

## Kapitel 3

# Effizienzvergleich

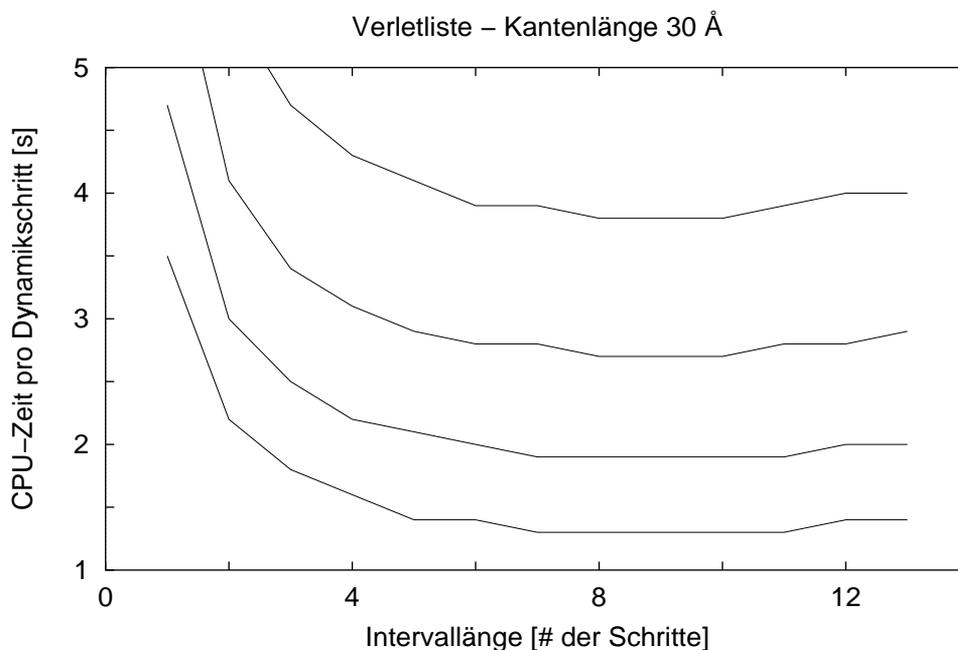
In diesem Kapitel stelle ich die Vor- und Nachteile der Verlet- und der Zellenliste genauer dar. Dazu habe ich den Speicherplatzbedarf und die benötigte Rechenzeit bei verschiedenen Molekulardynamikläufen (MD-Läufe) von Wassermolekülen in Würfeln mit periodischen Randbedingungen bestimmt. Die Rechnungen habe ich auf der SGI-Challenge der Zedat mit acht MIPS R8000 Prozessoren mit einer Takt rate von 75 MHz durchgeführt. Es liefen während meiner Rechnungen zwischen sechs und zehn andere CPU- und speicheraufwendige Prozesse an diesen Rechnern, die aber auf die Messung der aufgewendeten CPU-Zeit nur einen geringen Einfluß hatten. Die Bestimmung der Wechselwirkungspaare für die nichtbindenden Energieterme über die Verletliste wird mit dem CHARMM-Programm verwirklicht. Die Zellenliste habe ich weiterentwickelt und als Bestandteil des in unserer Arbeitsgruppe entwickelten MD-Programmpakets in C programmiert, das an CHARMM angelehnt ist. Zur Untersuchung der Einflüsse der Atomzahl und des Abschneideradius  $r_{off}$  habe ich die MD-Läufe mit Würfeln der Kantenlängen 30 Å, 40 Å und 50 Å – dies entspricht 904, 2014 und 4153 Wassermolekülen in den Würfeln – und vier bzw. fünf verschiedenen Radien  $r_{off}$  energieminiert, dann über einen Zeitraum von 20 ps von 0 K auf 300 K aufgeheizt und dann über 80 ps equilibriert, um die MD-Läufe unter für Computersimulationen der Molekulardynamik typischen Bedingungen durchzuführen.

### 3.1 Verletliste

Bei der Bestimmung der Wechselwirkungspartner für die nichtbindenden Energieterme über die Verletliste ist für die kürzeste Rechenzeit eine günstige Kombination aus einem möglichst seltenen Auffrischen der Liste, d. h. große Zeitintervalle  $t_{update}$  und einem möglichst kleinen Reservoir zu finden. Das bei MD-Simulationen übliche Intervall  $N_{update}$  beträgt fünf bis zehn Zeitschritte. Ich habe hier ein Auffrischen der Verletliste von ein bis dreizehn Zeitschritte durchprobiert. Zur Bestimmung der korrekten Größe des Reservoirs für jedes vorgegebene Intervall habe ich die Energie des molekularen Systems für das kleine System (30 Å Box) und einem Radius  $r_{off}$  von 12 Å nach etwa tausend Zeitschritten mit der Energie desselben molekularen Systems nach der gleichen Anzahl von Schritten bei einem Intervall  $N_{update}$  von einem Schritt und einem Reservoir von 0.7 Å, d. h. einem Gesamtradius von 12.7 Å verglichen. Die switch-Funktion (siehe Gleichung (2.22)) wird gruppenweise angewandt, d. h. es werden jeweils mehrere Atome (z. B. einer funktionellen Gruppe) zusammengefaßt, so daß deren Gesamtladung nahe Null liegt. Die Wassermoleküle bilden dabei jeweils eine eigene Gruppe. Dadurch ist allerdings auch bei einem Intervall  $N_{update}$  von einem Schritt ein kleines Reservoir notwendig. Testläufe mit tausend Zeitschritten haben mit dem so bestimmten Reservoir geringe Abweichungen im Energieverlauf ergeben, die unter einem Prozent liegen, und daher von mir als akzeptabel angenommen werden. Dies muß allerdings immer als mögliche Fehlerquelle bei MD-Läufen mit CHARMM beachtet werden. Testläufe mit den größeren

Systemen und anderen Abschneideradien  $r_{off}$  haben ähnliche Abweichungen ergeben. Diese bestehenden geringen Abweichungen sind allerdings schon so hoch, daß es wahrscheinlich innerhalb der tausend Zeitschritte zu Ausfällen in der Verletliste gekommen ist, da Rundungsunterschiede durch eine andere Reihenfolge der arithmetischen Operationen zur Berechnung der einzelnen Energieterme noch weit geringer liegen müßten.

