

Simulation eines Vielkörpersystems auf einem verteilten Rechner

Masterarbeit

Adrian Pegler

6. Juli 2018

CHRISTIAN-ALBRECHTS-UNIVERSITÄT ZU KIEL
INSTITUT FÜR INFORMATIK
ARBEITSGRUPPE SCIENTIFIC COMPUTING

Betreut durch: Prof. Dr. Steffen Börm
Dipl.-Inf. Sven Christophersen

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Kiel, 6. Juli 2018

Zusammenfassung

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Ziele	2
1.3	Aufbau	2
1.4	tutorial	2
2	Grundlagen	5
2.1	Hierarchische Matrizen	5
2.1.1	\mathcal{H} -Matrizen	13
2.1.2	Optimierung	14
2.1.3	\mathcal{H}^2 -Matrizen	16
2.2	Paralleles Rechnen	18
2.2.1	Parallele Hardware	19
2.2.2	Parallele Software	21
2.3	MPI	24
2.3.1	Geschichte	24
2.3.2	Point-to-Point-Kommunikation	25
2.3.3	Kollektive Kommunikation	28
3	Hauptteil	33
3.1	Ausgangssituation	33
3.2	\mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation	36
3.2.1	Clusterung	37
3.2.2	Vorwärtstransformation	41
3.2.3	Auswertung der Kopplungsmatrizen	45
3.2.4	Rückwärtstransformation	46
3.3	Parallelisierung	48
3.3.1	Arbeitsverteilung	48
3.3.2	Datenverteilung	51
4	Evaluierung	53
5	Fazit und Ausblick	55
5.1	Fazit	55
5.2	Ausblick	55

Inhaltsverzeichnis

Bibliografie

57

Einleitung

Vorbemerkungen

Ich verwende in diesem Dokument den nach Herrn Prof. Dr. H. Laue benannten *Lauehaken*: Sei $n \in \mathbb{N}$, dann bezeichnet \underline{n} die Menge $\{1, \dots, n\}$. In Anlehnung an die Schreibweise \mathbb{N}_0 für die natürlichen Zahlen $\mathbb{N} \setminus \{0\}$ bezeichnet \underline{n}_0 die Menge $\{0, \dots, n\}$.

vereinigt

Es werden ausschließlich Objekte im Zusammenhang mit gravitationellen Wechselwirkungen als Körper bezeichnet. In der Regel handelt es sich im Kontext dieser Arbeit dabei um Sonnen, allgemeiner um Himmelskörper.

1.1. Motivation

x_i, x_j umschreiben in x und y !

Angeblich soll Sir Isaac Newton durch das Fallen eines Apfels die grundlegende Idee gehabt haben, dass die Mechanik des Himmels und der Erde doch die selben sein könnten [Stukeley 1936]. Jeder Schüler hat von dieser Geschichte gehört - und ob sie nun wahr ist oder nicht, sein Gesetz der nicht-relativistischen Gravitation ist bis heute eine wichtige Formel in der Physik.

Seien für zwei Körper die Massen m_1, m_2 und Positionen x_1, x_2 gegeben. Dann wirkt durch die Masse m_2 eine Kraft f auf die Masse m_1 , die sich durch

$$f = \gamma m_1 m_2 \frac{x_2 - x_1}{\|x_2 - x_1\|_2^3} \quad (1.1)$$

ergibt [Newton 1833]. Dabei ist $\gamma \approx 6,67408 \cdot 10^{-11} \text{m}^3 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-2}$ die Gravitationskonstante [Mohr u. a. 2016] und $\|\cdot\|_2 : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ die euklidische Norm $z \mapsto \sqrt{\sum_{i \in \underline{d}} |z|^2}$. Im weiteren werden die Position eines Körpers und der Körper assoziiert.

Diese Formel für zwei Körper auszurechnen stellt zunächst kein Problem dar. Von größerem Interesse für die Wissenschaft sind aber Mehrkörperprobleme, also die gravitationellen Wechselwirkungen zwischen einer Menge von Körpern. Seien im folgenden also $n \in \mathbb{N}$ und Körper x_1, \dots, x_n mit Massen m_1, \dots, m_n gegeben. Für $i \neq j \in \underline{n}$ wirkt mit

1. Einleitung

Gleichung 1.1 durch den j -ten Körper eine Kraft

$$f_{ij} = \gamma m_i m_j \frac{x_j - x_i}{\|x_j - x_i\|_2^3} \quad (1.2)$$

beziehungsweise durch alle Körper eine kumulative Kraft

$$f_i = \sum_{\substack{j \in \mathcal{U} \\ j \neq i}} \gamma m_i m_j \frac{x_j - x_i}{\|x_j - x_i\|_2^3} \quad (1.3)$$

auf den i -ten Körper [Börm 2016]. Will man nun alle auftretenden Kräfte simulieren, müssen für alle n Körper jeweils $(n - 1)$ Gleichungen gelöst werden. Das Problem hat also eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^2)$.

Problematisch wird dies, wenn man sich beispielsweise die Dimensionen unseres Sonnensystems vergegenwärtigt. Laut *World Book at NASA* [2007] besteht die Milchstraße aus etwa 100 Milliarden (also 10^{11}) Sonnen. Für sämtliche gravitationelle Wechselwirkungen müssten also ungefähr $(10^{11})^2 = 10^{22}$ Terme gelöst werden. Geht man davon aus, dass ein aktueller Prozessor nicht mehr als eine Milliarde Terme pro Sekunde ausrechnen kann, so benötigt er etwa 10^{13} Sekunden, also mehr als 300.000 Jahre für einen einzigen Simulationsschritt. Ein Problem dieser Größenordnung könnte also nicht in annehmbarer Zeit gelöst werden.[Börm 2016]

In dieser Arbeit wird ein zweigleisiger Ansatz am vorliegenden Beispiel vorgestellt, mit dessen Hilfe Probleme dieser Größen- und Komplexitätsklasse in den Griff zu bekommen sind.

1.2. Ziele

Der erste Schritt ist über Approximation die Komplexitätsklasse des Problems zu reduzieren. Reduktion auf $\mathcal{O}(n)$

In einem weiteren Schritt wird der vorige Algorithmus zur Ausführung auf Parallel-Rechner-Systemen angepasst.

1.3. Aufbau

machen

1.4. tutorial

entfernen

Dies ist die Einleitung Shaw [2003] haben ein ganz tolles Papier geschrieben Dies war ein Beispiel für den *nathib* Befehl für `\citet{}`.

AspectJ ist ein tolles Tool [AspectJ]. Dies war ein Beispiel für den *nathib* Befehl `\citep{}`.

Kieker: [Rohr u. a. 2008; van Hoorn u. a. 2009; 2012]

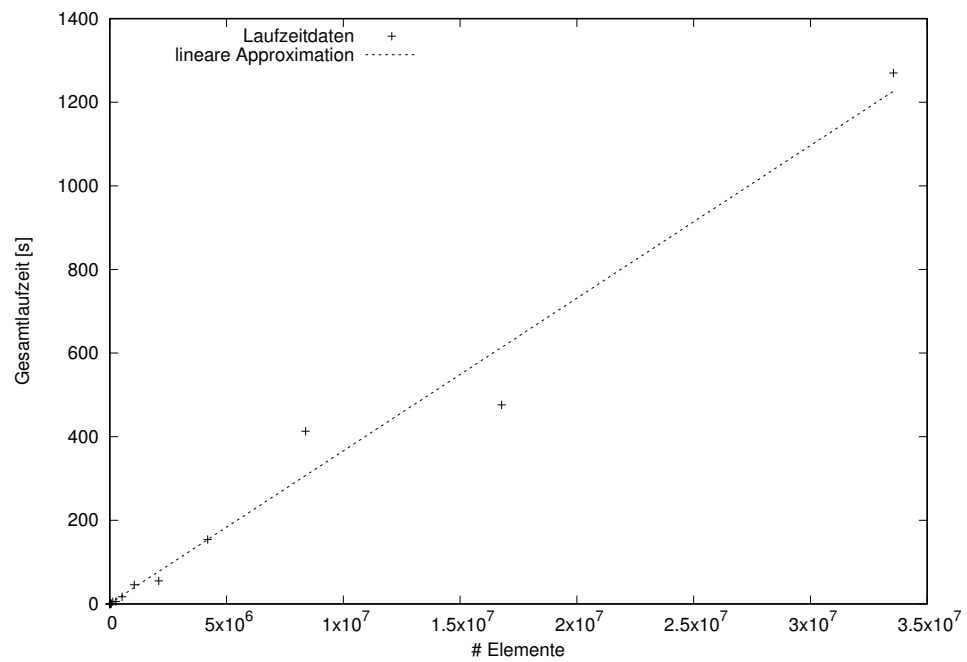
Artikel Beispiel: [Frey und Hasselbring 2011]

Weitere Hinweise auf <http://se.informatik.uni-kiel.de/research/scientific-work/> und <http://www.twenzel.de/>.

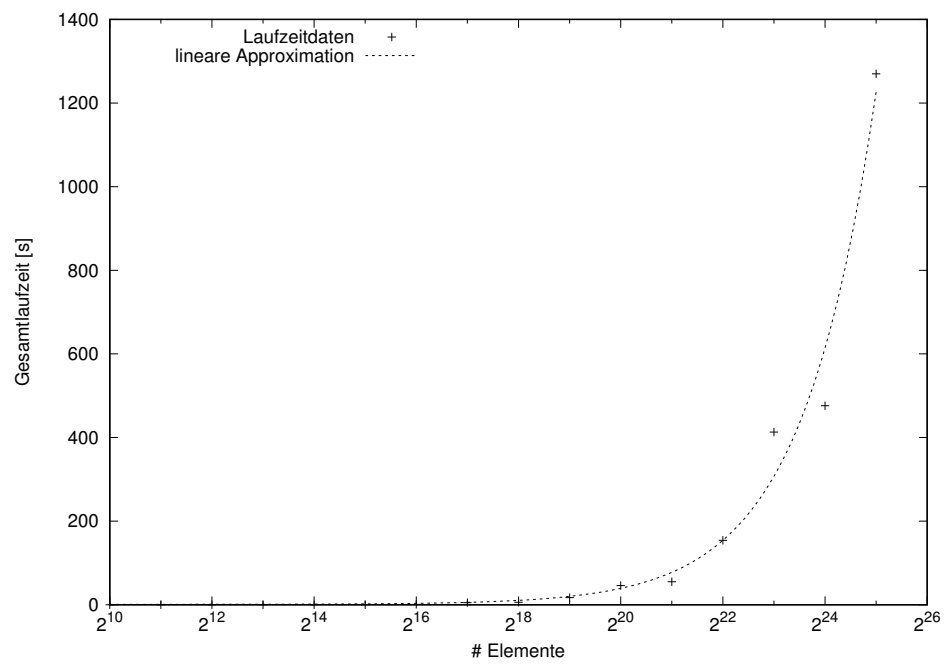
Listing 1.1. ImbaClass in Java code

```
1 public class ImbaClass {  
2     private static final String constantString = "I_am_imba";  
3 }
```

1. Einleitung



(a)



(b)

Abbildung 1.1. muhaha

Grundlagen

2.1. Hierarchische Matrizen

Erinnern wir uns an Gleichung 1.2 aus der Einleitung, in welcher die gravitationelle Wechselwirkung zwischen zwei Körpern x und y beschrieben wurde. Die Struktur dieser Formel erinnert stark an Matrizen. Ein Ansatz, um große vollbesetzte Matrizen speicherplatzsparend aufzustellen und Berechnungen zeiteffektiv durchzuführen, besteht darin, sie als hierarchische Matrizen darzustellen. Im Folgenden sollen daher die Grundlagen für allgemeine \mathcal{H} - und \mathcal{H}^2 -Matrizen eingeführt werden. Für ausführlichere Arbeiten zu dem Thema der hierarchischen Matrizen verweise ich auf Grasedyck [2001] und Hackbusch [1999].

Quellenangaben einfügen: vgl. Nicht lokale Operationen

Erarbeitet wurde das Konzept der hierarchischen Matrizen unter anderem zur effektiven Lösung Fredholmscher Integralgleichungen:

$$u(x) = \int_{\Omega} u(y) g(x, y) dy \quad \forall x \in \Omega.$$

Dabei ist $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ und $g: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ eine sogenannte *Kernfunktion*. Diskretisiert man diese Gleichung mit dem Galerkinverfahren unter Verwendung einer Finite-Elemente-Basis $(\phi_i)_{i \in I}$ erhält man die zugehörige Matrix

$$G_{ij} = \int_{\Omega} \int_{\Omega} \phi_i(x) g(x, y) \phi_j(y) dy dx, \quad \forall i, j \in I.$$

Um die Integration über $\Omega \times \Omega$ aufspalten zu können, ist es notwendig, dass die Variablen in der Kernfunktion getrennt werden können. Die Kernfunktion g muss also in der Form

$$g(x, y) = \sum_{v \in k} a_v(x) b_v(y)$$

mit $k \in \mathbb{N}$, $a_v, b_v: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ vorliegt. Eine Kernfunktion dieser Form heißt *entartete Kernfunktion* von Rang k . Allgemein nennen wir eine Funktion g eine Kernfunktion einer Matrix G , falls die Funktion g die Matrix G erzeugt, also gerade $G_{\mu\nu} = g(\mu, \nu)$ gilt. Nicht jede Kernfunktion ist entartet, es lassen sich aber oft entartete Kernfunktionen konstruieren, die die Funktion approximieren. Möglichkeiten sind beispielsweise Approximationen durch Taylor-Entwicklung oder Interpolation. [Grasedyck 2001]

2. Grundlagen

Seien X, Y Mengen und $G \in \mathbb{R}^{X \times Y}$ eine Matrix mit Kernfunktion $g: X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$. Ist g entartet, so gilt also für $x \in X$ und $y \in Y$ gerade $G_{xy} = g(x, y) = \sum_{v \in \underline{k}} a_v(x) b_v(y)$. Die Summe in dieser Gleichung können wir auch durch Multiplikation zweier Matrizen $A \in \mathbb{R}^{X \times k}$ und $B^T \in \mathbb{R}^{Y \times k}$ mit $A_{xv} = a_v(x)$, $B_{yv} = b_v(y)$ ausdrücken. Analog dazu, die Kernfunktion als entartete Kernfunktion darzustellen, ist also die Darstellung der Matrix G durch Matrizen A und B durch $G = AB^T$.

Approximation

Im Folgenden möchte ich eine beispielhafte Approximation einer nicht-entarteten Kernfunktion durch Interpolation vorstellen, um so eine entartete Kernfunktion zu erhalten. Der Aufbau folgt weitestgehend dem von Börm [2018]. Für eine Approximation einer nicht-entarteten Kernfunktion durch Taylor-Entwicklung verweise ich auf Grasedyck [2001].

Sei $g: \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine nicht-entartete Kernfunktion. Für eine Interpolationsordnung k und ein Teilgebiet $\sigma \subset \Omega$ wählen wir Interpolationspunkte $\xi_{\sigma,1}, \dots, \xi_{\sigma,k}$. Nun suchen wir eine Approximation von $g|_{\Omega \times \sigma}$ der Form

$$g_\sigma(x, y) = \sum_{v \in \underline{k}} g(x, \xi_{\sigma,v}) \mathcal{L}_{\sigma,v}(y), \quad (2.1)$$

in der x und y getrennt sind. Somit hätten wir bereits eine entartete Kernfunktion. In eben dieser Form werden Lagrange-Interpolaten in Stützstellen $\xi_{\sigma,v}$ mit Lagrange-Basisfunktionen $\mathcal{L}_{\sigma,v}$ dargestellt.

Lagrange-Interpolation im mehrdimensionalen Raum

Bevor wir die Funktion g wie in Gleichung 2.1 approximieren können, müssen wir die Lagrange-Basisfunktionen auf mehrdimensionalen Gebieten konstruieren und einige Eigenschaften sicherstellen. Zunächst definieren wir dazu die Lagrange-Basispolynome auf dem Referenzintervall $[-1, 1]$. Für $k \in \mathbb{N}$, $v \in \underline{k}_0$ und paarweise verschiedene Stützstellen $\xi_0, \dots, \xi_k \in [-1, 1]$ ist durch

$$\mathcal{L}_v(x) := \prod_{\substack{\mu \in \underline{k}_0 \\ \mu \neq v}} \frac{x - \xi_\mu}{\xi_v - \xi_\mu} \quad \text{für alle } x \in [-1, 1]$$

das v -te Lagrange-Polynom gegeben. Eine Eigenschaft der Lagrange-Polynome, die wir später noch benötigen, ist:

$$\mathcal{L}_v(\xi_\mu) = \delta_{v\mu} = \begin{cases} 1 & \text{falls } v = \mu, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.2)$$

2.1. Hierarchische Matrizen

Wir können durch

$$\mathfrak{I}: C[-1, 1] \rightarrow \Pi_k, \quad f \mapsto \sum_{v \in \underline{k}_0} f(\xi_v) \mathcal{L}_v$$

einen Lagrange-Interpolationsoperator definieren, der auf $[-1, 1]$ stetige Funktionen auf Polynome aus Π_k abbildet, also auf Polynome von höchstens Grad k .

Um diesen Operator auf Funktionen auf beliebigen Intervallen $[a, b]$ mit $a < b$ zu übertragen, definieren wir eine Transformation

$$\Phi_{[a,b]}: [-1, 1] \rightarrow [a, b] \quad x \mapsto \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x,$$

die für alle $x \in [-1, 1]$ die Eigenschaften

$$\Phi_{[a,b]}(-1) = a, \quad \Phi_{[a,b]}(1) = b, \quad \Phi'_{[a,b]}(x) = \frac{b-a}{2} > 0$$

hat, also affin und bijektiv ist. Für $f \in C[a, b]$ gilt also $\tilde{f} := f \circ \Phi_{[a,b]} \in C[-1, 1]$, sodass wir den auf $[-1, 1]$ definierten Interpolationsoperator \mathfrak{I} auf \tilde{f} anwenden können. Wir können also einen Interpolationsoperator auf dem Intervall $[a, b]$ durch

$$\mathfrak{I}_{[a,b]}: C[a, b] \rightarrow \Pi_k, \quad f \mapsto \mathfrak{I}[f \circ \Phi_{[a,b]}] \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}$$

definieren, was, die Definition von \mathfrak{I} eingesetzt, die Darstellung

$$\mathfrak{I}_{[a,b]}[f] = \sum_{v \in \underline{k}_0} f \circ \Phi_{[a,b]}(\xi_v) \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1} = \sum_{v \in \underline{k}_0} f(\Phi_{[a,b]}(\xi_v)) \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}$$

ergibt.

