S2 softening rivisited

似鳥　啓吾

2019 年 3 月 12 日

昔書いたものは SIMD で評価する都合は考えていたけれども丸め誤差への耐性は考えられていなかった。

$$g_0(r) = \begin{cases} 1-(208r-112r^3+56r^5-14r^6-8r^7+3r^8)/140 & (0 \le r \le 1) \\ 1-(12+128r+224r^2-448r^3+280r^4-56r^5-14r^6+8r^7-r^8)/140 & (1 \le r \le 2) \\ 0 & (2 \le r) \end{cases} \tag{1}$$

一見複雑な式だけれど、$s = \max(2-r, 0)$、$t = \max(1-r, 0)$ のように飽和減算を定義することで

$$g_0(r) = \frac{s^6(s^2-8s+14)-4t^7(t-4)}{140} \tag{2}$$

のように簡単に書くことができる。力のカットオフ関数は

$$-g_1(r) = -\frac{s^5(7s^3-64s^2+182s-168)-4t^6(7t^2-32t+28)}{140} \tag{3}$$

と少し複雑。両辺に -1 を掛けたのは定義の都合による。次の次数は

$$\begin{aligned} 3g_2(r) =& \frac{s^4(35s^4-368s^3+1442s^2-2520s+1680)}{140} \\ &- \frac{t^5(35t^3-184t^2+308t-168)}{35} \end{aligned} \tag{4}$$

3 のファクターがある理由は後ほど。次数が上がるほど多項式が汚くなるのが辛い。

$$\begin{aligned} -15g_3(r) =& \frac{3s^3(35s^5-432s^4+2198s^3-5768s^2+7840s-4480)}{140} \\ &- \frac{3t^4(35t^4-216t^3+532t^2-616t+280)}{35} \end{aligned} \tag{5}$$

ここでは -15 の係数がかかる。

1　多重極の計算

球対称の関数型 $S(\boldsymbol{r}) = S(r)$ についての多重曲展開を考える。相対座標 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_b - \boldsymbol{r}_a$ のとき、r_b にいる多重極モーメントが r_a において観測されるポテンシャルと力を論じる。まず、$\boldsymbol{r}_b + \boldsymbol{\delta} r_c$ に

いる電荷 q_c たちがモノポール、ダイポール、クアドルポールを作る。

$$
\begin{aligned}
m &= \sum_c q_c \\
d_i &= \sum_c q_c \delta r_{i,c} \\
Q_{ij} &= \sum_c q_c \delta r_{i,c} \delta r_{j,c}
\end{aligned}
\tag{6}
$$

ダイポールベクトルとクアドルポールの対照テンソルは成分表示でないときは $\boldsymbol{d}$、Q とも書く。ポテンシャルと力は（アインシュタインの縮約記法により）、

$$
\phi = mS(r) + d_i \partial_i S(r) + \frac{1}{2!} Q_{ij} \partial_i \partial_j S(r) + \cdots \tag{7}
$$

$$
f_k = m\partial_k S(r) + d_i \partial_i \partial_k S(r) + \frac{1}{2!} Q_{ij} \partial_i \partial_j \partial_k S(r) + \cdots \tag{8}
$$

ただし同じ添字については総和をとる。力の符号は

$$
\boldsymbol{f} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_a} \phi(r) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \phi(r) \tag{9}
$$

なので単に $f_k = \partial_k \phi$ でよい。

これから $S(r)$ の勾配を求めていく。

$$
\partial_i S(r) = \frac{\partial r}{\partial r_i} \frac{d}{dr} S(r) = \frac{r_i}{r} \frac{d}{dr} S(r) \tag{10}
$$

ここで

$$
\begin{aligned}
S^{(0)}(r) &= S(r) \\
S^{(n)}(r) &= \frac{1}{r} \frac{d}{dr} S^{(n-1)}(r) \\
\Big(\partial_i S^{(n)} &= r_i S^{(n+1)}\Big)
\end{aligned}
\tag{11}
$$

のようにしておくと計算が楽になる。ここから 4 階まで（暇な人はオクトポールの計算もしてみてください）の勾配は

$$
\begin{aligned}
\partial_i S(r) &= S^{(1)} r_i \\
\partial_i \partial_j S(r) &= S^{(2)} r_i r_j + S^{(1)} \delta_{ij} \\
\partial_i \partial_j \partial_k S(r) &= S^{(3)} r_i r_j r_k + S^{(2)} (\delta_{ij} r_k + \delta_{jk} r_i + \delta_{ki} r_j) \\
\partial_i \partial_j \partial_k \partial_l S(r) &= S^{(4)} r_i r_j r_k r_l \\
&+ S^{(3)} (\delta_{il} r_j r_k + \delta_{jl} r_k r_i + \delta_{kl} r_i r_j + \delta_{ij} r_k r_l + \delta_{jk} r_i r_l + \delta_{ki} r_j r_l) \\
&+ S^{(2)} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{jk} \delta_{il} \delta_{ki} \delta_{jl})
\end{aligned}
\tag{12}
$$

