

無衝突重力多体系の力学進化を計算するための N 体計算コードの開発

加藤 一輝 (筑波大学大学院 数理物質科学研究科)

Abstract

本研究の目的はコンピュータシミュレーションを用いて銀河スケールにおけるコールドダークマター理論の諸問題に挑戦することである。そのための無衝突重力多体系の力学進化を計算するための N 体計算コードを作成した。各粒子間の重力相互作用は、何も工夫しないで計算すると演算数のオーダーが粒子数の 2 乗となり、計算コストがかかってしまう。本研究では計算コストを削減するために、Particle-Mesh(PM) 法を採用した。この方法は、粒子分布から密度分布を求め、ポアソン方程式解き、重力ポテンシャルを求める。そして、その重力ポテンシャルを使って新たな粒子分布を求める方法である。ポアソン方程式を解くのに高速フーリエ変換を用いた結果、演算数のオーダーがメッシュ数 M に対して $M \log M$ となり大幅に計算コストを削減することができた。また、原始銀河の収縮過程である cold-collapse モデルのテスト計算を行い、銀河の力学的な準平衡状態を求めた。そして、エネルギー保存の誤差評価より、十分な解像度を得られる最大粒子数は 3 次元で $M/8$ 程度であることを確認した。

1 Introduction

銀河形成・進化を理解するためにはダークマターハロー (DMH) の力学進化を理解することが重要である。なぜなら、銀河の大部分は DM であり、重力相互作用において DM が支配的だからである。DMH を無衝突重力多体系と見なした場合、現在は N 体計算を駆使した系の進化広く行われている。無衝突系とは個々の粒子同士が力を及ぼし合うのではなく、全粒子が作る滑らかなポテンシャルを受けて粒子が運動する系である。N 体計算において、各粒子間の重力相互作用を直接計算 (Particle-Particle 法 (PP 法)) するには、 N^2 のオーダーのコストがかかり、粒子数を増やすと、現実的でない計算時間がかかってしまう。そこで、高速フーリエ変換 (FFT) を用いてポアソン方程式を解く方法 (Particle-Mesh 法 (PM 法)) を採用した。この場合、計算コストは全メッシュ数 M に対して $M \log M$ のオーダーとなる。本発表では現在開発中の N 体コードの説明を行う。

第 2 章で PP 法と PM 法の説明を行い、第 3 章で PP 法と PM 法の比較、PM 法のパラメータ依存性の議論を行う。そして、第 4 章でまとめを行う。

2 Numerical methods

2.1 Particle-Particle 法

PP 法は各粒子間の相互作用を直接計算する方法である。粒子 i の位置を \mathbf{x}_i 、質量を m_i とし、重力定数を G 、ソフトニングパラメータを ε とすると、以下の式で粒子 i にかかる加速度が計算できる。

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i}^N G m_j \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|^2 + \varepsilon^2)^{3/2}}, \quad (1)$$

この式から分かるように、各粒子に対して (N-1) 回の演算が必要である。故に、全粒子を計算するには N^2 のオーダーの計算が必要となる。ソフトニングパラメータとは、粒子間の距離が 0 になった時に計算が発散するのを防ぎ、物理的な値を得るために導入する非物理的な量である。この ε の値が小さいほど空間解像度は良くなるが、大きな加速度が生じるために細かい時間幅が必要となる。なぜなら、時間幅 Δt は典型的な速度を v とした時 $\Delta t < \varepsilon/v$ のように取るからである。

2.2 Particle-Mesh 法

PM 法とは、まず粒子分布から密度分布を求め、ポアソン方程式解き、重力ポテンシャルを求める。そして、その重力ポテンシャルを使って運動方程式を解くことで、新たな粒子分布を求める方法である。計算は以下のように要約される。

① 粒子分布から密度分布を生成する。(assignment)

$$\rho(\mathbf{x}_p) = \frac{1}{V_p} \sum_{i=1}^N m_i W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p), \quad (2)$$

ρ は密度、 V_p はメッシュの体積を表す。そして、 \mathbf{x}_i, m_i は粒子の位置と質量で \mathbf{x}_p はメッシュの位置である。 W は assignment 関数と呼ばれるもので、質量の各メッシュへの割り振りを表す。

② ポアソン方程式を解きポテンシャルを求める。

$$\phi(\mathbf{x}_p) = V_p \sum_{p'} G(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'}) \rho(\mathbf{x}_{p'}), \quad (3)$$

ϕ はポテンシャル、 G はグリーン関数である。

③ ポテンシャル分布に従って、粒子に働く加速度を求める。(interpolate)

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}_i) = - \sum_p \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p) \phi(\mathbf{x}_p), \quad (4)$$

\mathbf{a} は加速度である。

④ 運動方程式を解く。

エネルギー保存が良い leap frog 法を用いている。

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \Delta t \mathbf{v}_i + \Delta t^2 \mathbf{a}(\mathbf{x}_i) / 2 \quad (5)$$

$$\mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{v}_i + \Delta t [\mathbf{a}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{a}(\mathbf{x}_{i+1})] / 2 \quad (6)$$