Zur Vereinfachung definieren wir für $v \in \underline{k}_0$ und $x \in [a, b]$

$$\begin{aligned} \xi_{[a,b],v} &:= \Phi_{[a,b]}(\xi_v) = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\xi_v \\ \mathcal{L}_{[a,b],v} &:= \prod_{\substack{\mu \in \underline{k}_0 \\ \mu \neq v}} \frac{x - \xi_{[a,b],\mu}}{\xi_{[a,b],v} - \xi_{[a,b],\mu}}. \end{aligned}$$

Da mit Gleichung 2.2 folgende Gleichung für alle $v, \mu \in \underline{k}_0$ gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}(\xi_{[a,b],\mu}) &= \mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}(\Phi_{[a,b]}(\xi_{[a,b],\mu})) \\ &= \mathcal{L}_v(\xi_\mu) = \delta_{v\mu} \\ &= \mathcal{L}_{[a,b],v}(\xi_{[a,b],\mu}), \end{aligned}$$

stimmen $\mathcal{L}_v \circ \Phi_{[a,b]}^{-1}$ und $\mathcal{L}_{[a,b],v}$ in $k+1$ Punkten überein. Da beides Polynome in Π_k sind,

2. Grundlagen

müssen sie identisch sein und wir erhalten die vereinfachte Darstellung

$$\mathfrak{I}_{[a,b]}[f] = \sum_{\nu \in \underline{k}_0} f\left(\xi_{[a,b],\nu}\right) \mathcal{L}_{[a,b],\nu}, \quad \text{für alle } f \in C[a,b].$$

Nun müssen wir für unser Problem noch Interpolationsoperatoren auf Gebieten im mehrdimensionalen Raum definieren. Der Einfachheit halber, und weil der später vorgestellte Algorithmus ohnehin mit solchen sogenannten *bounding boxes* arbeitet, beschränken wir uns auf achsenparallele Quader $Q = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d]$. Sei also eine zu interpolierende Funktion $f \in C(Q)$ gegeben. Für $\iota \in \underline{d}$ und $x \in Q$ gewinnen wir aus f eine Funktion

$$f_{x,\iota}: [a_\iota, b_\iota] \rightarrow \mathbb{R}, \quad y \mapsto f(x_1, \dots, x_{\iota-1}, y, x_{\iota+1}, \dots, x_d),$$

bei der alle Parameter außer dem ι -ten fest sind. Auf diese Funktion auf dem Intervall $[a_\iota, b_\iota]$ können wir den Interpolationsoperator $\mathfrak{I}_{[a_\iota, b_\iota]}$ anwenden und erhalten so einen Operator

$$\mathfrak{I}_{Q,\iota}: C(Q) \rightarrow C(Q)$$

für den für $f \in C(Q)$ und $x \in Q$

$$\mathfrak{I}_{Q,\iota}[f](x) = \sum_{\nu \in \underline{k}_0} f\left(x_1, \dots, x_{\iota-1}, \xi_{[a_\iota, b_\iota],\nu}, x_{\iota+1}, \dots, x_d\right) \mathcal{L}_{[a_\iota, b_\iota],\nu}(x_\iota)$$

gilt. Somit bildet $\mathfrak{I}_{Q,\iota}$ eine stetige Funktion auf eine neue stetige Funktion ab, die sich in der ι -ten Komponente wie ein Polynom verhält. Durch Hintereinanderausführung der Operatoren für jede Dimension erhalten wir ein Polynom in jeder Komponente und mit

$$\mathfrak{I}_Q := \mathfrak{I}_{Q,1} \circ \dots \circ \mathfrak{I}_{Q,d}$$

einen Interpolationsoperator, der für alle $f \in C(Q)$ und $x \in Q$ die Gleichung

$$\mathfrak{I}_Q[f](x) = \sum_{\nu_1 \in \underline{k}_0} \dots \sum_{\nu_d \in \underline{k}_0} f\left(\xi_{[a_1, b_1],\nu_1}, \dots, \xi_{[a_d, b_d],\nu_d}\right) \mathcal{L}_{[a_1, b_1],\nu_1}(x_1) \dots \mathcal{L}_{[a_d, b_d],\nu_d}(x_d)$$

erfüllt. Mit den Definitionen

$$\xi_{Q,\nu} = \left(\xi_{[a_1, b_1],\nu_1}, \dots, \xi_{[a_d, b_d],\nu_d}\right),$$

$$\mathcal{L}_{Q,\nu} = \mathcal{L}_{[a_1, b_1],\nu_1}(x_1) \dots \mathcal{L}_{[a_d, b_d],\nu_d}(x_d), \text{ für alle } \nu \in M := \underline{k}_0^d, \quad x \in Q$$

erhalten wir die gewohnte Darstellung

$$\mathfrak{I}_Q[f] = \sum_{\nu \in M} f(\xi_{Q,\nu}) \mathcal{L}_{Q,\nu}, \text{ für alle } f \in C(Q).$$

Mit diesem Interpolationsoperator können wir nun die entartete Approximation der Kernfunktion g aus Gleichung 2.1 konstruieren. Dazu identifizieren wir $\sigma \in T_\Omega$ mit einem überdeckenden Quader Q_σ .

Zulässigkeit

Wir haben also über Interpolation eine entartete Kernfunktion g_σ konstruiert. Für $x \in \Omega$ und $y \in \sigma$ approximiert die Funktion g_σ die Funktion g allerdings nur dann gut, wenn x und σ hinreichend weit voneinander entfernt sind (vgl. Grasedyck [2001]; Börm [2018]). Daher wollen wir nun eine Bedingung einführen, die eine Aussage darüber trifft, ob das Gebiet σ für ein Gebiet τ zulässig, also für alle $x \in \tau$ hinreichend weit entfernt ist. Das Gebiet τ wird auch *Target-* oder *Zielgebiet*, das Gebiet σ auch *Source-* oder *Quellgebiet* genannt.

Definition 2.1. (Zulässigkeitsbedingung)

Wir nennen eine Abbildung, die jedem Paar $(\tau, \sigma) \in \mathcal{P}(\Omega) \times \mathcal{P}(\Omega)$ entweder “zulässig” oder “unzulässig” zuordnet, *Zulässigkeitsbedingung*.

Für eine konkrete Zulässigkeitsbedingung benötigen wir noch ein paar Definitionen. Seien $\sigma, \tau \subseteq \Omega$. Dann bezeichnet

$$\text{diam}(\sigma) := \max\{\|x - y\| \mid x, y \in \sigma\}$$

den Durchmesser eines Teilgebiets und

$$\text{dist}(\sigma, \tau) := \min\{\|x - y\| \mid x \in \sigma, y \in \tau\}$$

den Abstand der beiden Teilgebiete zueinander.

Damit lässt sich die von Grasedyck [2001] aufgeführte η -Zulässigkeit wie folgt definieren:

Definition 2.2. (η -Zulässigkeit)

Sei $\eta \in \mathbb{R}^+$. Dann heißt die Abbildung $\mathcal{Z}_\eta: \mathcal{P}(\Omega) \times \mathcal{P}(\Omega) \rightarrow \{\text{zulässig}, \text{unzulässig}\}$ mit

$$\mathcal{Z}_\eta(\tau, \sigma) = \begin{cases} \text{zulässig} & \text{falls } \{\text{diam}(\tau), \text{diam}(\sigma)\} \leq 2\eta \text{dist}(\tau, \sigma) \\ \text{unzulässig} & \text{sonst} \end{cases}$$

η -Zulässigkeitsbedingung. Paare (τ, σ) , für die $\mathcal{Z}(\tau, \sigma) = \text{zulässig}$ gilt, werden *η -zulässig* genannt.

Für kleine η zeigen Hackbusch und Börm [2002] die exponentielle Konvergenz der durch Interpolation approximierten Funktion gegen die Kernfunktion und Grasedyck [2001] die exponentielle Konvergenz bei Approximation durch Taylor-Entwicklung.

Börm [2018] weist nach, dass für asymptotisch glatte Funktionen die Approximation für jedes $\eta > 0$ exponentiell konvergiert, wenn die obige Zulässigkeitsbedingung erfüllt ist. Eine unendlich oft differenzierbare Kernfunktion g heißt asymptotisch glatt, wenn für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$, $x, y \in \mathbb{R}^d$, $x \neq y$, Konstanten $C: \mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ existieren, sodass die partiellen Ableitungen von g wie folgt abgeschätzt werden können:

$$|\partial_x^\alpha \partial_y^\beta g(x, y)| \leq C(|\alpha|, |\beta|) \|x - y\|^{-|\alpha| - |\beta|} |g(x, y)|.$$

(vgl. Hackbusch und Börm [2002])

2. Grundlagen

Tschebyscheff-Interpolationspunkte

Die Wahl der Zulässigkeitsbedingung ist nicht der einzige Einflussfaktor auf die Genauigkeit der Approximation. Auch die Wahl der Interpolationspunkte trägt dazu bei. Als optimale Interpolationspunkte haben sich die Tschebyscheff-Interpolationspunkte erwiesen (vgl. Börm [2018]). Daher führen wir diese im Folgenden kurz ein.

Definition 2.3. (Tschebyscheff-Polynome)

Durch

$$T_n = \begin{cases} 1 & \text{falls } n = 0 \\ x & \text{falls } n = 1 \\ 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) & \text{sonst,} \end{cases} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}_0, x \in \mathbb{R}$$

wird eine Familie $(T_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ von Polynomen definiert. Für $n \in \mathbb{N}_0$ bezeichnen wir T_n als n -tes Tschebyscheff-Polynom. [Börm 2018]

Mit Hilfe des Additionstheorems $\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$ und den Eigenschaften des Cosinus lässt sich leicht die folgende Aussage zeigen.

Lemma und Definition 2.4. Für $n \in \mathbb{N}_0$ und $x \in [-1, 1]$ gilt:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)).$$

Daraus folgen insbesondere die n reellen einfachen Nullstellen

$$T_n(\xi_\nu) = 0, \quad \xi_\nu := \cos\left(\pi \frac{2\nu + 1}{2n}\right) \quad \text{für alle } \nu \in \underline{n}.$$

Diese Nullstellen nennen wir *Tschebyscheff-Interpolationspunkte*. [Börm 2018]

Clustering

Im Abschnitt Approximation wurde gezeigt, wie die Kernfunktion auf Teilgebieten approximiert werden kann, sofern die Paare von Gebieten zulässig sind. Im Abschnitt Zulässigkeit wurde eine Bedingung aufgestellt, wann Paare von Gebieten zulässig sind und wann nicht. In diesem Kapitel soll eine Struktur vorgestellt werden, mit der solche Paare von Teilgebieten strukturiert werden können. Dazu werden zunächst einige grundlegende Definitionen benötigt.

Definition 2.5. (Baum)

Ein Paar $T = (V, E)$ mit $E \subset V \times V$ nennen wir einen Baum mit Knoten V und Kanten E , wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. Es gibt genau ein Element $\text{root}(T) \in V$, so dass für alle $v \in V$ gilt $(v, \text{root}(T)) \notin E$. Dieses Element heißt *Wurzel* des Baumes T .

2.1. Hierarchische Matrizen

2. Zu jedem Knoten $v \in V \setminus \{root(T)\}$ gibt es $n \in \mathbb{N}$ und einen Weg $(v_i)_{i=0}^n$ der Länge n von der Wurzel $root(t) = v_0$ zu dem Knoten $v = v_n$ mit $(v_{i-1}, v_i) \in E$ für $i \in \underline{n}$.

3. Es gibt keine Zyklen.

Es gelten folgende Notationen:

1. Die Länge des längsten Weges in T heißt die *Tiefe* des Baumes und wird mit $depth(T)$ bezeichnet.

2. Mit " $q \in T$ " ist stets " $q \in V$ " gemeint.

3. $sons(q) := sons_T(q) := \{v \in V \mid (q, v) \in E\}$ ist die Menge der *Söhne* eines Knotens $q \in T$.

4. $sons^*(q) := \begin{cases} q \cup \bigcup_{\tilde{q} \in sons(q)} sons^*(\tilde{q}) & \text{falls } sons(t) \neq \emptyset, \\ q & \text{sonst,} \end{cases}$ ist die Menge aller Nachfahren eines Knotens $q \in T$.

5. $T^{(i)}$ bezeichnet die i -te Ebene des Baumes. Dabei gilt:

(a) $T^{(0)} := \{root(T)\}$ und

(b) $T^{(i)} := \{\tilde{v} \in V \mid \exists v \in T^{(i-1)} : \tilde{v} \in sons(v)\}$ für $i \in \underline{depth(T)}$.

6. Der Begriff "oberhalb" bedeutet "näher zur Wurzel", der Begriff "unterhalb" respektive "weiter oder gleich weit entfernt von der Wurzel".

7. $\mathcal{L}(T) := \{q \in T \mid \forall v \in T : (q, v) \notin E\}$ bezeichnet die Menge aller Blätter des Baumes T .

8. $\mathcal{L}(T, i) := \mathcal{L}(T) \cap T^{(i)}$ ist die Menge der Blätter auf der i -ten Ebene des Baumes.

9. $\mathcal{L}(T, \leq s) := \mathcal{L}(T) \cap \bigcup_{i \in \underline{s_0}} T^{(i)}$ sind alle Blätter der Ebenen $0, \dots, s \leq depth(T)$.

[Grasedyck 2001]

Mit Hilfe einer Baumstruktur wollen wir nun eine Struktur definieren, mit der im Allgemeinen eine beliebige Menge M hierarchisch partitioniert werden kann. Diese Struktur wollen wir dann für unsere Menge Ω nutzen.

Definition 2.6. (Clusterbaum)

Wir nennen einen Baum $T = (V, E)$ mit $V \subseteq \mathcal{P}(M) \setminus \{\emptyset\}$ einen *Clusterbaum* einer Menge M , falls die nachfolgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. $root(T) = M$

2. $\forall t \in T : t = \bigcup_{s \in sons(t)} s$.

3. $\forall t \in T \forall s_0, s_1 \in sons(t) : s_0 \cap s_1 = \emptyset$

2. Grundlagen

Für einen Clusterbaum verwenden wir in der Regel die Notation T_M um auf die verwendete Indexmenge hinzuweisen, und bezeichnen die Knoten $t \in T_M$ als *Cluster*. [Börm 2018]

Grasedyck [2001] nennt Clusterbäume auch hierarchische Partitionsbäume oder kurz \mathcal{H} -Bäume der Menge M . Der Name leitet sich direkt von den Eigenschaften des Clusterbaumes her. Es gilt nämlich:

1. Die Menge $P_M^{(i)} := T_M^{(i)} \cup \mathcal{L}(T, \leq i)$ für bildet für alle $i \in \underline{\text{depth}}(T_M)_0$ eine disjunkte Partition der Menge M .
2. Die Partitionen sind über die Ebenen des Baumes hierarchisch angeordnet. Damit ist gemeint, dass für alle $i \in \underline{\text{depth}}(T_M)$ die Partition $P^{(i)}$ mehr Teilmengen beinhaltet als die Partition $P^{(i-1)}$.

Mit Hilfe eines Clusterbaumes können Partitionen einer Menge also hierarchisch strukturiert werden. Meist werden sie genutzt, um eine Indexmenge oder die geometrische Struktur eines Problems zu partitionieren. Letztere Variante wird auch *geometrischer Clusterbaum* genannt.

Ein weiterer praktischer Aspekt von Clusterbäumen ist ihre gute rekursive Konstruierbarkeit. Beginnend mit der vollständigen Menge M wird ein Cluster jeweils in Sohncluster unterteilt, bis entweder in den Blättern jeweils nur noch ein Element vorhanden ist oder eine anders geartete Abbruchbedingung erfüllt ist. Für praktische Anwendungen ist es in der Regel nicht effizient, bis zu einelementigen Mengen zu teilen. Üblich sind Abbruchbedingungen, die eine gewisse Mächtigkeit für Blattmengen vorgeben. Wird diese unterschritten, wird nicht weiter geteilt.

Das Teilen der Cluster kann ebenfalls unterschiedlich motiviert sein. Naheliegend sind kardinalitätsgesteuerte Zerlegungen, um ein optimales Loadbalancing zu erhalten, sowie die Zerlegung anhand der zugrundeliegenden geometrischen Struktur. Auch kombinierte Zerlegungen sind denkbar.

Definition 2.7. (Blockbaum, (streng) zulässiger Blockbaum)

Seien Menge X, Y und jeweils zugehörige Clusterbäume T_X und T_Y gegeben.

Einen Clusterbaum $T_{X \times Y}$ der Menge $X \times Y$ mit folgenden Eigenschaften:

1. Für alle Knoten $b \in T_{X \times Y}$ existieren Knoten $t \in T_X$ und $s \in T_Y$, sodass $b = t \times s$
2. Falls $b = t \times s \in T_{X \times Y}$ kein Blatt ist, gilt

$$\text{sons}(b) = \begin{cases} \{t \times s' \mid s' \in \text{sons}(s)\} & \text{falls } \text{sons}(t) = \emptyset, \text{sons}(s) \neq \emptyset \\ \{t' \times s \mid t' \in \text{sons}(t)\} & \text{falls } \text{sons}(t) \neq \emptyset, \text{sons}(s) = \emptyset \\ \{t' \times s' \mid t' \in \text{sons}(t), s' \in \text{sons}(s)\} & \text{ansonsten} \end{cases}$$

nennen wir *Blockbaum* und seine Knoten *Blöcke*. Die Komponenten $t \in T_X$ und $s \in T_Y$ werden auch *Zeilen-* und *Spaltencluster* genannt.

2.1. Hierarchische Matrizen

Wir nennen einen Block $b = t \times s$ *zulässig* bezüglich einer Zulässigkeitsbedingung \mathcal{Z} , wenn $\mathcal{Z}(t, s) = \text{zulässig}$ erfüllt ist.

Wir nennen einen Blockbaum zulässig, wenn für alle Blattblöcke $b = t \times s \in \mathcal{L}(T_{X \times Y})$ gilt:

$$\mathcal{Z}(t, s) = \text{zulässig} \text{ oder } \text{sons}(t) = \emptyset \text{ oder } \text{sons}(s) = \emptyset.$$

Wir nennen ihn *streng zulässig*, wenn gilt:

$$\mathcal{Z}(t, s) = \text{zulässig} \text{ oder } \text{sons}(t) = \emptyset = \text{sons}(s),$$

Mit

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^+(T_{X \times Y}) &= \{b = t \times s \in \mathcal{L}(T_{X \times Y}) \mid \mathcal{Z}(t, s) = \text{zulässig}\} \\ \text{und } \mathcal{L}^-(T_{X \times Y}) &= \{b = t \times s \in \mathcal{L}(T_{X \times Y}) \mid \mathcal{Z}(t, s) = \text{unzulässig}\} \end{aligned}$$

bezeichnen wir die Mengen der zulässigen beziehungsweise unzulässigen Blätter eines Blockbaumes. $\mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$ wird auch *Fernfeld* und $\mathcal{L}^-(T_{X \times Y})$ *Nahfeld* genannt. Die Namen leiten sich von der η -Zulässigkeitsbedingung her, die auf der relativen Nähe der Cluster zueinander beruht.

Mit Hilfe von Blockbäumen können wir nun also Paare von Teilgebieten hierarchisch strukturieren und auf Zulässigkeit prüfen. Damit haben wir nun alles Notwendige bei der Hand um \mathcal{H} -Matrizen definieren zu können.

