

重力多体計算のアルゴリズム

国立天文台
理論研究部/天文シミュレーションプロジェクト (CfCA)
牧野淳一郎



今日の話の構成

1. 重力多体系のシミュレーションではどんなことをしているか？
2. 重力多体系のシミュレーションでは何が難しいか？
 - 時間方向
 - 空間方向
3. どんな方法を使うか？
4. 最近の方向

多体シミュレーションの役割

- 観測の解釈 — 理論+モデル計算
知られている物理法則から天体現象を理解する
- もうちょっとと原理的な問題
カオス
熱力学

そもそもどんな対象を考えるか？

大抵の天文学的对象：自己重力系

一つの星：重力とガスの圧力が釣りあう

それよりも大きい構造：重力を構成要素の運動エネルギーで支える

- 太陽系
- 星団
- 銀河
- 銀河団
- 宇宙の大規模構造

例：星団

- 球状星団
- その他、丸い星団

丸い： ある程度熱力学に緩和していることを意味する。(円盤銀河なんかとは違う)

しかし、熱平衡状態ではない(自己重力系には熱平衡状態は存在しない)

球状星団 M15



地球からの距離 10kpc (1pc: 3 光年
くらい)

星の数: 200 万くらい

質量: 太陽の 50 万倍

半径 (質量の半分がある): 4 pc

球状星団 G1



アンドロメダ (M31) にある、局所銀河団で最大の球状星団

質量:

見積もり (a) 1.5×10^7 太陽質量
(Meylan et al. 2001)

見積もり (b) 8×10^6 太陽質量
(Baumgardt et al. 2003)

2倍の違い: 力学モデルの違いから。

球状星団を研究する理由

沢山あるが、、

- 銀河でもっとも古い星の集団 — 球状星団がどうやってできたかは銀河自体がどうやってできたかと関係
- 出来てから星形成やガスとの相互作用が基本的にはない — 理想的な「自己重力質点系」に近い
- より複雑な銀河中心等を理解するための鍵
- 激しい星形成領域 — 比較的大きな星団になっているものが多いらしい。何が見えるか、何が起こるかを理解することは星形成過程の理解にも重要。
- 中間質量ブラックホール???

Portegies Zwart 作ムービー

もうちょっと原理的な問題

重力だけで相互作用する質点の集まりには一体なにが起きるのか？

粒子数 $N = 2$: ニュートンが解決

$N > 2$ ポアンカレが「一般には解析解はない」ことを示した

球状星団 : $N \sim 10^6$

銀河: $N \sim 10^{11}$

なにが起きるか？

数値計算なら、初期条件を与えれば答はでる。

計算すればなんでもわかるか？

原理的には答は YES。
現実の問題としては NO。

- 計算機・計算方法限界 (今日の話の主題)
- 素過程の理解 (今日は省略)

解く方程式 — 重力多体系の基礎方程式

もとの方程式自体はもちろん、各粒子の運動方程式

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} G m_j \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|^3}, \quad (1)$$

数値計算は基本的にはこれを使う

何故多体問題を直接数値計算するのか？

もうちょっと違う方法

- 解析的ななんか
- 分布関数に対するフォッカー・プランク方程式

現実問題として、、、

- 解析的には解けない
- フォッカー・プランク近似は正しいとは限らない
- 多次元ではフォッカー・プランク方程式は計算量的に解けない

で、多体問題を直接数値積分すれば、「原理的には」なんでもわかるはず。

数値計算の方法等

この種の問題：基本的に

- より大粒子数で
- より正確な

計算をすることで、「新しいことがわかる」(こともある)。



どうやって今までより「良い(大きく、正確な)」計算ができるようになるかが問題

「良い」計算をする方法

基本的な事実: 速く計算できればそれだけ良い計算が可能になる。(例は時間に余裕があればいくつかあげたい)

それしか方法がないわけではないが、「速く計算できるようにする」のは極めて重要な方法。

- 計算法を改良する (今日の本題)
- 速い計算機を買う
- 速い計算機を作る

計算法

原理的には、多体シミュレーションはとっても単純：
運動方程式

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} G m_j \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|^3}, \quad (2)$$

を数値積分するだけ。

右辺を計算するプログラム：2重ループで10行くらい
時間積分：なにかルンゲクッタとか適当なものを使えばいい

というだけで話が済めばいいけれど、もちろん世の中はそんなに簡単ではない。

何が問題か？

- 計算精度の問題：2粒子の近接散乱、自己重力による構造形成 — 時間刻みをどんどん短くしないとちゃんと計算できなくなる。積分時間が長いので高精度の公式を使いたい。
- 計算量の問題：右辺の計算量が $O(N^2)$ — N が少し大きくなるとすぐに計算時間が現実的ではなくなる

