

1 Ewald の総和

距離 r だけに依存するポテンシャル $\phi(r)$ による、ポテンシャルエネルギーや加速度を計算したい。例えば粒子が及ぼす重力の場合には

$$\phi(r) = \frac{Gm}{r} \quad (1)$$

になる。

一辺の長さが L であるような箱の中に粒子が分布しているとして、さらにこれが周期的に広がっているとす。この時に、以下の二重の総和

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{Gm_i m_j}{r} \quad (2)$$

を計算したい。粒子は周期的に無限に広がっているため、長距離力のポテンシャルについてこの総和を直接計算すると、値を取束させるためには、非常に多くの演算が必要となる。

これを高速に計算する方法が Ewald の総和 (Ewald 1921) である。この方法では $\phi(r)$ を短距離成分と長距離成分に分離する。

$$\phi(r) = Gm \left(\frac{f(r)}{r} + \frac{1-f(r)}{r} \right) \quad (3)$$

$f(r)$ は短距離だけに作用するような関数。

Ewald の総和では第一項は直接計算する。なぜなら、この部分は $f(r)$ の性質により局所的な総和になるためである。一方で第二項の部分はやはり周期的な項を考慮して総和をする必要がある。ポイントは第二項の計算を波数空間で行なうことである。 $f(r)$ の定義から、定性的には第二項の関数は波数空間では局所的な関数になるので、波数空間での総和は第一項と同様に局所的な総和になる。

$f(r)$ としては、オリジナルの分子動力学への適用では相補誤差関数 $\text{erfc}(r)$ を採用する。

$$\text{erfc}(r) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^r e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_r^\infty e^{-t^2} dt \quad (4)$$

$f(r)$ をパラメーター α を導入した $\text{erfc}(\alpha r)$ とすると、第二項の波数区間での総和は Gaussian による総和となる。この時、ある場所に \vec{r} に働く加速度の第二項の contribution は、

$$\vec{F}(\vec{r}) = \frac{G}{L^3} \sum_j m_j \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{4\pi \vec{k}}{k^2} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha}\right) \sin(\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_j)) \quad (5)$$

となる。内側の総和を事前に計算しておくことで、この項を直接粒子間相互作用として計算することも可能である。実際、Hernquist, Bouchet & Suto(1991) はこの手法を宇宙論的にシミュレーションに適用した。

P³M 法 (Hockney&Eastwood 1988, 以下 H&E) では、この第二項の部分を mesh での近似によって計算する。ここで、P³M 法でのポテンシャルを以下のように定義する (定数は除く)。

$$\phi(r) = \phi_{\text{P3M}}(r) + \phi_{\text{Long}}(r) \quad (6)$$

$\phi_{\text{P3M}}(r)$ は粒子間相互作用として直接計算する。実際上、 $\text{erfc}(r)/r$ は積分により定義されているので、計算量が多だけでなく、あまり局所的ではない。そこで、天文やプラズマでの応用では、ある半径より外側では0になるような関数を選んで $\phi_{\text{P3M}}(r)$ とする。こうすることで、 $\phi_{\text{P3M}}(r)$ の和は、様々な高速アルゴリズムにより $O(N)$ または $O(N \log N)$ で演算可能である。

一方、 ϕ_{Long} の総和は密度とのたたみ込み演算であるため、mesh で近似をする場合には、FFT を使うことができる。よって、mesh point \vec{r}_p におけるポテンシャルの波数成分 $\phi^*(\vec{k}_p)$ は

$$\phi^*(\vec{k}_p) = [\text{FFT}_{\text{forward}}[\rho_M] \times G_{\text{opt}}](\vec{k}_p) \quad (7)$$

となる。 ρ_M は mesh における密度分布を表す。

ここで関数 G_{opt} は単純には関数 ϕ_{Long} の波数成分に対応する。P³M 法では、この関数を調整することで離散化による影響を最小限になるように最適化する。具体的には、二体間の加速度の誤差の RMS を最小化するように G_{opt} を定義する。これを、以下、修正された Green 関数と呼ぶ。