2.1.1. \mathcal{H} -Matrizen

Definition 2.8. (Rk-Matrix)

Seien $m, n, k \in \mathbb{N}$ sowie $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gegeben. Wir nennen M eine *Rk-Matrix*, wenn Matrizen $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$ und $B \in \mathbb{R}^{n \times k}$ existieren, sodass

$$M = AB^T$$

gilt. Die Menge aller solcher Rk-Matrizen bezeichnen wir mit

$$\mathcal{R}(m, n, k) = \{M \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid M = AB^T, A \in \mathbb{R}^{m \times k}, B \in \mathbb{R}^{n \times k}\}.$$

[Börm 2018]

Das praktische an Rk-Matrizen ist, dass sie sich durch $k(m + n)$ Koeffizienten darstellen lassen. Ist $k \ll m, n$ ist dies wesentlich effizienter als eine volle Darstellung mit $m \cdot n$ Koeffizienten. [Börm 2018]

Definition 2.9. (Hierarchische Matrix)

Seien X, Y zwei Mengen, T ein zugehöriger zulässiger Blockbaum mit Zulässigkeitsbedingung \mathcal{Z} und $k : \mathcal{L}(T) \rightarrow \mathbb{N}_0$ die Rangverteilung der Blätter.

Eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{X \times Y}$ heißt *hierarchische Matrix* oder kurz *\mathcal{H} -Matrix* bezüglich T, \mathcal{Z} und k , falls für jeden Blattblock $b \in \mathcal{L}(T)$ der korrespondierende Matrixblock $M_b = (M_{ij})_{(i,j) \in b}$ eine Rk-Matrix ist.

2. Grundlagen

Eine Zahl $k_0 \in \mathbb{N}$ mit $k(b) \leq k_0$ für alle $b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$ heißt lokaler Rang der hierarchischen Matrix.

[Grasedyck 2001; Börm 2018]

Für die Darstellung in Computern sind \mathcal{H} -Matrizen von besonderem Interesse, da sie sich durch die Zerlegung in \mathbf{Rk} -Matrizen besonders kompakt speichern lassen. Für eine \mathcal{H} -Matrix M mit lokalem Rang k existieren nach Definition Familien von Matrizen $(A_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})}$ und $(B_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})}$, mit

$$A_b \in \mathbb{R}^{t \times k}, B_b \in \mathbb{R}^{s \times k}, M|_b = A_b B_b^T, \text{ für alle } b = t \times s \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y}).$$

So verbleiben nur noch für unzulässige Blöcke $b \in \mathcal{L}^-(T_{X \times Y})$ vollbesetzte Matrizen $N_b = M|_b$, sogenannte *Nahfeldmatrizen*. Das Tripel $\left((A_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})}, (B_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})}, (N_b)_{b \in \mathcal{L}^-(T_{X \times Y})} \right)$ bezeichnen wir als \mathcal{H} -Matrix-Darstellung der Matrix M . [Börm 2018]

Gerade auch im Zusammenhang mit dieser Arbeit ist aber von noch größerem Interesse, dass auch Operationen wie Matrix-Vektor-Multiplikationen auf \mathbf{Rk} -Matrizen wesentlich effektiver implementiert werden können. Grasedyck [2001] zeigt, dass die Matrix-Vektor-Multiplikation nur $k(n + m)$ statt $n \cdot m$ Operationen benötigt.

2.1.2. Optimierung

Im Folgenden wollen wir noch einige Überlegungen vorstellen, durch die \mathcal{H} -Matrizen noch speicherplatzsparender und noch effizienter in der Berechnung werden.

Zeilen- und Spaltenmatrizen

Bisher wurde eine hierarchische Matrix konstruiert, indem die Kernfunktion g auf zulässigen Blöcken $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$ durch die auf σ interpolierte Funktion

$$g_\sigma(x, y) = \sum_{\nu \in \underline{k}} g(x, \xi_{\sigma, \nu}) \mathcal{L}_{\sigma, \nu}(y)$$

approximiert wurde. Somit erhalten wir durch die punktweise Definition

$$(A_b)_{x\nu} := g(x, \xi_{\sigma, \nu}) \text{ und } (B_b)_{y\nu} := \mathcal{L}_{\sigma, \nu}(y) \text{ für alle } x \in \tau \text{ und } y \in \sigma$$

Matrizen $A_b \in \mathbb{R}^{m \times k}$ und $B_b \in \mathbb{R}^{n \times k}$. Damit können wir die Matrix G auf Blöcken $b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$ in der Form

$$(G|_b)_{xy} = g(x, y) \approx g_\sigma(x, y) = (A_b B_b^T)_{xy},$$

also durch \mathbf{Rk} -Matrizen darstellen und erhalten so eine Darstellung als hierarchische Matrix. [Börm 2018]

Ein Blick auf die Definition der Matrix B_b verrät, dass diese nicht von τ abhängt. Wir

2.1. Hierarchische Matrizen

können sie also für konstantes σ für alle Blöcke $\tilde{b} = \tilde{\tau} \times \sigma \in T_{X \times Y}$ durch eine Matrix

$$(W_\sigma)_{y\nu} := \mathcal{L}_{\sigma,\nu}(y)$$

ersetzen. Anstatt also für jeden Block b wieder eine eigene Matrix aufstellen zu müssen, können sich Blöcke mit gleichem Quellgebiet σ die Matrizen teilen. Insbesondere muss diese Matrix W_σ auch nur einmal berechnet werden, womit ein erheblicher Teil des Rechenaufwands bei der Konstruktion von \mathcal{H} -Matrizen eingespart werden kann. Zudem können wiederum Operationen wie die Matrix-Vektor-Multiplikation effektiver durchgeführt werden, da auch hier die Matrix W_σ ausgeklammert werden kann, und so nur einmal in die Berechnung einfließt. [Börm 2018]

Definition 2.10. (Zeilen-/Spaltenmatrizen)

Wir nennen Matrizen $W_\sigma \in \mathbb{R}^{\sigma \times k}$ wie oben *Spaltenmatrizen* einer hierarchischen Matrix G . Bei Interpolation in der ersten Komponente nennen wir sie entsprechend *Zeilenmatrizen*.

Transfermatrizen und Clusterbasis

Von Hackbusch und Börm [2002] wird auf folgende Eigenschaft der Interpolationsoperatoren hingewiesen:

Polynomraum \mathcal{T}_k

Alle Cluster wurden durch Polynome der selben Ordnung interpoliert. Wegen der Projektionseigenschaft des Interpolationsoperators folgt damit für $\sigma \in T_X \setminus \mathcal{L}(T_X)$ und Söhne $\tilde{\sigma} \in \text{sons}(\sigma)$ und für alle $\nu \in \underline{k}$:

$$\mathcal{L}_{\sigma,\nu} = \mathfrak{I}_{\tilde{\sigma}}[\mathcal{L}_{\sigma,\nu}] = \sum_{\tilde{\nu} \in \underline{k}} \mathcal{L}_{\sigma,\nu}(\xi_{\tilde{\sigma},\tilde{\nu}}) \mathcal{L}_{\tilde{\sigma},\tilde{\nu}}.$$

Anstatt also auf jeder Ebene des Clusterbaumes eine vollständige Matrix $W_\sigma \in \mathbb{R}^{\sigma \times k}$ aufzustellen, genügt es für jeden Sohncluster $\tilde{\sigma} \in \text{sons}(\sigma)$ Matrizen $E_{\tilde{\sigma}} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ mit $(E_{\tilde{\sigma}})_{\tilde{\nu},\nu} := \mathcal{L}_{\sigma,\nu}(\xi_{\tilde{\sigma},\tilde{\nu}})$ zu speichern. Dies führt zu folgender Definition:

Definition 2.11. (Transfermatrix, Clusterbasis)

Sei T_X ein Clusterbaum mit einer Familie von Spalten- (bzw. Zeilen-)matrizen $W = (W_\sigma)_{\sigma \in T_X}$. Existiert eine Familie $E = (E_\sigma)_{\sigma \in T_X}$ von $(k \times k)$ -Matrizen mit der Eigenschaft

$$V_\sigma|_{\tilde{\sigma} \times k} = V_{\tilde{\sigma}} E_{\tilde{\sigma}} \quad \text{für alle } \sigma \in T_X \setminus \mathcal{L}(T_X) \text{ und } \tilde{\sigma} \in \text{sons}(\sigma),$$

so nennen wir V eine (*geschachtelte*) *Clusterbasis* (von Rang k) für den Clusterbaum T_X . Die Matrizen der Familie E heißen die korrespondierenden *Transfermatrizen*. [Börm 2018]

Mit der *geschachtelten Darstellung* $\left((W_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{L}(T_X)}, (E_\sigma)_{\sigma \in T_X \setminus \mathcal{L}(T_X)} \right)$ der Clusterbasen haben wir nun also eine noch kompaktere Darstellung der Matrizen B_b .

2. Grundlagen

Interpolation in beiden Komponenten

Auch in diesem Abschnitt folge ich dem Aufbau von Börm [2018].

Wir haben bereits einige Eigenschaften der Matrizen B_b beziehungsweise W_σ identifiziert, die sich zur Effektivitätssteigerung nutzen lassen. Leider bleiben die Speicherplatzineffizienz und der höhere Rechenaufwand für die Matrizen A_b bestehen, die die positiven Eigenschaften der Matrizen W_σ nicht teilen. Allerdings haben wir die Matrizen W_σ einfach punktweise aus den Lagrange-Polynomen bei der Interpolation definiert. Es liegt also nahe eine Interpolation nicht nur in einer, sondern in beiden Variablen durchzuführen. Wir wählen also Interpolationspunkte $\xi_{\tau,1}, \dots, \xi_{\tau,k}$ und erhalten wiederum mit den zugehörigen Lagrange-Polynomen $\mathcal{L}_{\tau,1}, \dots, \mathcal{L}_{\tau,k}$:

$$g(x, y) \approx \tilde{g}(x, y) = \sum_{\mu \in \underline{k}_\tau} \sum_{\nu \in \underline{k}_\sigma} \mathcal{L}_{\tau,\mu}(x) g(\xi_{\tau,\mu}, \xi_{\sigma,\nu}) \mathcal{L}_{\sigma,\nu}(y).$$

Mit

$$(S_b)_{\mu\nu} := g(\xi_{\tau,\mu}, \xi_{\sigma,\nu}), \quad \mu, \nu \in \underline{k}_\tau$$

erhalten wir eine Familie von Koeffizientenmatrizen $(S_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})} \in \mathbb{R}^{k \times k}$, die weder von x , noch von y abhängt, sondern lediglich von den Interpolationspunkten. Außerdem haben wir durch die neuerliche Interpolation die Abhängigkeit von x wiederum auf Lagrange-Polynome beschränkt und erhalten so Matrizen $V_\tau \in \mathbb{R}^{\tau \times k}$ durch die Festlegung

$$(V_\tau)_{x\mu} := \mathcal{L}_{\tau,\mu}(x).$$

Insgesamt erhalten wir also für alle $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$

$$G|_b \approx \tilde{G}|_b = V_\tau S_b W_\sigma^T.$$

Die Matrizen V_τ haben dieselben Eigenschaften wie die Matrizen W_σ . Beide lassen sich also nicht nur effizient speichern, sondern auch effizient konstruieren. Außerdem brauchen sie auf Grund der Entkoppelung von τ und σ jeweils nur einmal aufgestellt zu werden. Da die Matrizen S_b , die die Kopplung zwischen den Clustern τ und σ beschreiben, wiederum verhältnismäßig klein sind, lassen sich diese wiederum auch effektiv verarbeiten.

2.1.3. \mathcal{H}^2 -Matrizen

Die Überlegungen der letzten Abschnitte fließen nun in der Definition der \mathcal{H}^2 -Matrizen zusammen.

Definition 2.12. (\mathcal{H}^2 -Matrizen)

Sei $T_{X \times Y}$ ein streng zulässiger Blockbaum, $k \in \mathbb{N}_0$ und seien V und W Clusterbasen des Ranges k für die Clusterbäume T_X und T_Y . Eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{X \times Y}$ heißt \mathcal{H}^2 -Matrix mit Zeilenbasis V und Spaltenbasis W , falls für alle zulässigen Blattblöcke $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$ eine Matrix $S_b \in \mathbb{R}^{k \times k}$ existiert, sodass

$$M|_b = V_\tau S_b W_\sigma^T$$

2.1. Hierarchische Matrizen

erfüllt ist. Die Familie $(S_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})}$ bezeichnen wir als Familie der *Kopplungsmatrizen*.

Für unzulässig Blattblöcke $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^-(T_{X \times Y})$ verbleiben, wie auch bei den \mathcal{H} -Matrizen, die vollbesetzten Nahfeldmatrizen N_b .

Mit geschachtelten Darstellungen

$$\left((V_\tau)_{\tau \in \mathcal{L}(T_X)}, (E_\tau)_{\tau \in T_X \setminus \mathcal{L}(T_X)} \right) \text{ und } \left((W_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{L}(T_Y)}, (F_\sigma)_{\sigma \in T_Y \setminus \mathcal{L}(T_Y)} \right)$$

der Clusterbasen V und W bezeichnen wir das Tupel

$$\left((S_b)_{b \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})}, (N_b)_{b \in \mathcal{L}^-(T_{X \times Y})}, (V_\tau)_{\tau \in \mathcal{L}(T_X)}, (E_\tau)_{\tau \in T_X \setminus \mathcal{L}(T_X)}, (W_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{L}(T_Y)}, (F_\sigma)_{\sigma \in T_Y \setminus \mathcal{L}(T_Y)} \right)$$

als \mathcal{H}^2 -Matrix-Darstellung der Matrix M .

Von Börm [2007] wird eine vollständige Charakterisierung der \mathcal{H}^2 -Matrizen vorgenommen. Dadurch wird ein für uns entscheidender Unterschied zwischen \mathcal{H} -Matrizen und \mathcal{H}^2 -Matrizen deutlich: Bei \mathcal{H} -Matrizen müssen die zu den zulässigen Blöcken $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y})$ gehörige Matrizen $M|_{\tau \times \sigma}$ niedrigen Rang besitzen. Bei \mathcal{H}^2 -Matrizen hingegen müssen die deutlich größeren Matrizen $M|_{\tau \times R_\tau}$ und $M|_{C_\sigma \times \sigma}$ für alle Cluster $\tau \in T_X$ und $\sigma \in T_Y$ niedrigen Rang besitzen. Dabei sind für alle $\tau \in T_X$ und $\sigma \in T_Y$ definiert:

$$\begin{aligned} R_\tau &:= \bigcup_{r \in \text{row}(\tau)} r, & C_\sigma &:= \bigcup_{c \in \text{col}(\sigma)} c, \\ \text{row}(\tau) &:= \{s \in T_Y \mid \exists \tilde{\tau} \in T_X: \tilde{\tau} \times s \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y}) \wedge \tau \in \text{sons}^*(\tilde{\tau})\}, \\ \text{col}(\sigma) &:= \{t \in T_X \mid \exists \tilde{\sigma} \in T_Y: t \times \tilde{\sigma} \in \mathcal{L}^+(T_{X \times Y}) \wedge \sigma \in \text{sons}^*(\tilde{\sigma})\}. \end{aligned}$$

Dieser Unterschied ist in Abbildung 2.1 bildlich dargestellt:

Mit den \mathcal{H}^2 -Matrizen haben wir also eine sehr effiziente Teilmenge der hierarchischen Matrizen gefunden, die sich noch kompakter speichern lassen und mit denen Berechnungen noch effizienter durchgeführt werden können.

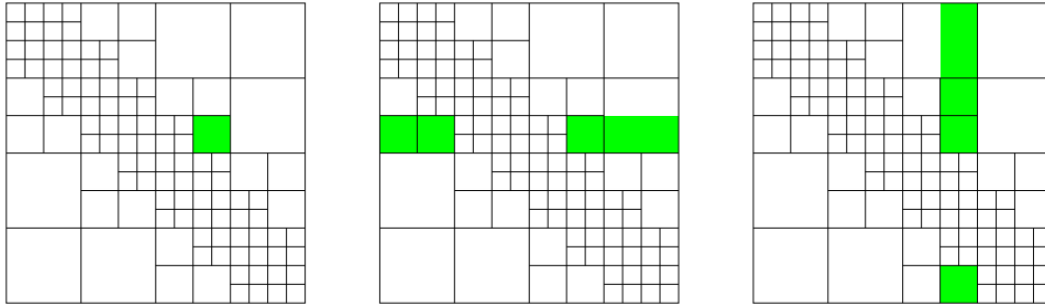


Abbildung 2.1. Vergleich zwischen \mathcal{H} - und \mathcal{H}^2 -Matrix: Bei ersterer müssen nur einzelne Teilmatrizen niedrigen Rang besitzen, bei letzterer ganze Zeilen- und Spaltenblöcke. (Quelle: Börm [2018])

2. Grundlagen

2.2. Paralleles Rechnen

Bereits in Abschnitt 1.1 wurde gezeigt, dass das Problem der gravitationellen Wechselwirkungen in unserer Galaxie mit einem aktuellen Computer nicht ohne weiteres lösbar ist. Konnten sich früher Programmierer darauf verlassen, dass in einigen Jahren eine deutlich schnellere Prozessorgeneration erscheinen würde, so dass Probleme ohne weitere Änderungen schneller gelöst werden könnten, ist dies heute leider nicht mehr der Fall.

Grund hierfür ist die Physik. Dazu ein kleines Rechenexperiment: Nehmen wir einen Prozessorchip von etwa einem Zentimeter Durchmesser an und vergegenwärtigen wir uns die Lichtgeschwindigkeit $c \approx 3 \cdot 10^{10}$ [BIPM 1975]. Licht könnte diesen Chip also etwa 30 Milliarden mal pro Sekunde durchqueren, was 30 Gigahertz entspräche. Bedenkt man, dass man in Prozessoren mit Elektrizität arbeitet und somit beispielsweise mit kapazitären Effekten und proportional zur Taktfrequenz steigender Verlustleistung zu kämpfen hat, sind die 3 Gigahertz aktueller Mittelklasseprozessoren durchaus nicht zu verachten.

Zwar wäre eine Möglichkeit die Chips weiter zu verkleinern, jedoch machen dem Fortschritt hier quantenmechanische Phänomene aktuell noch einen Strich durch die Rechnung. Ein gängiger und gangbarer Lösungsweg besteht in der Parallelisierung von Soft- und Hardware. Durch das gleichmäßige Verteilen eines Algorithmus auf mehrere Prozessoren kann die Gesamtlaufzeit entsprechend verringert werden. Unter optimalen Bedingungen könnte theoretisch eine Verdopplung der Prozessoranzahl eine Halbierung der Laufzeit bewirken. Heute haben daher die meisten Prozessoren nicht mehr nur einen Rechenkern, sondern mehrere und für die Berechnung großer mathematischer Probleme arbeiten oft viele Rechner zusammen an der Lösung.[Börm 2017]

Ein weiterer Grund für parallele, beziehungsweise verteilte Rechnersysteme ist die Diskrepanz zwischen vorhandenem und benötigtem Speicher. Beispielsweise hat der diesbezüglich größte Computer im Rechenzentrum der Christian-Albrecht-Universität Kiel einen Hauptspeicher von 768 GB. Ein aktuelles, speicherintensives Problem ist ein engmaschiges Klimamodell der Erde. Bei einer Dichte von einer Masche alle 1,56 km in Äquatornähe wird der Gesamtspeicherbedarf auf etwa 24000 GB geschätzt [Wehner u. a. 2008]. Ein Problem dieser Größe passt nicht mehr in den Hauptspeicher eines Computers. Hinzu kommt die Skalierbarkeit solcher Probleme: Angenommen ein Hauptspeicher von 24000 GB stünde auf einem Computer zur Verfügung. Warum bei einer Maschendichte von 1,56 km stehen bleiben und nicht noch feiner auflösen um noch genauere Berechnungen durchzuführen? Warum bei der Berechnung der gravitationellen Wechselwirkungen bei den Sonnen unserer Galaxie stehen bleiben und nicht die Planeten, Monde oder noch kleinere Himmelskörper mit einbeziehen? Diese Probleme, und damit auch der Speicherbedarf, lassen sich also nahezu beliebig vergrößern.