というわけで、どんな方法を使っているかという話を簡単に。

計算法 — 時間領域

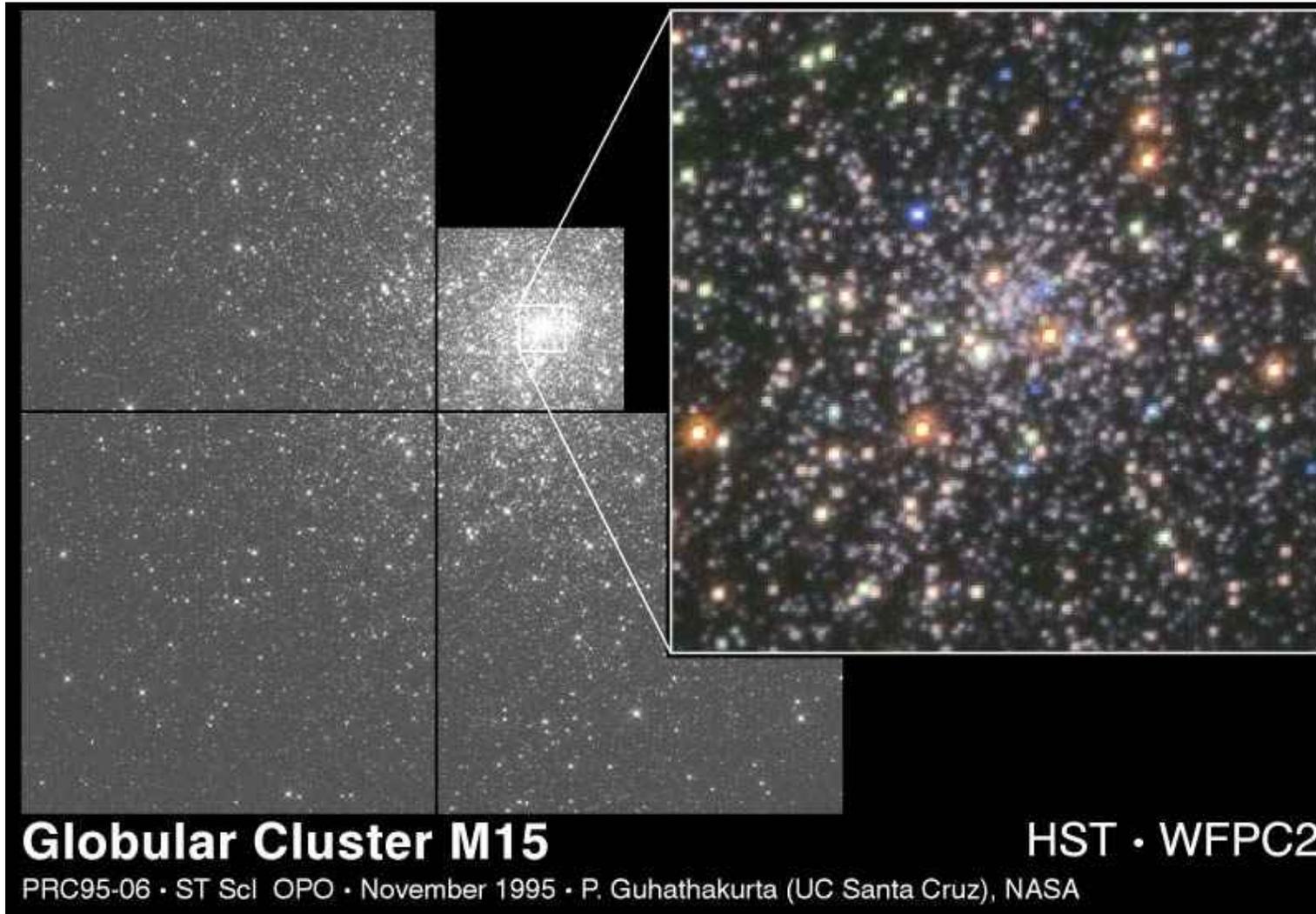
算数としては、単に常微分方程式の初期値問題の数値解。
ナイーブに考えると、いろんな公式がライブラリであるので、それを使えば済みそうな気がする。
それだけでは済まないのが問題。
済まない理由:

- 粒子によって非常に大きく軌道のタイムスケールが違ふことがある
- 連星とかそういったものができる

軌道タイムスケールの問題

- 構造形成による効果
- 一様な系でも起きる問題

構造形成による効果：球状星団の例



構造形成による効果 (続き)

- 「コア崩壊型」星団 — 星の数密度が中心までべき (半径の -1.8 乗) で増加
- 中心にブラックホールがある？

星の運動のタイムスケール: 中心に近いほど短くなる。
等温カスプ (密度が半径の -2 乗に比例): タイムスケールの分布がべき乗になる。

一様な系でも起きる問題

重力が引力であるために確率的には2つの粒子がひじょうに近づくような近接散乱が起こる

インパクトパラメータが0に近い2体衝突: 非常に短い時間刻みが必要
これは重力多体系特有の問題: 相互作用が引力で、しかも距離0で発散するため。

例えば分子動力学計算ではこういう問題はおこらない。

計算量への影響

単純な可変時間刻みでは計算量が大きくなりすぎる。

理由: どちらの場合も、タイムステップの分布がべき乗的なテイルをもつようになる。

粒子数が増えるに従って、タイムステップが短くなる。

構造形成の効果: 最悪 $O(N^{1.3})$

2体衝突の効果: $O(N^{1/3})$ 程度

対応:

- 粒子毎に時間刻みをバラバラに変化させる。(独立時間刻み)
- 2体衝突、連星は座標変換して扱う。

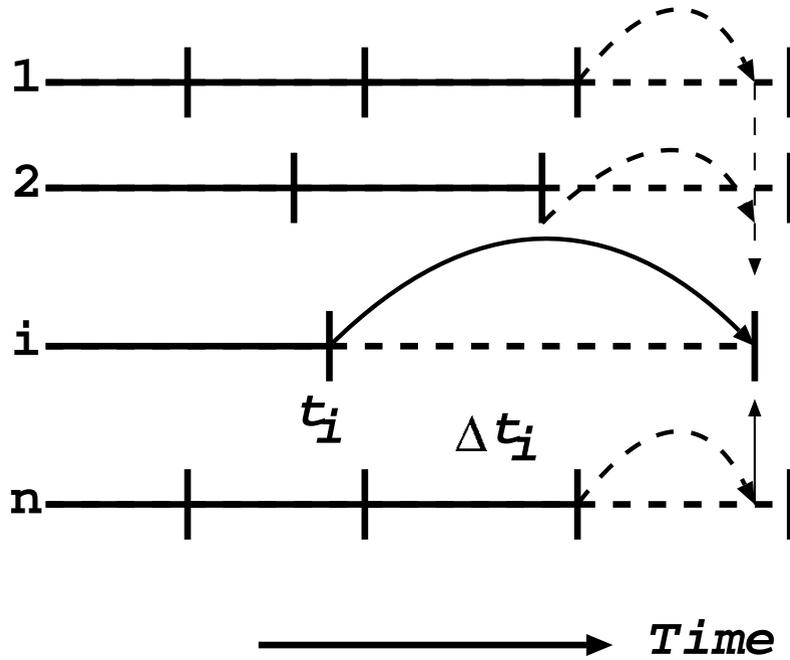
独立時間刻みの原理

粒子毎にばらばらの時刻 t_i と時間ステップ Δt_i を与える

1. $t_i + \Delta t_i$ が最小の粒子を選ぶ。
2. その粒子の軌道を新しい時刻まで積分する。
3. その粒子の新しい時間刻みを決める。
4. ステップ 1 に戻る。

ある粒子の時刻 $t_i + \Delta t_i$ で他の粒子の位置が高精度で必要:
予測子・修正子型の公式を使う。

独立時間刻み



(Aarseth 1963)

- 各粒子にそれぞれ時刻と時間刻みを与える
- 「イベント駆動」時間積分 — $t_i + \Delta t_i$ がもっとも小さい粒子が積分される

時間積分公式に対する要請

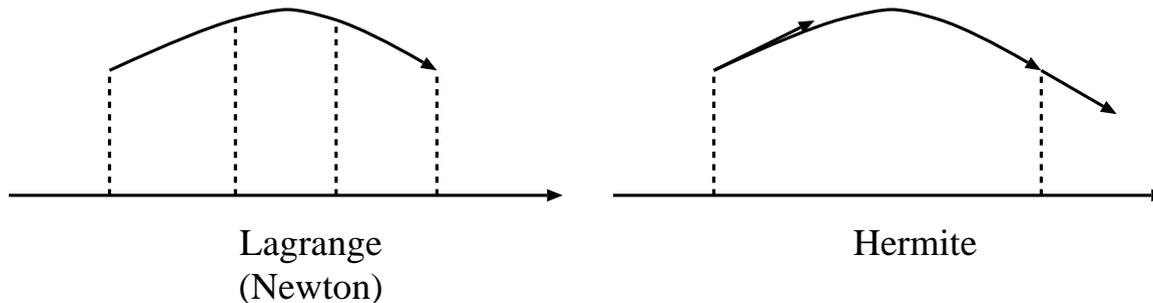
- 高次の予測子が必要 (他の粒子の位置が必要)
- 可変時間刻みが必要
- 積分区間の途中で加速度を計算するような方法は使えない。
 - 線形多段階法は使える
 - ルンゲ・クッタは使えない
 - シンプレクティック法は単純には使えない

