gives no permission to license the work in any other way, but it does not invalidate such permission if you have separately received it.
- d) If the work has interactive user interfaces, each must display Appropriate Legal Notices; however, if the Program has interactive interfaces that do not display Appropriate Legal Notices, your work need not make them do so.

A compilation of a covered work with other separate and independent works, which are not by their nature extensions of the covered work, and which are not combined with it such as to form a larger program, in or on a volume of a storage or distribution medium, is called an "aggregate" if the compilation and its resulting copyright are not used to limit the access or legal rights of the compilation's users beyond what the individual works permit. Inclusion of a covered work in an aggregate does not cause this License to apply to the other parts of the aggregate.

6. Conveying Non-Source Forms.

You may convey a covered work in object code form under the terms of sections 4 and 5, provided that you also convey the machinereadable Corresponding Source under the terms of this License, in one of these ways:

- a) Convey the object code in, or embodied in, a physical product (including a physical distribution medium), accompanied by the Corresponding Source fixed on a durable physical medium customarily used for software interchange.
- b) Convey the object code in, or embodied in, a physical product (including a physical distribution medium), accompanied by a written offer, valid for at least three years and valid for as long as you offer spare parts or customer support for that product model, to give anyone who possesses the object code either (1) a copy of the Corresponding Source for all the software in the product that is covered by this License, on a durable physical medium customarily used for software interchange, for a price no more than your reasonable cost of physically performing this conveying of source, or (2) access to copy the Corresponding Source from a network server at no charge.
- c) Convey individual copies of the object code with a copy of the written offer to provide the Corresponding Source. This alternative is allowed only occasionally and noncommercially, and only if you received the object code with such an offer, in accord with subsection 6b.
- d) Convey the object code by offering access from a designated place (gratis or for a charge), and offer equivalent access to the Corresponding Source in the same way through the same place at no further charge. You need not require recipients to copy the Corresponding Source along with the object code. If the place to copy the object code is a network server, the Corresponding Source may be on a different server (operated by you or a third party) that supports equivalent copying facilities, provided you maintain clear directions next to the object code saying where to find the Corresponding Source. Regardless of what server hosts the Corresponding Source, you remain obligated to ensure that it is available for as long as needed to satisfy these requirements.

• e) Convey the object code using peer-to-peer transmission, provided you inform other peers where the object code and Corresponding Source of the work are being offered to the general public at no charge under subsection 6d.

A separable portion of the object code, whose source code is excluded from the Corresponding Source as a System Library, need not be included in conveying the object code work.

A "User Product" is either (1) a "consumer product", which means any tangible personal property which is normally used for personal, family, or household purposes, or (2) anything designed or sold for incorporation into a dwelling. In determining whether a product is a consumer product, doubtful cases shall be resolved in favor of coverage. For a particular product received by a particular user, "normally used" refers to a typical or common use of that class of product, regardless of the status of the particular user or of the way in which the particular user actually uses, or expects or is expected to use, the product. A product is a consumer product regardless of whether the product has substantial commercial, industrial or non-consumer uses, unless such uses represent the only significant mode of use of the product.

"Installation Information" for a User Product means any methods, procedures, authorization keys, or other information required to install and execute modified versions of a covered work in that User Product from a modified version of its Corresponding Source. The information must suffice to ensure that the continued functioning of the modified object code is in no case prevented or interfered with solely because modification has been made.

If you convey an object code work under this section in, or with, or specifically for use in, a User Product, and the conveying occurs as part of a transaction in which the right of possession and use of the User Product is transferred to the recipient in perpetuity or for a fixed term (regardless of how the transaction is characterized), the Corresponding Source conveyed under this section must be accompanied by the Installation Information. But this requirement does not apply if neither you nor any third party retains the ability to install modified object code on the User Product (for example, the work has been installed in ROM).

The requirement to provide Installation Information does not include a requirement to continue to provide support service, warranty, or updates for a work that has been modified or installed by the recipient, or for the User Product in which it has been modified or installed. Access to a network may be denied when the modification itself materially and adversely affects the operation of the network or violates the rules and protocols for communication across the network.

Corresponding Source conveyed, and Installation Information provided, in accord with this section must be in a format that is

publicly documented (and with an implementation available to the public in source code form), and must require no special password or key for unpacking, reading or copying.

7. Additional Terms.

"Additional permissions" are terms that supplement the terms of this License by making exceptions from one or more of its conditions. Additional permissions that are applicable to the entire Program shall be treated as though they were included in this License, to the extent that they are valid under applicable law. If additional permissions apply only to part of the Program, that part may be used separately under those permissions, but the entire Program remains governed by this License without regard to the additional permissions.

When you convey a copy of a covered work, you may at your option remove any additional permissions from that copy, or from any part of it. (Additional permissions may be written to require their own removal in certain cases when you modify the work.) You may place additional permissions on material, added by you to a covered work, for which you have or can give appropriate copyright permission.

