

S2 softening

似鳥 啓吾

2011 年 6 月 30 日

1 Softening

Softening というとまず思いつくのは、

- ポテンシャルの発散を避けるためにポテンシャルの関数型を変更する

といものだと思うが、別の見方として

- 質点をぼやかして、球対称な密度分布にする

と考えることもできる。このふたつが完全に等価かどうかはちょっと自信がないが、一様質量で softening 長が定数の粒子径ではこのふたつは同一のものと考えてもよからう。あるいは、

- 密度に対し、波数空間でなんらかの cut-off を与える

との見方も可能である。

また、softening には、よく知られた Plummer softening のようにポテンシャルへの影響や密度分布（Plummer 分布ではないよ）が無限遠へと広がるものと、これから話す S2 分布のように、その影響が有限長までしか及ばない（そのかわり C^∞ ではない）ものがあるということになる。

さて、Hockney & Eastwood (1981) に出てくる S2 分布（あるいは S2 softening）とは、簡単のため単位質量に対して到達半径が 1 となるような座標系で書くと、

$$\rho(R) = \begin{cases} \frac{3}{\pi}(1-R) & (0 \leq R \leq 1) \\ 0 & (1 \leq R) \end{cases}, \quad (1)$$

というように単純に線形に減少して打ち切られるという、というものである（教科書 p. 270）。上記の文献では、その他に一様密度のものを S1 分布、ガウシアンのを S3 分布としている。S1 分布と S2 分布はそれぞれ、CIC (cloud-in-cell) 法と TSC (triangular shape cloud) 法に対応付けて考えることもできる。

2 Force shape

さて、S2 クラウドがふたつあるとして、そのクラウド間に働く引力は、距離が 2 以上離れていれば Newton の定理により $1/R^2$ であるが、それ以外の場合は体積素片の相互作用を六重積分して求める必要がある。計算結果は教科書 p. 300 に載っていて、

$$f(R) = \begin{cases} \frac{1}{140} (224R - 224R^3 + 70R^4 + 48R^5 - 21R^6) & (0 \leq R \leq 1) \\ \frac{1}{140} \left(\frac{12}{R^2} - 224 + 869R - 840R^2 + 224R^3 + 70R^4 - 48R^5 + 7R^6 \right) & (1 \leq R \leq 2) \\ \frac{1}{R^2} & (2 \leq R) \end{cases}, \quad (2)$$

ある種の spline softening のような形をしているが、何かをスプラインで近似したのではなく、S2 分布に対する厳密解であることには注意。

P³M 法の PP パート（つまりは S2 soften された PM force の Newton 重力からの残差）での重力相互作用へのカットオフ関数

$$\mathbf{a}_i = \sum_{j \neq i} \frac{m_j (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} g_{\text{P3M}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|/\eta), \quad (3)$$

として表現する場合は、

$$g_{\text{P3M}}(R) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{140} (224R^3 - 224R^5 + 70R^6 + 48R^7 - 21R^8) & (0 \leq R \leq 1) \\ 1 - \frac{1}{140} (12 - 224R^2 + 869R^3 - 840R^4 + 224R^5 + 70R^6 - 48R^7 + 7R^8) & (1 \leq R \leq 2) \\ 0 & (2 \leq R) \end{cases}, \quad (4)$$

とあらわせる。

ポテンシャルも写経：

$$\phi(R) = \begin{cases} \frac{1}{140} [208 - 112R^2 + 56R^4 - 14R^5 - 8R^6 + 3R^7] & (0 \leq R \leq 1) \\ \frac{1}{140} \left[\frac{12}{R} + 128 + 224R - 448R^2 + 280R^3 - 56R^4 - 14R^5 + 8R^6 - R^7 \right] & (1 \leq R \leq 2) \\ \frac{1}{R} & (2 \leq R) \end{cases} \quad (5)$$

3 Optimization

このままでは演算量も多く分岐もあるため、PP 相互作用の度にこれを計算するのはさすがに無視できないコストとなる。そこでモダンな汎用計算機のための効率的な式変形を試みてみよう。

$$S \equiv \max(0, R - 1), \quad (6)$$

として、

$$g_{\text{P3M}}(R) = 1 + R^3 \left(-\frac{8}{5} + R^2 \left(\frac{8}{5} + R \left(-\frac{1}{2} + R \left(-\frac{12}{35} + R \frac{3}{20} \right) \right) \right) \right) - S^6 \left(\frac{3}{35} + R \left(\frac{18}{35} + R \frac{1}{5} \right) \right) \quad (0 \leq R \leq 2) \quad (7)$$