Bei dem CHARMM-Dynamik-Programmpaket gibt es Kontrollmechanismen, die die Konsistenz der verschiedenen Zeitintervalle und Auffrischfrequenzen überprüfen und unter Umständen korrigieren. Dies wird notwendig, wenn die Gesamtzahl der Schritte eines MD-Laufes kein ganzzahliges Vielfaches der Schritte zwischen den Updates  $N_{update}$  ist. Dadurch habe ich nicht für alle Intervalle  $N_{update}$  exakt die gleichen Schrittzahlen erreichen können, da in der Kontrolle nur jeweils die ganzzahligen Vielfachen der Schrittzahl  $N_{update}$  als Schrittzahl für die Simulationslänge zugelassen werden. In Tabelle 1 im Anhang C sind die Schrittzahlen  $N_{update}$  und die Größen der sich daraus ergebenden Reservoirgrößen (Res.) und Simulationsschrittzahlen für die MD-Läufe angegeben.



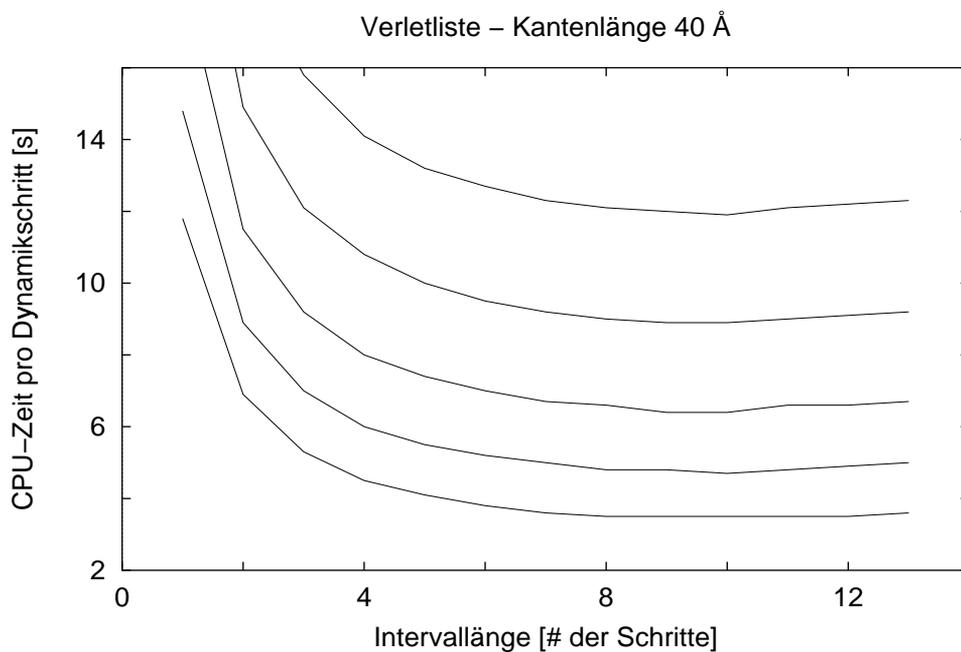
**Abb. 3.1:** Rechenzeiten pro Dynamikschritt in Sekunden aufgetragen über den Intervalllängen  $N_{update}$  für das Auffrischen der Verletliste bei einem System mit 904 Wassermolekülen in einem Würfel der Kantenlänge von 30 Å mit periodischen Randbedingungen bei verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 14 Å (oberster Graph), die in Abständen von 2 Å variiert wurden. (Die Größe der Reservoirs ist der Tabelle 1 im Anhang C zu entnehmen.)

Werden die Rechenzeiten über der Anzahl der Dynamikschritte aufgetragen, so ergeben die Meßpunkte eine Gerade, deren Steigung  $m$  die mittlere Rechenzeit pro Dynamikschritt angibt und deren Ordinatenabschnitt  $y_0$  die Rechenzeit für die Initialisierung – wie z. B. das Einlesen der Parameter und Koordinaten der Atome –. Die Werte für die Steigung  $m$  und den Ordinatenabschnitt  $y_0$  sind mit der Methode der

kleinsten Quadrate aus den  $N$  Meßpunkten  $(x_i, y_i)$  bestimmt:

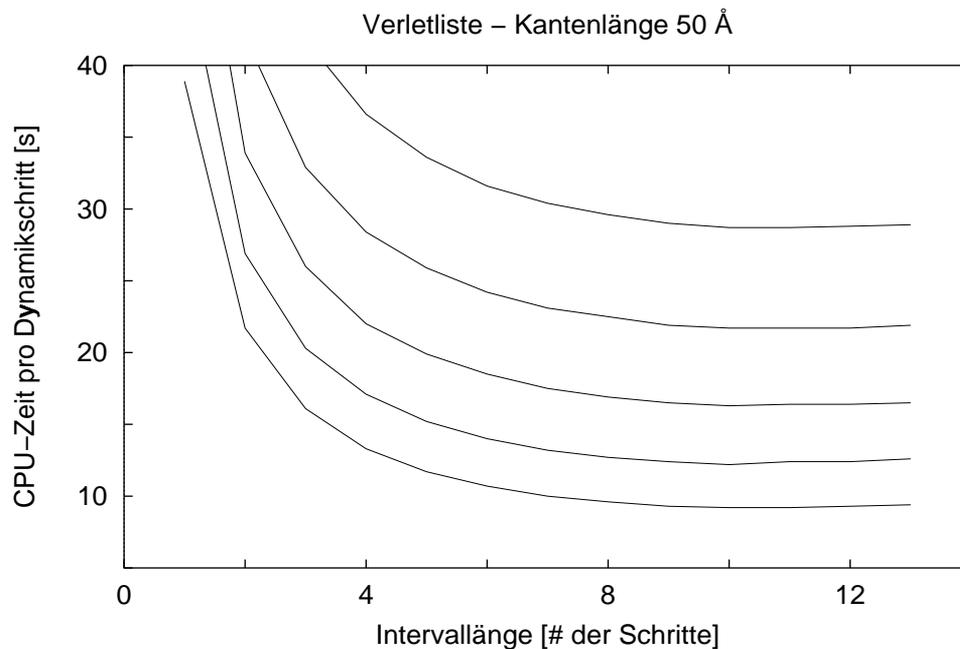
$$m = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i y_i - \sum_{i=1}^N y_i \sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \quad (3.1)$$

$$y_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i=1}^N x_i y_i \sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \quad (3.2)$$



**Abb. 3.2:** Rechenzeiten pro Dynamikschritt in Sekunden aufgetragen über den Intervalllängen  $N_{update}$  für das Auffrischen der Verletliste bei einem System mit 2014 Wassermolekülen in einem Würfel der Kantenlänge von 40 Å mit periodischen Randbedingungen bei verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 16 Å (oberster Graph), die in Abständen von 2 Å variiert wurden.