Notwithstanding any other provision of this License, for material you add to a covered work, you may (if authorized by the copyright holders of that material) supplement the terms of this License with terms:

- a) Disclaiming warranty or limiting liability differently from the terms of sections 15 and 16 of this License; or
- b) Requiring preservation of specified reasonable legal notices or author attributions in that material or in the Appropriate Legal Notices displayed by works containing it; or
- c) Prohibiting misrepresentation of the origin of that material, or requiring that modified versions of such material be marked in reasonable ways as different from the original version; or
- d) Limiting the use for publicity purposes of names of licensors or authors of the material; or
- e) Declining to grant rights under trademark law for use of some trade names, trademarks, or service marks; or
- f) Requiring indemnification of licensors and authors of that material by anyone who conveys the material (or modified versions of it) with contractual assumptions of liability to the recipient, for any liability that these contractual assumptions directly impose on those licensors and authors.

All other non-permissive additional terms are considered "further restrictions" within the meaning of section 10. If the Program as you received it, or any part of it, contains a notice stating that it is governed by this License along with a term that is a further restriction, you may remove that term. If a license document contains a further restriction but permits relicensing or conveying under this License, you may add to a covered work material governed by the terms of that license document, provided that the further restriction does not survive such relicensing or conveying.

If you add terms to a covered work in accord with this section, you must place, in the relevant source files, a statement of the additional terms that apply to those files, or a notice indicating where to find the applicable terms.

Additional terms, permissive or non-permissive, may be stated in the form of a separately written license, or stated as exceptions; the above requirements apply either way.

8. Termination.

You may not propagate or modify a covered work except as expressly provided under this License. Any attempt otherwise to propagate or modify it is void, and will automatically terminate your rights under this License (including any patent licenses granted under the third paragraph of section 11).

However, if you cease all violation of this License, then your license from a particular copyright holder is reinstated (a) provisionally, unless and until the copyright holder explicitly and finally terminates your license, and (b) permanently, if the copyright holder fails to notify you of the violation by some reasonable means prior to 60 days after the cessation.

Moreover, your license from a particular copyright holder is reinstated permanently if the copyright holder notifies you of the violation by some reasonable means, this is the first time you have received notice of violation of this License (for any work) from that copyright holder, and you cure the violation prior to 30 days after your receipt of the notice.

Termination of your rights under this section does not terminate the licenses of parties who have received copies or rights from you under this License. If your rights have been terminated and not permanently reinstated, you do not qualify to receive new licenses for the same material under section 10.

9. Acceptance Not Required for Having Copies.

You are not required to accept this License in order to receive or run a copy of the Program. Ancillary propagation of a covered work occurring solely as a consequence of using peer-to-peer transmission to receive a copy likewise does not require acceptance. However, nothing other than this License grants you permission to propagate or modify any covered work. These actions infringe copyright if you do not accept this License. Therefore, by modifying or propagating a covered work, you indicate your acceptance of this License to do so. 10. Automatic Licensing of Downstream Recipients.

Each time you convey a covered work, the recipient automatically receives a license from the original licensors, to run, modify and propagate that work, subject to this License. You are not responsible for enforcing compliance by third parties with this License.

An "entity transaction" is a transaction transferring control of an organization, or substantially all assets of one, or subdividing an organization, or merging organizations. If propagation of a covered work results from an entity transaction, each party to that transaction who receives a copy of the work also receives whatever licenses to the work the party's predecessor in interest had or could give under the previous paragraph, plus a right to possession of the Corresponding Source of the work from the predecessor in interest, if the predecessor has it or can get it with reasonable efforts.

You may not impose any further restrictions on the exercise of the rights granted or affirmed under this License. For example, you may not impose a license fee, royalty, or other charge for exercise of rights granted under this License, and you may not initiate litigation (including a cross-claim or counterclaim in a lawsuit) alleging that any patent claim is infringed by making, using, selling, offering for sale, or importing the Program or any portion of it.

11. Patents.

A "contributor" is a copyright holder who authorizes use under this License of the Program or a work on which the Program is based. The work thus licensed is called the contributor's "contributor version".

A contributor's "essential patent claims" are all patent claims owned or controlled by the contributor, whether already acquired or hereafter acquired, that would be infringed by some manner, permitted by this License, of making, using, or selling its contributor version, but do not include claims that would be infringed only as a consequence of further modification of the contributor version. For purposes of this definition, "control" includes the right to grant patent sublicenses in a manner consistent with the requirements of this License.

Each contributor grants you a non-exclusive, worldwide, royaltyfree patent license under the contributor's essential patent claims, to make, use, sell, offer for sale, import and otherwise run, modify and propagate the contents of its contributor version.

In the following three paragraphs, a "patent license" is any express agreement or commitment, however denominated, not to enforce a patent (such as an express permission to practice a patent or covenant not to sue for patent infringement). To "grant" such a patent license to a party means to make such an agreement or commitment not to enforce a patent against the party.

If you convey a covered work, knowingly relying on a patent license, and the Corresponding Source of the work is not available for anyone to copy, free of charge and under the terms of this License, through a publicly available network server or other readily accessible means, then you must either (1) cause the Corresponding Source to be so available, or (2) arrange to deprive yourself of the benefit of the patent license for this particular work, or (3) arrange, in a manner consistent with the requirements of this License, to extend the patent license to downstream recipients. "Knowingly relying" means you have actual knowledge that, but for the patent license, your conveying the covered work in a country, or your recipient's use of the covered work in a country, would infringe one or more identifiable patents in that country that you have reason to believe are valid.

