2013/10/16

FMM（高速多重極法）における
諸公式の導出及び実装

似鳥啓吾　（神戸）

1　概要／動機

- FMMを実装するのはなかなか困難
  - 難しいのは多重極法の概念や八分木を用いたアルゴリズムの方ではない
  - むしろ「算数」の方、球面調和関数の展開中心をシフトする部分
    - ブラックボックスとして打ち込むだけで大層な労力、必ずどこかで間違いそう
    - (出版物の符号が間違えているなんてよくあるし)
    - 導出から理解とか無理

「読めば実装できる」ぐらいのノートは必要

直感的な導出があった方がいろいろ安心

続き

- Solid Harmonics（体球調和関数）での表記はわりと単純
- 紹介するもの
  - 実装に必要な数式一式（読みながら実装できる程度に）
  - 符号の定義は対称性がよくなるように
  - （多分）世界一簡単な導出

今回の話が簡単で当たり前すぎて何が有難いのか
さっぱりわからなかったという人向けの参考文献

- Grengard & Rokhlin(1988), “The rapid evaluation of potential fields in three dimensions”
- Epton & Dembart(1995) “Multipole translation theory for the three-dimensional laplace and helmholtz equations”
- van Gelderen(1998) “The shift operators and translations of spherical harmonics”

2 Solid Harmonics

いきなり「定義はこう」で申し訳ないが、'Regular' と 'Singular' のものを

$$R_\ell^m(r,\theta,\phi) = (-1)^{(|m|-m)/2}\frac{r^\ell}{(\ell+|m|)!}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{1}$$

$$S_\ell^m(r,\theta,\phi) = (-1)^{\ell+(|m|+m)/2}\frac{(\ell-|m|)!}{r^{\ell+1}}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{2}$$

とする。P_ℓ^m はLegendreの陪多項式。ちなみに普通の球面調和関数は

$$Y_\ell^m(r,\theta,\phi) = (-1)^{(|m|-m)/2}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}. \tag{3}$$

m の符号反転に対しては単なる複素共役にならず、$R_\ell^{-m} = (-1)^m[R_\ell^m]^*$, $S_\ell^{-m} = (-1)^m[S_\ell^m]^*$ となっている。
後々のため、S_ℓ^m の定義には $(-1)^{\ell+m}$ の因数を含ませた。

$$\left(R_\ell^m = \frac{(-1)^{\ell+m}r^{2\ell+1}}{(\ell+m)!(\ell-m)!}S_\ell^m\right)$$

3　多重極能率と局所展開

球座標での Laplace 方程式 $\nabla^2 \Phi(r, \theta, \phi) = 0$ の一般解はさっきのを用いて、

$$\Phi(r, \theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[L_\ell^m R_\ell^m(r, \theta, \phi) + M_\ell^m S_\ell^{-m}(r, \theta, \phi) \right], \tag{4}$$

と書ける。係数の L_ℓ^m を *local expansions*（局所展開）、M_ℓ^m を *multipole moments*（多重極能率）と呼ぶことにする。それぞれ展開中心を $\boldsymbol{r}_L$、$\boldsymbol{r}_M$ として、

$$\text{P2M:} \quad M_\ell^m = \sum_i q_i \cdot R_\ell^m(\boldsymbol{r}_M - \boldsymbol{r}_i) \tag{5}$$

$$\text{M2P:} \quad \Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{p} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} M_\lambda^\mu S_\lambda^{-\mu}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_M) \tag{6}$$

$$\text{L2P:} \quad \Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{p} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} L_\lambda^\mu R_\lambda^\mu(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_L) \tag{7}$$

4　全然「特殊」関数じゃないです

デカルト座標で低次のものを書き下してみた。

(l, m)	R_ℓ^m	S_ℓ^m
$(0,0)$	1	$1/r$
$(1,0)$	z	$-z/r^3$
$(1,1)$	$-(x+iy)/2$	$-(x+iy)/r^3$
$(2,0)$	$(3z^2-r^2)/4$	$(3z^2-r^2)/r^5$
$(2,1)$	$-z(x+iy)/2$	$3z(x+iy)/r^5$
$(2,2)$	$(x+iy)^2/8$	$3(x+iy)^2/r^5$