Im folgenden Kapitel wird kurz skizziert, wie parallel arbeitende Hardware gestalten sein kann und welche Vor- und Nachteile und welche Herausforderungen damit einhergehen.

Tabelle 2.1. Flynn'sche Klassifikation mit Beispielen.

	eine Instruktion (single instruction)	mehrere Instruktionen (multiple instruction)
ein Datensatz (single data)	SISD: konventioneller einkerniger Prozessor	MISD: Spezialrechner
mehrere Datensätze (multiple data)	SIMD: Vektorrechner	MIMD: Multicore; Clustersystem

2.2.1. Parallele Hardware

Prozessor

Flynn [1972] klassifiziert 4 unterschiedliche Architekturen von Rechnern. Dabei unterteilt er nach der Möglichkeit des Prozessors zu einem Zeitpunkt einzelne oder mehrere Instruktionen beziehungsweise Datensätze zu verarbeiten (vgl. Tabelle 2.1).

Vor einigen Jahrzehnten waren die meisten Prozessoren in PCs noch SISD-Architekturen. Sie hatten einen Prozessor mit einem einzelnen Kern; konnten also zu jedem Zeitpunkt nur eine Instruktion auf einem Datensatz ausführen. Heute sind Multicore-Prozessoren üblich. Auf einem Prozessorchip finden sich hierbei mehrere Rechenkerne. Die einzelnen Kerne sind unabhängig von einander; sie verwalten eigenen Register und führen eigene Instruktionen aus. Daher zählen Multicore-Prozessoren zu den MIMD-Architekturen. Zu diesen Architekturen gehören ebenfalls die später erläuterten Clustersysteme. [Flynn 1972; Barbic 2006]

MIMD-Architekturen sind auf Grund ihrer autonom arbeitenden und programmierbaren Prozessoren sehr flexibel und können viele Probleme effizient lösen. Die Autonomie der Prozessoren stellt die Programmierung aber auch vor Herausforderungen. Durch die asynchrone Ausführung der Programme wird das Verhalten des gesamten Systems schwer vorhersagbar. [Börm 2017]

MISD-Architekturen, also solche in denen parallel auf einem Datum mehrere Instruktionen ausgeführt werden können sind nur in Spezialrechnern zu finden und für die Lösung der meisten Probleme nicht geeignet.

SIMD-Architekturen hingegen, in denen auf mehreren Daten parallel die gleiche Instruktion ausgeführt werden kann, sind durchaus gängig. Hintergrund sind Algorithmen, die auf ganzen Reihen von Daten immer wieder die selben Operation ausführen. Während beim Ansatz der MIMD-Architekturen die Operationen dynamisch auf die einzelnen Recheneinheiten verteilt werden, ist der Ansatz von SIMD-Architekturen, beziehungsweise von Vektorrechnern, die Anzahl der Rechenwerke in den Recheneinheiten zu erhöhen und eine Operation für mehrere Daten gleichzeitig auszuführen. Zum Beispiel werden für die Berechnung der Gravitationskräfte für viele Körper immer wieder die selben Operationen verarbeitet. Anstatt diese also für jedes einzelne Paar von Körpern einzeln durchzuführen könnten sie für mehrere Paare von Körpern gleichzeitig durchgeführt werden.

2. Grundlagen

Der Name Vektorrechner leitet sich von der Anlehnung an die kartesische Geometrie her, in der ein Vektor ein Tupel von Zahlen ist. Entsprechend werden Daten des selben Typs ebenfalls als Vektoren bezeichnet. Um solche Vektoren handhaben zu können, verfügen Vektorrechner über spezielle Vektorregister, die mehrere Daten gleichzeitig fassen können. Für jedes einzelne Datum innerhalb dieser Register ist dann jeweils ein eigenes Rechenwerk im Kern zuständig.

Viele aktuelle Multicore-Prozessoren verfügen zusätzlich über einige Möglichkeiten der Vektorisierung. Es existieren aber auch auf diese Art der Parallelisierung spezialisierte Prozessoren.

verifizieren

Prozessoren laden in der Regel nicht nur ein einzelnes Datum, sondern gleich eine sogenannte *cache line* aus dem Hauptspeicher. Daher ist es sinnvoll, um SIMD-Parallelisierung optimal ausnutzen zu können, die Daten im Hauptspeicher anhand dieser *cache lines* anzuordnen. Dazu müssen in der Regel explizite Methoden zum Anfordern von *aligned memory* verwendet werden. Außerdem müssen die parallel zu verarbeitenden Daten im Hauptspeicher direkt hintereinander und nicht durch andere Daten unterbrochen auftauchen. Nehmen wir an, wir wollten die Daten der Körper, die für die Berechnung der Gravitationskräfte benötigt werden, in einer Struktur zusammenfassen. Wollen wir Daten zu vielen dieser Körper speichern so wäre es in Bezug auf Vektorrechner nicht sinnvoll ein Array dieser Strukturen anzulegen (engl.: *array of structs*). Dabei würden die im Sinne der Vektorisierung zusammengehörigen Daten durch andere getrennt. Um eine Vektorisierung zu ermöglichen ist es daher sinnvoll die Struktur so zu definieren, dass sie Array der benötigten Daten beinhaltet (engl.: *struct of arrays*). So kann sichergestellt werden, dass diese Daten im Hauptspeicher hintereinander stehen.

Referenz und vielleicht eine erklärende Grafik

Speicherverwaltung

genauer ausarbeiten

In Abschnitt 2.2 wurde bereits kurz erwähnt, dass bei Multicore-Prozessoren jeder Kern seine eigenen Register hat. Genau genommen verfügen die Kerne meist auch über privaten L1-, seltener über L2- oder L3-Cache. Diese sind meist *shared* (dt.: gemeinsam genutzt). Shared Memory wird von allen Prozessoren gemeinsam verwaltet.

Grundsätzlich können die heute üblichen MIMD Architekturen weiter anhand ihrer Speicherverwaltung unterteilt werden. Beim Shared Memory Modell wird ein globaler Speicher gemeinsam genutzt. Sie teilen sich also einen gemeinsamen Adressraum. Dies trifft in der Regel auf den Hauptspeicher, aber eventuell auch, wie bereits erwähnt, auf den Cache zu. Anders ist dies beim Distributed Memory Modell. Hier besitzt jeder Prozessor seinen eigenen Speicher. Shared Memory Systeme sind unter anderem die heute üblichen Multicore-Prozessoren, aber auch Computer mit mehreren Prozessoren, wie sie häufig in Servern und Großrechnern vorkommen. Distributed Memory Systeme sind in der Regel vernetzte Rechnersysteme. Allerdings wird auch auf Shared-Memory-Systemen durch moderne Betriebssysteme ein Distributed Memory Modell simuliert. Durch die

2.2. Paralleles Rechnen

Virtualisierung des Hauptspeichers etwa wird jedes Programm behandelt, als liefe es alleine. Dabei wird jedem Programm ein privater Bereich des Hauptspeichers zugewiesen. Das Programm nutzt diesen Bereich, als sei es der gesamte Hauptspeicher. [Körbler 2007]

Der Vorteil von gemeinsam genutztem Speicher ist, vorausgesetzt das Programm wurde entsprechend entworfen, dass die Ergebnisse eines Kerns den anderen automatisch auch zur Verfügung stehen. Arbeiten also mehrere Recheneinheiten gemeinsam an einem Problem, müssen die Ergebnisse einer Einheit den anderen also gegebenenfalls nicht explizit mitgeteilt werden. Dies vermeidet Overhead durch das Austauschen und kopieren von Daten. Jedoch ist es bei privatem Cache möglich, diesen in größerer Nähe zum zugehörigen Kern auf dem Chip zu platzieren. Dies führt zu besseren Zugriffszeiten, als gänzlich gemeinsam genutzter Cache und wird daher auch oft in verwendet.

Ein Nachteil von Shared Memory Systemen ist, dass der Schaltungsaufwand für den Zugriff auf den gemeinsam genutzten Speicher steigt mit wachsender Anzahl Recheneinheiten rapide an [Börm 2017]. Außerdem können Race Conditions auftreten, die durch den gemeinsam genutzten Speicher verursacht werden.

Beim schreiben von parallelen Programmen ist also besondere Vorsicht geboten. Es muss klar sein welche Daten sich wo befinden, und ob sie gemeinsam genutzt werden, oder nicht. Dies ist gegebenenfalls eine noch größere Herausforderung, wenn der Hauptspeicher innerhalb eines parallelen Programms teilweise gemeinsam genutzt wird und teilweise verteilt ist.

Netzwerk

Wie bereits erwähnt gibt es Probleme, die für einen einzelnen Computer zu viel Hauptspeicher benötigen oder zu viel Rechenaufwand bedeuten. Daher ist es naheliegend Computer zu Netzwerken, sogenannten *Clustern*, zusammenzuschließen. Hierbei können die vernetzten Computer, die als *Knoten* des Clustersystems bezeichnet werden, über die Netzwerkverbindung kommunizieren. Clustersysteme gehören zur Klasse der MIMD-Architekturen und stellen meist eine Mischform aus Distributed- und Shared-Memory-Modell dar: Jeder Knoten hat seinen eignen Hauptspeicher, der nicht mit den anderen Knoten geteilt wird, die einzelnen Knoten sind in der Regel aber Shared-Memory-Systeme. Meist Verfügen die einzelnen Knoten über einen oder mehrere Multicore-Prozessor(en).

Referenz!

2.2.2. Parallele Software

Im vorherigen Kapitel wurde die Entwicklung von einzelnen Computern mit einer Recheneinheit hin zu Clustersystemen, deren Knoten mit mehreren Recheneinheiten bestückt sind, skizziert.

Solange es sich um einen Computer mit Multicore-Prozessor handelt, ist bis dato keine Änderung an der Software notwendig um auf diesem Multicore-Prozessor lauffähig zu sein. Auf einem Computer läuft in der Regel nicht nur ein einzelnes Programm, sondern

2. Grundlagen

zumindest noch ein Betriebssystem und meist auch noch einige weitere Programme. Der Prozessor kann nun lediglich mehrere Programme echt parallel verarbeiten.

Allerdings profitiert ein Programm bis dato auch wenig von parallel arbeitender Technologie. Es wird nun lediglich gegebenenfalls seltener von anderen Programmen unterbrochen. Soll sich das Potential der Parallelität für ein Programm voll entfalten, so muss das Programm selbst parallel arbeiten und so mehrere Kern beziehungsweise mehrere Knoten eines Clusters nutzen können. Dazu sind natürlich auch entsprechende Entwicklungen im Bereich der Software notwendig. Zum einen muss es überhaupt möglich sein mehrere Instanzen eines Prozesses zu starten und diese zusammenarbeiten zu lassen. Dies impliziert aber wiederum die Schaffung von Möglichkeiten, die oben erwähnten Race Conditions zu vermeiden. Schließlich müssen für Programme, die auf Clustersystemen arbeiten, Möglichkeiten geschaffen werden, zu kommunizieren. Durch diese Kommunikation wäre es dann auch nicht mehr notwendig alle Daten lokal abrufbar zu haben. Statt dessen wäre es Möglich die Datenmenge auf die Knoten zu verteilen und bei Bedarf zwischen Knoten auszutauschen. Erst dadurch sind Probleme wie die Berechnung der Gravitationskräfte oder engmaschige Klimamodelle zu bewältigen.

All diese Konzepte vorzustellen wäre im Rahmen dieser Arbeit nicht zielführend. Im folgenden Kapitel wird daher nur das für diese Arbeit relevante Konzept vorgestellt.

Das Message-Passing-Modell

Für unser Beispielpblem der Berechnung der Gravitationskräfte ist ein Programm vonnöten, das auf einem Clustersystem läuft und dessen Speicher verteilt verwaltet wird. Daher wird im folgenden Kapitel ein Parallel-Programming-Modell vorgestellt, das die Schwierigkeiten von Shared Memory Systemen umgeht und ein Konzept der Speicherverwaltung und Kommunikation auf verteilten Rechnersystemen liefert. Dieses Konzept ist das sogenannte *Message-Passing-Modell*. Dieses Modell geht von einer Menge von *autonomen* Prozessen aus, die

1. eindeutig benannt sind,
2. jeweils über *privaten Speicher* verfügen.

Dies spezifiziert nicht, um welche Art Rechner(system) es sich handelt. Bei gemeinsam genutztem Hauptspeicher wird davon ausgegangen, dass jeder Prozess einen eigenen privaten Bereich zugewiesen bekommt.

Um nun Daten von einem Prozess P_i an einen Prozess P_j zu kommunizieren, muss P_i explizit im Programmlauf seine Daten in Form einer Nachricht (engl.: message) senden, und respektive P_j diese Nachricht und damit die Daten in Empfang nehmen.

Ein Nachteil des Message-Passing-Modells besteht in der Grundannahme von nicht gemeinsam genutztem Speicher. Jeder Prozess hat seine eigenen Kopien der benötigten Daten und Ergebnisse müssen explizit durch Nachrichten mitgeteilt und in die Speicherbereiche der anderen Prozesse kopiert werden. Dies macht das Programm aber auch weniger anfällig für Race-Conditions. Weitere Vorteile des Message-Passing-Modells sind:

2.2. Paralleles Rechnen

- Portabilität Message-Passing ist spätestens seit MPI (vgl.: Abschnitt 2.3) auf den meisten parallelen Plattformen einheitlich implementiert.
- Universalität Das Message-Passing-Modell stellt nur minimale Anforderungen an die zugrundeliegende Hardware. Es funktioniert einheitlich für vernetzte Systeme mit verteiltem Speicher ebenso, wie für Shared-Memory-Systeme oder Kombinationen aus diesen.
- Einfachheit Das Modell unterstützt explizite Kontrolle über Referenzen zu Speicherzellen und erleichtert so auch Debugging.

Diese Vorteile machen das Message-Passing-Modell zu einem der Standard-Modelle im High-Performance-Computing.[IBM 2017; Foster 1995; van Engelen 2017]

2. Grundlagen

2.3. MPI

MPI (*Message-Passing Interface*) ist eine Spezifikation für den Nachrichtenaustausch eines verteilten Systems. MPI richtet sich hauptsächlich nach dem *Message-Passing-Modell* (siehe Abschnitt 2.2.2). Erweitert wird das “klassische” Message-Passing-Modell unter anderem durch kollektive Kommunikationsmöglichkeiten, Remote-Speicherzugriff und parallele I/O-Operationen. Als Interface bietet MPI selbst keine Implementierung des Standards, sondern beschreibt Methoden und ihre Semantik.

Das Ziel von MPI ist es, einen Standard für Programme zu liefern, die sich des Message-Passing-Modells bedienen, und somit zu Effizienz, Portabilität und Flexibilität beizutragen. [MPI-Forum 2015]

2.3.1. Geschichte

Bereits vor 1992 gab es Bibliotheken für paralleles Rechnen. Jedoch gab es keinen einheitlichen Standard und die meisten Bibliotheken waren systemspezifisch, sodass das Portieren von Programmen auf ein anderes System zumindest eine aufwendige Aufgabe war. Auch die Ansätze der Bibliotheken unterschieden sich teilweise stark. Ein weit verbreiteter Ansatz war allerdings das Message-Passing-Modell, bei dem die verteilten Prozesssteile Nachrichten austauschen, um eine gemeinsame Aufgabe zu erfüllen.[Kendall 2017]

Am 29. und 30. April 1992 begann mit dem *Workshop on Standards for Message-Passing in a Distributed Memory Environment* am *Center for Research on Parallel Computing* in Williamsburg (Virginia) ein Prozess zur Standardisierung des Message-Passing-Ansatzes [Walker 1992]. Hier wurden die essentiellen Bestandteile eines standardisierten Message-Passing-Interfaces diskutiert. An diesem Prozess waren rund 60 Personen von 40 verschiedenen Organisationen beteiligt, darunter die bedeutendsten Anbieter von Parallelrechnern sowie Forscher aus Universitäten, staatlichen Laboren und der Industrie. Die Ergebnisse wurden zunächst in einem vorläufigen Entwurf im November 1992 und schließlich in revidierter Fassung in einem Proposal, bekannt als MPI-1, veröffentlicht. [Dongarra u. a. 1993]

Eine Hauptabsicht von MPI-1 war es, erst einmal den “Ball in’s Rollen zu bringen” und eine Diskussion anzuregen. Daher beschäftigte es sich noch hauptsächlich mit Point-to-Point-Kommunikation. Zu diesem Zeitpunkt war MPI weder thread safe, noch bot es Methoden zur kollektiven Kommunikation. Aktuell liegt MPI in der Version 3.1 vor und bietet neben der Point-to-Point-Kommunikation auch kollektive Routinen, nicht-blockierende Methoden, automatische Puffer-Verwaltung und vieles mehr. [MPI-Forum 2015]

Umsetzung in C und Fortran
später auch bindings für c++

2.3.2. Point-to-Point-Kommunikation

Die Point-to-Point-Kommunikation ist das durch das Message-Passing-Modell beschriebene Herzstück von MPI. Die Standardmethoden in C-Syntax sind:

Listing 2.1. Die Syntax der standard Sende- und Empfangsoperationen

```
MPI_Send(
    void* data,
    int count,
    MPI_Datatype datatype,
    int destination,
    int tag,
    MPI_Comm communicator)

MPI_Recv(
    void* data,
    int count,
    MPI_Datatype datatype,
    int source,
    int tag,
    MPI_Comm communicator,
    MPI_Status* status)
```

Jede Nachricht besteht aus einem Daten-Teil sowie einem *Umschlag* (engl.: envelope). Der Daten-Teil beinhaltet die Daten, die vom Sende- in den Empfangspuffer kopiert werden sollen (**void*** data), deren Anzahl (**int** count) sowie den Datentyp der zu sendenden Elemente (**MPI_Datatype** datatype). [MPI-Forum 2015]

Der Umschlag besteht aus:

- | | |
|---------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Sender | Dieser bei der Point-to-Point-Kommunikation automatisch hinzugefügt, muss aber bei der kollektiven Kommunikation explizit angegeben werden (vgl.: Abschnitt 2.3.3). |
| Empfänger | Jeder Prozess im Kommunikator hat eine eindeutige Nummer. Über diese Nummer (int destination) wird der Empfänger festgelegt. |
| Kennzeichnung | Eine Kennzeichnung (engl.: tag) kann zur Differenzierung der Nachrichten eingesetzt werden (int tag). |
| Kommunikator | Der MPI_Comm communicator spezifiziert eine Menge von p Prozessen, die sich diesen Kommunikator teilen. Die <i>Prozessgruppe</i> ist geordnet und die Prozesse sind durch ihren Rang $\text{destination} \in \underline{p-1}_0$ innerhalb der Gruppe spezifiziert. |

2. Grundlagen

Tabelle 2.2. MPIs Point-to-Point-Kommunikationsvarianten (Quelle: Akinci [2012])

Kommunikationsmodus	blockierende Methode	nicht-blockierende Methode
Standard	MPI_Send	MPI_Isend
Synchro	MPI_Ssend	MPI_Issend
Ready	MPI_Rsend	MPI_Irsend
Buffered	MPI_Bsend	MPI_Ibsend
	MPI_Recv	MPI_Irecv

Diese Informationen ermöglichen es, Nachrichten voneinander unterscheiden und selektiv empfangen zu können. Der zugehörige Empfängeranruf muss genau zum Sendeaufruf passen. [MPI-Forum 2015]

MPI_Status* status dient dem empfangenden Prozess dazu eventuelle Fehler zu erhalten. Dies ist besonders dann wichtig, wenn der Sender oder die Kennzeichnung, zum Beispiel auf Grund der Nutzung von Wildcards, nicht bekannt ist. Der Datentyp MPI_Status enthält dazu die Member MPI_SOURCE, MPI_TAG und MPI_ERROR. [MPI-Forum 2015]

Bei den in Listing 2.1 dargestellten Standard-Point-to-Point-Methoden handelt es sich um blockierende Operationen. Das heißt, dass das Programm aus MPI_Send erst zurückkehrt, wenn sicher ist, dass die gesendeten Daten wieder verändert werden dürfen. Entweder, weil sie in einen temporären Systempuffer, oder weil sie bereits in den Empfängerspeicher übertragen wurden. Dies kann bei manchen Programmen zu viel Wartezeit führen, andere benötigen eventuell mehr Sicherheit im Ablauf. Daher bietet MPI Variationen dieser Standard-Sendeoperation an. Diese sind in Tabelle 2.2 aufgelistet und werden im Folgenden kurz erläutert.