If, pursuant to or in connection with a single transaction or arrangement, you convey, or propagate by procuring conveyance of, a covered work, and grant a patent license to some of the parties receiving the covered work authorizing them to use, propagate, modify or convey a specific copy of the covered work, then the patent license you grant is automatically extended to all recipients of the covered work and works based on it.

A patent license is "discriminatory" if it does not include within the scope of its coverage, prohibits the exercise of, or is conditioned on the non-exercise of one or more of the rights that are specifically granted under this License. You may not convey a covered work if you are a party to an arrangement with a third party that is in the business of distributing software, under which you make payment to the third party based on the extent of your activity of conveying the work, and under which the third party grants, to any of the parties who would receive the covered work from you, a discriminatory patent license (a) in connection with copies of the covered work conveyed by you (or copies made from those copies), or (b) primarily for and in connection with specific products or compilations that contain the covered work, unless you entered into that arrangement, or that patent license was granted, prior to 28 March 2007.

Nothing in this License shall be construed as excluding or limiting any implied license or other defenses to infringement that may otherwise be available to you under applicable patent law.

12. No Surrender of Others' Freedom.

If conditions are imposed on you (whether by court order, agreement or otherwise) that contradict the conditions of this License, they do not excuse you from the conditions of this License. If you cannot convey a covered work so as to satisfy simultaneously your obligations under this License and any other pertinent obligations, then as a consequence you may not convey it at all. For example, if you agree to terms that obligate you to collect a royalty for further conveying from those to whom you convey the Program, the only way you could satisfy both those terms and this License would be to refrain entirely from conveying the Program.

13. Use with the GNU Affero General Public License.

Notwithstanding any other provision of this License, you have permission to link or combine any covered work with a work licensed under version 3 of the GNU Affero General Public License into a single combined work, and to convey the resulting work. The terms of this License will continue to apply to the part which is the covered work, but the special requirements of the GNU Affero General Public License, section 13, concerning interaction through a network will apply to the combination as such.

14. Revised Versions of this License.

The Free Software Foundation may publish revised and/or new versions of the GNU General Public License from time to time. Such new versions will be similar in spirit to the present version, but may differ in detail to address new problems or concerns.

Each version is given a distinguishing version number. If the Program specifies that a certain numbered version of the GNU General Public License "or any later version" applies to it, you have the option of following the terms and conditions either of that numbered version or of any later version published by the Free Software Foundation. If the Program does not specify a version number of the GNU General Public License, you may choose any version ever published by the Free Software Foundation.

If the Program specifies that a proxy can decide which future versions of the GNU General Public License can be used, that proxy's public statement of acceptance of a version permanently authorizes you to choose that version for the Program.

Later license versions may give you additional or different permissions. However, no additional obligations are imposed on any author or copyright holder as a result of your choosing to follow a later version.

15. Disclaimer of Warranty.

THERE IS NO WARRANTY FOR THE PROGRAM, TO THE EXTENT PERMITTED BY APPLICABLE LAW. EXCEPT WHEN OTHERWISE STATED IN WRITING THE COPYRIGHT HOLDERS AND/OR OTHER PARTIES PROVIDE THE PROGRAM "AS IS" WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EITHER EXPRESSED OR IMPLIED, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. THE ENTIRE RISK AS TO THE QUALITY AND PERFORMANCE OF THE PROGRAM IS WITH YOU. SHOULD THE PROGRAM PROVE DEFECTIVE, YOU ASSUME THE COST OF ALL NECESSARY SERVICING, REPAIR OR CORRECTION.

16. Limitation of Liability.

IN NO EVENT UNLESS REQUIRED BY APPLICABLE LAW OR AGREED TO IN WRITING WILL ANY COPYRIGHT HOLDER, OR ANY OTHER PARTY WHO MODIFIES AND/OR CONVEYS THE PROGRAM AS PERMITTED ABOVE, BE LIABLE TO YOU FOR DAMAGES, INCLUDING ANY GENERAL, SPECIAL, INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES ARISING OUT OF THE USE OR INABILITY TO USE THE PROGRAM (INCLUDING BUT NOT LIMITED TO LOSS OF DATA OR DATA BEING RENDERED INACCURATE OR LOSSES SUSTAINED BY YOU OR THIRD PARTIES OR A FAILURE OF THE PROGRAM TO OPERATE WITH ANY OTHER PROGRAMS), EVEN IF SUCH HOLDER OR OTHER PARTY HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES.

17. Interpretation of Sections 15 and 16.

If the disclaimer of warranty and limitation of liability provided above cannot be given local legal effect according to their terms, reviewing courts shall apply local law that most closely approximates an absolute waiver of all civil liability in connection with the Program, unless a warranty or assumption of liability accompanies a copy of the Program in return for a fee.

END OF TERMS AND CONDITIONS

How to Apply These Terms to Your New Programs

If you develop a new program, and you want it to be of the greatest possible use to the public, the best way to achieve this is to make it free software which everyone can redistribute and change under these terms.