時間積分公式

次数：「4次くらいが適当」(JM 1990)。

もっと高いほうが良い: (Nitadori and JM 2007)

- Aarseth scheme (Aarseth 1963): 可変刻みのアダムス法、PECモード、4次、2階の方程式用。
- Hermite scheme (JM 1990): ラグランジュ補間(ニュートン補間)の代わりに、加速度の一階時間導関数も使ってエルミート補間を構成。



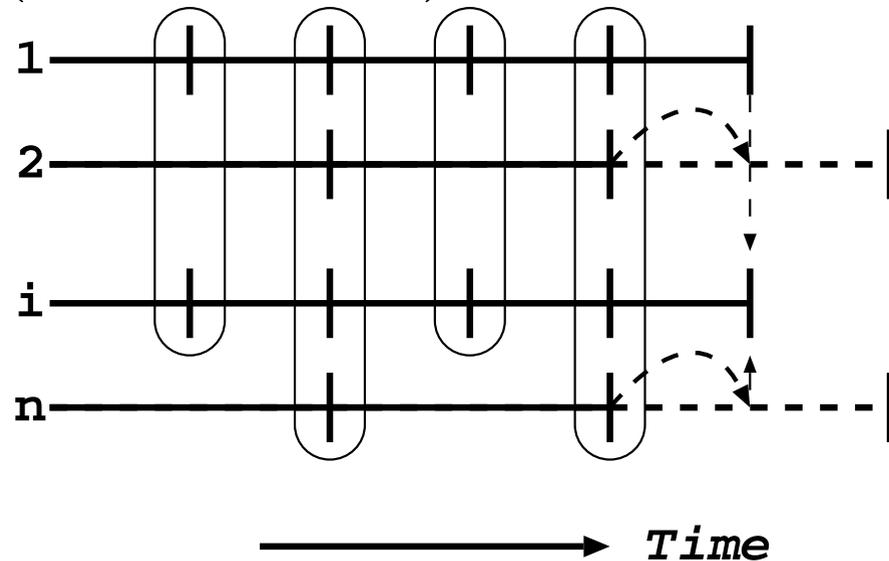
高次エルミート

Nitadori and JM 2007

- 2階導関数まで直接計算してエルミート補間: 6次公式
- 3階導関数まで直接計算してエルミート補間: 8次公式
- 予測子は前のステップの値を使って構成

ブロック時間刻み法

(McMillan 1986) ベクター / パラレル計算機のための改良



- 時間刻みを 2^{-k} に制限する。
- $t_i + \Delta t_i$ が同じ (Δt_i は違っててもよい) 粒子は同時に積分される。

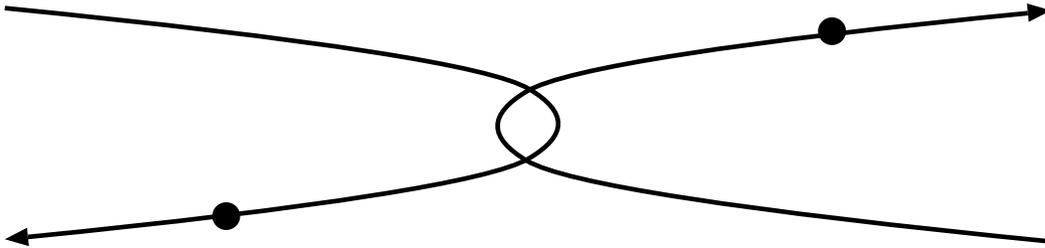
$O(N_c^{2/3})$ 個の粒子 (N_c は高密度コアのなかの粒子数) を並列計算

— そんなに大きな数ではない。

近接遭遇

連星に限らず、2つの星の距離が極端に近づくと計算が破綻する(相互作用ポテンシャルが発散するので数値誤差も発散する)。なんらかの対処が必要。

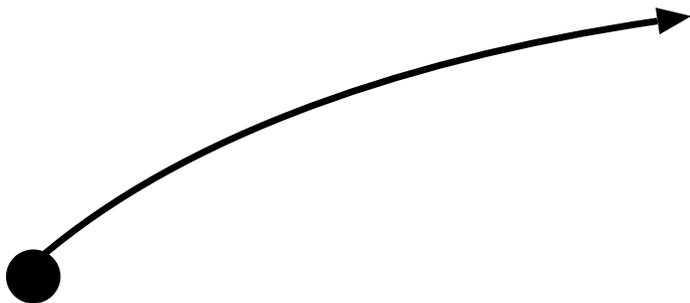
原理的には“straightforward”: 2体が十分近づいたら、解析解(またはそれ+摂動)でおきかえればいい。



具体的には

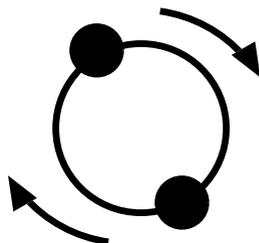
- 2つの粒子が近付いたかどうかをチェックする
- 近付いていたら、その2粒子の重心および相対位置（内部運動）を新しい変数として時間積分する
- 相対運動に対して、回りの粒子からの摂動が十分に小さければ数値積分しないで解析的に解く
- 2つの粒子が十分離れたらその重心と相対位置から元の粒子を復元する

連星



普通の星:他の星全体が作るポテンシャルの中を運動

連星: 2つが重力的に結合
できた:



- 生まれる時に連星 (結構多い)
- 3体相互作用

連星と計算量

連星は軌道周期が短い

連星の熱力学: ほぼ「等温」のバックグラウンドに埋めこまれた自己重力系
一旦周りよりも「温度」が上がると、周りに熱を与えて無制限に温度が上がる。

(3体相互作用作用でエネルギーを与える)