Beim synchronen Senden wird, wie in Abbildung 2.2.(a) dargestellt, zunächst vom sendenden Prozess eine "Ready to send"-Mitteilung verschickt. Auf diese Antwortet der empfangende Prozess mit einer "Ready to receive"-Mitteilung. Im Anschluss findet das Senden und Empfangen der Daten statt. Durch dieses Vorgehen müssen die Prozesse aber gegebenenfalls auf einander warten. Die Wartezeit ist in der Abbildung dunkel eingefärbt. Dafür wird aber nicht nur sichergestellt, dass die gesendeten Daten verändert werden dürfen, sondern auch, dass der Empfänger-Prozess zumindest damit begonnen hat die Daten auch zu empfangen. [Akinci 2012; MPI-Forum 2015]

Das Ready-Send sieht wie eine einfachere synchrone Sende-Variante aus (vgl. Abbildung 2.2.(b)), ist aber restriktiver. Die Methoden MPI_Rsend beziehungsweise MPI_Irsend erwarten, dass die "Ready to receive"-Mitteilung bereits geschickt wurde, wenn sie aufgerufen werden. Nur wenn diese Mitteilung bereits eingetroffen ist, werden die Daten auch gesendet, ansonsten wird ein Fehler gemeldet. Diese Methode soll den System-Overhead durch Sendeoperationen und Synchronisation minimieren. Es wird jedoch dazu geraten diese Methode nur zu verwenden, wenn die zeitliche Abfolge garantiert ist. [Akinci 2012; MPI-Forum 2015]

Beim Buffered-Send werden die Daten in einem gesonderten Puffer zwischengespei-

2.3. MPI

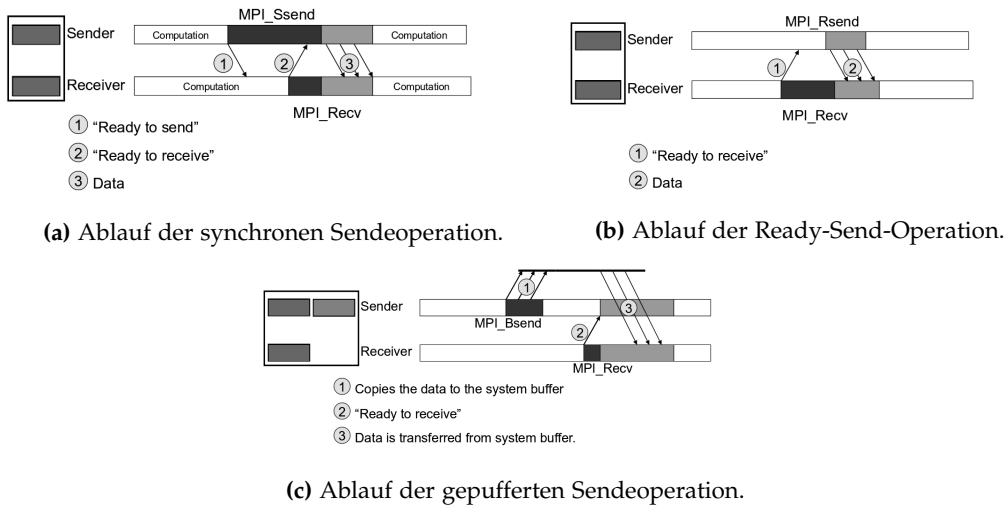


Abbildung 2.2. Quelle: Akinci [2012]

chert. Dies führt durch das zusätzliche Kopieren gegebenenfalls zu weiterem Overhead, dafür kann der Prozess, wie in Abbildung 2.2.(c) zu erkennen, im Anschluss an den Kopiervorgang seine Arbeit fortsetzen und auch den Sendepuffer bereits verändern. Die eigentliche Sendeoperation wird dann zu einem späteren Zeitpunkt nach der "Ready to receive"-Mitteilung des Empfängers durchgeführt. Der Puffer zum Zwischenspeichern muss allerdings auch durch den Nutzer zur Verfügung gestellt werden und wird nicht automatisch durch das System verwaltet. [Akinci 2012; MPI-Forum 2015]

Bei allen blockierenden Methoden können Deadlocks auftreten. Diese können beispielsweise entstehen, wenn zwei Prozesse Daten austauschen wollen, jedoch beide mit einer Sendeoperation beginnen, die nicht zurückkehrt, bevor nicht auch das Empfangen der Daten begonnen wurde. Beide Prozesse werden niemals beginnen Daten zu empfangen und werden somit auch nie aus dem Senden zurückkehren. Abhilfe können die nicht-blockierenden Methoden liefern.

Die nicht-blockierenden Methoden bestehen grundsätzlich aus zwei Aufrufen. Einer Initialisierung des Sendens/Empfangens, ohne dass auf dessen Ausführung gewartet wird, und einer Abschlussmethode, wie `MPI_Wait`, `MPI_Probe` oder `MPI_Test`. Dies ermöglicht es dem sendenden und dem empfangenden Prozess weitere Arbeiten auszuführen, um so möglichst Wartezeiten zu vermeiden beziehungsweise produktiv zu nutzen. Allerdings sollten weder der Sende- noch der Empfangspuffer zwischen Initialisierung und Abschluss verändert werden. [Akinci 2012; MPI-Forum 2015]

2. Grundlagen

2.3.3. Kollektive Kommunikation

Zusätzlich zur klassischen Point-to-Point-Kommunikation bietet MPI Möglichkeiten für kollektive Kommunikation. Ein Unterschied zur direkten Kommunikation zwischen zwei Knoten ist, dass hier keine getrennten Send- und Receive-Operationen durchgeführt werden. Bei der kollektiven Kommunikation rufen alle Prozesse eines Kommunikators dieselbe Methode auf. Daher sind auch die Parameter `destination` und `tag` nicht mehr notwendig. Wie auch bei der Point-to-Point-Kommunikation gibt es bei diesen Methoden jeweils eine blockierende und eine nicht-blockierende Variante.

Die einfachste kollektive Methode ist `MPI_Barrier`. Diese dient nicht dem Austausch von Daten, sondern ausschließlich der Synchronisation der Prozesse eines Kommunikators. Jeder Prozess, der diese Methode aufruft, wartet, bis jeder Prozess des Kommunikators diese Methode ebenfalls aufgerufen hat. Eine Deadlockgefahr besteht, falls nicht alle Prozesse des Kommunikators die Methode aufrufen. [MPI-Forum 2015]

In Abbildung 2.6 sind einige kollektive Methoden und ihre Funktionsweise veranschaulicht und werden im Folgenden kurz erläutert.

Der Broadcast dient dazu, Daten von einem Prozess an alle anderen zu verteilen. Die Syntax ist Listing 2.2 zu finden.

Die meisten Parameter sind bereits aus dem vorherigen Abschnitt bekannt. Neu ist der Parameter `int root`. Dieser bezeichnet den Rang des Prozesses im Kommunikator, der die Daten an die anderen verteilen möchte. Er legt also letztlich fest welcher Prozess sendet und welcher empfängt. Auch wenn es auf den ersten Blick so aussehen mag, werden die Daten nicht ausschließlich vom Sender nacheinander an alle Empfänger gesendet, was

Listing (2.2) Die Syntax von `MPI_Bcast`

```
MPI_Bcast(  
    void* data,  
    int count,  
    MPI_Datatype datatype,  
    int root,  
    MPI_Comm communicator)
```

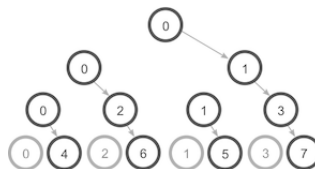


Abbildung 2.4. Mögliche Verteilung der Daten durch `MPI_Bcast`. (Quelle: Kendall [2017])

Listing (2.3) Die Syntax von MPI_Alltoallv

```

int MPI_Alltoallv(
    const void* sendbuffer,
    const int sendcounts[],
    const int senddispls[],
    MPI_Datatype sendtype,
    void* recvbuffer,
    const int recvcounts[],
    const int recvdispls[],
    MPI_Datatype recvtype,
    MPI_Comm comm)

```

linearen Aufwand bedeuten würde, sondern baumartig weitergegeben. In Abbildung 2.4 wird ein möglicher Ablauf dargestellt. Durch dieses Vorgehen ist logarithmische Laufzeit erreichbar. [Kendall 2017; MPI-Forum 2015]

MPI_Scatter dient ebenfalls dem Verteilen von Daten von einem Prozess auf die anderen, jedoch wird hier ein Array auf alle Prozesse eines Kommunikators verteilt. Dies kann zum Beispiel genutzt werden, um Testdaten in einem Root-Prozess einzulesen und dann an die anderen Prozesse zu verteilen. Umgekehrt zieht MPI_Gather die Daten aller Prozesse eines Kommunikators auf einem Prozess zusammen, beispielsweise um die Ergebnisse einer verteilten Berechnung auf einem Prozess zu aggregieren und auszugeben. Beim darunter abgebildeten MPI_Allgather wird das Ergebnis nicht nur auf einem, sondern auf allen Prozessen gesammelt. [Kendall 2017; MPI-Forum 2015]

Ähnlich zu den beiden Gather-Methoden sind die Methoden MPI_Reduce und MPI_Allreduce. Auch diese sammeln Daten von allen Prozessen auf einen, respektive auf alle Prozesse, zusammen. Jedoch werden hierbei die Daten nicht einfach in einem Array gebündelt, sondern über den Parameter MPI_Op op eine Operation mitgegeben, die auf die gesammelten Daten angewandt wird. So können aus den gesendet Daten direkt das Maximum, Minimum, die Summe und vieles mehr bestimmt werden. [Kendall 2017; MPI-Forum 2015]

Zuletzt ist MPI_Alltoall in Abbildung 2.6 dargestellt. Hierbei führt quasi jeder Prozess ein Scatter durch. Man könnte es auch als *Transponieren* der "Prozess-Daten-Matrix" bezeichnen. [MPI-Forum 2015]

Von jeder dieser kollektiven Methoden gibt es wie bereits erwähnt ebenfalls eine nicht-blockierende Variante, die, der Namenskonvention folgend, durch ein eingeschobenes I gekennzeichnet ist.

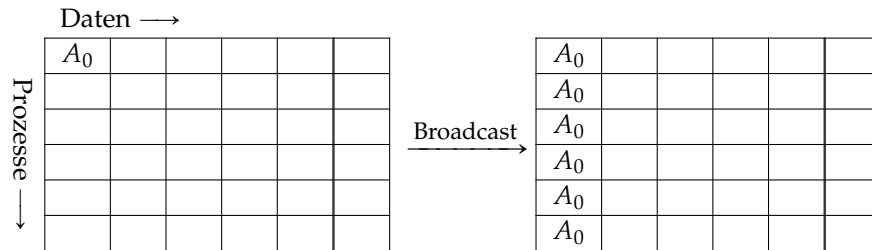
Außerdem gibt es für die Daten austauschenden Methoden eine *vektorierte* Variante. Alle zuvor erläuterten Methoden erwarten eine feste Anzahl an zu kommunizierenden Elementen pro Prozess. Es kann aber vorkommen, dass zwischen unterschiedlichen Prozessen unterschiedliche Anzahlen von Elementen ausgetauscht werden müssen. Diese vektorisierten Varianten, zu erkennen an einem hinter dem Namen angefügten v, erwarten

2. Grundlagen

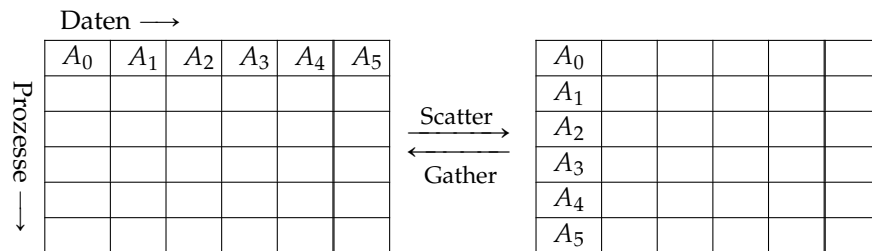
ein Array von Anzahlen. Als Beispiel ist die Syntax der vektorisierten Alltoall-Methode in Listing 2.3 aufgeführt.

Für $i \in \underline{p-1}_0$ legt der i -te Eintrag der Arrays `sendcounts` und `recvcounts` fest, wie viele Elemente an den i -ten Prozess gesendet, respektive vom i -ten Prozess empfangen werden. Neu sind außerdem die `int`-Arrays `senddispls` und `recvdispls`. Der i -te Eintrag legt hier fest, ab welchem Index die Daten im `sendbuffer` für den i -ten Prozess bestimmt sind, beziehungsweise ab welchem Index im `recvbuffer` die Daten des i -ten Prozesses zu empfangen sind. [MPI-Forum 2015]

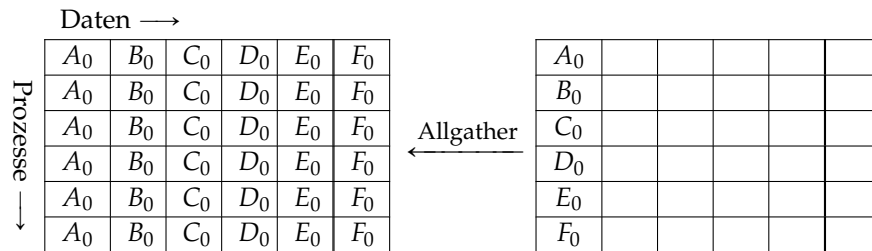
2.3. MPI



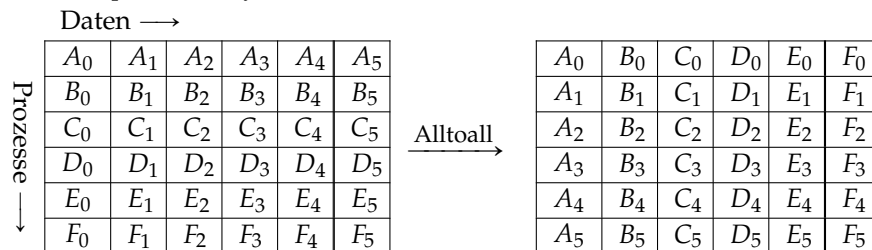
- (a) Beim `MPI_Bcast` wird ein Datensatz von einem Root-Prozess an alle anderen Prozesse gesendet und von diesen empfangen.



- (b) `MPI_Scatter` verteilt ein Array von Daten auf die Prozesse. `MPI_Gather` vereinigt Daten aller Prozesse in einem Array auf einem Root-Prozess.



- (c) `MPI_Allgather` vereint ebenfalls Daten aller Prozesse, allerdings erhält jeder Prozess eine Kopie des Arrays.



- (d) `MPI_Alltoall` ist ein simultanes `MPI_Scatter` aller Prozesse. Betrachtet man die Prozesse und Daten als Matrix, wird eine Matrixtransformation durchgeführt.

Abbildung 2.6. Möglichkeiten der kollektiven Kommunikation in MPI. (Quelle: Schwarz [2011])

Hauptteil

3.1. Ausgangssituation

Zur Erinnerung: Wir wollen für $n \in \mathbb{N}_{\geq 2}$ die wechselseitigen Gravitationskräfte von n Himmelskörpern berechnen. Da die größten davon die Sonnen sind und es davon bereits mehr als genug in unserer Galaxie gibt beschränken wir uns zunächst auf diese. Die Menge unserer n Sonnen ist im Folgenden mit der Menge Ω dargestellt. Für jede Sonne $x \in \Omega$ muss die Gleichung

$$f_x = \sum_{\substack{y \in \Omega \\ y \neq x}} \gamma m_x m_y \frac{y - x}{\|y - x\|_2^3} \quad (3.1)$$

gelöst werden. Zunächst möchte ich die Grundstruktur des Programms vorstellen. Das Programm ist in C geschrieben und wurde in der nicht-optimierten Version von Sven Christophersen zur Verfügung gestellt.

Wir benötigen als ersten Schritt eine Datenstruktur, die unsere Sonnen darstellt. Diese ist in Listing 3.1 aufgeführt. In Vorbereitung einer eventuell anschließenden Vektorisierung (vgl.) wurde diese Struktur als struct of arrays (vgl. Abschnitt 2.2.1) angelegt.

Ref auf Ausblick

Die Komponenten der Struktur sind:

1. das Array **int** *id, das einer einfachen Identifizierung der Sonnen dient,
2. die Arrays **double** *x, *y, *z, in denen die Position der Sonnen gespeichert werden,
3. die Arrays **double** *Fx, *Fy, *Fz, in denen die Kraftvektoren, die auf die einzelnen Sonne wirken, gespeichert werden,
4. die Arrays **double** *vx, *vy, *vz, in denen der Geschwindigkeitsvektor jeder Sonne gespeichert wird,
5. das Array **double** *m, in dem die Massen der Sonnen gespeichert werden, und zuletzt
6. die Werte **int** n und **double** th, die die Anzahl an Sonnen und die Länge eines Zeitschritts in Sekunden enthalten.