To do so, attach the following notices to the program. It is safest to attach them to the start of each source file to most effectively state the exclusion of warranty; and each file should have at least the "copyright" line and a pointer to where the full notice is found.

<one line to give the program's name and a brief idea of what
it does.>

Copyright (C) <year> <name of author>

This program is free software: you can redistribute it and/or modify

it under the terms of the GNU General Public License as published by

the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or

(at your option) any later version.

This program is distributed in the hope that it will be useful,

but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of

MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License for more details.

You should have received a copy of the GNU General Public License

along with this program. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.

Also add information on how to contact you by electronic and paper mail.

If the program does terminal interaction, make it output a short notice like this when it starts in an interactive mode:

<program> Copyright (C) <year> <name of author>

This program comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY; for details type `show w'.

This is free software, and you are welcome to redistribute it

under certain conditions; type `show c' for details.

The hypothetical commands `show w' and `show c' should show the appropriate parts of the General Public License. Of course, your program's commands might be different; for a GUI interface, you would use an "about box".

You should also get your employer (if you work as a programmer) or school, if any, to sign a "copyright disclaimer" for the program, if necessary. For more information on this, and how to apply and follow the GNU GPL, see <a href="http://www.gnu.org/licenses/">http://www.gnu.org/licenses/</a>.

The GNU General Public License does not permit incorporating your program into proprietary programs. If your program is a subroutine library, you may consider it more useful to permit linking proprietary applications with the library. If this is what you want to do, use the GNU Lesser General Public License instead of this License. But first, please read

<<u>http://www.gnu.org/philosophy/why-not-lgpl.html</u>>.

## Π.1.3 Τα script του Περιβάλλοντος

## П.1.3.1 config.sh

```
#!/bin/bash
# Run this script for benchmark preparation
# This configh.sh script is located in the same directory as
# 01.FMM-YUK-U.tar.bz2 and 02.FMM-YUK-A.tar.bz2
echo
echo
echo "Current directory is $PWD" #setting main folder as env var
echo
echo "Setting '$PWD' as benchmark root directory"
export bench dir=$PWD
# echo $bench dir
echo
echo
echo " If you prefer another path either set it in bash.rc"
echo " or move files and script to said folder"
tar -jxvf 01.FMM-YUK-U.tar.bz2  # extract tar in folder 01
tar -jxvf 02.FMM-YUK-A.tar.bz2  # extract tar in folder 02
tar -jxvf 02.FMM-YUK-A.tar.bz2
                                      # extract tar in folder 02
echo
echo
export bench dir 01=$bench dir/01.FMM-YUK-U
# setting folder 01 as env var
export bench dir 02=$bench dir/02.FMM-YUK-A
# setting folder 02 as env var
#echo $bench dir 01
#echo $bench dir 02
export additions=$bench dir/additions
# setting folder additions as env var
cd $additions ; make all
# 'make' additions folder
#echo $PWD
#ls
cd $bench dir 01/source/; make clean
# make clean for bench folders
#echo $PWD
cd $bench dir 02/source/; make clean
#echo $PWD
cd $bench dir ; chmod u+x generate.sh ; ./generate.sh
# over to generate.sh script
```

## П.1.3.2 generate.sh

```
#!/bin/bash
# Run this script for benchmark preparation
# Datadump creation
# step one
#echo $bench dir 2>&1 |tee -a bench dir
#echo $bench dir 01 2>&1 |tee -a bench dir 01
#echo $bench_dir_02 2>&1 |tee -a bench_dir_02
#echo $additions 2>&1 |tee -a additionsf
ans="global variable"
                                      # global var
echo "
                           In script generator.sh"
echo
echo "This script prepares the benchmarking of FMM-YUK-A and FMM-YUK-U"
echo
echo -n "
                       Do you wish to proceed (Y/any key for N)?"
read ans
if test "$ans" != "Y" -a "$ans" != "y";
then exit 0;
fi
# step two
# global var particle count etc
choice="global variable"
particles="global variable"
echo "Choose between a particle generator, uniform cube, uniform sphere or
plummer model"
echo "Type either \"cube\" \"sphere\" or \"plummer\" "
read choice
if test "$choice" != "cube" -a "$choice" != "sphere" -a "$choice" !=
"plummer"
then exit 0
fi
echo "Enter the desired number of particles"
read particles
echo
if test "$choice" == "cube";
then echo "Generating $choice of side 1 and $particles uniform
particles";echo; cd $additions ; ./cube.o $particles > /dev/null ;
fi
if test "$choice" == "sphere"
then echo "Generating $choice of radius 1 and $particles uniform
particles";echo; cd $additions ; ./sphere.o $particles > /dev/null ;
fi
if test "$choice" == "plummer"
then echo "Generating $choice cluster of total radius 1 and $particles
uniform particles"; echo; cd $additions; ./plummer.o $particles >
/dev/null ;
```