周りと温度が等しい = 軌道長半径 \sim 系の大きさ/ N

軌道周期が他の星の $1/N$

軌道周期が他の星の $1/1000N$ くらいまでは系内にいられる。

こんなのを計算してたら日が暮れるところではない。

連星の扱い

十分コンパクトな連星で、回りの粒子からの摂動が無視できるほど小さい場合：要するに単に摂動を無視すればよい

どれくらい摂動が小さいなら無視していいか？ — 目的による
エネルギー：断熱不変量
角運動量：そうではない

角運動量について正確な結果を得るのは現状では難しい

弱い摂動の扱い

まともにやるなら、軌道要素で表して、外力を軌道平均して、、、

画期的に安直な方法

- 摂動論的扱いができる範囲内で連星の軌道周期を遅くする
- 摂動項は、実時間での軌道要素の変化率が同じになるようにスケールして運動方程式に入れる。

摂動論の範囲内では摂動論と同じ結果を、軌道を直接数値積分して得ることができる。
(平均運動共鳴は扱えない)

うまくいかないケース

階層的な3重星：連星の外側をもう一つ星が回っているようなもの

- 安定条件は数値的にしかもとまっていない。
- 共鳴が効くので時間のスケールリングはできない

いろいろ研究中

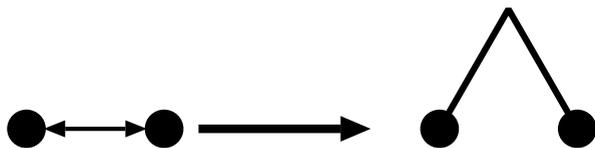
2体以上の系の扱い

例えば3体の系を重心運動と内部運動に分離するにはどうするか？

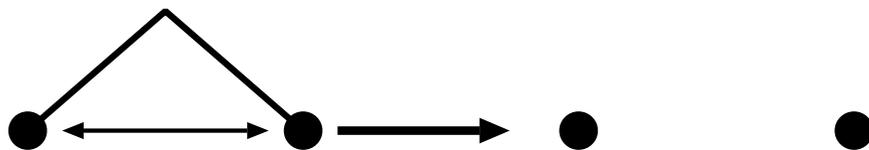
- 「3体」として認識、それ用の正則化
- 2体+1体としては認識、再帰的に扱う

今のところ広く使われているコードは前者
後者のコードもそれなりに動くようになってきている

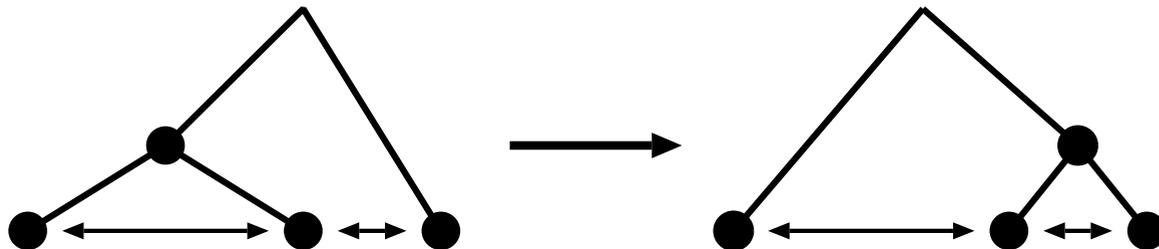
構造の組み換え



$$r < r_{close}$$



$$r > \gamma r_{close}$$



計算法 — 空間領域

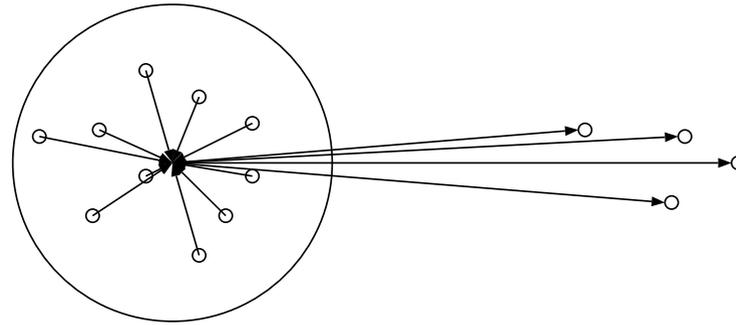
運動方程式の右辺をどうやって評価するか？という問題。

以下、**独立時間刻みのことはとりあえず棚上げ**にして話をすすめる。

広く使われている方法： Barnes-Hut treecode

有名な方法： 高速多重極法

ツリー法、FMMの基本的発想

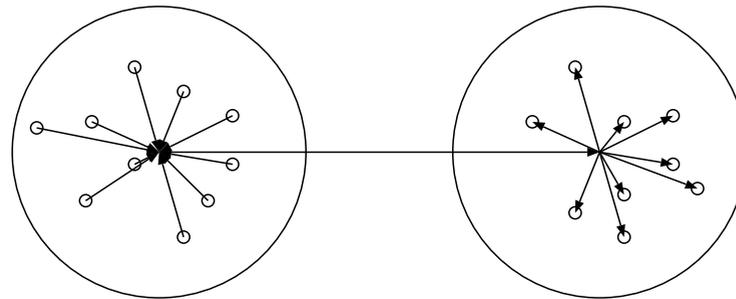


Tree

遠くの粒子からの力は弱い



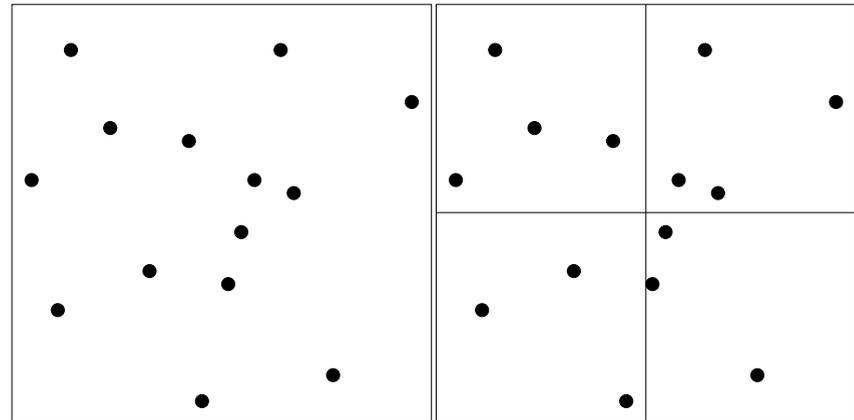
まとめて計算できないか？



FMM

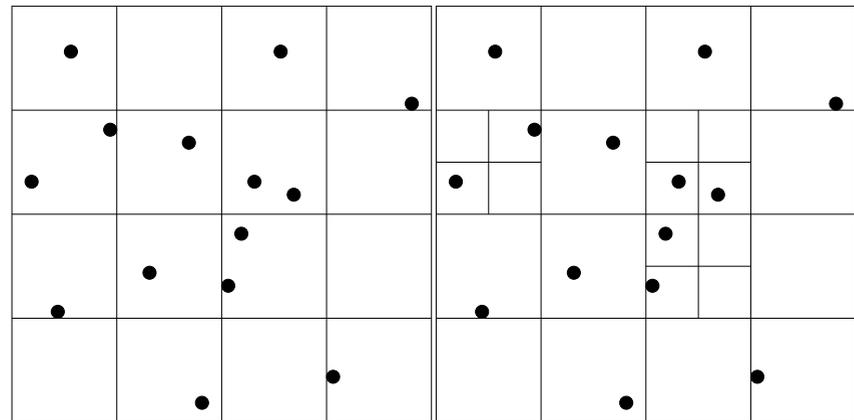
- ツリー：力を及ぼすほうだけをまとめて評価
- FMM：力を受けるほうもまとめて評価