Die Körper entsprechen noch keinen reellen Himmelskörpern, zu denen uns keine Daten vorliegen, sondern werden zufällig generiert. Die Sonnen werden in einem Gebiet von ± 1

3. Hauptteil

Listing (3.1) Die Struktur `bodies` dient der Speicherung aller mit den einzelnen Sonnen zusammenhängenden Daten

```
/* Struct that holds coordinates x, masses m and forces F for all
   particles. */
struct _bodies {
    int    *id; // id to identify each single body
    double *x;  // x-components of the masses.
    double *y;  // y-components of the masses.
    double *z;  // z-components of the masses.
    double *Fx; // x-components of the forces.
    double *Fy; // y-components of the forces.
    double *Fz; // z-components of the forces.
    double *vx; // x-components of the velocities.
    double *vy; // y-components of the velocities.
    double *vz; // z-components of the velocities.
    double *m;  // The masses.
    int     n;  // Number of masses.
    double th;  // length of one timestep.
};
typedef struct _bodies bodies;
```

Lichtjahr in jeder Koordinatenrichtung um einen angenommenen Ursprung mit Massen zwischen einer und 15 Sonnenmassen verteilt.

echte Werte

Um nun alle gravitationellen Wechselwirkungen zu berechnen wird die Methode `compute_forces_bodies(...)` (vgl. Listing 3.2) ausgeführt. Gut zu erkennen ist die matrix-ähnliche Struktur: Die beiden **for**-Schleifen entsprechen dem zeilen- und spaltenweisen durchgehen der zugehörigen $\Omega \times \Omega$ -Matrix. Explizit aufgestellt wird diese Matrix allerdings nicht, da dies in Bezug auf den Speicherplatz äußerst ineffizient wäre. Statt dessen wird direkt, wie in Gleichung 3.1 angegeben, die kumulative Kraftwirkung für jede Sonne berechnet und in der `bodies`-Struktur gespeichert. Ein Teil der Kernfunktion ist in den Aufruf von `calc_potential(...)` in Zeile 19 ausgegliedert. Diese Methode berechnet das rein auf der Entfernung der beiden Sonnen beruhende Gravitationspotential $P(x, y)$, sodass die Formel aus Gleichung 3.1 wie folgt dargestellt werden kann

$$f_x = \sum_{\substack{y \in \Omega \\ y \neq x}} \gamma m_x m_y P(x, y), \quad P(x, y) := \frac{y - x}{\|y - x\|_2^3}.$$

Wie bereits in der Einleitung beschrieben ist das Problem mit diesem Algorithmus, dass er in Bezug auf die Laufzeit quadratisch skaliert. Läuft dieser Algorithmus mit $n = 2^{13} \approx 8.000$ Sonnen noch in 1,097 Sekunden durch, so braucht er bereits für $n = 2^{15} \approx 32.000$

3.1. Ausgangssituation

Sonnen 17,531 Sekunden und für $n = 2^{16} \approx 64.000$ Sonnen bereits über 70 Sekunden.¹ Und diese Größenordnung ist weit entfernt von dem reellen Problem die Gravitationskräfte in unserer Galaxie mit etwa 100.000.000.000 Sonnen zu berechnen.

Listing (3.2) Diese Methode berechnet die auftretenden Gravitationskräfte.

```
1  /* Computation of the resulting forces for every particle.*/
2  void compute_forces_bodies(bodies *b) {
3      int n = b->n;
4      int i, j;
5      double F[3], P[3];
6      double *x, *y, *z, *m;
7      x = b->x;
8      y = b->y;
9      z = b->z;
10     m = b->m;
11     for (i = 0; i < n; ++i) {
12         F[0] = 0.0;
13         F[1] = 0.0;
14         F[2] = 0.0;
15         for (j = 0; j < n; ++j) {
16             if (i == j) {
17                 continue;
18             }
19             calc_potential(x[i], y[i], z[i], x[j], y[j], z[j], P);
20             F[0] += m[j] * P[0];
21             F[1] += m[j] * P[1];
22             F[2] += m[j] * P[2];
23         }
24         b->Fx[i] += GAMMA * m[i] * F[0];
25         b->Fy[i] += GAMMA * m[i] * F[1];
26         b->Fz[i] += GAMMA * m[i] * F[2];
27     }
28 }
```

¹Ausgeführt auf einem Computer mit 16 Gb Arbeitsspeicher und einem Intel Core i7 mit 2,4 GHz pro Kern.

3. Hauptteil

3.2. \mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation

Nun wollen wir die in Abschnitt 2.1 vorgestellte Struktur der hierarchischen Matrizen nutzen, um den Algorithmus zu beschleunigen. Wir wollen also die Kernfunktion

$$f : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3, (x, y) \mapsto \gamma m_x m_y \frac{y - x}{\|y - x\|_2^3}$$

durch Lagrange-Interpolation der Ordnung k in jeder Koordinatenrichtung auf Clustern τ und σ des zulässigen Blocks $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^+(T_{\Omega \times \Omega})$ approximieren. Dazu konstruieren wir Tschebyscheff-Interpolationspunkte $\xi_{\mathbf{g},i}$, $\mathbf{g} \in \{\tau, \sigma\}$, $i \in k_3 =: M \subset \mathbb{N}^3$ und erhalten so:

$$\begin{aligned} f(x, y) &\approx \tilde{f}(x, y) = \sum_{\nu \in M} \sum_{\mu \in M} \mathcal{L}_{\tau, \nu}(x) \gamma m_x m_y \frac{\xi_{\sigma, \mu} - \xi_{\tau, \nu}}{\|\xi_{\sigma, \mu} - \xi_{\tau, \nu}\|_2^3} \mathcal{L}_{\sigma, \mu}(y) \\ &= \gamma \sum_{\nu \in M} \mathcal{L}_{\tau, \nu}(x) m_x \sum_{\mu \in M} \frac{\xi_{\sigma, \mu} - \xi_{\tau, \nu}}{\|\xi_{\sigma, \mu} - \xi_{\tau, \nu}\|_2^3} \mathcal{L}_{\sigma, \mu}(y) m_y \\ &= \gamma \sum_{\nu \in M} \mathcal{L}_{\tau, \nu}(x) m_x \sum_{\mu \in M} P(\xi_{\tau, \nu}, \xi_{\sigma, \mu}) \mathcal{L}_{\sigma, \mu}(y) m_y. \end{aligned}$$

Anders ausgedrückt wollen wir die Matrix $(F)_{x,y} := f(x, y)$ durch eine \mathcal{H}^2 -Matrix \tilde{F} approximieren. Für einen streng zulässigen Blockbaum $T_{\Omega \times \Omega}$ und jeden zulässigen Block $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^+(T_{\Omega \times \Omega})$ konstruieren wir die nötigen Matrizen, mit $\mu, \nu \in M$, wie folgt:

$$\begin{aligned} E_{\tilde{\tau}} &:= (E_{\tilde{\tau}})_{\mu\nu} := \mathcal{L}_{\tau, \nu}(\xi_{\tilde{\tau}, \mu}) \quad \text{für alle } \tilde{\tau} \in \text{sons}(\tau) \text{ falls } \tau \notin \mathcal{L}(T_{\Omega}), \\ V_{\tau} &:= \begin{cases} (V_{\tau})_{x\nu} := \mathcal{L}_{\tau, \nu}(x) & \text{für alle } x \in \tau \text{ falls } \tau \in \mathcal{L}(T_{\Omega}), \\ \sum_{\tilde{\tau} \in \text{sons}(\tau)} E_{\tilde{\tau}} V_{\tilde{\tau}} & \text{falls } \tau \notin \mathcal{L}(T_{\Omega}), \end{cases} \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} S_b &:= (S_b)_{\mu\nu} := P(\xi_{\tau, \nu}, \xi_{\sigma, \mu}), \\ E_{\tilde{\sigma}} &:= (E_{\tilde{\sigma}})_{\mu\nu} := \mathcal{L}_{\sigma, \nu}(\xi_{\tilde{\sigma}, \mu}) \quad \text{für alle } \tilde{\sigma} \in \text{sons}(\sigma) \text{ falls } \sigma \notin \mathcal{L}(T_{\Omega}), \\ W_{\sigma} &:= \begin{cases} (W_{\sigma})_{y\nu} := \mathcal{L}_{\sigma, \nu}(y) & \text{für alle } y \in \sigma \text{ falls } \sigma \in \mathcal{L}(T_{\Omega}), \\ \sum_{\tilde{\sigma} \in \text{sons}(\sigma)} E_{\tilde{\sigma}} W_{\tilde{\sigma}} & \text{falls } \sigma \notin \mathcal{L}(T_{\Omega}). \end{cases} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Spalten linksbündig

Für die unzulässigen Blöcke $b = \tau \times \sigma \in \mathcal{L}^-(T_{\Omega \times \Omega})$ müssen wir weiterhin vollbesetzte Matrizen

$$N_b := (N_b)_{xy} := \gamma m_x m_y P(x, y)$$

auswerten.

Für die Anschauung mag es helfen, sich die Faktoren $\mathcal{L}_{\tau, \nu} m_x =: h_x$ beziehungsweise $\mathcal{L}_{\sigma, \mu} m_y =: h_y$ als Anteil der Masse der Sonne x beziehungsweise y an Ersatzmassen $m_{\xi_{\mathbf{g},i}}$ vorzustellen, wobei $\mathbf{g} \in \{\tau, \sigma\}$ und $i \in M$ gilt. Durch die Interpolation werden also für weit genug entfernte Gebiete statt der echten Sonnen Ersatzkörper betrachtet, die sich an der Position der Interpolationspunkte befinden und eben diese Ersatzmassen haben.

3.2. \mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation

Listing (3.3) Die Struktur Cluster vereint die Definition eines Clusters mit der eines Clusterbaumes.

```
struct _Cluster{
    bodies *bodies;           //related bodies
    int id;                   //id of the Cluster
    int start;                 //start index of the according subarray
    int n;                     //number of bodies in this Cluster
    double a[3];               //"upper left" corner of the bounding box
    double b[3];               //"lower right" corner of the bounding box
    double center[3];          //center of the bounding box
    double diam;               //diameter of the bounding box
    double *m;                 //substitution masses
    double *F;                 //substitution forces
    double *xs;                //coordinates of the locations of submasses
    int num_sons;              //number of son clusters
    struct _Cluster *son[2];    //pointers to the son
};
typedef struct _Cluster Cluster;
```

3.2.1. Clustering

Für die oben beschriebene Approximation müssen wir einen Clusterbaum und einen streng zulässigen Blockbaum konstruieren. Dazu benötigen wir zunächst eine Datenstruktur für Clusterbäume. Diese finden Sie in Listing 3.3.

Die Datenstruktur

Die Datenstruktur speichert die für die Cluster notwendigen Daten sowie jeweils Zeiger auf die Sohncluster `Cluster *son[2]`. Jedes Cluster verweist auf die zum Baum gehörenden `bodies *bodies`, und nutzt einen Startindex `int start` sowie die Anzahl `int n`, um auf die zum Cluster gehörigen Sonnen zu verweisen und zuzugreifen. Auch denkbar wäre es, nicht getrennt das `bodies`-Array und den Startindex zu speichern, sondern direkt auf das erste Element des zum Cluster gehörenden Teilarrays zu zeigen. Für jedes Cluster ein eigenes Array anzulegen würde hingegen zu Redundanz und somit unnötigem Speicherbedarf führen, da jede Ebene des Clusterbaumes eine Partition von Ω erzeugt. Die hier vorgestellte Variante erscheint mir am vielseitigsten ohne nennenswert unnötig Speicher zu belegen.

Außerdem enthält das Cluster die, die Elemente des Clusters umschließende, bounding box (vgl. Seite 8). Diese wird durch zwei Punkte in der Gestalt von `double a[3]` und `double b[3]` aufgespannt. Da das Zentrum mehrfach bei der Konstruktion und Teilung auftaucht ist dieses zur Laufzeitoptimierung in `double center[3]` abgespeichert. Ebenso ist der Durchmesser der bounding box in `double diam` hinterlegt, um ihn nur einmal bei der

3. Hauptteil

Konstruktion und nicht bei jeder Abfrage erneut berechnen zu müssen.

Die drei Arrays **double** *m, **double** *F und **double** *xs repräsentieren die in den Clustern genutzten Ersatzkörper. In *m sind die n Massen, in *F Ersatzkräfte und in *xs die Positionen der Ersatzkörper, beziehungsweise Interpolationspunkte $\xi_{g,i}$, gespeichert. Für jeden Interpolationspunkt muss eine Ersatzmasse gespeichert werden können, sodass *m k^3 Einträge hat. Da *F ein Array von dreidimensionalen Vektoren ist, enthält es $3k^3$ Einträge. Zwar sind *xs ebenfalls dreidimensionale Punkte, jedoch bilden diese ein regelmäßiges Raster. Indem wir die Koordinatenprojektionen der Punkte speichern, reichen $3k$ Einträge. Die Interpolationspunkte können dann durch $\{xs_0, \dots, xs_{k-1}\} \times \{xs_0, \dots, xs_{k-1}\} \times \{xs_0, \dots, xs_{k-1}\}$ rekonstruiert werden. Die Einträge sind jeweils nach Koordinatenrichtung zusammengefasst, also erst alle x-Koordinaten, dann die y-Koordinaten usw., um auch wieder eine "struct of arrays"-Struktur zu bilden, um eine einfach Vektorisierung zu ermöglichen.

Die Membervariable **int** num_sons dient in diesem Fall der einfacheren Abfrage, ob es sich bei dem Cluster um ein Blatt oder einen inneren Knoten handelt. In allgemeineren Kontexten ist es durchaus möglich, dass Cluster unterschiedlich viele Sohncluster haben. Beispielweise hat der zugehörige Blockbaum $T_{\Omega \times \Omega}$ vier Sohnblöcke pro Nicht-Blattblock.

Die Konstruktion

Nun, da wir eine Datenstruktur für Clusterbäume definiert haben, müssen wir diesen noch erzeugen. Sei dazu eine bodies Struktur mit zufällig generierten Sonnen gegeben.

Nun beginnen wir, indem wir ein Wurzelcluster mit $id = 0$ konstruieren. Per Definition enthält es alle in bodies gegebenen Sonnen, womit die Member *bodies, start und n bereits festgelegt sind. Als nächstes erzeugen wir für die gegebenen Sonnen eine bounding box mit minimalen Ausmaßen. Dazu fassen wir für jede Koordinatenrichtung die kleinsten (beziehungsweise größten) Positionswerte der bodies in a (beziehungsweise b) zusammen. Alternativ könnte man, wegen der zufälligen Konstruktion der Sonnen, auch dessen Grenzen als bounding box wählen. Zu dieser bounding box werden nun die Werte center[3] und diam berechnet. Die Member **double** *m und **double** *F bleiben mit 0 initialisiert. Die Interpolationspunkte xs werden allerdings ebenfalls jetzt berechnet. Dazu wurden beim Start des Programmes bereits Tschebyscheff-Interpolationspunkte auf dem Intervall $[-1, 1]$ berechnet. Diese werden jetzt für jede Koordinatenrichtung i auf das entsprechende Intervall $[a_i, b_i]$ des Quaders der bounding box transformiert.

Um nun mit dieser Wurzel einen Clusterbaum zu konstruieren, unterteilen wir ein Cluster jeweils in Sohncluster bis eine Abbruchbedingung erfüllt ist. Die wichtigsten Auszüge aus dem Code zur rekursiven Konstruktion des Clusterbaumes sind in Listing 3.4, Listing 3.6 und Listing 3.5 aufgeführt.

Da wir mit zufällig generierten und recht großen Datenmengen arbeiten, ist es nicht notwendig die Unterteilung eines Clusters in Sohncluster kardinalitätsgesteuert vorzunehmen um ein gutes load balancing zu erhalten. Dies könnte bei reellen Daten möglicherweise notwendig werden, wenn es in der betrachteten Menge Ω große Bereiche mit sehr wenigen Körpern gibt. Der hier vorgestellte Algorithmus unterteilt die Cluster auf jeder Stufe des

3.2. \mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation

Listing (3.4) Dies sind die Kernmethoden der Konstruktion des Clusterbaumes. Die Teilung der bounding box wird hier vorgenommen sowie die Sortierung der Elemente und Konstruktion der Sohncluster gestartet.

```

1 void _setup(Cluster *c, int depth){
2     [...]
3     if(depth < MAX_DEPTH){          //split as long as condition is not met
4         _setup_nonLeafCluster(c, depth);
5     }
6     [...]
7 }
8 void _setup_nonLeafCluster(Cluster *c, int depth){
9     int dir = _largest_direction(c);
10    int border = _sortIndices(c, dir);    //number of elements in the first
        son cluster
11    double b1[3], a2[3];                //new bounding box points
12    for(int d = 0; d < 3; d++){
13        if(d == dir){
14            b1[d] = c->center[d];
15            a2[d] = c->center[d];
16        } else {
17            b1[d] = c->b[d];
18            a2[d] = c->a[d];
19        }
20    }
21    c->num_sons = 2;
22    c->son[0] = _new_bound_Cluster(c->start, border, c->bodies, c->a, b1);
23    _setup(c->son[0], depth+1);
24    c->son[1] = _new_bound_Cluster(c->start + border, c->n - border, c->
        bodies, a2, c->b);
25    _setup(c->son[1], depth+1);
26 }

```

Baumes rein geometrisch durch eine Mittelebene. Dazu wird zunächst die Richtung der größten Ausdehnung der bounding box bestimmt und dann in dieser Koordinatenrichtung mittig unterteilt. Während dieser Unterteilung werden die zunächst ungeordneten bodies gemäß ihrer Zugehörigkeit zu einem der beiden Sohncluster sukzessive sortiert.

Die Methode `_sortIndices` beruht, über die gesamte Konstruktion des Clusterbaumes betrachtet, auf der Grundidee von Quicksort. Für die größte Richtung $[a_i, b_i]$ des Quaders, der die bounding box darstellt, wird als Quasi-Pivotelement jeweils die Mitte $c_i = \frac{a_i + b_i}{2}$ dieser Richtung gesetzt und die Sonnen entsprechend ihrer Position in die linke oder rechte Hälfte einsortiert. Anders als bei Quicksort wird auf Grund der gewählten Abbruchbedin-

3. Hauptteil

Listing (3.5) Hier wird der Wert MAX_DEPTH für die Abbruchbedingung berechnet.

```
1 void init(int argc, String* argv){
2   [...]
3   switch(argc){
4     case 3:
5       pot = atoi(argv[2]);
6     case 2:
7       INTERPOLATION_POINTS = atoi(argv[1]);
8       [...]
9   }
10  NUM_SUB_MASSES = INTERPOLATION_POINTS * INTERPOLATION_POINTS *
      INTERPOLATION_POINTS;
11  [...]
12  int leaf_pot = INTERPOLATION_POINTS - 1 ? ceil(log2(2 * NUM_SUB_MASSES))
      : 4;
13  MAX_DEPTH = pot - leaf_pot;
14  [...]
15 }
```

gung die Liste nicht vollständig sortiert. Für den Algorithmus ist die Zugehörigkeit der Sonnen zu bestimmten Clustern die entscheidende Information.