In den Abbildungen 3.1, 3.2 und 3.3 sind die Rechenzeiten pro Dynamikschritt über den Längen der Intervalllängen  $N_{update}$  aufgetragen. Es ist gut zu erkennen, wie stark der Einfluß des häufigen Erstellens der Verletliste auf die benötigte Rechenzeit ist. Jenseits einer Intervalllänge von zehn Schritten fängt langsam ein Anstieg der Rechenzeit an, da dann das Reservoir so groß gewählt werden muß, daß von zu vielen Atompaaaren der errechnete Abstand oberhalb der Abschneideradien  $r_{off}$  liegt.

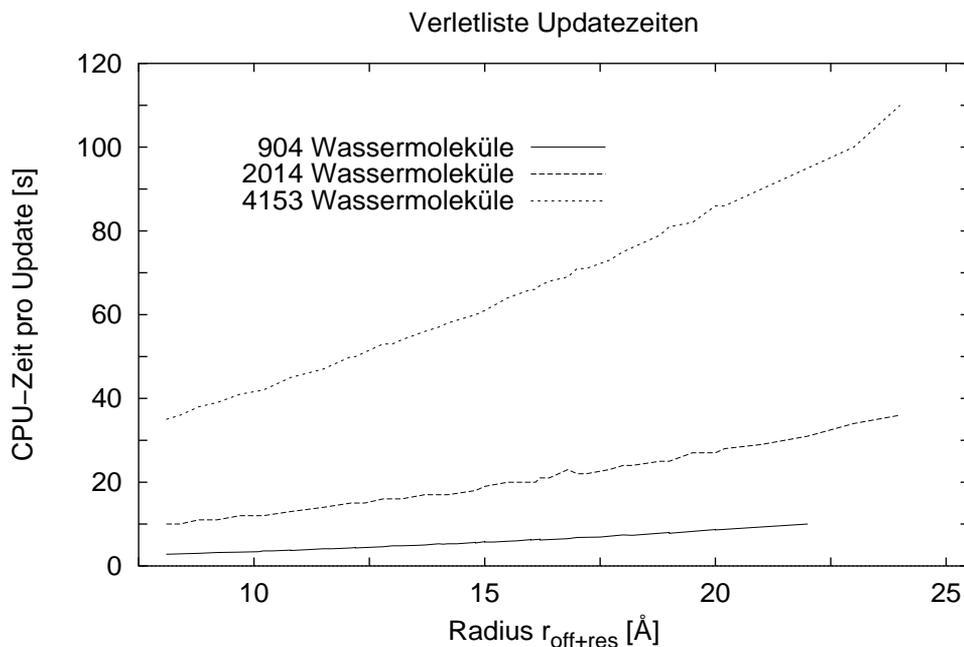


**Abb. 3.3:** Rechenzeiten pro Dynamikschritt in Sekunden aufgetragen über den Intervalllängen  $N_{update}$  für das Auffrischen der Verletliste bei einem System mit 4153 Wassermolekülen in einem Würfel der Kantenlänge von 50 Å mit periodischen Randbedingungen bei verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 16 Å (oberster Graph), die in Abständen von 2 Å variiert wurden.

Diese Rechenzeiten für den Gesamtaufwand eines Dynamikschrittes können auf drei Aufgabenbereiche verteilt werden:

1. Aufstellen der Verletliste
2. Energieberechnung mit deren Ableitung
3. Berechnung des Dynamikschrittes für jedes Atom und weitere programminterne Dynamikverwaltung, wie z. B. Neuordnung der Atomkoordinaten

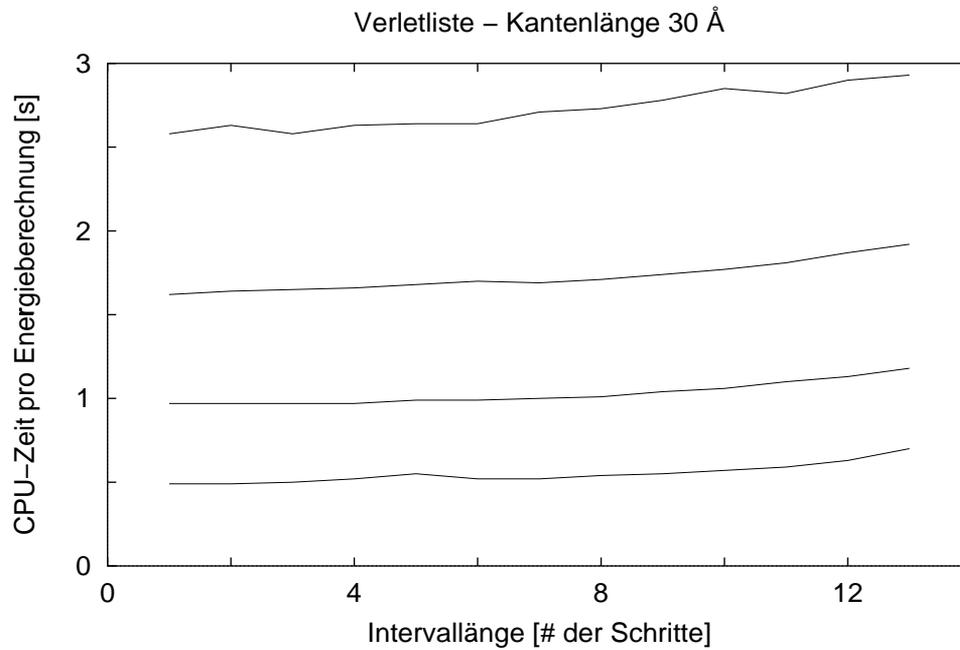
Die Rechenzeiten für den dritten Teil sind weder von der Wahl der Länge des Intervalls  $N_{update}$  noch vom Abschneideradius  $r_{off}$  abhängig, sondern sind für jedes der drei Systemgrößen jeweils eine minimale Zeitkonstante, die im wesentlichen auch unabhängig von der Wahl der Energiefunktion und der Nachbarliste ist. Die weitere Untersuchung beschränkt sich deshalb auf die ersten beiden Anteile. Die Rechenzeit für das Aufstellen der Verletliste ist nur von der Systemgröße und dem Wert des Radius  $r_{off+res}$  abhängig, da für die Atompaare innerhalb dieses Gesamtbereichs von Abschneideradius und Reservoir noch einiger Verwaltungsaufwand als Vorbereitung für die Berechnung der Energiefunktion betrieben werden muß. So wird z. B. nicht für jedes Atompaar, für das der Abstand geringer als der Abschneideradius  $r_{off}$  ist, auch die Coulombenergie bestimmt.