特に R_ℓ^m は ℓ 次の斉次多項式。因数に $(x+iy)^m$。

5 計算方法

$\tilde{P}_\ell^m(r,z) = r^\ell \cdot (r\sin\theta)^{-m} \cdot P_\ell^m(\cos\theta) \in \mathbb{R}$ **としておくと**
$\tilde{P}_\ell^m(r,z) \cdot (x+iy)^m = r^\ell \cdot P_\ell^m(\cos\theta) \cdot e^{im\phi}$**。あとは漸化式**

$$\tilde{P}_\ell^m(r,z) = \begin{cases} (-1)^m(2m-1)!! & (\ell = m) \\ (2\ell-1)z\tilde{P}_{\ell-1}^m(r,z) & (\ell = m+1) \\ \dfrac{2\ell-1}{\ell-m}z\tilde{P}_{\ell-1}^m(r,z) - \dfrac{\ell+m-1}{\ell-m}r^2\tilde{P}_{\ell-2}^m(r,z) & (\ell \geq m+2) \end{cases} \tag{8}$$

- !! **は二重階乗、**$n!! = n \cdot (n-2)!!,\ 1!! = 0!! = 1$
- m **ループを外側に、対角成分** P_m^m **から** ℓ **を育てる**
- R_ℓ^m **は** division/square-root free
- `1.0/(int), 1.0/factrl(i)` **はテーブルで覚えておく**

6　八象限対称

$$
\begin{aligned}
R_\ell^m(-x,-y,-z) &= (-1)^\ell R_\ell^m(x,y,z),\\
R_\ell^m(x,-y,z) &= (-1)^m R_\ell^{-m}(x,y,z),\\
R_\ell^m(-x,y,z) &= R_\ell^{-m}(x,y,z),\\
R_\ell^m(-x,-y,z) &= (-1)^m R_\ell^m(x,y,z),
\end{aligned} \tag{9}
$$

等々。コードの再利用にも有効。
S_ℓ^{-m} **をよく使うが、これは** $\propto (-1)^{\ell+m} R_\ell^{-m}$ **なので**
引数に $(-x,y,-z)$ **を入れればいい。**

7　昇降演算子 (Ladder Operators)

ここが一番重要！（ただし証明略）

デカルト座標の偏微分で添字を変化させる。

$$\begin{pmatrix} \partial_x + i\partial_y \\ \partial_z \\ -\partial_x + i\partial_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_\ell^m(\boldsymbol{r}) & S_\ell^m(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{\ell-1}^{m+1}(\boldsymbol{r}) & S_{\ell+1}^{m+1}(\boldsymbol{r}) \\ R_{\ell-1}^{m}(\boldsymbol{r}) & S_{\ell+1}^{m}(\boldsymbol{r}) \\ R_{\ell-1}^{m-1}(\boldsymbol{r}) & S_{\ell+1}^{m-1}(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}. \tag{10}$$

演算子$\mathcal{D}_\ell^{\pm|m|} = (\pm\partial_x + i\partial_y)^{|m|}(\partial_z)^{\ell-|m|}$ **を定義しておくことで、**
$\mathcal{D}_\ell^m R_\lambda^\mu = R_{\lambda-\ell}^{\mu+m}$ 、$\mathcal{D}_\ell^m S_\lambda^\mu = S_{\lambda+\ell}^{\mu+m}$。
$R_0^0 = 1$、$S_0^0 = 1/r$ **も思い出して** $D_\ell^{-m} R_\ell^m = 1$、$S_\ell^m = \mathcal{D}_\ell^m(1/r)$。
Laplace**方程式：**$\mathcal{D}_1^{+1}\mathcal{D}_1^{-1}[\,] = \mathcal{D}_2^0[\,] \Leftrightarrow (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)[\,] = 0$

8 局所展開

$$[\mathcal{D}_\ell^{-m} R_\lambda^\mu(\boldsymbol{r})]_{\boldsymbol{r}=0} = \delta_{\ell\lambda}\delta_{m\mu}, \tag{11}$$

を考えれば、真空ポテンシャル場から L_ℓ^m を抽出できる：

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} L_\lambda^\mu R_\lambda^\mu(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_L) \Rightarrow L_\ell^m = [\mathcal{D}_\ell^{-m}\Phi(\boldsymbol{r})]_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_L}. \tag{12}$$