どうやってまとめるか？ — ツリー法の場合



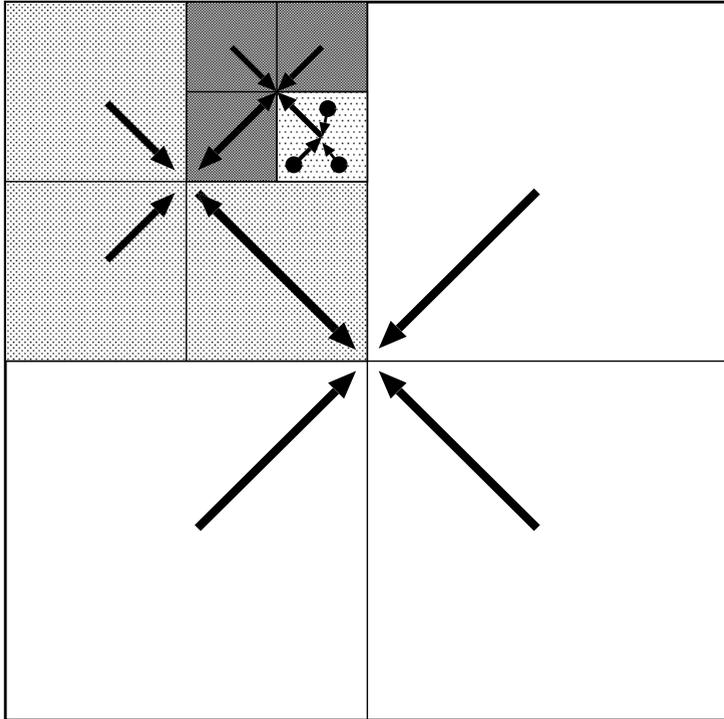
階層的なツリー構造を使う。

- まず、全体が入るセルを作る
- それを再帰的に 8 (2次元なら 4) 分割する
- 中の粒子がある数以下になったら止める (上の例では1個)



多重極展開の構成

まず、ツリーの各セルのなかの粒子がつくるポテンシャルの多重極展開を計算する。



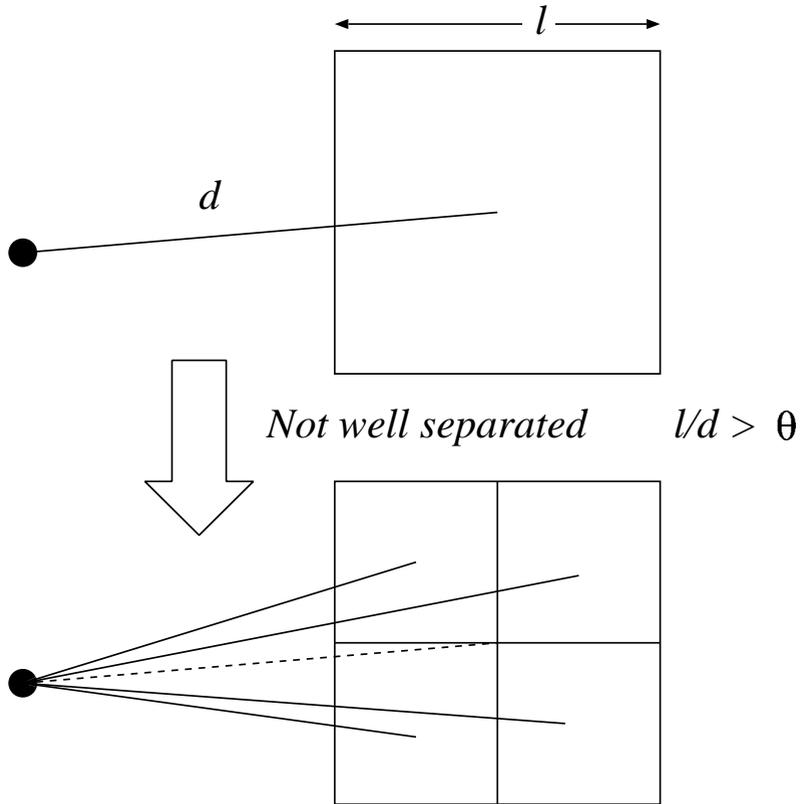
- 最下層のセル: そのなかの粒子が作るポテンシャルを多重極展開
- それ以外: 子セルの多重極展開の展開中心をシフトして加算

下から順に計算していけばよい。

計算量は $O(N)$ 。展開をシフトする式はかなり複雑。

ツリー法での力の計算

再帰的な形に表現すると格好がいい。



- 十分に離れている: 重心(あるいは多重極展開)からの力
- そうでない: 子ノードからの力の合計

系全体からの力 = ルートからの力

ツリー法の効果

- 計算量のオーダーが $O(N^2)$ から $O(N \log N)$ に減る。
- 現状では、例えば天文台の Cray 1024 コアを使って 2048^3 粒子が 1 ステップ数分とか。
- もしも直接計算したら 1 ステップ数十年かかる。

独立時間刻みとツリー法の組合せ

- 原理的にはこれが望ましいに決まっている
- 研究も昔からある。McMillan and Aarseth 1993 とか
- (牧野は 1987 年あたりに色々やったけど論文書いてない)
- あまり上手くいっていない

問題点:

- 現在の殆どの実装は、一番短いステップ毎にツリーを作り直す。そうすると、ツリーを作る時間が全部になって速度があがらない。
- 部分的にツリーを作り直すとかも試みられているが、特に並列化と組み合わせるとコードが複雑になりすぎて手に負えない。

並列化向けのアプローチ

例えばこんなのを扱いたい
銀河中心近くでの高密度星団の進化

- 星団を銀河に埋め込む
- 星団内は精度が欲しい
- 銀河はまあ適当でもよい

ここ数年で色々ごまかす方法を考えた。

- BRIDGE scheme
- もうひとつ別 (押野、in preparation)