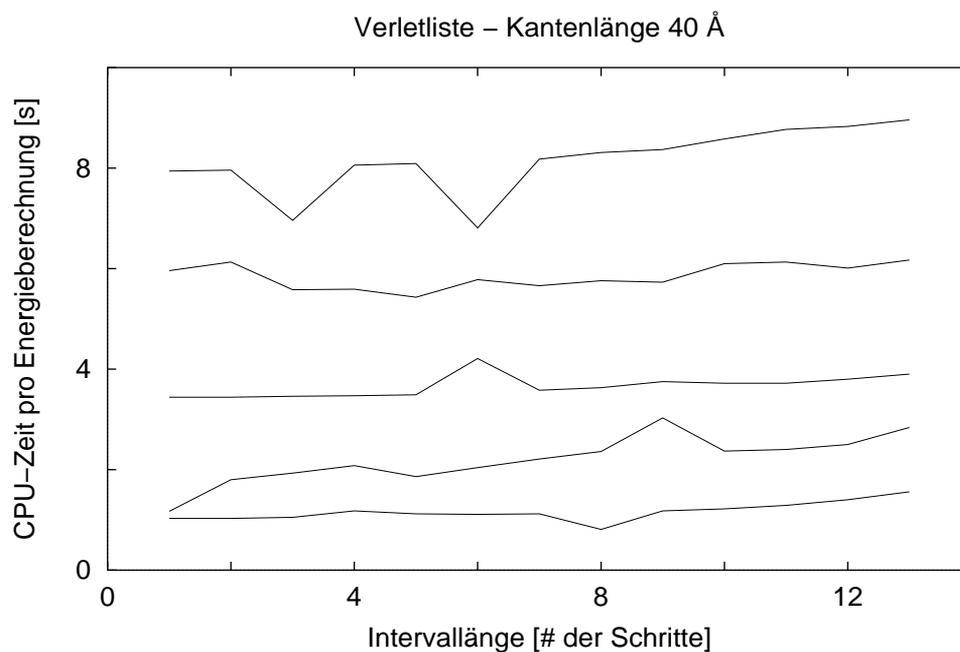
**Abb. 3.4:** Rechenzeiten für jedes Aufstellen der Verletliste in Sekunden aufgetragen über dem Abschneideradius einschließlich Reservoir für die drei Systemgrößen.

In Abbildung 3.4 sind die Rechenzeiten für das Aufstellen der Verletliste über dem Radius  $r_{off+res}$  aufgetragen. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Rechenzeiten durch den höheren Verwaltungsaufwand nach der Bestimmung der Abstände der Atompaaire mit dem Radius  $r_{off+res}$  ansteigt. Dies wird allerdings zugunsten größerer Reservoirs ausgeglichen, da die Verletliste nicht bei jedem Dynamikschritt neu aufgestellt werden muß.

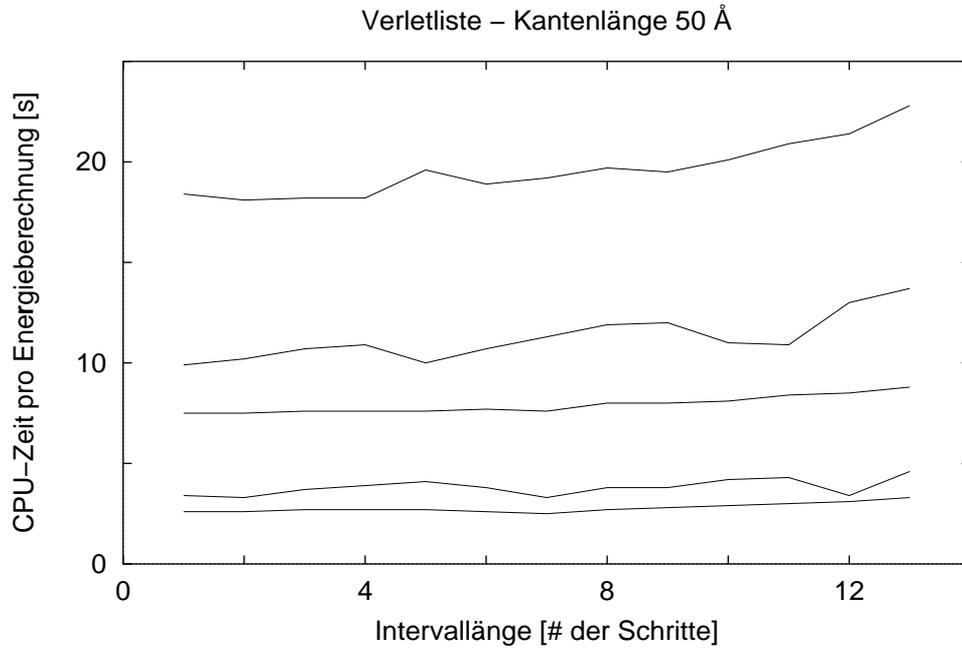
Die Rechenzeit, die für die Bestimmung der Energie benötigt wird, hängt von der Größe des Reservoirs und dem Abschneideradius ab, da für alle Atompaaire innerhalb des Radius  $r_{off+res}$  der Abstand und für alle Atompaaire innerhalb des Radius  $r_{off}$  der Wert der nichtbindenden Wechselwirkungsenergien bestimmt werden muß.



**Abb. 3.5:** Rechenzeiten pro Energieberechnung in Sekunden aufgetragen über den Intervallängen  $N_{update}$  für das Auffrischen der Verletliste bei einem System mit 904 Wassermolekülen in einem Würfel der Kantenlänge von 30 Å mit periodischen Randbedingungen bei verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 14 Å (oberster Graph) in Abständen von 2 Å.



**Abb. 3.6:** Rechenzeiten pro Energieberechnung in Sekunden aufgetragen über den Intervallängen  $N_{update}$  für das Auffrischen der Verletliste bei einem System mit 2014 Wassermolekülen in einem Würfel der Kantenlänge von 40 Å mit periodischen Randbedingungen bei verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 16 Å (oberster Graph) in Abständen von 2 Å.



**Abb. 3.7:** Rechenzeiten pro Energieberechnung in Sekunden aufgetragen über den Intervallängen  $N_{update}$  für das Auffrischen der Verletliste bei einem System mit 4153 Wassermolekülen in einem Würfel der Kantenlänge von 50 Å mit periodischen Randbedingungen bei verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 16 Å (oberster Graph) in Abständen von 2 Å.

