

Erweiterung der Ewald-Summation auf nichtperiodische Randbedingungen

Betreuer: Dipl. Math. Michael Pippig, Prof. Dr. Daniel Potts
Adresse: TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik
Reichenhainer Straße 39
Zimmer 729
09107 Chemnitz
Telefon: 0371 531 37833
Fax: 0371 531 837833
Email: michael.pippig@mathematik.tu-chemnitz.de

Aufgabenstellung

Entwickeln Sie einen schnellen Algorithmus zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkungen von Partikelsystemen mit nichtperiodischen Randbedingungen in allen drei Raumrichtungen. Kombinieren Sie dazu das Ewald-Splitting [2] mit den Ideen der schnellen Summation [6, 7], insbesondere der Regularisierung des langreichweitigen Anteils mittels Taylor-Polynomen, der numerischen Berechnung der Fourier-Koeffizienten mittels schneller Fourier-Transformation und der Auswertung mittels schneller nichtäquidistanten Fourier-Transformationen. Implementieren Sie diesen Algorithmus innerhalb der ScaFaCoS Programmbibliothek [1]. Überprüfen Sie numerisch, ob die heuristischen Parameterwahlen aus [4] auch für den nichtperiodischen Fall zutreffend sind. Vergleichen Sie die Genauigkeit und Laufzeit des neuen Algorithmus mit bekannten schnellen Summationsmethoden für periodische Randbedingungen [3, 5] und nichtperiodische Randbedingungen [6, 7].

- [1] *ScaFaCoS - Scalable Fast Coloumb Solvers*. <http://www.scafacos.de>.
- [2] P. P. Ewald: *Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale*. Ann. Phys., 369:253–287, 1921.
- [3] F. Hedman und A. Laaksonen: *Ewald summation based on nonuniform fast Fourier transform*. Chem. Phys. Lett., 425:142 – 147, 2006.
- [4] F. Nestler, M. Pippig und D. Potts: *Fast Ewald summation based on NFFT with mixed periodicity*. Preprint 2013-16, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, 2013.
- [5] M. Pippig und D. Potts: *Particle simulation based on nonequispaced fast Fourier transforms*. In: G. Sutmann, P. Gibbon und T. Lippert (Hrsg.): *Fast Methods for Long-Range Interactions in Complex Systems*, IAS-Series, S. 131 – 158, Jülich, 2011. Forschungszentrum Jülich.
- [6] D. Potts und G. Steidl: *Fast Summation at nonequispaced knots by NFFTs*. SIAM J. Sci. Comput., 24:2013 – 2037, 2003.
- [7] D. Potts, G. Steidl und A. Nieslony: *Fast convolution with radial kernels at nonequispaced knots*. Numer. Math., 98:329 – 351, 2004.