BRIDGE

MVS (混合変数シンプレクティック) に類似

単純な陽的シンプレクティック: ハミルトニアンを運動エネルギーとポテンシャルに分解、交互に積分

MVS: 惑星の運動を、太陽の回りのケプラー運動とそれ以外の相互作用に分解。

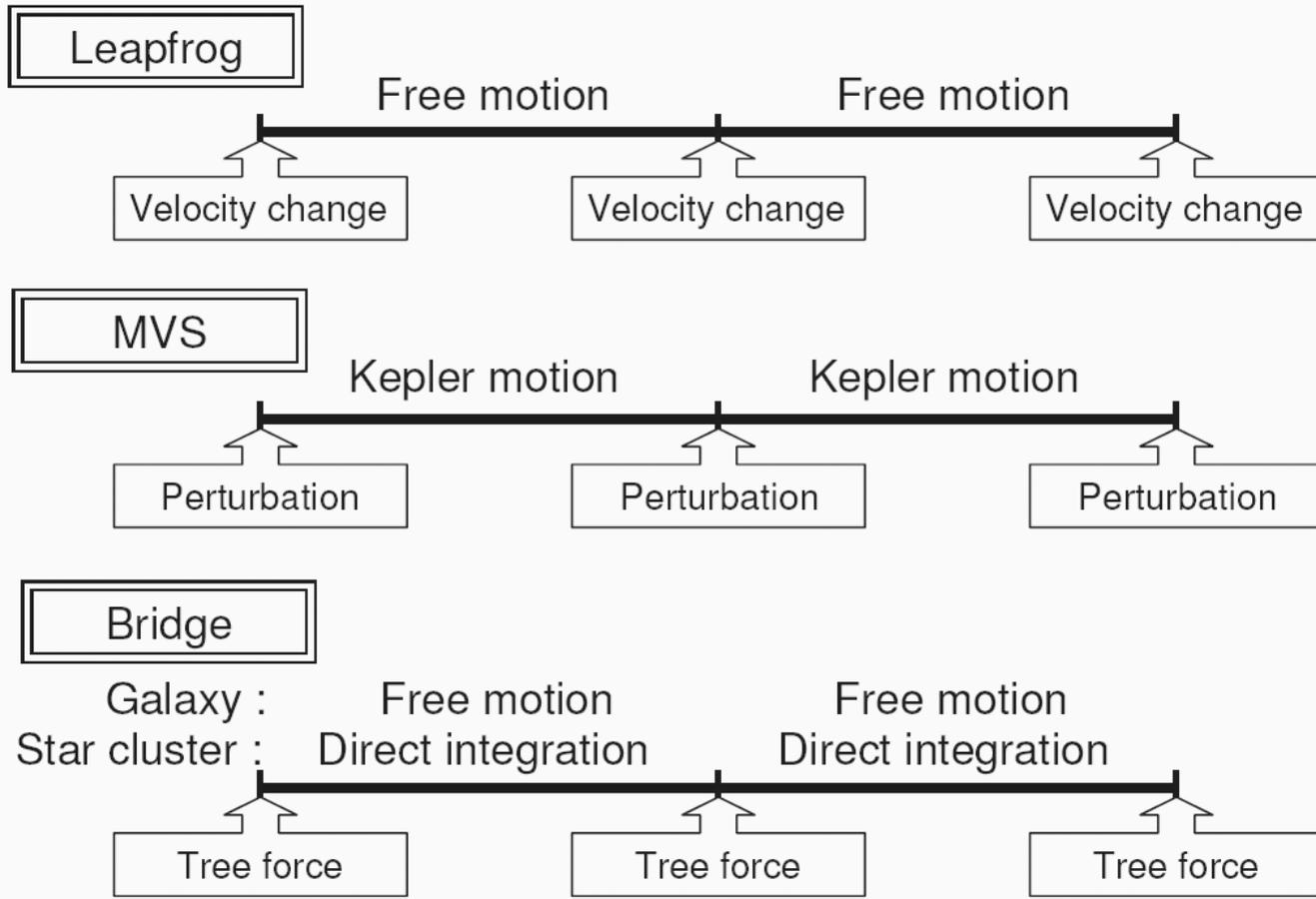
我々の方法: ハミルトニアンを

- 運動エネルギーと星団内ポテンシャル
- それ以外のポテンシャル

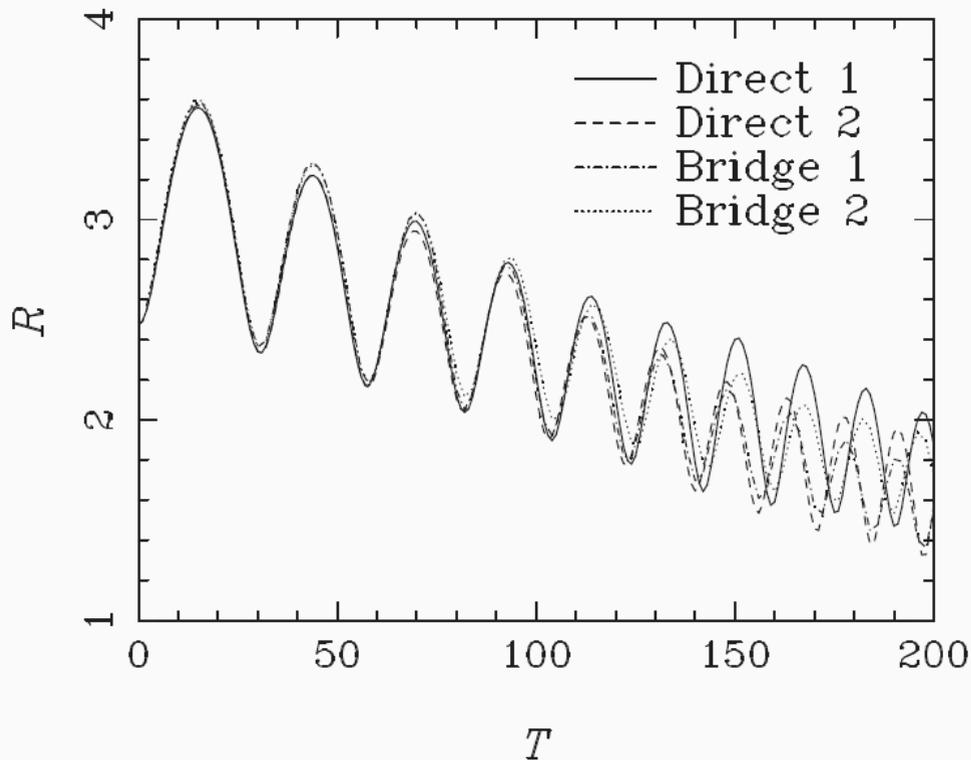
に分解、前者を (シンプレクティックでない) 独立時間刻みで高精度に積分

BRIDGE (Bridge is for Realistic Interactions in Dense Galactic Environment)

How does it work?



Test result



- $N = 100k + 2k$
- Similar model as in Fujii et al. 2996
- Two runs: different random seeds
- Results agree well.
- Energy error: dominated by the parent galaxy.