fi echo " Press any key to continue" read -n 1 -s echo echo echo "Completed" # step three echo "Copying binary data dump to respective folders" cp binary x \$bench dir 01/source/binary x ; cp binary y \$bench\_dir\_01/source/binary\_y ; cp binary\_z \$bench\_dir\_01/source/binary\_z cp binary charge \$bench dir 01/source/binary charge cp binary x \$bench dir 02/source/binary x ; cp binary y \$bench dir 02/source/binary y ; cp binary z \$bench dir 02/source/binary z cp binary charge \$bench dir 02/source/binary charge #step four echo echo " Problem size was \$particles" echo " Descend into FMM-YUK-U and compile?" echo " Press any key to continue" read -n 1 -s cd \$bench dir 01/source/ cp \$additions/result analysis.o ./result analysis.o # result analyzer copied to folder rm uniyukdriver.f rm fmmuniyuk.f rm yukoperators.f sed -e 's/100000/'\$particles'/g' < initial uniyukdriver.f > uniyukdriver.f # problem size is changed in U uniyukdriver.f sed -e 's/100000/'\$particles'/g' < initial fmmuniyuk.f > fmmuniyuk.f # problem size is changed in U fmmuniyuk.f sed 's/100000/'\$particles'/g' < initial yukoperators.f > yukoperators.f # problem size is changed in U yukoperators.f make # step five echo echo " Descend into FMM-YUK-A and compile?" echo " Press any key to continue" read -n 1 -s cd \$bench dir 02/source/ cp \$additions/result analysis.o ./result analysis.o # result analyzer copied to folder rm adapyukdriver.f

```
rm fmmadapyuk.f
rm yukoperators.f
sed -e 's/100000/'$particles'/g' < initial_adapyukdriver.f >
adapyukdriver.f # problem size is changed in A adapyukdriver.f
sed -e 's/100000/'$particles'/g' < initial fmmadapyuk.f > fmmadapyuk.f
          # problem size is changed in A fmmadapyuk.f
sed -e 's/100000/'$particles'/g' < initial yukoperators.f >
yukoperators.f # #problem size is changed in A yukoperators.f
make
echo
echo
echo "This concludes generate script and benchmark preparation"
echo "Would you like to run the benchmark?"
read ans
if test "$ans" != "Y" -a "$ans" != "y";
then exit 0;
fi
cd $bench dir ; chmod u+x run.sh ; ./run.sh
                                                     # over to
generate.sh script
```

## П.1.3.3 run.sh

```
#!/bin/bash
# Run this script for benchmark preparation
cd $bench dir 01/source/
clear
echo
echo "
               RUNNING Yukawa Potential Uniform Solver for $particles
particles"
echo
./fmm ; ./result analysis.o 2>&1 | tee -a fmm.log
cd $bench dir 02/source/;
#clear
echo
echo "
                RUNNING Yukawa Potential Adaptive Solver for $particles
particles"
./fmm ; ./result analysis.o 2>&1 | tee -a fmm.log
```

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

### Βιβλιογραφία Εισαγωγής

[1] Diacu, F.: The solution of the n-body Problem, The Mathematical Intelligencer, 1996, 18, p.66– 70

[2] Griffiths, D. J.: Introduction to Electrodynamics (3rd ed.). Prentice Hall, (1998) ISBN 0-13-805326-X.

[3] Martin B. R.: Particle Physics. Graham Shaw (2008) .p.18.

[4] Ταμβάκης, Κ.: Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική. Leader Books AE Graham Shaw (2008), ISBN 960-7901-39-8

[5] Zhang, B., Huang, J., Pitsianis, N., Sun, X.: Revision of FMM–Yukawa: An adaptive fast multipole method for screened Coulomb interactions. Computer Physics Communications, Volume 181, Issue 12, December 2010, Pages 2206–2207

[6] Debye, P., Hóckel, E.: Phys. Z. 24 (1923) 185.

[7] M. Gilson, A. Rashin, R. Fine, B. Honig, J. Molec. Biol. 184 (1985) 503.

[8] Juffer, A. J., Botta, E. F. F., van Keulen, B.A.M., van der Ploeg, A. H.J.C., Berendsen, J.: Comput. Phys. 97 (1991) 144.

 [9] Kuo, S.S., Altman, M.D., Bardhan, J.P., B. Tidor, J.K. White, Fast methods for simulation of biomolecule electrostatics, in: ICCAD '02: Proceedings of the2002 IEEE/ACM International Conference on Computer-Aided Design, ACM, New York, NY, USA, 2002, pp. 466–473.

[10] Liang, J., Subramaniam, S.: Biophys. J. 73 (1997) 1830.

[11] B. Lu, X. Cheng, J. Huang, J.A. McCammon, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 103 (2006) 19314.

[12] D.A. Saville, W.B. Russell, W.R. Schowalter (Eds.), Colloidal Dispersions, Cambridge University Press, 1991.

[13] W. Hafla, A. Buchau, W. M. Rucker, *Efficient computation of source magnetic scalar potential. Adv. Radio Sci.*, 4, 59–63, 2006

[14] H. Cheng and L. Greengard and V. Rokhlin, *A Fast Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions*. Journal of Computational Physics, vol. 155, pages 468-498, 1999).