Die Abbildungen 3.5 bis 3.7 zeigen die Rechenzeiten für die Bestimmung der Energie. Die Einbrüche bzw. Spitzen in den Verläufen der Graphen sind wahrscheinlich durch günstigeres bzw. ungünstigeres Ausnutzen des Speicherplatzes entstanden. Abgesehen davon zeigen die Graphen ein leichtes Ansteigen mit der Erhöhung der Reservoirs – durch die Zunahme an Abständen, die zu berechnen sind – und eine größere Zunahme der Rechenzeit mit größeren Abschneideradien, da hier der Hauptaufwand in der Berechnung der nichtbindenden Energieterme mit der hohen Zahl an Rechenschritten steigt.

## 3.2 Zellenliste

Die Rechenzeitdauer bei der Berechnung der nichtbindenden Wechselwirkungsenergieterme hängt hier von der Einteilung in Zellen ab. Für die Längenverhältnisse von Kantenlänge des Würfels  $a_W$  und Abschneideradius  $r_{off}$  gilt:

$$2r_{off} < a_W, \quad (3.3)$$

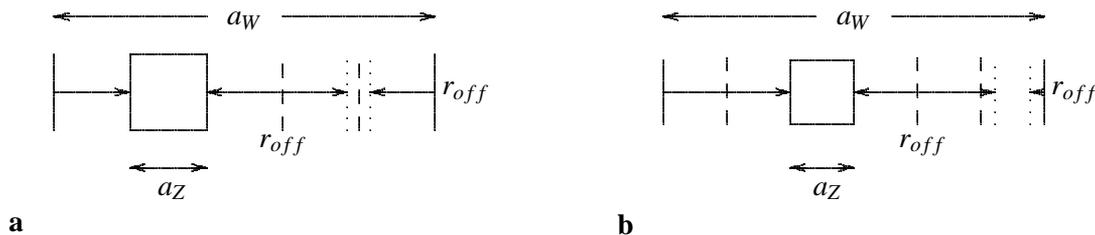
damit kein Atom ein anderes Atom sowohl direkt als auch über die periodischen Randbedingungen sieht. Die Kantenlänge des Würfels wird in  $N_Z$  Teile eingeteilt, damit ergibt sich für die Kantenlänge einer einzelnen Zelle  $a_Z = \frac{a_W}{N_Z}$ . Um die Bestimmung der Wechselwirkungspartner auf die Zellenpaare zu beschränken, habe ich die Kantenlänge  $a_Z$  einer Zelle etwas eingeschränkt. Es gilt für ungerade Zellenzahlen:

$$2r_{off} + a_Z < a_W \quad (3.4)$$

pro Würfelkante bzw.

$$2(r_{off} + a_Z) < a_W \quad (3.5)$$

für gerade Zellenzahl pro Kante. Diese größere Einschränkung bei gerader Zellenzahl greift aber nur bei dem kleinen System mit 30 Å Kantenlänge und hat auf die Bestimmung der Rechenzeiten der beiden größeren Systeme keinen Einfluß. Mit diesen Einschränkungen erhalte ich bei allen Zellenpaaren der Zellenliste eine eindeutige Zuordnung, in welcher Richtung Atompaare in denselben Zellen miteinander wechselwirken, ob direkt oder über die periodischen Randbedingungen, wie in Abbildung 3.8 verdeutlicht.



**Abb. 3.8:** Skizze zur Zuordnung der Wechselwirkung auf direktem Weg oder über die periodischen Randbedingungen bei ungerader Zellenzahl  $N_Z = 5$  (a) und bei gerader Zellenzahl  $N_Z = 6$  (b). Dabei sind jeweils die rechten und linken Ränder zu identifizieren, so daß praktisch ein Zylinder gebildet und  $r_{off}$  wie abgebildet über den Rand fortgesetzt wird.

In Abbildung 3.8 sind in zwei Beispielen die Unterschiede bei gerader und ungerader Zellenzahl dargestellt. In Teil (a) ist eine Einteilung einer Kante des Würfels in fünf Zellen gewählt. Diese Wahl ist bei dem vorgegebenen Abschneideradius  $r_{off}$  fein genug, da die beiden Bereiche, die vom Abschneideradius abgedeckt werden, durch eine Zelleinteilung voneinander getrennt sind. In Teil (b) ist eine feinere Einteilung mit sechs Zellen pro Würfelkante gewählt. Trotz der engeren Zelleinteilung gibt es hier ein Zellenpaar, in dem ein Teil der Atome direkt und ein anderer Teil der Atome über die periodischen Randbedingungen wechselwirken können, da die Gleichung (3.5) nicht erfüllt ist und dadurch keine Trennung vorliegt.

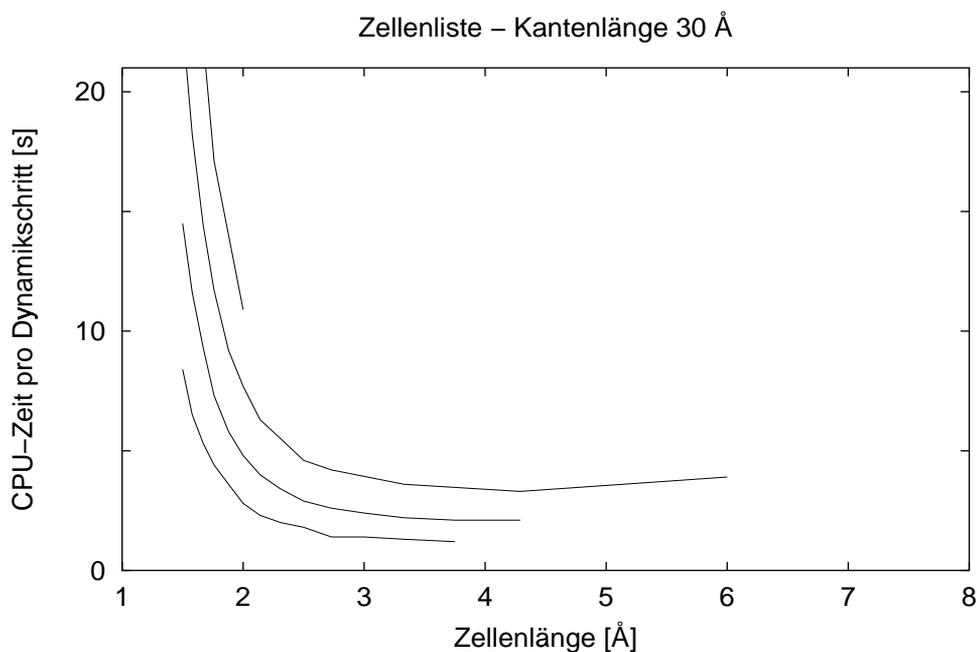
Eine weitere untere Grenze für die Zahl der Zellen habe ich eingeführt, um die Entscheidung zu vermeiden, ob für zwei Atome, die innerhalb derselben Zelle liegen, die Wechselwirkungsenergie der Atome berechnet wird oder nicht. Damit gilt:

$$r_{off} > \sqrt{3}a_Z . \quad (3.6)$$

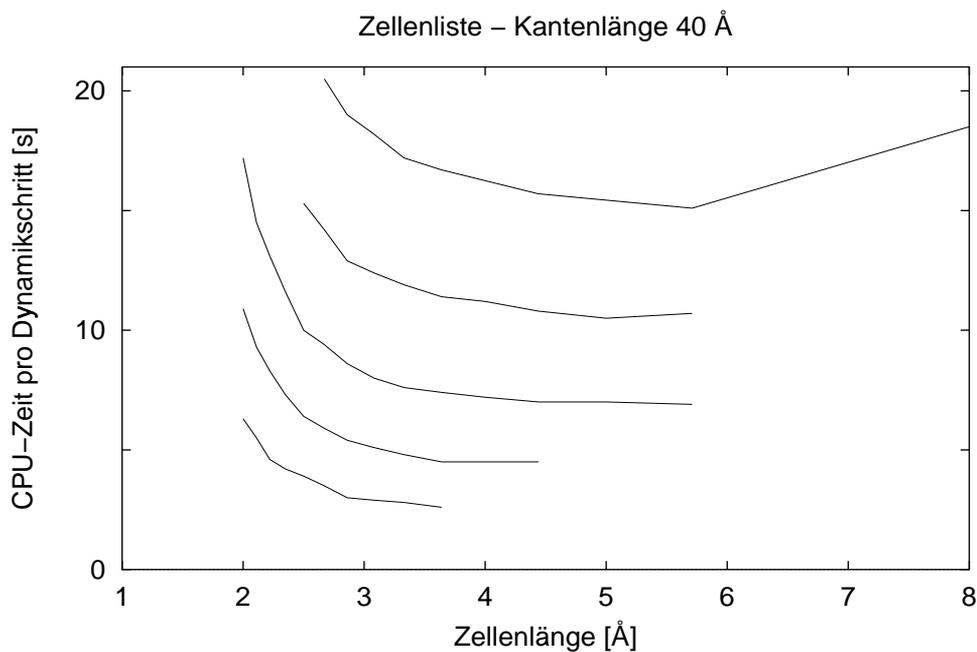
Also ist gesichert, daß der Abstand aller Atome innerhalb einer Zelle kleiner als der Abschneideradius  $r_{off}$  ist. Dies ist nur relevant für sehr große Zellen.

Für die MD-Läufe habe ich – wie oben eingeführt – Würfel genommen. Diese habe ich in allen drei Raumrichtungen jeweils in die gleiche Anzahl von Zellen eingeteilt.

In Abbildung 3.9 sind die Rechenzeiten pro Dynamikschritt über die Zellenlänge für einen Würfel mit einer Kantenlänge von 30 Å aufgetragen. Wegen der Einschränkung in der möglichen Zellenzahl, die sich aus Gleichung (3.4) ergibt, hört der Graph für den Abschneideradius  $r_{off} = 14.0$  Å schon bei einer Zellenlänge von  $a_Z = 2.0$  Å auf. Das Ende der anderen drei Graphen ergibt sich aus der Gleichung (3.6). Durch die Nebenbedingungen wird nur bei dem Abschneideradius  $r_{off} = 12.0$  Å das Optimum der Zellenlänge überschritten, es liegt bei diesen Simulationsbedingungen bei 4.3 Å Zellenlänge, damit liegen durchschnittlich 2.6 Wassermoleküle in einer Zelle. Die Rechenzeiten für die Einteilungen ab 3.3 Å Zellenlänge – das entspricht im Mittel 1.2 Wassermoleküle in einer Zelle – liegen weniger als zehn Prozent darüber. Bei Einteilungen mit geringerer Zellenlänge, d. h. deutlich weniger als ein Wassermolekül pro Zelle steigt die Rechenzeit rapide an.



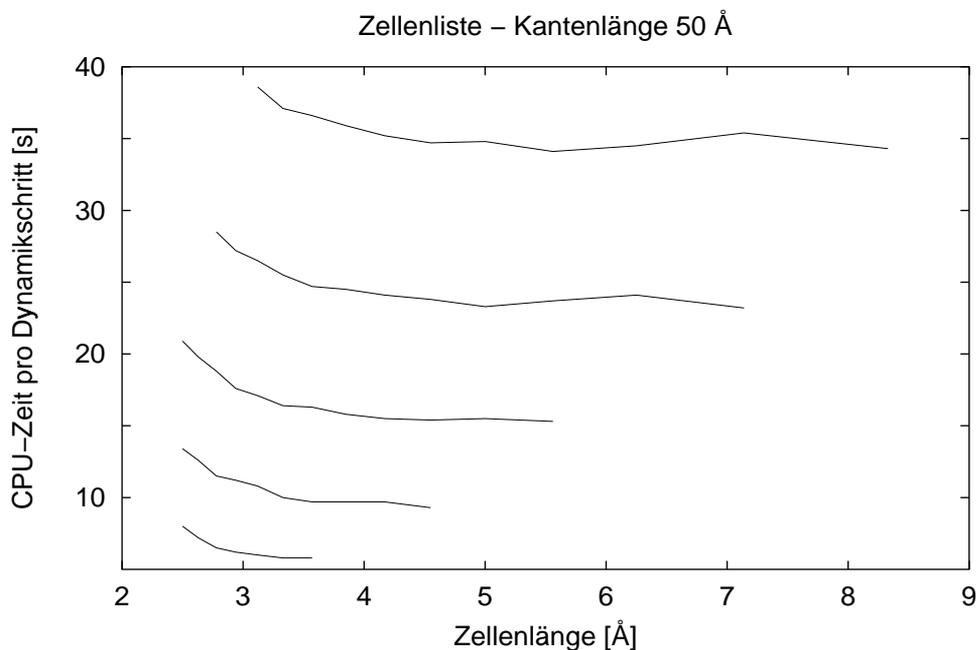
**Abb. 3.9:** Rechenzeiten pro Dynamikschritt in Sekunden aufgetragen über der Zellenlänge für das Modell Zellenliste bei einer Kantenlänge von 30 Å mit verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 14 Å (oberster Graph) in Abständen von 2 Å.