つまり任意の場所で局所展開の係数が手に入る。よって Taylar 展開は、

$$\Phi(\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} R_\lambda^\mu(\Delta\boldsymbol{r})[\mathcal{D}_\lambda^{-\mu}\Phi(\boldsymbol{r})]. \tag{13}$$

これは任意の Laplace 方程式の解 $\Phi(\boldsymbol{r})$ に適用できる。（$\Delta\boldsymbol{r}$ の半径内が真空なら有効）

9　加法定理

$R_\ell^m(\boldsymbol{r})$ も $S_\ell^m(\boldsymbol{r})$ も Laplace 方程式の解であった。よって先程の展開を適用すると以下の加法定理を得る：

$$R_\ell^m(\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} R_\lambda^\mu(\Delta\boldsymbol{r}) R_{\ell-\lambda}^{m-\mu}(\boldsymbol{r}), \tag{14}$$

$$S_\ell^{-m}(\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} R_\lambda^\mu(\Delta\boldsymbol{r}) S_{\ell+\lambda}^{-(m+\mu)}(\boldsymbol{r}). \tag{15}$$

余白にもう一度、

$$\Phi(\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} R_\lambda^\mu(\Delta\boldsymbol{r})[\mathcal{D}_\lambda^{-\mu}\Phi(\boldsymbol{r})].$$

10　$1/r$ ポテンシャルの展開

$S_0^0(\boldsymbol{r})$ の加法定理として、

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\|\boldsymbol{r}_S-\boldsymbol{r}_R\|} &= S_0^0(\boldsymbol{r}_S-\boldsymbol{r}_R) \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} S_\ell^{-m}(\boldsymbol{r}_S)R_\ell^m(-\boldsymbol{r}_R) \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{{r_R}^\ell}{{r_S}^{\ell+1}}\left[\frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\left[Y_\ell^m(\theta_S,\phi_S)\right]^* Y_\ell^m(\theta_R,\phi_R)\right] \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{{r_R}^\ell}{{r_S}^{\ell+1}}P_\ell(\cos\theta_{SR}), \quad \text{for} \quad \|\boldsymbol{r}_S\|>\|\boldsymbol{r}_R\|, \\
&\qquad \text{with} \quad \cos\theta_{SR}=(\boldsymbol{r}_S\cdot\boldsymbol{r}_R)/(\|\boldsymbol{r}_S\|\|\boldsymbol{r}_R\|).
\end{aligned} \tag{16}
$$

後ろ２行とかは教科書にも載っているかも。

11 M2P, M2L

$$\frac{1}{\|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i\|}=\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}S_\ell^{-m}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_M)R_\ell^m(\boldsymbol{r}_M-\boldsymbol{r}_i),$$

よりただちにM2Pが確認できる：

$$M_\ell^m=\sum_i q_i\cdot R_\ell^m(\boldsymbol{r}_M-\boldsymbol{r}_i)\Rightarrow\Phi(\boldsymbol{r})=\sum_{\lambda=0}^{p}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda}M_\lambda^\mu S_\lambda^{-\mu}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_M).$$

$\Phi(\boldsymbol{r})$ に $\mathcal{D}_\ell^{-m}$ をあてて局所展開を作ると、

$$\text{M2L:}\quad L_\ell^m=\sum_{\lambda=0}^{p}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda}M_\lambda^\mu S_{\ell+\lambda}^{-(m+\mu)}(\boldsymbol{r}_L-\boldsymbol{r}_M).\tag{17}$$

12 M2M

展開中心を $\boldsymbol{r}_M$ から $\boldsymbol{r}_{M'}$ にシフトすることを考える。

R_ℓ^m の加法定理から、

$$R_\ell^m(\boldsymbol{r}_{M'} - \boldsymbol{r}_i) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} R_\lambda^\mu(\boldsymbol{r}_{M'} - \boldsymbol{r}_M) R_{\ell-\lambda}^{m-\mu}(\boldsymbol{r}_M - \boldsymbol{r}_i).$$

$\sum_i q_i$ を適用することで、

$$\text{M2M:} \quad {M'}_\ell^m = \sum_{\lambda=0}^{\ell} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} M_{\ell-\lambda}^{m-\mu} R_\lambda^\mu(\boldsymbol{r}_{M'} - \boldsymbol{r}_M). \qquad (18)$$