[15] Temam R. Navier Stokes Equations: Theory and Numerical Analysis. AMS Chelsea Publishing(2000) ISBN 0-8218-2737-5

[16] Sverre J. Aarseth (2003). *Gravitational N-body Simulations: Tools and Algorithms*. Cambridge University Press. ISBN0521121531.

[17] Hwu, Wen-mei W., GPU Computing Gems Jade Edition, Chapter 31 Fast N-Body Simulation with CUDA, Morgan Kaufmann (2011)., ISBN0123859638

[18] NG Hadjiconstantinou *Analysis of discretization in the direct simulation Monte Carlo* Physics of Fluids, 2000

[19] L. Greengard and V. Rokhlin, A Fast Algorithm for Particle Simulations, JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 135, 280–292 (1997)

[20] E Puchwein , S Hilbert. Cluster strong lensing in the Millennium simulation: the effect of galaxies and structures along the line-of-sight Monthly Monthly Notices of the Royal Astronomical Society Volume 398, Issue 3, pages 1298–1308, September 2009

[21] Springel V., 2005, MNRAS, submitted, astro-ph/0505010

[22] Springel V., Yoshida N., White S. D. M., 2001, New Astronomy, 6, 51

[23] Cooley, JW, and Tukey, JW 1965 Math Comput., 19 297

[24] Couchman, H. M. P. *Mesh-refined P3M - A fast adaptive N-body algorithm*. Astrophysical Journal, Part 2 - Letters (ISSN 0004-637X), vol. 368, Feb. 20, 1991, p. L23-L26.

[25] Hernquist,L. Performance Characteristics of Tree Codes. The Astrophysical Journal Supplement Series, 64: 715-734,1987 August

[26] J. E. Barnes and P. Hut. Error analysis of a tree code, The astrophysical journal supplements series 70:389-417, June 1989

[27] http://www.amara.com/papers/nbody.html by Amara Graps, 1995-2000.

[28] Harvey Gould and Jan Tobochnik, An Introduction to Computer Simulation Methods, Parts 1 and 2, Addison Wesley, 1988.

[29] Alejandro Garcia, Numerical Methods for Physics, Prentice-Hall, 1994.

[30] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles* (McGraw-Hill, New York, 1981).

[31] B.A. Luty and W.F. van Gunsteren (1996). "Calculating Electrostatic Interactions Using the Particle-Particle Particle-Mesh Method with Nonperiodic Long-Range Interactions" *J. Phys. Chem.* 100 2581-2587.

[32] B.A. Luty, I.G. Tironi and W.F. van Gunsteren (1995). "Lattice-sum Methods for Calculating Electrostatic Interactions in Molecular Simulations," *J. Chem. Phys.* 103 3014-3021. (Brock Luty's study of periodic boundary conditions for P3M)

[33] Gregory Beylkin, Ronald R. Coifman, and Vladimir Rokhlin. "Fast Wavelet Transforms and Numerical Algorithms I." *Comm on Pure and Applied Math*, XLIV: 141-183, 1991.

[34] A. W. Appel 1981 BA thesis Princeton University

[35] A. W. Appel, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 6, 85 (1985).

[36] J. G. Jernigan and D. H. Porter. *A tree code with logarithmic reduction of force terms, hierarchical regularization of all variables, and explicit accuracy controls* Astrophysical Journal Supplement Series (ISSN 0067-0049), vol. 71, Dec. 1989, p. 871-893.

[37] Sergio Gelato, David F. Chernoff, Ira Wasserman, "An Adaptive Hierarchical Particle-Mesh code with Isolated Boundary Conditions," *ApJ* accepted, 1997 May 1 issue.

[38] Jessop, Duncan & Chau 1994, J. Comp. Phys. 115, 339.

[39] Splinter, Randall, "A Nested Grid Particle-Mesh Code for High Resolution Simulations of Gravitational Instability in Cosmology," *MNRAS*, 1996, 281, 281

[40] Villumsen, 1988, ApJS, 71, (1988), 407.

[41] Anninos, et al. ApJ, 436, (1994), 11.

[42] Suvendra Dutta, 1995 in MNRAS 276, 1109

[43] Guohong Xu, "A New Parallel N-body Gravity Solver: TPM

http://zeus.ncsa.uiuc.edu:8080/gc3/gc3006/abstract.html

[44] Lars Hernquist & Jeremiah Ostriker, (1992), "A Self-Consistent Field Method for Galactic Dynamics," *Astrophysical Journal*, 386, 375-397.

[45] M Hser, R Ahlrichs *Improvements on the direct SCF method* Journal of Computational Chemistry (1989) Volume: 10, Issue: 1, Publisher: John Wiley & Sons, Inc., Pages: 104-111

[46] J Gavnholt, T Olsen, M Engelun, and J Schiøtz, *△ self-consistent field method to obtain potential energy surfaces of excited molecules on surfaces* Danish National Research Foundation's Center for Individual Nanoparticle Functionality (CINF), Department of Physics, Technical

University of Denmark, DK-2800 Kongens Lyngby, Denmark

[47] Piet Hut, Jun Makino, The Art of Computational Science vol 9, July 11 2005

[48] Sverre Aarseth, Michel Henon, and Roland Wielen: *A comparison of Numerical Methods for the Study of Star Cluster Dynamics*, 1974, Astron. Astroph. 37, 183.