のように計算できる。これを用いるとポテンシャルが

$$
\begin{aligned}
\phi^{mono} &= S^{(0)}(r)\, m \\
\phi^{\mathrm{di}} &= S^{(1)}(r)\, (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{d}) \\
\phi^{\mathrm{quad}} &= \frac{1}{2} \Big(S^{(2)}(r)\, (\boldsymbol{r}^t \mathsf{Q} \boldsymbol{r}) + S^{(1)}(r)\, (\mathrm{tr}\mathsf{Q}) \Big)
\end{aligned}
\tag{13}
$$

また力は

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{f}^{\mathrm{mono}} =& S^{(1)}(r)\, m\boldsymbol{r} \\
\boldsymbol{f}^{\mathrm{di}} =& S^{(2)}(r)\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{d})\boldsymbol{r} + S^{(1)}(r)\,\boldsymbol{d} \\
\boldsymbol{f}^{\mathrm{q}uad} =& \frac{1}{2}\left(S^{(3)}(r)\,(\boldsymbol{r}^t\mathsf{Q}\boldsymbol{r}) + S^{(2)}(r)\,(\mathrm{tr}\mathsf{Q})\right)\boldsymbol{r} + S^{(2)}(r)\,\mathsf{Q}\boldsymbol{r}
\end{aligned} \tag{14}$$

途中計算としては $Q_{ij}\delta_{jk}r_i = Q_{ik}r_i = (\mathsf{Q}\boldsymbol{r})_k$ 、$Q_{ij}\delta_{ki}r_j = Q_{kj}r_j = (\mathsf{Q}\boldsymbol{r})_k$ を使っている。

2　$S^{(n)}$ の具体的なかたち

まず普通のニュートン重力から。クーロン力では逆符号になるので注意。

$$\begin{aligned}
S^{(0)}(r) =& -\frac{1}{r} \\
S^{(1)}(r) =& \frac{1}{r^3} \\
S^{(2)}(r) =& -\frac{3}{r^5} \\
S^{(3)}(r) =& \frac{15}{r^7} \\
S^{(n)}(r) =& (-1)^{n+1}\frac{(2n-1)!!}{r^{2n+1}}
\end{aligned} \tag{15}$$

次に何らかのカットオフ関数がある場合だが、

$$\begin{aligned}
S^{(0)}(r) =& -\frac{g_0}{r} \\
S^{(1)}(r) =& \frac{g_0 - rg_0'}{r^3} \equiv \frac{g_1}{r^3} \\
S^{(2)}(r) =& -\frac{3g_1 - rg_1'}{r^5} \equiv -\frac{3g_2}{r^5} \\
S^{(3)}(r) =& \frac{15g_2 - 3rg_2'}{r^7} \equiv \frac{15g_3}{r^7}
\end{aligned} \tag{16}$$

から

$$\begin{aligned}
g_1 =& g_0 - rg_0' \\
g_2 =& g_1 - \frac{1}{3}rg_1' \\
g_3 =& g_2 - \frac{1}{5}rg_2'
\end{aligned} \tag{17}$$

のように計算できる。

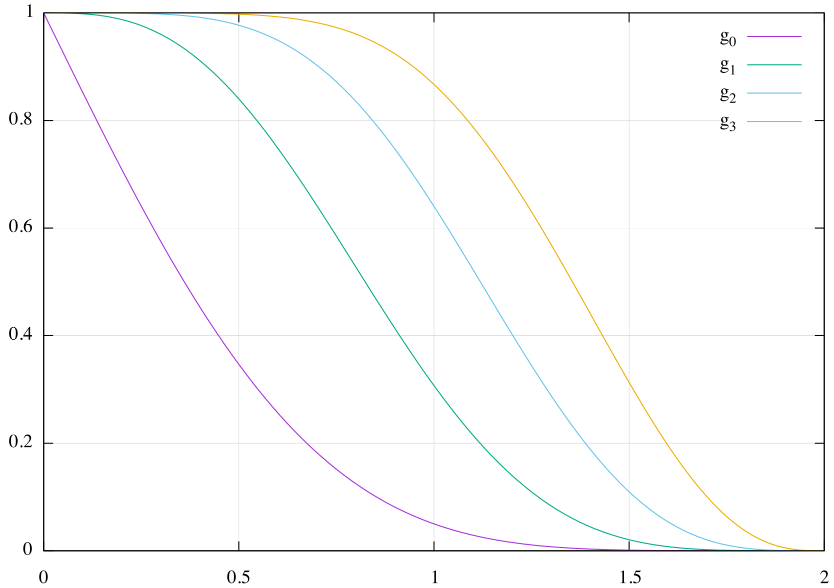

図 1　カットオフ関数たち