と変形すれば、8 回の積和算でこの関数が計算でき、分岐のひとつは \max 関数に落とせた（ \max はふつうハードウェア実装されている）。重力相互作用の計算では、上の式を R で割ったものを評価しておけば、乗算数で少し得する。（ $2 \leq R$ ）の場合についての分岐は比較の結果でマスクするか、あるいは丸め誤差に注意して（逆数平方根に近似命令を使っても、4.0 の逆数平方根は誤差なく 0.5 となるだろう）

$$R \leftarrow \min(R, 2), \quad (8)$$

とすれば消すことができる。

4 Quadrupole Moment

ツリー法では精度が必要なときは θ をやみくもに小さくするよりは四重極やそれ以上のモーメントを入れたほうが計算コストは小さく済む。しかしカットオフ関数が入ると、四

重極モーメントによる力の補正項も、式の形が複雑になる。一般的な球対称カーネルに対する四重極モーメントからの重力加速度は、次のようにあらわされる。

$$\mathbf{a}_{\text{quad}} = -\frac{1}{2r^5} \left[\left(g_a(r) \cdot \frac{(\mathbf{r}^T \mathbb{Q} \mathbf{r})}{r^2} + g_b(r) \cdot \text{tr}(\mathbb{Q}) \right) \mathbf{r} + 2g_b(r) \cdot (\mathbb{Q} \mathbf{r}) \right], \quad (9)$$

ここで、

$$g_a(r) = r^4 \phi'''(r) - 3r^3 \phi''(r) + 3r^2 \phi'(r), \quad (10)$$

$$g_b(r) = r^3 \phi''(r) - r^2 \phi'(r), \quad (11)$$

である。ただし四重極モーメントの定義として、トレースレスにはせず、

$$Q_{ij} \equiv \sum_k m_k (r_k^i - r_c^i)(r_k^j - r_c^j), \quad (12)$$

のような単純なものを用いる（添字の意味は合理的に汲みとってください）。とくに $\phi(r) = 1/r$ のとき、 $g_a(r) = -15$ 、 $g_b(r) = 3$ となり、よく知られている形式と一致する。念のため、

$$\text{tr}(\mathbb{Q}) \equiv Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz}, \quad (13)$$

である。

P³M 法のための S2 カットオフの入ったものは、

$$g_a(r) = -\frac{1}{140} (315R^8 - 384R^7 - 210R^6 + 2100) + \frac{3}{35} S^4 (35R^4 + 76R^3 + 94R^2 + 60R + 15), \quad (14)$$

$$g_b(r) = -\frac{1}{140} (105R^8 - 192R^7 - 210R^6 + 448R^5 - 420) + \frac{1}{35} S^5 (35R^3 + 79R^2 + 45R + 9), \quad (15)$$

となる。

5 Dipole moment

荷電粒子系での静電気力の計算では、「重心」を上手くとることができず、展開中心からの双極子モーメントも導入する必要が発生するかも知れない。数式だけ、書き留めておく。

$$\mathbf{a}_{\text{dipole}} = \left(\phi'' - \frac{\phi'}{r} \right) \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{d})}{r^2} \mathbf{r} + \frac{\phi'}{r} \mathbf{d}, \quad (16)$$

6 もうちょっと整理

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_M &= -g_1(r) \cdot \frac{1}{r^3} \mathbf{r}, \\
\mathbf{a}_D &= -g_2(r) \cdot \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{d})}{r^5} \mathbf{r} - g_1(r) \cdot \frac{1}{r^3} \mathbf{d}, \\
\mathbf{a}_Q &= -\frac{1}{2r^5} \left[\left(g_3(r) \cdot \frac{(\mathbf{r}^T \mathbb{Q} \mathbf{r})}{r^2} + g_2(r) \cdot \text{tr}(\mathbb{Q}) \right) \mathbf{r} + 2g_2(r) \cdot (\mathbb{Q} \mathbf{r}) \right], \quad (17)
\end{aligned}$$

で、それぞれカットオフ関数が

$$\begin{aligned}
g_0(r) &\equiv r\phi(r), \\
g_1(r) &\equiv r^2\phi'(r), \\
g_2(r) &\equiv r^3\phi''(r) - r^2\phi'(r), \\
g_3(r) &\equiv r^4\phi'''(r) - 3r^3\phi''(r) + 3r^2\phi'(r), \quad (18)
\end{aligned}$$