⑤ (1) に戻る。

2.2.1 assignment 関数

代表的な assignment 関数を空間 1 次元の場合を例に挙げ紹介する。

・ Nearest Grid Point(NGP) スキーム

粒子の全質量を最も近いメッシュに割り当てる。(図 2 の上) 密度分布が粗く、加速度がメッシュ間で不連続となるので、ほとんど使われない。

・ Cloud In Cell(CIC) スキーム

質量を 1 メッシュ幅に一樣分布させる。(図 2 の中) 質量分布は滑らかだが、その一回微分は不連続

$$W(x) = \begin{cases} 1 - \frac{|x|}{H} & |x| < H, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (7a)$$

x は粒子間の距離で、 H はメッシュ幅を表している。

・ Triangular Shaped Cloud(TSC) スキーム

粒子の位置から 2 メッシュ幅に線形で質量を分布させる。(図 2 の下) 質量分布もその一回微分も連続となる

$$W(x) = \begin{cases} \frac{3}{4} - \left(\frac{x}{H}\right)^2 & |x| \leq \frac{H}{2} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - \frac{|x|}{H}\right)^2 & \frac{H}{2} \leq |x| \leq \frac{3H}{2} \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (8a)$$

質量を分割するメッシュを増やすごとに分布は連続的になるが計算コストが増えるため適切なスキームを選ぶ必要がある。

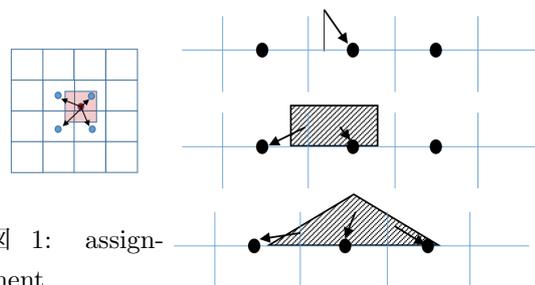


図 1: assignment

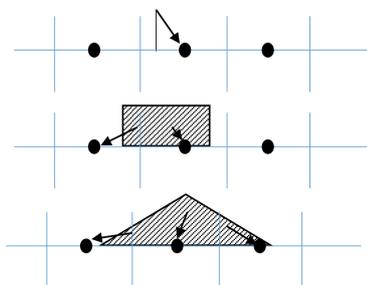


図 2: assignment 関数

一方、加速度の計算において、interpolate 関数 W は密度分布の生成で使った assignment 関数と同じものを用いることで、自己相互作用を打ち消し、運動量を保存させることが出来る。

2.2.2 ポアソン方程式

ポアソン方程式を解くにあたって、FFT を用いる。FFT とはフーリエ変換の周期性を利用してメッシュ数 M に対して M^2 オーダーの計算を計算精度を変えずに $M \log M$ オーダーに減らした計算方法である。FFT は画像処理など実用的な分野で頻繁に使われており、より高速で効率のよい計算コードが日々研究されている。本研究では free software である FFTW ver3.3.4 (HP:www.fftw.org) を利用した。式 (3) をフーリエ変換し、畳み込みの定理を用いると

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}_p) = \hat{G}(\mathbf{k}_p)\hat{\rho}(\mathbf{k}_p), \quad (9)$$

となり、この式を逆フーリエ変換して各メッシュのポテンシャルを求める。

2.2.3 境界条件

ポアソン方程式を FFT で解くにあたって、メッシュの境界では周期境界条件を用いる。しかし、周期境界条件が物理的に適さない場合がある。この場合、図 3 のように一つの領域以外の密度を 0 にすることにより周期境界の周期性を消すことが出来る。孤立した系での N 体計算を行う場合、この方法が用いられる。

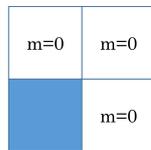


図 3: 孤立系

3 Cold-collapse

テスト計算として原始銀河の収縮過程である cold-collapse モデルの計算を行い、銀河の力学的な準平

衡状態を求める。初期条件は、粒子を半径 1 の球内に一様分布させ、速度分布は等方に系から出ない程度の同じ速さを与える。この時の系の自由落下時間 t_d は式 (10) より 1.1 である。また、 $\Delta t = 2^{-7}$ の固定時間幅で系を時間発展させた。PM 法では孤立系をとり、CIC スキームで計算している。

$$t_d(r) = \sqrt{\frac{3\pi}{32G\bar{\rho}(<r_d)}} \quad (10)$$

$\bar{\rho}(<r_d)$ は半径 r_d の球内の平均密度である。

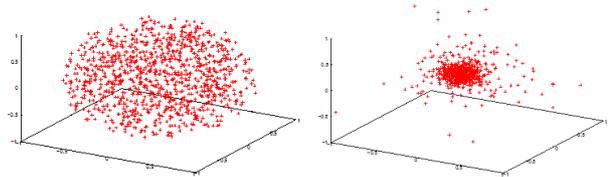


図 4: 初期条件

図 5: t = 4

3.1 PP 法と PM 法の比較

1024 粒子で計算を行った。PP 法でのソフトニングパラメータは $\epsilon = 2^{-5}$ とし、PM 法はメッシュでの系の大きさを 4^3 とし、 128^3 のメッシュ数を取った。すなわち、ソフトニングパラメータとメッシュ幅が同じ大きさである。