#### Βιβλιογραφία Κεφαλαίου 2

[49] A. W. Appel. An efficient program for many-body simulation. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 6, 85, (1985).

[50] J.G. Jernigan and D. H. Porter. A tree code with logarithmic reduction of force terms, hierarchical regularization of all variables and explicit accuracy controls. *Ap. J. Suppl.*, 71, 871, (1989).

[51] Barnes, J. E. & Hut, P. *A hierarchical O(NlogN) force-calculation algorithm*, Nature 324, 446-449, (1986)

[52] Barnes, J. E. & Hut, P., *Error Analysis of a Treecode*, Astrophysical Journal Supplement Series (ISSN, 0067-0049), vol. 70, June 1989, p. 389-417.

[53] J. Makino. Comparison of two different tree algorithms. J. Comp. Phys., 88, 393, (1990).

[54] F. R. Bouchet and L. Hernquist. Cosmological simulations using the hierarchical tree method. *Ap. J. Suppl.*, 68, 521,(1988).

- [55] J. E. Barnes. A modified tree code: Don't laugh; it runs. J. Comp. Phys., 87, 161, (1990).
- [56] Chandrasekhar, S. 1942 Principles of Stellar Dynamics, University of Chicago Press.
- [57] Dubinski ,J.: A Parallel Tree Code Interface (1996) Volume: 1, Issue: 2
- [58] Makino, J. & Hut, P. 1989, Comput. Phys. Rep., 9, 199

[59] Barnes, J.E 1990, J. of Comp. Phys., 87, 161

[60] Lars Hernquist Vectorization of tree traversals, The Institute for Advanced Study, Princeton University, Princeton, New Jersey, USA

[61] Warren, M.S. 1994, Ph.D Thesis, University of California, Santa Barbara

[62] Barnes, J.E. 1994, In Computational Astrophysics, Eds. J. Barnes et al. (Springer-Verlag: Berlin)

[63] John K Salmon, Michael S Warren, *Skeletons from the Treecode Closet*, Journal of Computational Physics, July 31, 1992

### Βιβλιογραφία Κεφαλαίου 3

[64] L. Greengard and V. Rokhlin "A Fast Algorithm for Particle Simulations" JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 135, 280–292 (1997)

[65] *Barry A. Cipra* The Best of the 20th Century: Editors Name Top 10 Algorithms *SIAM News*, Volume 33, Number 4

[66] J.W. Brown and R.V.Churchill, Complex Variables and Applications, McGraw-Hill Science/Engineering/Math , 6 edition (1995), ISBN-10: 0079121470

[67] The Embedded Boundary Integral Equation Solver for the Incompressible Navier-Stokes Equations. G. Biros, L. Ying, D. Zorin. International Association for Boundary Element Methods Symposium, 2002.

[68] K. Nabors, F. T. Korsmeyer, F. T. Leighton, and J. White Preconditioned, Adaptive, Multipole-Accelerated Iterative Methods for Three-Dimensional First-Kind Integral Equations of Potential Theory

[69] Schlick T. (2002). *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*. Interdisciplinary Applied Mathematics series, vol. 21. Springer: New York, NY, USA. ISBN 0-387-95404-X. [70] Rapaport DC. (2004). *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. 2nd ed. Cambridge University Press. ISBN 0521825687.

[71] Morse, P.M. and Feshbach, H. "Boundary Conditions and Eigenfunctions." Ch.6 in *Methods of Theoretical Physics, Part I.* New York: McGraw-Hill, pp 495-498 and 676-790, 1953.

[72] Arfken, G. Mathematical Methods for Physicists, 3rd ed. Orlando, FL: Academic Press, pp.502-504, 1985.

[73] Weisstein, Eric W. "Boundary Conditions." From *MathWorld--*A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/BoundaryConditions.html

[74] L. Greengard and V. Rokhlin. A new version of the fast multipole method for the Laplace equation in three dimensions. Acta Numer.,

6:229–269, 1997.

[75] Felipe A. Cruz L. A. Barba Characterization of the errors of the Fast Multipole

Method approximation in particle simulations International Journal for Numerical Methods in Engineering Volume 79, Issue 13, pages 1577–1604, 24 September 2009

[76] H. Cheng, L. Greengard, V. Rokhlin, A Fast Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions <sup>Journal of Computational Physics</sup>

Volume 155, Issue 2, 1 November 1999, Pages 468-498

[77] Carrier, J | Greengard, L | Rokhlin, V A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. SIAM J. SCI. STAT. COMPUT. Vol. 9, no. 4, pp. 669-686. 1988

[78] Greengard, L., Jingfang Huang, Rokhlin, V., Wandzura, S., Accelerating fast multipole methods for the Helmholtz equation at low frequencies: Computational Science & Engineering, IEEE Issue Date: Jul-Sep 1998 Volume: 5 Issue:3 p32-38

[79] Hongwei Cheng, William Y. Crutchfield, Zydrunas Gimbutas, Leslie F. Greengard, J. Frank Ethridge, Jingfang Huang, Vladimir Rokhlin, Norman Yarvin, Junsheng Zhao "A wideband fast multipole method for the Helmholtz equation in three dimensions" Journal of Computational Physics, Volume 216, Issue 1, 20 July 2006, Pages 300–325

[80] M. Harper Langston, Leslie Greengard and Denis Zorin] A free-space adaptive FMM-Based PDE solver in three dimensions Communications in applied mathematics and computational science Vol. 6 (2011), No. 1, 79–122

[81] K.Nabors and J. White, "Fastcap: A multipole accelerated 3-D capacitance extraction program" IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, Vol 10, pp.1447-

1459, November 1991.