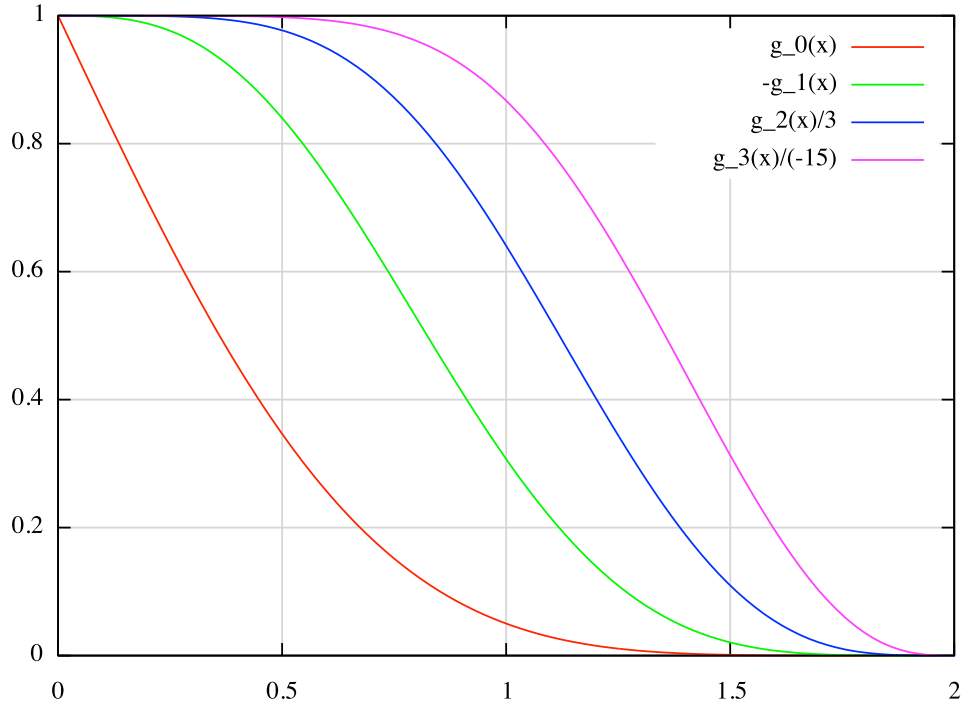
$\phi(r) = r^{-1}$ では、 $g_0(r) = 1$, $g_1(r) = -1$, $g_2(r) = 3$, $g_3(r) = -15$ である。同じテーブルでポテンシャルの計算も可能。GPU なら関数の値を計算するかわりに、1D texture から float4 で一気に読んでしまうという実装も考えられる。一次補間もハードウェアでやってくれたりする。

カットオフ関数をプロットしてみたものは次のようになる。

7 共変微分

もう少し一般的に、球対称カーネルの直交座標偏部分を書いてみる。なお、Galactic Dynamics 2nd Edition の 128 項のボックスにも同じことが書いてある。この形式から適当に多重共モーメントのコンボリューションをとることで、ポテンシャルや加速度（やより高次の微分）が得られる。なお、モーメントや局所展開の次数に対する項数は、ラプラス場の場合、 $[1, 3, 5, 7, \dots, 2p + 1]$ となるが、この一般的な形式の場合は $[1, 3, 6, 10, \dots, (p + 1)(p + 2)/2]$ となる。

$$\begin{aligned}
\Phi^{(0)}(r) &\equiv \phi(r), \\
\Phi^{(n)}(r) &\equiv \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi^{(n-1)}(r), \quad (19)
\end{aligned}$$



として、

$$\begin{aligned}
\partial_i \phi &= \Phi^{(1)} r_i, \\
\partial_i \partial_j \phi &= \Phi^{(2)} r_i r_j + \Phi_{(1)} \delta_{ij}, \\
\partial_i \partial_j \partial_k \phi &= \Phi^{(3)} r_i r_j r_k + \Phi^{(2)} (\delta_{ij} r_k + \delta_{jk} r_i + \delta_{ki} r_j), \\
\partial_i \partial_j \partial_k \partial_l \phi &= \Phi^{(4)} r_i r_j r_k r_l \\
&\quad + \Phi^{(3)} (\delta_{il} r_j r_k + \delta_{jl} r_k r_i + \delta_{kl} r_i r_j + \delta_{ij} r_k r_l + \delta_{jk} r_k r_l + \delta_{ki} r_j r_l) \\
&\quad + \Phi^{(2)} (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{jl} \delta_{ki} + \delta_{kl} \delta_{ij}),
\end{aligned} \tag{20}$$