実際には、粒子シミュレーションで必要なのは ϕ^* による加速度である。加速度を計算するには ϕ^* を微分すればよい(符号は負にする)。波数空間での微分演算子は $i\vec{k}$ になるので、mesh point (\vec{k}_p) における加速度の波数成分 $\vec{F}^*(\vec{k}_p)$ は

$$\vec{F}^*(\vec{k}_p) = -i\vec{k}\phi^*(\vec{k}_p) \quad (8)$$

この逆変換をとることで、実空間の mesh point での加速度が求まる。

$$\vec{F}^*(\vec{r}_p) = \text{FFT}_{\text{backward}}[-i\vec{k}\phi^*] \quad (9)$$

粒子の位置での加速度は、 \vec{F}^* を補間することで計算する。なお、 ρ_M を計算する方法と \vec{F}^* の補間は、相互に対称になっている必要がある。そうでない場合、二粒子間の力が非対称になるため、運動量などが厳密には保存しなくなる。P³M 法では、この部分に P 次のスプライン関数を利用する。なお、この手法では mesh での \vec{F}^* の計算に3回の逆 FFT が必要である。その代わりに、 $\phi^*(\vec{r}_p)$ を計算して数値的に微分することもできる。この手法のほうが広く使われているが、これは数値微分による誤差と FFT の演算時間やメモリ消費との兼ね合いで、最適な方法が決まる。

2 重力への適用：S2 profile

天文シミュレーションでは、 $1/r$ のポテンシャルをそのまま利用することはなく、通常これをなまらせたポテンシャルを使う。広く使われているのは Plummer profile である。このような、なまらせた密度分布を利用しない場合、任意の粒子が無限まで近づくことが起こりえるため、これは軌道積分を非常に困難にする。

なまらせたポテンシャルを利用することは、無限小に小さい粒子を広がった密度分布をもつ粒子で近似することに相当する。P³M 法では、 ϕ_{P3M} に対して局所的であるということ仮定するため、Plummer profile をそのまま利用することはできない。そこで、以下のような密度分布 (S2 profile) の粒子を考える (H&E 270 ページ)。

$$\rho(r) = \frac{48}{\pi a^4} \left(\frac{a}{2} - r \right) \quad (10)$$

ただし $r < a/2$ とする。これは原点から距離に応じて線形に減少するような密度分布である。これに対応する加速度やポテンシャルは定義より計算することができる。(H&E 300 ページ)。

この密度分布による加速度を \vec{R} とし、実際に計算したい加速度を \vec{F} すると、

$$\vec{F} = -\nabla(\phi_{\text{P3M}} + \phi_{\text{Long}}) \quad (11)$$

より、

$$\vec{R} = -\nabla(\phi_{\text{Long}}) \quad (12)$$

であるから、

$$\vec{F} = -\nabla\phi_{\text{P3M}} + \vec{R} \quad (13)$$

となる。よって、第一項 (短距離力) は $\vec{F}_{\text{P3M}} = \vec{F} - \vec{R}$ で定義される。

以下の定義から、 \vec{R} は直接計算が可能である (H&E 300 ページ)。

$$\vec{R}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \int d\vec{r}'' S(\vec{r}') S(\vec{r}'' - \vec{r}') \frac{\vec{r}' - \vec{r}''}{|\vec{r}' - \vec{r}''|^3} \quad (14)$$

よって、 $\vec{R}(\vec{r})$ の距離の関数としての絶対値 $R(r)$ は

$$R(r) = \vec{R} \cdot \vec{r} = \frac{1}{r^2} \begin{cases} R_1(q) & q \leq 1 \\ R_2(q) & q \leq 2 \\ 1 & q > 2 \end{cases} \quad (15)$$

となる。ただし

$$q = \frac{2r}{a} \quad (16)$$

であり、 R_1 と R_2 は a を消去して、

$$\begin{aligned} 140R_1(q) &= 224q^3 - 224q^5 + 70q^6 + 48q^7 - 21q^8 \\ 140R_2(q) &= 12 - 224q^2 + 896q^3 - 840q^4 + 224q^5 + 70q^6 - 48q^7 + 7q^8 \end{aligned} \quad (17)$$