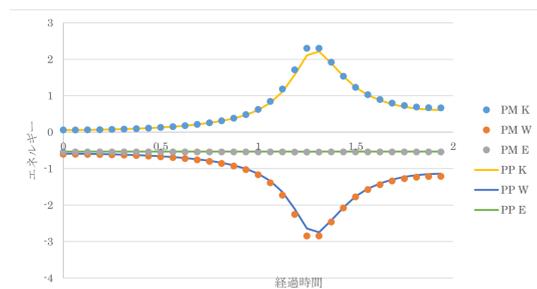


図 6: エネルギー変化

図 6 は縦軸にエネルギー横軸に経過時間を示している。点は PM 法、実線は PP 法を示しており、K は運動エネルギー、W はポテンシャルエネルギー、E は全エネルギーである。この図より PM 法と PP 法は同じ力学進化の結果を示すことが分かる。

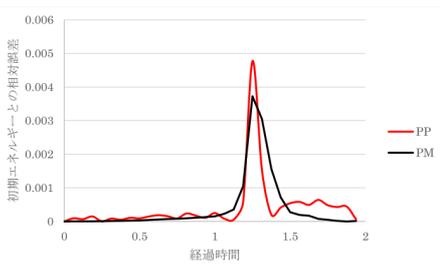


図 7: エネルギーの相対誤差

図 7 は縦軸に全エネルギーの相対誤差を横軸に経過時間を示している。赤線は PP 法で黒線は PM 法を示している。この図より PM 法は PP 法とほぼ同じエネルギー誤差で計算できることが分かる。さらに、粒子数を変え 100 ステップの計算時間を比較した。PM 法は粒子数の 8 倍が計算領域のメッシュ数になるように調整した。

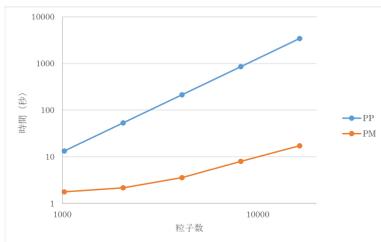


図 8: 計算時間

図 8 は縦軸に計算 100 ステップにかかった時間、横軸に粒子数を取っている。青が PP 法で赤が PM 法である。この図より PM 法の方が圧倒的に計算が速いことが分かる。

3.2 PM 法のパラメータ依存性

粒子数を 1024 に固定し、メッシュ数を変えて計算した。

図 9、図 10 では図 7、図 8 と同様の図が示されている。各実線名の数字は 1 次元方向のメッシュ数であり全メッシュ数はこの数の 3 乗である。また、孤立系をとっていることより、計算領域のメッシュ数は全メッシュ数の 1/8 である。これらの図より計算領域のメッシュ数が粒子数の 8 倍以上であると誤差が少なく解けることが分かった。

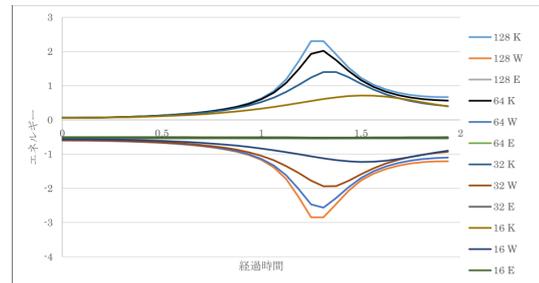


図 9: エネルギーの変化

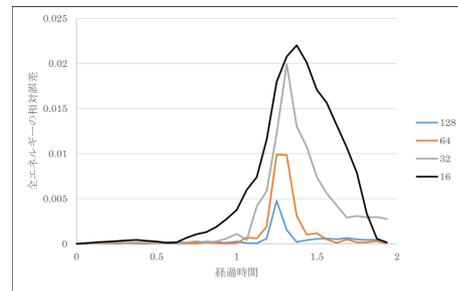


図 10: エネルギーの相対誤差

4 Summary

無衝突重力多体系の力学進化を計算する N 体計算コードを PM 法で作成し、テスト計算を行った。その結果、PM 法は PP 法と同様の結果が得られ、エネルギーも保存することが分かった。そして、計算コストが大幅に削減でき、多数の粒子を取り扱うことのできる N 体計算コードを書くことができた。また、PM 法で十分な解像度で取り扱うことの出来る粒子数は全メッシュ数の 1/8 程度であることが分かった。

Reference

- 1) Binney, J. , and Tremaine, S. 2008, Galactic Dynamics 2nd ed, Princeton University Press
- 2) R, W, Hockney. and J, W, Eastwood. 1998 Computer simulation using particles, Taylor and Francis Group
- 3) 牧野淳一郎 et al. 2013 N 体シミュレーション大寒の学校教科書