Nach Definition 2.6 wurden zwei Beispiele für Abbruchbedingungen erwähnt. Wegen der zufälligen Generierung lässt sich die ungefähre Anzahl Elemente in den Blattclustern anhand der Tiefe des Baumes schätzen. Indem wir als Abbruchbedingung eine maximale Tiefe für den Clusterbaum festlegen, stellen wir gleichzeitig sicher, dass der Clusterbaum ein vollständiger Binärbaum wird. Der Wert MAX_DEPTH für die Abbruchbedingung wird gleich zu Beginn des Programmlaufs auf Basis der Anzahl an Sonnen ($|\Omega| = 2^{\text{pot}}$), und der Interpolationsordnung k berechnet. Dabei gilt:

$$\text{MAX_DEPTH} := \text{pot} - l, \quad l := \begin{cases} \lceil \log_2(2k^3) \rceil & \text{falls } k > 1 \\ 4 & \text{falls } k = 1 \end{cases}$$

Bei einer Baumtiefe von pot wären die Blattcluster um Schnitt gerade einelementig. Indem die Abbruchbedingung die Tiefe des Clusterbaumes auf $\text{pot} - l$ begrenzt, enthalten die Blattknoten im Schnitt gerade 2^l Elemente. Durch diese Baumtiefenreglierung wird für $k > 1$ die nächsthöhere Zweierpotenz zur doppelten Anzahl an Interpolationspunkten als durchschnittliche Anzahl Sonnen pro Blattcluster festgelegt. Für die Interpolationsordnung $k = 1$ wäre dies eine zu feine Zerlegung. Daher wird hier l auf den Wert 4 und damit die durchschnittliche Blattgröße auf $2^4 = 8$ gesetzt. Indem die Blattgröße im Schnitt auf ungefähr das Doppelte der Anzahl an Interpolationspunkten festgelegt wird, soll eine gute Balance zwischen Genauigkeit und Laufzeit erreicht werden.

3.2. \mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation

Listing (3.6) Diese Methode nimmt die Sortierung der bodies anhand einer vorgegebenen Koordinatenrichtung vor.

```
1 int _sortIndices(Cluster *c, int dir){
2     if(0 == c->n){
3         return 0;
4     }
5     int j, front, back;
6     double *assoc_coord;
7
8     //get associated coordinates of bodies
9     assoc_coord = _getAssocCoord(c->bodies, dir);
10
11    //sort the bodies according to clusters center
12    front = 0;
13    back = c->n;
14    back -= 1;
15    do {
16        j = c->start + front;
17
18        if(assoc_coord[j] < c->center[dir]){
19            front++;
20        } else {
21            if(assoc_coord[c->start + back] <= c->center[dir]){
22                swap_bodies(c->bodies, c->start + front, c->start + back);
23            }
24            back--;
25        }
26    } while(front <= back);
27
28    return front; //front resembles the number of elements in the left half
29 }
```

Für die Blattcluster ist keine eigne setup-Methode notwendig, da der Konstruktor `_new_bound_Cluster(...)` zunächst alle Werte für ein Blattcluster setzt. Die Methode `_setup(...)` entscheidet also anhand der Stufe ob ein Cluster ein Blattcluster bleibt, oder durch Unterteilung zu einem Nicht-Blattcluster wird.

3.2.2. Vorwärtstransformation

Nun können wir uns an die Berechnung der Gravitation machen. Um eine Matrix-Vektor-Multiplikation mit der Matrix \tilde{F} auf zulässigen Blöcken auszuwerten, muss diese Operation

3. Hauptteil

Listing (3.7) Diese Methode dient dem rekursiven Aufruf der Vorwärtstransformation und delegiert die Konstruktion der Ersatzmassen. Dabei wird zwischen Blatt- und Nicht-Blattclustern unterschieden.

```

1 void forward(Cluster *c){
2     if(c->num_sons){
3         _forward_nonLeaf(c);
4     } else {
5         _forward_leaf(c);
6     }
7 }

```

als erstes auf den Matrizen W_σ ausgewertet werden. Die Auswertung der Matrizen W_σ nennt man auch *Vorwärtstransformation*.

Da wir die Gravitationskräfte für alle Sonnen in Ω berechnen wollen, ist es sinnvoll die Vorwärtstransformation einfach für alle $\sigma \in T_\Omega$ durchzuführen. Dies geschieht im vorliegenden Programm durch einen Aufruf von `forward(Cluster *c)` mit `root(T_Ω)`. Die Methode `forward(...)` unterscheidet zwischen Blatt- und Nicht-Blattclustern, und ruft entsprechend die Methode `_forward_leaf(Cluster *c)` oder `_forward_nonLeaf(Cluster *c)` auf. Die Methode `_forward_leaf(...)` entspricht der Konstruktion und Auswertung der Matrizen W_σ anhand der Sonnen $x \in \sigma$, die Methode `_forward_nonLeaf(Cluster *c)` der anhand der Sohncluster. Für letztere müssen daher die Ergebnisse der Söhne bereits vorliegen. Daher ruft diese als ersten Schritt `forward(cs)` für alle Sohncluster `cs` auf. Auf diese Weise durchlaufen die Methoden gemeinsam betrachtet den Clusterbaum rekursiv. Der Code der drei Methoden ist in Listing 3.7, Listing 3.8 und Listing 3.9 zu finden.

Durch die Methode `_forward_leaf(Cluster *c)` werden, wie auf Seite 36 beschrieben, für alle Interpolationspunkte $\xi_{c\mu} \in \times_{i=0}^2 \{xs_{i:k}, \dots, xs_{(i+1):k-1}\}$, $\mu \in M$ durch

$$m_{\xi_{c\mu}} = m_\mu := \sum_{y \in c} \mathcal{L}_{c,\mu}(y) m_y$$

die Ersatzmassen in der Clusterbasis berechnet und gespeichert. Die Methode `_forward_nonLeaf(Cluster *c)` berechnet ebenfalls Ersatzmassen, jedoch nicht aus allen Sonnen des Clusters, sondern aus den Interpolationspunkten und Ersatzmassen der Sohncluster (vgl. Abschnitt 2.1.2).

Stellt man sich den Baum von der Wurzel aus nach unten hängend vor, werden also die Massen der Sonnen in den Baum hochgezogen. Je höher die Stufe des Baumes, um so größer ist die Approximation.

3.2. \mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation

Listing (3.8) Diese Methode arbeitet auf den Transformmatrizen und ruft daher zuert rekursiv die Vorwärtstransformation für die Sohncluster auf.

```

1 void _forward_nonLeaf(Cluster *c){
2   int i, j, k, w, wj, son, ison, json, kson, wson, wsonj;
3   double sum, l1, l2, l3;
4
5   forward(c->son[0]); //recursiv call for first son
6   forward(c->son[1]); //recursiv call for second son
7
8   //for all submasses
9   for(i = 0; i < INTERPOLATION_POINTS; i++){
10    for(j = 0; j < INTERPOLATION_POINTS; j++){
11      wj = i * INTERPOLATION_POINTS + j;
12      for(k = 0; k < INTERPOLATION_POINTS; k++){
13        w = wj * INTERPOLATION_POINTS + k;
14        sum = 0.0;
15
16        //for all sons
17        for(son = 0; son < 2; son++){
18          //for all sons submasses
19          for(ison = 0; ison < INTERPOLATION_POINTS; ison++){
20            l1 = lagrange(c, i, 0, c->son[son]->xs[ison]);
21            for(json = 0; json < INTERPOLATION_POINTS; json++){
22              wsonj = ison * INTERPOLATION_POINTS + json;
23              l2 = l1 * lagrange(c, j, 1, c->son[son]->xs[INTERPOLATION_POINTS
24                + json]);
25              for(kson = 0; kson < INTERPOLATION_POINTS; kson++){
26                wson = wsonj * INTERPOLATION_POINTS + kson;
27                l3 = l2 * lagrange(c, k, 2, c->son[son]->xs[2 * INTERPOLATION_POINTS
28                  + kson]);
29
30                //calculate the substitution mass
31                sum += c->son[son]->m[wson] * l3;
32              }
33            }
34          }
35        }
36      }
37    }
38  }

```

3. Hauptteil

Listing (3.9) Diese Methode erstellt die Clusterbasis des Clusterbaumes.

```
1 void _forward_leaf(Cluster *c){
2   if(0 == c->n){ return; }
3   int i, j, k, l, m, w, wj;
4   double x, y, z, *mass, l1, l2, l3;
5   bodies *b = c->bodies;
6   mass = b->m;
7
8   for(i = 0; i < NUM_SUB_MASSES; i++){
9     c->m[i] = 0.0;
10  }
11
12  //for all linked actual masses
13  for(l = 0; l < c->n; l++){
14    m = c->start + l;
15    x = b->x[m];
16    y = b->y[m];
17    z = b->z[m];
18
19    //for all interpolation points:
20    for(i = 0; i < INTERPOLATION_POINTS; i++){
21      l1 = lagrange(c, i, 0, x);
22      for(j = 0; j < INTERPOLATION_POINTS; j++){
23        wj = i * INTERPOLATION_POINTS + j;
24        l2 = l1 * lagrange(c, j, 1, y);
25        for(k = 0; k < INTERPOLATION_POINTS; k++){
26          //actual interpolation point:
27          w = wj * INTERPOLATION_POINTS + k;
28          //actual lagrange weight:
29          l3 = l2 * lagrange(c, k, 2, z);
30
31          //calculate the substitution mass
32          c->m[w] += mass[m] * l3;
33        }
34      }
35    }
36  }
37 }
```

3.2.3. Auswertung der Kopplungsmatrizen

Der nächste Schritt in der Auswertung ist die Multiplikation mit den Kopplungsmatrizen S_b . Da diese Matrizen, im Gegensatz zu den Clusterbasen V_τ und W_σ , vom Block und damit von beiden und nicht nur von einem Cluster abhängen, müssen wir nun den Blockbaum $T_{\Omega \times \Omega}$ durchlaufen. Gleichzeitig können wir in diesem Schritt die Nahfeldmatrizen N_b , die ebenfalls von den Blöcken abhängen, auswerten.

Den Blockbaum haben wir nicht explizit aufgestellt. Das ist auch nicht notwendig, da wir ihn implizit konstruieren können und somit keinen Speicherplatz benötigen. Wir durchlaufen unseren impliziten Blockbaum, indem wir, beginnend mit dem Wurzelblock $b_{root} = root(T_\Omega) \times root(T_\Omega)$, für jeden Block $b = \tau \times \sigma$ prüfen, ob

1. $\mathcal{Z}_\eta(\tau, \sigma) = \text{zulässig}$ erfüllt ist. Ist dies der Fall haben wir, unabhängig davon, ob $\tau \in \mathcal{L}(T_\Omega)$ oder $\sigma \in \mathcal{L}(T_\Omega)$ gilt, einen Blattblock erreicht und können S_b auswerten.
2. Ist $\mathcal{Z}_\eta(\tau, \sigma) = \text{unzulässig}$, prüfen wir, ob
 - (a) $\tau, \sigma \in \mathcal{L}(T_\Omega)$. Falls τ und σ Blattcluster sind, haben wir ebenfalls einen Blattblock erreicht, können aber nicht approximieren und müssen daher N_b auswerten.
 - (b) Sind τ und σ aber keine Blattcluster, so können wir durch folgende Zuweisung rekursiv fortfahren:

Für $\tilde{\tau}_0 \neq \tilde{\tau}_1 \in sons(\tau)$ und $\tilde{\sigma}_0 \neq \tilde{\sigma}_1 \in sons(\sigma)$ definieren wir Sohnblöcke

$$\begin{aligned} \tilde{b}_0 &:= \tilde{\tau}_0 \times \tilde{\sigma}_0 & \tilde{b}_1 &:= \tilde{\tau}_0 \times \tilde{\sigma}_1 \\ \tilde{b}_2 &:= \tilde{\tau}_1 \times \tilde{\sigma}_0 & \tilde{b}_3 &:= \tilde{\tau}_1 \times \tilde{\sigma}_1. \end{aligned}$$

Durch dieses Vorgehen konstruieren wir implizit einen streng zulässigen Blockbaum. Zulässige Blöcke werden automatisch Blattblöcke, da die Rekursion dort nicht fortgesetzt wird. Außerdem werden die Sohnblöcke immer aus genau einer Stufe des Clusterbaumes gebildet, bei welchem wir sichergestellt haben, dass er als vollständiger Binärbaum konstruiert wird. Daher ist auch sichergestellt, dass unzulässige Blattblöcke nur aus Blättern des Clusterbaumes bestehen können.

Für jeden Blattblock $b = \tau \times \sigma$ wird also

1. für alle $x \in \tau$ und $y \in \sigma$ die Funktion f ausgewertet und direkt in den `bodies` gespeichert, falls b unzulässig ist, oder
2. für alle Interpolationspunkte $\xi_{\tau,\nu}, \xi_{\tau,\mu}$, mit $\nu, \mu \in M$ der Ausdruck $P(\xi_{\tau,\nu}, \xi_{\tau,\mu})$ ausgewertet und mit den in der Vorwärtstransformation berechneten Ersatzmassen m_μ multipliziert, falls b zulässig ist.

Anschaulich werden in diesem Schritt in den zulässigen Blöcken aus den Ersatzmassen und Interpolationspunkten Quasi-Ersatzkräfte² berechnet.

²An dieser Stelle wird nur die Masse des Source-Clusters σ verrechnet. Daher handelt es sich im physikalischen Sinne noch nicht um eine Kraft.

3. Hauptteil

Listing (3.10) Durch diese rekursive Struktur wird ein impliziter Blockbaum durchlaufen, um die Matrizen S_b bzw. N_b auszuwerten.

```

1 void _eval(Cluster *ct, Cluster *cs){
2     if(admissable(ct, cs)){
3         _eval_CC(ct, cs);
4     } else {
5         if (ct->num_sons && cs->num_sons){ //both clusters have sons left:
6             _eval(ct->son[0], cs->son[0]);
7             _eval(ct->son[0], cs->son[1]);
8             _eval(ct->son[1], cs->son[0]);
9             _eval(ct->son[1], cs->son[1]);
10        } else { //no son clusters left but still
11            not admissable:
12            _eval_full(ct, cs);
13        }
14    }
15    // world.rank?:current_level?:printf("\nfirst admissable block on level
16    %d\n", first_admissable);
17    // world.rank?:current_level?:printf("split depth: %d\n", SPLIT_DEPTH);
18 }

```

3.2.4. Rückwärtstransformation

Der letzte Schritt der Berechnung ist die Auswertung der Matrizen V_τ . Diesen Schritt nennt man auch *Rückwärtstranformation*.

Auch dieser Schritt hängt wieder ausschließlich von den Clustern ab. Daher kann die Rückwärtstranformation wieder unabhängig von den Blöcken für den gesamten Clusterbaum T_Ω ausgeführt werden. Wir rufen dazu, wieder mit $root(T_\Omega)$, die Methode `backward(Cluster *c)` auf. Wie bereits bei der Vorwärtstransformation unterscheidet diese Methode, ob es sich bei dem aktuellen Cluster um ein Blatt- oder ein Nicht-Blattcluster handelt und delegiert die Arbeit entsprechend an die Methoden `_backward_Leaf(Cluster *c)` und `_backward_nonLeaf(Cluster *c)`. Anders als bei der Vorwärtstransformation müssen bei der Rückwärtstransformation die Ergebnisse des Vaterclusters für die Söhne vorliegen. Daher gibt die Methode `_backward_nonLeaf(Cluster *c)` die approximierten Quasi-Kräfte, gewichtet über die Lagrange-Polynome, an die Sohncluster weiter. Für alle Söhne $\tilde{c} \in sons(c)$ und alle $\mu \in M$ wird

$$F_{c,\tilde{c},\mu} = \sum_{v \in M} \mathcal{L}_{c,v}(\xi_{\tilde{c},\mu} F_{c,v}$$

zu den dort eventuell bereits aus der Auswertung der Kopplungsmatrizen vorhandenen Quasi-Ersatzkräfte addiert.

Schließlich werden in der Methode `_backward_Leaf(Cluster *c)` die Quasi-Ersatzkräfte

3.2. \mathcal{H}^2 -Matrixstruktur und Approximation

$F_{c,v}$, $v \in M$, über die Lagrange-Polynome gewichtet auf alle Sonnen $x \in c$ verteilt und mit deren Masse m_x multipliziert. Da auch hier bereits aus der Nahfeldauswertung Kräfte vorhanden sind, müssen diese approximierten Kräfte³ zu den vorhandenen addiert werden.

Da diese Methoden analog zu denjenigen der Vorwärtstransformation funktionieren sind diese hier nicht (oder nur im Anhang) aufgeführt.

³Durch die Multiplikation mit m_x werden die Quasi-Kräfte im physikalischen Sinne zu Kräften vervollständigt.

3. Hauptteil

3.3. Parallelisierung

Im vorherigen Kapitel haben wir die Berechnung der Gravitationskräfte durch Interpolation approximiert. Dadurch konnten wir die Technik \mathcal{H}^2 -Matrizen nutzen um den Rechenaufwand des Algorithmus zu beschleunigen. Um die absolute Laufzeit aber noch weiter zu reduzieren sind wir an einer parallel arbeitende Variante dieses Algorithmus interessiert. In diesem Kapitel wird ein Ansatz vorgestellt.

Ziel ist es, zunächst einen einfachen Algorithmus zu entwerfen. Daher beschränken wir uns auf Parallelisierung nach dem Message-Passing-Modell unter Verwendung von MPI. Wir können also $p \in \mathbb{N}$ Prozesse starten. Jeder von diesen hat eine eindeutige $id \in \underline{p-1}_0$ und seinen privaten Speicherbereich. Insbesondere ist in diesem Modell Shared-Memory ausgeschlossen. Außerdem können die Prozesse miteinander kommunizieren um Daten auszutauschen. Die Menge der Prozesse wird im Folgenden mit \mathfrak{P} bezeichnet.

3.3.1. Arbeitsverteilung

Damit wir von parallel arbeitenden Prozessen profitieren können, muss die Arbeit möglichst gleichmäßig auf diese Prozesse verteilt werden. Wir folgen, in modifizierter Variante, dem von Börm und Bendoraityte [2008] vorgestellten Cluster-zentrierten Ansatz. Dieser basiert auf dem Grundgedanken, dass für Vorwärts- und Rückwärtstransformation ausschließlich Daten zwischen Vater- und Sohnclustern ausgetauscht werden müssen. Um möglichst viel Kommunikation zu sparen, ist es daher besonders effektiv, wenn möglichst viele Söhne durch den selben Prozess verarbeitet werden, wie der Vater. Besonders einfach wird das Verteilen der Cluster und das Loadbalancing, wenn wir p als Zweierpotenz $p = 2^q$ wählen. Da dann die Anzahl von Clustern in $T_\Omega^{(q)}$ gerade p entspricht, können wir diese Ebene, zuzüglich der Sohncluster, optimal auf die Prozesse verteilen. Wir gehen im Folgenden immer von einer so gewählten Anzahl Prozesse aus.