となる。

\vec{F} は十分遠方では $\propto 1/r^2$ であるから、結局、

$$\vec{F}_{\text{P3M}}(\vec{r}) = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3} \begin{cases} 1 - R_1(q) & q \leq 1 \\ 1 - R_2(q) & q \leq 2 \\ 0 & q > 2 \end{cases} \quad (18)$$

最後に、 a の定義は η で置き換える。

$$q = \frac{r}{\eta} = \frac{2r}{a}, a = 2\eta \quad (19)$$

η は、 h にあわせて適切に設定すればよい。以上より、 \vec{F}_{P3M} は $r/\eta \leq 2$ の近接相互作用として、ツリー法などを利用して計算すればよい。

3 修正された Green 関数

Ballenegger et al. (2008) 及び、Dessemo & Holm (1998a, 1998b) の定義に従うと、加速度を最適化する修正された Green 関数 $G(\vec{k})$ は以下のように定義される：

$$G(\vec{k}) = \frac{\sum(\vec{k} \cdot \vec{k}_m)U^2(\vec{k}_m)R'(\vec{k}_m)}{|\vec{k}|^2(\sum U^2(\vec{k}_m))^2} \quad (20)$$

ここで \vec{k}_m の定義は以下のとおり。

$$\vec{k}_m = \vec{k} + \frac{2\pi}{h}\vec{m} \quad (21)$$

h は mesh の間隔を表す。

$U(\vec{k})$ は

$$U(\vec{k}) = \frac{W(\vec{k})}{h^3} \quad (22)$$

と定義される。

W は charge assignment 関数で、その波数空間の成分は、1次元のものをかけあわせたものである。

$$W(\vec{k}) = w(k_x)w(k_y)w(k_z) \quad (23)$$

ここで $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ とする。

TSC で密度を割り当てる場合は

$$W(k) = \left(\frac{\sin \frac{kh}{2}}{k/2}\right)^3 \quad (24)$$

である。

$R'(\vec{k})$ は $\vec{R}(\vec{k})$ と以下のような関係である。

$$\vec{R}(\vec{k}) = -i\vec{k}R'(\vec{k}) \quad (25)$$

さらに $R'(k)$ は

$$R'(\vec{k}) = \frac{|S(\vec{k})|^2}{|\vec{k}|^2} \quad (26)$$

である。

$S(\vec{k})$ は定義から計算できて (H&E 284 ページ)、

$$S(\vec{k}) = \frac{12}{(k\eta)^4} (2 - 2\cos(k\eta) - k\eta \sin(k\eta)) \quad (27)$$

になる (η を使って書きなおした)。

\sum は定義としては全波数空間で計算する必要がある。実際には $S(\vec{k}) \propto k^{-4}$ のため、また、 U の性質も同様であるので、 $\vec{m} = -2.., 2$ の和をとれば十分である (H&E 284 - 285 ページ)。

また、TSCで密度割り当てる場合には分母の Σ は解析的に計算できる。結果は

$$\Sigma U^2(\vec{k}) = u(k_x)u(k_y)u(k_z) \quad (28)$$

であり、 $u(k)$ は、

$$u(k) = \left(1 - \sin^2 \frac{kh}{2} + \frac{2}{15} \sin^4 \frac{kh}{2}\right) \quad (29)$$

で定義される。

4 実効上の手続き

- (1) TSCにより mesh point $\vec{x} = (x, y, z)$ での密度分布 $\rho_M(\vec{x})$ を得る。
- (2) FFTによりその波数成分 $\rho_M(\vec{k})$ を得る。
- (3) 修正された Green 関数 $G(\vec{k})$ と $\rho_M(\vec{k})$ の積 ($\phi^*(\vec{k})$) を計算する。
- (4) $\vec{F}^*(\vec{k})$ の成分ごとに逆FFT行なうことで $\vec{F}^*(\vec{x})$ を得る。
- (5) 与えられた粒子の位置 \vec{z} の位置での加速度を $\vec{F}^*(\vec{x})$ を TSC で補間して計算