

X10a 高速多重極展開法とツリーコードの新しい実現法

牧野淳一郎 (東大総文)

高速多重極展開法 (fast multipole method, FMM) とは、粒子間の重力を階層的なデータ構造を使うことにより粒子数 N に比例した計算時間で求める方法である。Greengard と Rokhlin により 1987 年に提案された。ほぼ同じ頃に提案され、天文では広く使われているツリーコードとの違いは、ツリーコードでは力を及ぼす粒子だけをまとめるのに対し、FMM では力を受ける方も同様にまとめることである。この違いのために、ツリーコードでは計算量が $O(N \log N)$ であるのに対し、FMM では理論上は $O(N)$ になる。

どちらの方法でも、高い精度を実現しようとした場合には粒子をまとめたセルからの力の多重極展開を評価する必要がある。FMM の場合には、さらにこの多重極展開を力を受ける方のセルの中での調和関数展開に置き換えることになる。これらの計算式が非常に複雑なものであることが、高い精度を実現するうえでの障害になっていた。また、高速化の面から見ても不利であった。ツリーコードの場合でも、四重極モーメントより高次の項まで使おうとした場合には同様の困難があった。

今回提案する方法では、多重極展開された重力場をもう一度有限個の粒子 (仮想粒子) で表現し直す。さらに、球面調和関数展開を経ないで直接もとの粒子分布から仮想粒子の分布を求める公式を導いた。この公式を使うことで、球面調和関数展開をしないで高次精度の FMM やツリーコードを実現できる。

この方法には、従来の方法に比べて以下のような利点がある。

- 計算するべき式がはるかに簡単になり、実装が容易である。また、ベクトル化、並列化による高速化も容易である。
- 多重極展開が粒子で表されているので、GRAPE を使った高速計算が可能になる。特にツリーコードの場合は計算コードの少しの手直しで高い精度が実現可能になる。