[82] Nabors, K., Kim, S., White, J., "Fast capacitance extraction of general three dimentional structures", IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Vol 40 Issue 7, p1496 - 1506 Jul 1992

[83] B.L. Buzbee, G.H. Golub, and C.W. Nielson. On direct methods for solving Poisson's equation. SIAM Journal on Numerical Analysis, 7:627–656, 1970.

[84] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang. Spectral Methods in Fluid Dynamics. Springer–Verlag, New York, 1987.

[85] B.L. Buzbee, G.H. Golub, and C.W. Nielson. On direct methods for solving Poisson's equation. SIAM Journal on Numerical Analysis,

7:627–656, 1970.

[86] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang. Spectral Methods in Fluid Dynamics. Springer–Verlag, New York, 1987.

[87] P. McCorquodale, P. Colella, G.T. Balls, and S.B. Baden. A local corrections algorithm for solving Poisson's equation in three dimensions.

Communications in Applied Mathematics and Computational Science, 2(1):57-81, 2007

[88] A. Brandt. Multilevel adaptive solutions to boundary value problems. Mathematics of Computation, 31:333–390, 1977.

[89] L. Briggs, V. Emden Henson, and S. F. McCormick. A Multigrid Tutorial. SIAM, Philadelphia, 2000.

[90] H. Johansen and P. Colella. A Cartesian grid embedded boundary method for Poisson's equation on irregular domains. Journal of Computational

Physics, 147:60-85, 1998.

[91] D. Martin and K. Cartwright. Solving Poisson's equations using adaptive mesh refinement. Technical Report M96/66, University of California,

Berkeley Electronic Research Laboratory, 1996.

# Βιβλία προγραμματισμού που χρησιμοποιήθηκαν από το γράφοντα στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

[92] Brian W. Kernigan and Dennis Ritchie, The C Programming Language, Prentice Hall; 2 edition(22 Mar 1988) ISBN: 0131103628

[93] Kyle Loudon, C++ Pocket Reference, O'Reilly Media, 1st edition May 2003)
[94] Bjarne Stroustrup, The C++ Programming Language, Addison Wesley, 3 edition 1 Feb 2000

[95] Kyle Loudon, Mastering Algorithms with C, O'Reilly Media, 1 edition 12 Aug 1999

[96] David Flanagan, The Ruby Programming Language, O'Reilly Media, 1 edition 1 Feb 2008

[97] Dave Thomas, Chad Fowled, Andy Hunt, Programming Ruby: The Pragmatic Programmer's Guide, Second Edition, Pragmatic Bookshelf,2 edition, 8 Oct 2004

[98] Kathy Sierra, Bert Bates, Head First Java, O'Reilly Media, 2 edition 16 Feb 2005

[99] Herbert Schildt, Java The Complete Reference, McGraw-Hill Osborne, 8 edition 1 Aug 2011

[100] Michael Metcalf, John Reid, Malcolm Cohen, Modern Fortran Explained (Numerical Mathematics and Scientific Computation), OUP Oxford, 4 edition 24 Mar 2011

[101] Stephen J. Chapman, Fortran 95/2003 for Scientists & Engineers, McGraw-Hill Higher Education, 3 edition 1 May 2007

[102] Ian Chivers, Introduction to Programming with Fortran: with coverage of Fortran 90, 95, 2003 and 77, Springer, 1st Edition. edition 22 Dec 2005

[103] Chris Johnson, Pro Bash Programming: Scripting the Linux Shell, APRESS, 1 edition 12Oct 2009

[104] Christopher Negus, Francois Caen, Ubuntu Linux Toolbox: 1000+ Commands for Ubuntu and Debian Power Users, John Wiley & Sons 23 Nov 2007

[105] Arnold Robbins, bash Pocket Reference, O'Reilly Media, 1 edition 17 May 2010)

[106] Michael Kerrisk, The Linux Programming Interface: A Linux and UNIX System Programming Handbook, NO STARCH PRESS, 1 edition 17 Nov 2010

[107] Elen Siever, Stephen Figgins, Robert Lovem Arnold Robbins, Linux in a Nutshell, O'Reilly Media, 6 edition 29 September 2009

[108] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian Flannery, Numerical Recipes in C, Second Edition Cambridge University Press (1992)

[109] Piet Hut and Jun Makino, The Art of Computational Science, Vol 9, The Kali Code.