Um diesen Ansatz auf den Algorithmus zu übertragen, wird in der in Listing 3.5 aufgeführten `init`-Methode die globale Variable `SPLIT_DEPTH = $\log_2(p) = q$` gesetzt. Außerdem bekommt die Datenstruktur `Cluster` einen weiteren Member: `int active`. In diesem wird die `id` des für dieses Cluster zuständigen Prozesses gespeichert.

Zudem gibt es aber noch Cluster auf den Ebenen $T_\Omega^{<q} := T_\Omega^{(0)}, \dots, T_\Omega^{(q-1)}$. Um ein Cluster $C \in T_\Omega^{<q}$ zu klassifizieren nutzt jeder Prozess $P \in \mathfrak{P}$ mit id_P zwei Konstanten. Gilt für alle Nachfahren $\tilde{C} \in sons * (C)$ $C.active \neq id_P$, wird der Member `C.active` auf die `int`-Konstante `inactive` gesetzt. Gibt es aber Nachfahren $\tilde{C} \in sons * (C)$ mit $C.active = id_P$, so wird der Member `C.active` statt dessen auf die `int`-Konstante `semi_active` gesetzt. Inaktive Cluster werden während der Vorwärts- und Rückwärtstransformation nicht weiter beachtet.

Um diese Einteilung vorzunehmen, wird vorrangig der Code der Methode `_setup(...)` (vgl. Listing 3.4) angepasst. Zudem bekommt der Konstruktor `_new_bound_Cluster` einen neuen Parameter um den Member `active` aller Cluster zu initialisieren. Für die Kon-

Listing (3.11) Für die Verteilung der Cluster auf die Prozesse angepasste `_setup`-Methode.

```

1 void _setup(Cluster *c, int depth){
2     if(depth == SPLIT_DEPTH){
3         c->active = ++split_count;
4     }
5
6     if(depth < MAX_DEPTH){
7         _setup_nonLeafCluster(c, depth);
8     }
9
10    if(c->active == semi_active){
11        if(c->son[0]->active == inactive && c->son[1]->active == inactive){
12            c->active = inactive;
13        } else{
14            if(c->son[0]->active != world.rank && c->son[0]->active !=
                semi_active &&
15            c->son[1]->active != world.rank && c->son[1]->active != semi_active) {
16                c->active = inactive;
17            }
18        }
19    }
20 }

```

struktur der Wurzel ist dieser auf `semi_active` gesetzt. Danach wird durch die Methode `_setup_nonLeafCluster(...)` immer der Wert des Vaters an die Söhne weitergegeben. Der angepasste Code der `_setup`-Methode ist in Listing 3.11 aufgeführt.

Zunächst wird überprüft, ob die `SPLIT_DEPTH` erreicht wurde. Ist dies der Fall wird der Member `active` auf die `id` des zuständigen Prozesses gesetzt. Dies geschieht einfach durch abzählen. Als nächstes folgt der bereits aus Listing 3.4 bekannte Aufruf, der das Teilen in Sohncluster, das Sortieren der `bodies` und die Rekursion beinhaltet. Der letzte Teil wird beim Abbau der Rekursion durchgeführt. Hier wird für eben die Cluster in $T_{\Omega}^{(<q)}$ überprüft ob diese auf `semi-active` bleiben, oder, falls kein Nachfahre aktiv ist, der Member `active` auf `inactive` gesetzt wird.

Die Idee der semi-aktiven Cluster beruht darauf, die Gestalt der Spalten- bzw. Zeilenmatrizen V_{τ} und W_{σ} auszunutzen. Diese werden für Nicht-Blattcluster durch die Transformmatrizen aus den Söhnen konstruiert (vgl. Abschnitt 3.2). Während der Vorwärtstransformation werden für ein solches Cluster $C_{semi} \in T_{\Omega}^{(<q)}$ die Ersatzmassen nur aus (semi-)aktiven Söhnen errechnet. Da diese Cluster für mehrere Prozesse als semi-aktiv gekennzeichnet sind, werden global betrachtet alle Söhne in der Vorwärtstransformation beachtet. Ist eines dieser Cluster Bestandteil eines zulässigen Blockes $b_0 = C_{semi} \times C$ oder $b_1 = C \times C_{semi}$, so

3. Hauptteil

können die Prozesse ihre Berechnungen untereinander austauschen. Somit werden die Definitionen der Matrizen V_τ und W_σ aus Gleichung 3.2 beziehungsweise Gleichung 3.3 lediglich auf mehrere Prozesse verteilt und die Summation bei Bedarf aus den Teilergebnissen gebildet.

Unter der Voraussetzung, dass alle notwendigen Information für jeden Prozess vorhanden sind, ist die einzige Anpassung der Auswertung der Kopplungsmatrizen, dass sich die Auswertung auf (semi-)aktive Targetcluster beschränkt. Auch die Rückwärtstransformation braucht sich lediglich auf (semi-)aktive Cluster beschränken.

Letztlich verteilt sich die Arbeit durch diesen Ansatz sehr natürlich auf die Prozesse. In Abbildung 3.12 ist dies veranschaulicht. Hier ist dies für einen Prozess P mit $id_P = 1$ und $p = 4$ dargestellt, welche Zuständigkeiten sich für die Blöcke des Blockbaumes aus der Aufteilung der Targetcluster ergeben.

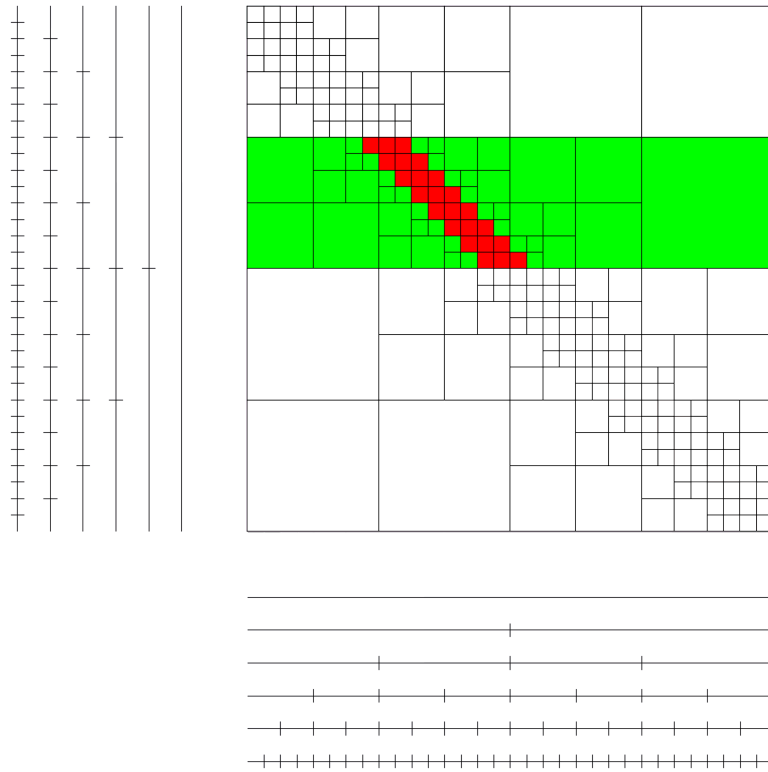


Abbildung 3.12. Für einen Prozess P mit $id_P = 1$ und die Anzahl Prozesse $p = 4$ ist hier die Zuständigkeit des Prozesses P für Blöcke eines Blockbaumes farbig dargestellt.

3.3.2. Datenverteilung

Eine weitere grundlegenden Frage ist, wo welche Daten vorhanden sind. Ein Möglicher Ansatz wäre, dass jeder Prozess eine Kopie aller Daten hat. Doch selbst wenn das Gravitationsproblem kein all zu speicherhungriges ist, würde der Hauptspeicher bei 32 Prozessen auf einem Knoten⁴ sehr schnell knapp werden. Außerdem sei an dieser Stelle an die weitere Skalierbarkeit des Problems erinnert (vgl. Abschnitt 2.2). Daher müssen die Daten über die Prozesse verteilt werden.

Da wir im vorigen Kapitel bereits beschrieben haben, wie die Arbeit effektiv verteilt werden kann, ist es nur naheliegend die Daten auf die gleiche Weise zu verteilen. Jeder Prozess soll also genau die, zu seinen aktiven Clustern gehörenden, Teile der *bodies*-Struktur. Dies entspricht den hellblau gekennzeichneten Teilen des Clusterbaumes links in Abbildung 3.12.

Weder bei reellen Daten, noch bei unseren zufällig generierten Testdaten, können wir davon ausgehen, dass diese nach Clustern sortiert vorliegen. Da ferner bei reellen Daten davon auszugehen ist, dass diese aus Platzgründen auch verteilt eingelesen werden müssen, generieren in unserem Programm auch alle Prozesse jeweils zufällige Testdaten. Es wäre möglich die Daten so verteilt zu belassen, wie sie generiert beziehungsweise eingelesen wurden. Jedoch wäre dann während der Vorwärts- und Rückwärtstransformation eine große Menge an Kommunikation notwendig um diese entsprechend der Arbeitsvertei-

Listing (3.12) Ausschnitt aus der parallelen Konstruktion des Clusterbaumes.

```

1 Cluster *constructClusterTree(bodies *b){
2   [...]
3   //////////////////////////////////////
4   // Sort the bodies; first locally, then globally.
5   preSort(root, 0);
6   new_bs = new_bodies(new_n);
7   alltoall_bodies(my_bs, send_count, send_displ,
8     new_bs, recv_count, recv_displ);
9   del_bodies(my_bs);
10  my_bs = new_bs;
11  //reset roots bodies*
12  root->bodies = my_bs;
13  root->n      = my_bs->n;
14
15  //clean up
16  [...]
17 }
```

⁴Dies entspricht den Spezifikationen der meisten Knoten des RZ-Clusters der Uni Kiel.

3. Hauptteil

Listing (3.13) Diese Methode sortiert die lokalen bodies nach Prozesszugehörigkeit.

```
1 void preSort(Cluster *c, int depth){
2   if(depth == SPLIT_DEPTH){
3     c->active = ++split_count;
4
5     //get count and start index of data to send to process #split_count
6     send_count[split_count] = c->n;
7     send_displ[split_count] = split_count == 0 ? 0 :
8       send_displ[split_count - 1] + send_count[split_count - 1];
9
10    //if the current knot is the active one: gather counts and displs from
11    //the other knots:
12    MPI_Gather(&send_count[split_count], 1, MPI_INT, recv_count, 1,
13      MPI_INT, split_count, MPI_COMM_WORLD);
14    if(world.rank == c->active){
15      new_n = 0;
16      for(int i = 0; i < world.size; i++){
17        recv_displ[i] = new_n;
18        new_n += recv_count[i];
19      }
20    }
21    [...] // Sortierung und rekursiver Aufruf
22 }
```

lung durchzuführen. Daher ist es sinnvoll diese Daten einmal nach Prozesszugehörigkeit auszutauschen.

Diese Kommunikation wird während der Konstruktion des Clusterbaumes vorgenommen. Der zugehörige Quellcode ist in Listing 3.12 und Listing 3.13 aufgeführt.

Evaluierung

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Fazit und Ausblick

5.1. Fazit

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

5.2. Ausblick

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Literaturverzeichnis

- [Akinci 2012] Ö. Akinci. MPI - Point to Point Communication. Juni 2012. URL: http://training.uhem.itu.edu.tr/docs/14haziranmpi/01.1_14Haz2012_MPI_P2P_III_Block-NonBlock-Comm_e2.pdf. (Siehe Seiten 26, 27)
- [AspectJ] AspectJ language extension. Eclipse Foundation. URL: <http://www.eclipse.org/aspectj/>. (Siehe Seite 3)
- [Barbic 2006] J. Barbic. Multi-core architectures. Mai 2006. URL: <https://www.cs.cmu.edu/~fp/courses/15213-s06/lectures/27-multicore.pdf>. (Siehe Seite 19)
- [BIPM 1975] BIPM. Resolution 2 of the 15th CGPM. 1975. URL: <https://www.bipm.org/en/CGPM/db/15/2/>. (Siehe Seite 18)
- [Börm 2007] S. Börm. Data-sparse approximation of non-local operators by \mathcal{H}^2 -matrices. *Linear Algebra and its Applications* 422 (2007), Seiten 380–403. (Siehe Seite 17)
- [Börm 2016] S. Börm. Wissenschaftliches Rechnen. Feb. 2016. URL: <https://www.math.uni-kiel.de/scicom/de/lehre/wissenschaftliches-rechnen>. (Siehe Seite 2)
- [Börm 2017] S. Börm. Hochleistungsrechnen. Jan. 2017. URL: <https://www.math.uni-kiel.de/scicom/de/lehre/hpc>. (Siehe Seiten 18, 19 und 21)
- [Börm 2018] S. Börm. Numerik nicht-lokaler Operatoren. Feb. 2018. URL: <https://www.math.uni-kiel.de/scicom/de/lehre/nichtlokal>. (Siehe Seiten 6, 9, 10, 12–17)
- [Börm und Bendoraityte 2008] S. Börm und J. Bendoraityte. Distributed \mathcal{H}^2 -matrices for non-local operators. *Comput Visual Sci* 11 (2008), Seiten 237–249. (Siehe Seite 48)
- [Dongarra u. a. 1993] J. J. Dongarra, R. Hempel, A. J. Hey und D. W. Walker. A proposal for a user-level, message passing interface in a distributed memory environment. Technischer Bericht. Oak Ridge National Lab., TN (United States), 1993. (Siehe Seite 24)
- [Flynn 1972] M. J. Flynn. Some computer organizations and their effectiveness. *IEEE transactions on computers* 100.9 (1972), Seiten 948–960. (Siehe Seite 19)
- [Foster 1995] I. Foster. 1.3 A Parallel Programming Model. 1995. URL: <http://www.mcs.anl.gov/~itf/dbpp/text/node9.html>. (Siehe Seite 23)
- [Frey und Hasselbring 2011] S. Frey und W. Hasselbring. The CloudMIG Approach: Model-Based Migration of Software Systems to Cloud-Optimized Applications. *International Journal on Advances in Software* 4.3 (Apr. 2011), Seiten 342–353. (Siehe Seite 3)
- [Grasedyck 2001] L. Grasedyck. Theorie und Anwendungen hierarchischer Matrizen. Dissertation. Christian-Albrechts Universität Kiel, 2001. (Siehe Seiten 5, 6, 9, 11, 12 und 14)

Literaturverzeichnis

- [Hackbusch 1999] W. Hackbusch. A Sparse Matrix Arithmetic Based on \mathcal{H} -Matrices. Part I: Introduction to \mathcal{H} -Matrices. *Computing* 62.2 (1999), Seiten 89–108. (Siehe Seite 5)
- [Hackbusch und Börm 2002] W. Hackbusch und S. Börm. \mathcal{H}^2 -matrix approximation of integral operators by interpolation. *Applied Numerical Mathematics* 43 (2002), Seiten 129–143. (Siehe Seiten 9 und 15)
- [IBM 2017] IBM. The message passing model. 2017. URL: https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/en/SSF4ZA_9.1.3/mpi_guide/message-passing-model.html. (Siehe Seite 23)
- [Kendall 2017] W. Kendall. A Comprehensive MPI Tutorial Resource. 2017. URL: <http://mpitutorial.com/>. (Siehe Seiten 24, 28, 29)
- [Körbler 2007] S. Körbler. Parallel Computing-Systemarchitekturen und Methoden der Programmierung (2007). (Siehe Seite 21)
- [Mohr u. a. 2016] P. J. Mohr, D. B. Newell und B. N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 45.4 (2016), Seite 043102. (Siehe Seite 1)
- [MPI-Forum 2015] MPI-Forum. MPI: A Message-Passing Interface Standard Version 3.1. Technischer Bericht. Message Passing Interface Forum, Juni 2015. (Siehe Seiten 24–30)
- [Newton 1833] I. Newton. Philosophiae naturalis principia mathematica. Band 1. G. Brookman, 1833. (Siehe Seite 1)
- [Rohr u. a. 2008] M. Rohr, A. van Hoorn, J. Matevska, N. Sommer, L. Stoeve, S. Giesecke und W. Hasselbring. Kieker: Continuous Monitoring and on demand Visualization of Java Software Behavior. In: *Proceedings of the IASTED International Conference on Software Engineering 2008 (SE'08)*. ACTA Press, Feb. 2008, Seiten 80–85. (Siehe Seite 3)
- [Schwarz 2011] S. Schwarz. Intro to MPI. Feb. 2011. URL: http://www.dartmouth.edu/~rc/classes/intro_mpi/print_pages.shtml. (Siehe Seite 31)
- [Shaw 2003] M. Shaw. Writing good software engineering research papers: minitutorial. In: *Proceedings of the 25th International Conference on Software Engineering (ICSE 2003)*. IEEE Computer Society, Mai 2003, Seiten 726–736. (Siehe Seite 3)
- [Stukeley 1936] W. Stukeley. Memoirs of Sir Isaac Newton's Life. Taylor und Francis, 1936. (Siehe Seite 1)
- [Van Engelen 2017] R. van Engelen. Parallel Programming Models. 2017. URL: <https://www.cs.fsu.edu/~engelen/courses/HPC/Models.pdf>. (Siehe Seite 23)
- [Van Hoorn u. a. 2009] A. van Hoorn, M. Rohr, W. Hasselbring, J. Waller, J. Ehlers, S. Frey und D. Kieselhorst. Continuous Monitoring of Software Services: Design and Application of the Kieker Framework. Technischer Bericht TR-0921. Department of Computer Science, Kiel University, Germany, Nov. 2009. (Siehe Seite 3)

- [Van Hoorn u. a. 2012] A. van Hoorn, J. Waller und W. Hasselbring. Kieker: A Framework for Application Performance Monitoring and Dynamic Software Analysis. In: *Proceedings of the 3rd ACM/SPEC International Conference on Performance Engineering (ICPE 2012)*. ACM, Apr. 2012, Seiten 247–248. (Siehe Seite 3)
- [Walker 1992] D. W. Walker. Standards for message-passing in a distributed memory environment. Technischer Bericht. Oak Ridge National Lab., TN (United States), 1992. (Siehe Seite 24)
- [Wehner u. a. 2008] M. Wehner, L. Oliker und J. Shalf. Towards ultra-high resolution models of climate and weather. *The International Journal of High Performance Computing Applications* 22.2 (2008), Seiten 149–165. (Siehe Seite 18)
- [World Book at NASA] World Book at NASA. Nov. 2007. URL: https://web.archive.org/web/20090412172631/http://mynasa.nasa.gov/worldbook/galaxy_worldbook.html. (Siehe Seite 2)