**Abb. 3.10:** Rechenzeiten pro Dynamikschritt in Sekunden aufgetragen über der Zellenlänge für das Modell Zellenliste bei einer Kantenlänge von 40 Å mit verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von 8 Å (unterster Graph) bis 16 Å (oberster Graph) in Abständen von 2 Å.

Die Abbildung 3.10 zeigt die Rechenzeiten pro Dynamikschritt für die MD-Simulationen des Würfels mit einer Kantenlänge von  $40 \text{ \AA}$ . Die optimale Einteilung liegt hier bei einer Zellenlänge zwischen  $5.7 \text{ \AA}$  und  $5.0 \text{ \AA}$ . Diese Einteilung sorgt für eine mittlere Anzahl von 5.9 oder 3.9 Wassermolekülen pro Zelle. Eine Zelleneinteilung, die zu einer mittleren Zellbelegung von 1.2 Wassermolekülen führt ( $3.3 \text{ \AA}$  Zellenlänge), bildet auch hier wieder die Grenze dafür, unterhalb der die Rechenzeiten stark ansteigen.

Werden die Rechenzeiten für die Bestimmung der Abstände und der Auswertung der Energiefunktion bzw. dem Abarbeiten der Zellenliste mit der Bestimmung, ob die Zellenpaare direkt oder über die periodischen Randbedingungen wechselwirken, betrachtet, so schneiden sich beide Graphen bei einer Zellenlänge zwischen  $2.0 \text{ \AA}$  und  $2.2 \text{ \AA}$ . Damit wird also, wenn im Durchschnitt jede dritte oder vierte Zelle mit einem Wassermolekül besetzt ist, für die Zellenverwaltung genausoviel Rechenzeit benötigt, wie für die Auswertung der Energiefunktion.

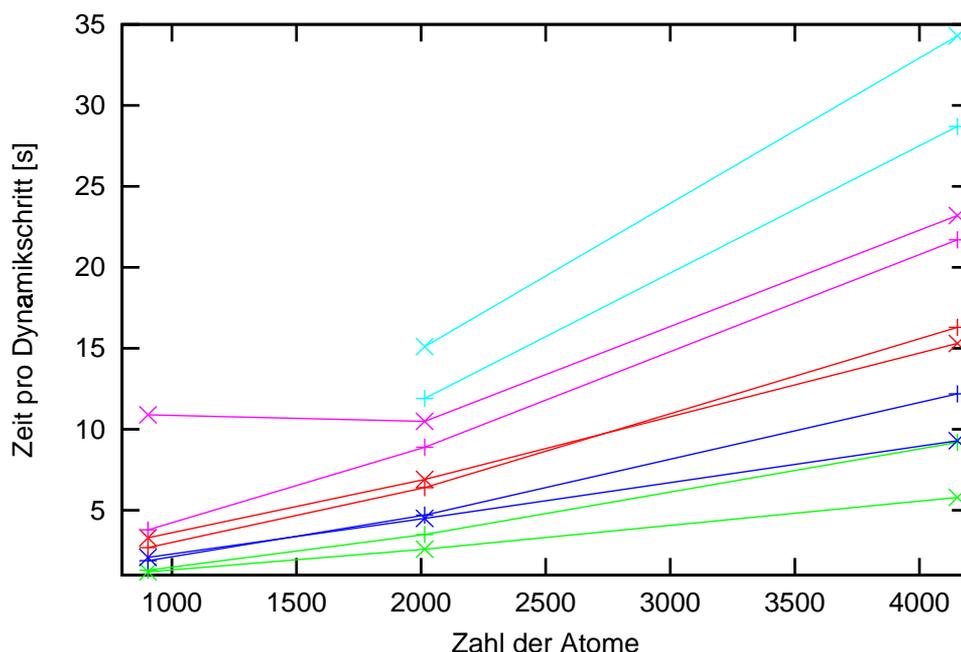


**Abb. 3.11:** Rechenzeiten pro Dynamikschritt in Sekunden aufgetragen über der Zellenlänge für das Modell Zellenliste bei einer Kantenlänge von  $50 \text{ \AA}$  mit verschiedenen Abschneideradien  $r_{off}$  von  $8 \text{ \AA}$  (unterster Graph) bis  $16 \text{ \AA}$  (oberster Graph) in Abständen von  $2 \text{ \AA}$ .

In Abbildung 3.11 ist der Verlauf der Rechenzeiten in Abhängigkeit von der Anzahl der Zellen für die MD-Simulationen eines Würfels mit einer Kantenlänge von  $50 \text{ \AA}$  dargestellt. Die optimalen Einteilungen liegen für diese Systeme zwischen einer mittleren Anzahl von 5.7 bis 19.2 Wassermolekülen pro Zelle. Das Optimum der Anzahl von Wassermolekülen pro Zelle steigt mit der Systemgröße, da der Aufwand, der durch die größere Zahl von Zellen entsteht, zunimmt und so der Algorithmus erst bei einer höheren Zahl von Molekülen pro Zelle greift. Denn für jedes auftretende Zellenpaar muß für die Berechnung der nichtbindenden Energieterme die Wechselwirkungsrichtung bestimmt werden, d. h. es muß entschieden werden, ob die Energieterme der Moleküle in den Zellen direkt oder über die periodischen Randbedingungen berechnet werden. Da für diese Bestimmung ein Abstand berechnet werden muß, wird diese Abfrage erst von der Wirkung auf immer mehr Atompaare kompensiert.

### 3.3 Vergleich

Die Abbildung 3.12 vergleicht die Rechenzeiten pro Dynamikschritt für die MD-Simulationen mit Verletliste und mit Zellenliste in Abhängigkeit von der Anzahl der Gruppen. Zwar liegen die Rechenzeiten für die Zellenliste in der Regel oberhalb der mit Verletliste, jedoch zeigen sie einen geringeren Anstieg mit zunehmender Systemgröße, d. h. wachsender Anzahl der Gruppen. Also zahlt es sich aus bei wachsenden Systemgrößen auf die Zellenliste an Stelle der Verletliste zurückzugreifen.