オーバーフローを避けるために、μ のループ範囲は、

$$\max(-\lambda, m - (\ell - \lambda)) \le \mu \le \min(\lambda, m + (\ell - \lambda)).$$

13 L2L

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} L_\lambda^\mu R_\lambda^\mu(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_L) \Rightarrow L_\ell^m = [\mathcal{D}_\ell^{-m} \Phi(\boldsymbol{r})]_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_L},$$

を新しい展開中心$\boldsymbol{r}_{L'}$でもう一度展開するだけ：

$$\text{L2L:} \quad {L'}_\ell^m = \sum_{\lambda=\ell}^{p} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} L_\lambda^\mu R_{\lambda-\ell}^{\mu-m}(\boldsymbol{r}_{L'} - \boldsymbol{r}_L). \tag{19}$$

ついでに、ポテンシャルの勾配は

$$\Phi(\boldsymbol{r}_L + d\boldsymbol{r}) = L_0^0 + (-\Re L_1^1)dx + (\Im L_1^1)dy + L_1^0\, dz, \tag{20}$$

で得られるので、L2Pのかわりに$p = 1$のL2Lを使うと実装が楽。

14　配列への格納

$0 \leq \ell \leq p,\ |m| \leq \ell$ のとき R_ℓ^m や M_ℓ^m は
$1 + 3 + 5 + \ldots + (2p + 1) = (p + 1)^2$ 個の複素数からなる。
$R_\ell^{-m} = (-1)^m [R_\ell^m]^*$ を考えると実効的に $(p + 1)^2$ 個の実数でよい。１例として一次元配列 $X_i\ (0 \leq i < (p + 1)^2)$ に、

$$X_{\ell(\ell+1)+m} = \begin{cases} \Re R_\ell^{|m|} & (m \geq 0) \\ \Im R_\ell^{|m|} & (m < 0) \end{cases}, \tag{21}$$

のように格納できる。

15　実行列化

複素数での線形変換

$$
\begin{aligned}
L_\ell^m &= \sum_{\lambda=0}^{p} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} G_{\ell,\lambda}^{m,\mu} M_\lambda^\mu \\
&= \sum_{\lambda=0}^{p} \left[G_{\ell,\lambda}^{m,0} M_\lambda^0 + \sum_{\mu=1}^{\lambda} (G_{\ell,\lambda}^{m,\mu} M_\lambda^\mu + G_{\ell,\lambda}^{m,-\mu} M_\lambda^{-\mu}) \right],
\end{aligned} \tag{22}
$$

を頑張って実数の変換で書くと、

$$
\Re L_\ell^m = \sum_{\lambda=0}^{p} \left[A_{\ell,\lambda}^{m,0} M_\lambda^0 + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \left\{ (A_{\ell,\lambda}^{m,\mu} + C_{\ell,\lambda}^{m,\mu}) \Re M_\lambda^\mu + (-B_{\ell,\lambda}^{m,\mu} + D_{\ell,\lambda}^{m,\mu}) \Im M_\lambda^\mu \right\} \right],
$$

$$
\Im L_\ell^m = \sum_{\lambda=0}^{p} \left[B_{\ell,\lambda}^{m,0} M_\lambda^0 + \sum_{\mu=1}^{\lambda} \left\{ (B_{\ell,\lambda}^{m,\mu} + D_{\ell,\lambda}^{m,\mu}) \Re M_\lambda^\mu + (A_{\ell,\lambda}^{m,\mu} - C_{\ell,\lambda}^{m,\mu}) \Im M_\lambda^\mu \right\} \right],
$$

ここで、 $A_{\ell,\lambda}^{m,\mu} + iB_{\ell,\lambda}^{m,\mu} = G_{\ell,\lambda}^{m,\mu}, \quad C_{\ell,\lambda}^{m,\mu} + iD_{\ell,\lambda}^{m,\mu} = (-1)^\mu G_{\ell,\lambda}^{m,-\mu}.$

16 まとめ

- 書いてみるとそれなりに式が沢山になった
- とはいえ「FMMの算数」の最短コースだったと思います
- §8, §9あたりは画期的かもしれないです
  （普通は§10から始まる）