**Abb. 3.12:** Rechenzeitvergleich für Verletliste und Zellenliste: Es ist die Zeit pro Dynamikschritt in Sekunden über der Anzahl der Gruppen aufgetragen. Es bedeuten gleiche Farben gleiche Abschneideradien  $r_{off}$  beginnend bei Cyan für  $r_{off} = 16 \text{ \AA}$  bis Grün für  $r_{off} = 8 \text{ \AA}$ . Mit  $\times$  sind die Graphen der Zellenliste gekennzeichnet und mit  $+$  die der Verletliste.

$n$	$n^2$	$n \log_2 n$
10	$1.0 * 10^2$	$2.3 * 10^1$
100	$1.0 * 10^4$	$6.6 * 10^2$
1000	$1.0 * 10^6$	$1.0 * 10^4$
10000	$1.0 * 10^8$	$1.3 * 10^5$

**Tab. 3.1:** Vergleich von  $n^2$  und  $n \log_2 n$  in Abhängigkeit von der Systemgröße  $n$ .

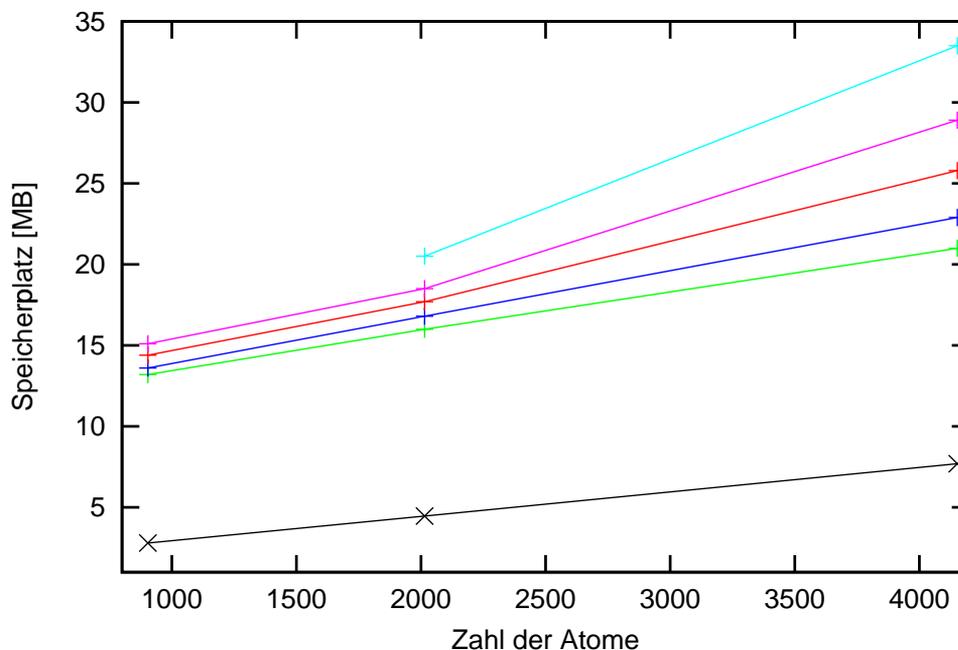
Der flachere Anstieg der Rechenzeiten mit der Systemgröße bei festem Abschneideradius für die Zellenliste gegenüber der Verletliste legt nahe, daß im Vergleich zum Aufwand  $O(n^2)$  bei der Verletliste mit der Systemgröße  $n$  für die Zellenliste  $O(n \log_2 n)$  gilt. Die kleine Tabelle 3.1 zeigt das Verhalten von  $n^2$  in Vergleich mit  $n \log_2 n$  in Abhängigkeit von  $n$ . Beim Aufstellen der Verletliste ist es nötig die für Dreiecksoperationen typischen (für  $i \in [1, n - 1]$  durchlaufe das Intervall  $[i, n]$ )  $\sum_v^{n-1} v$  arithmetischen Operationen

durchzuführen, d. h. für die Zeit pro Dynamikschritt  $T(n)$  gilt:

$$T(n) = C \frac{(n-1)(n-2)}{2} = O(n^2) \quad (3.7)$$

Dadurch, daß die Verletliste nicht bei jedem Schritt aufgefrischt werden muß, wird zwar die Systemkonstante  $C$  herabgesetzt, jedoch bleibt das grundsätzlich entscheidende  $O(n^2)$  für große  $n$  ausschlaggebend. Bei der Zellenliste ist für den Rechenaufwand maßgeblich eine Suche über eine Liste der Länge  $n^2$ . Da Suchalgorithmen rekursiv nach der Methode *divide and conquer* ablaufen, d.h. Rechenzeiten  $T(n) = O(n^2)$  auf  $T(n) = O(n \log_2 n)$  reduzieren (vgl. z. B. schnelle Fourier-Transformation bei Press 1988), kann für die Rechenzeit zur Zellenliste von  $O(n \log_2 n)$  ausgegangen werden.

Gilt für die Rechenzeit der Verletliste  $T(n) = C_1 n^2$  mit einer Verfahrenskonstanten  $C_1$ , so gelte  $T(n) = C_2 n \log_2 n$  für die Zellenliste mit einer Verfahrenskonstanten  $C_2$ . In der Regel wird die Beschleunigung der Rechenzeit mit wachsendem  $n$  durch eine höhere Verfahrenskonstante eingekauft<sup>1</sup>, also meist  $C_2 \gg C_1$ . Bei  $C_2 \approx 10C_1$  zieht das beschleunigte Verfahren erst für  $n \gg 100$ , d. h. mindestens 500 Gruppen; bei  $C_2 \approx 100C_1$  erst ab  $n$  zwischen 5000 und 10000 Gruppen. Die Abbildung 3.12 legt einen Faktor zwischen 10 und 100 für  $C_2$  und  $C_1$  in Abhängigkeit vom Abschneideradius nahe.



**Abb. 3.13:** Belegter Speicherplatz in Megabyte für die Hauptrechenzeit aufgetragen über der Anzahl der Gruppen. Bei der Zellenliste ist dieser für alle Abschneideradien  $r_{off}$  gleich (schwarzer Graph).

Zusätzlich zeigt Abbildung 3.13, daß der Speicherplatzbedarf bei der Zellenliste weit unterhalb dessen für die Verletliste liegt. Ferner ist es bei Benutzung der Verletliste nie ganz sicher, ob das Reservoir groß genug ist; für die Zellenliste gibt es keine derartigen Unsicherheiten. Insgesamt birgt die Zellenliste Vorteile gegenüber der Verletliste, vor allem mit zunehmender Systemgröße.

<sup>1</sup>Z. B. kommt die schnelle Fourier-Transformation erst ab  $n = 100$  zum Tragen, vgl. Press 1988.