もうひとつの方法

BRIDGE は銀河+星団1つだと素晴らしく上手くいくが、限界もある

- 星団複数だと計算大変
- 実際に銀河の中で星団が生まれてくるような現象には使いにくい

というわけで、

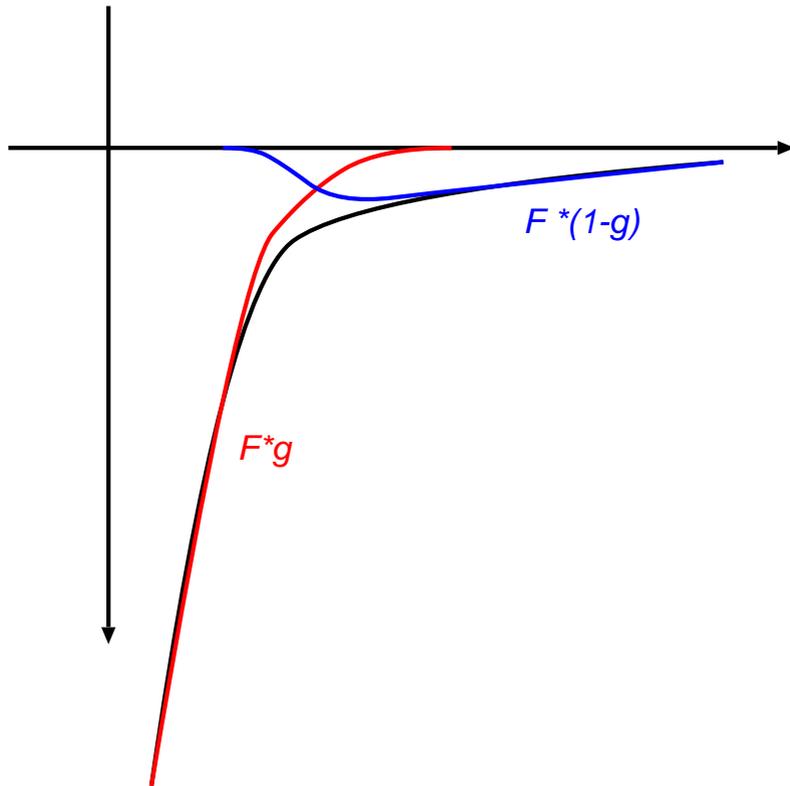
- 粒子の種類によってではなく、距離で分けたらどうか？

具体的には

2 粒子間の重力を形式的に2つのタームに分ける。

$$F_{ij} = -Gm_i m_j \frac{r_{ij}}{|r_{ij}|^3} = F_{ij}(1 - g(|r_{ij}|)) + F_{ij}g(|r_{ij}|)$$

こんな感じに分解



- $F * g +$ 運動エネルギー を独立時間刻みで高精度に積分
- $F * (1 - g)$ はツリー+リープフロッグで積分 (こっちはシンプレクティック)
- g はコンパクトサポートで、積分公式に必要な回数だけ微分できる必要あり (スプラインを使う)

開発状況

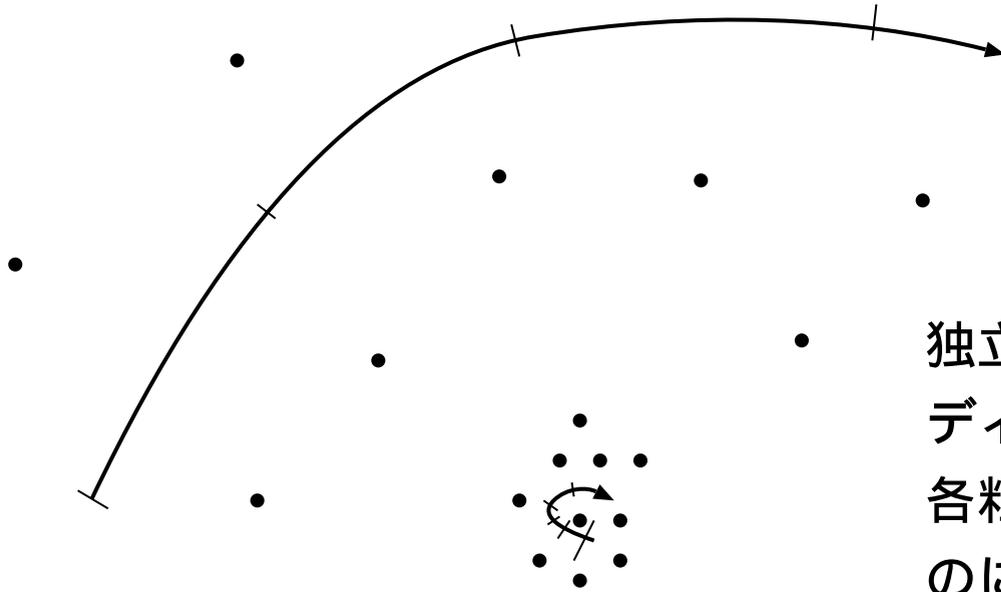
- とりあえず、惑星形成の計算向けに実装、テスト中
- 上手く動いているような気がする
- MVS と同じく、太陽重力は高精度側に入れる
- 並列化と相性がよい。

まとめ

- 重力多体系向けの計算方法を概観した
- 時間スケール・空間スケールの幅があるために、それぞれについて適応的な方法が使われている
 - 時間: 独立時間刻み
 - 空間: ツリー法
- 2つの組合せは難しい。
- 限られた状況では上手くいくような方法はいくつかできた

おまけ:独立時間刻みというのは本当に大丈夫なのか？

何が問題か？



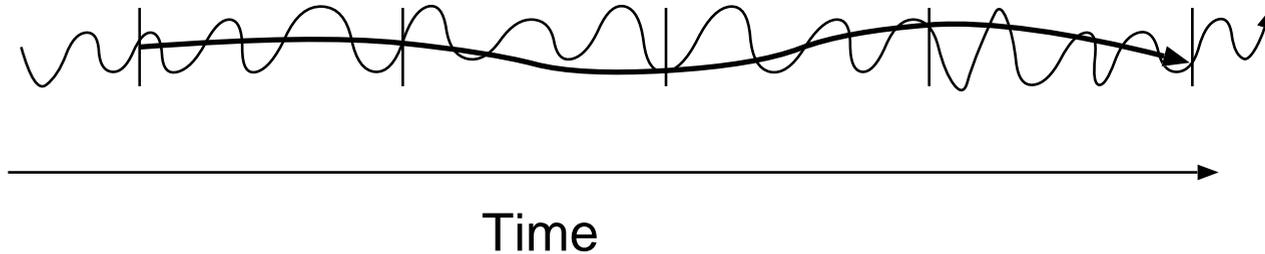
独立時間刻みの基本的なアイデア:

各粒子は自分の軌道を分解するのに必要十分な時間刻みを取る

タイムスケールが短い粒子から長い粒子への力はどうなっているのか？

どうなっていると思われるか？

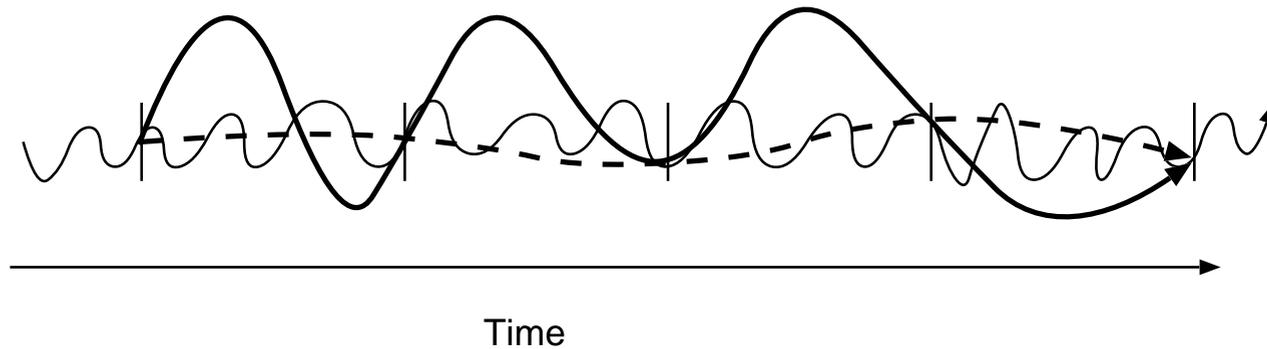
全然デタラメなはず。



- 力は時間スケールの小さい変動をするはず。
- タイムステップが長いと、この力がランダムにサンプルされる。(タイムスケールの短い粒子の軌道が完全に周期的でないなら)

エルミート公式の場合

もっと悪い。

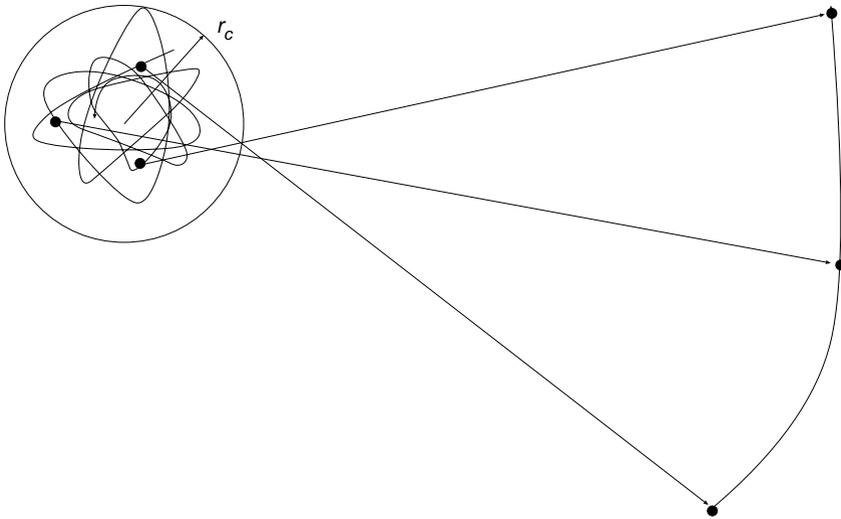


- 導関数の情報を使うべく頑張る
- でも無理
- 無理に計算する

どういう時に起こるか？

星団の場合:

- コア領域の粒子の軌道タイムスケールが星団の典型的な星の時間刻みより短くなると起こる。
- 大雑把にいて: $r_c \ll r_h N^{-1/3}$
- 収縮から膨張に移る時: $r_c \sim r_h / N \ll r_h N^{-1/3}$



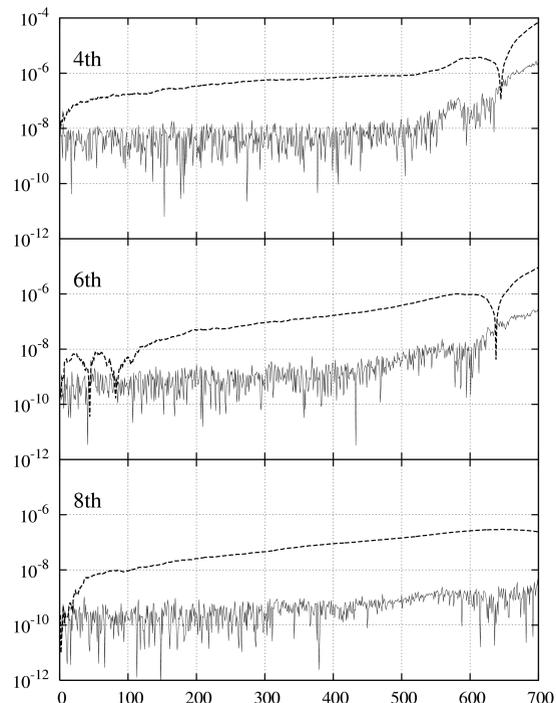
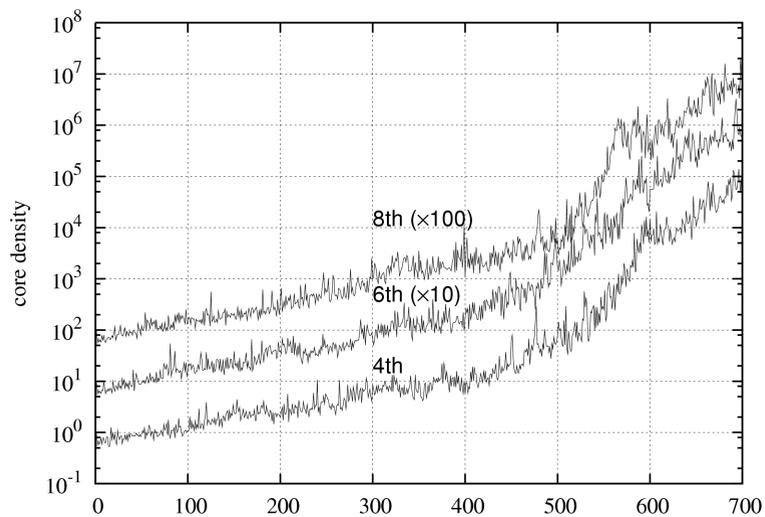
本当に問題は起こるか？

コアが小さくなるとエネルギー誤差が急激に増大する

ということは昔からなんとなく知られていたが、コア自身の積分誤差だとみんな思っていた。

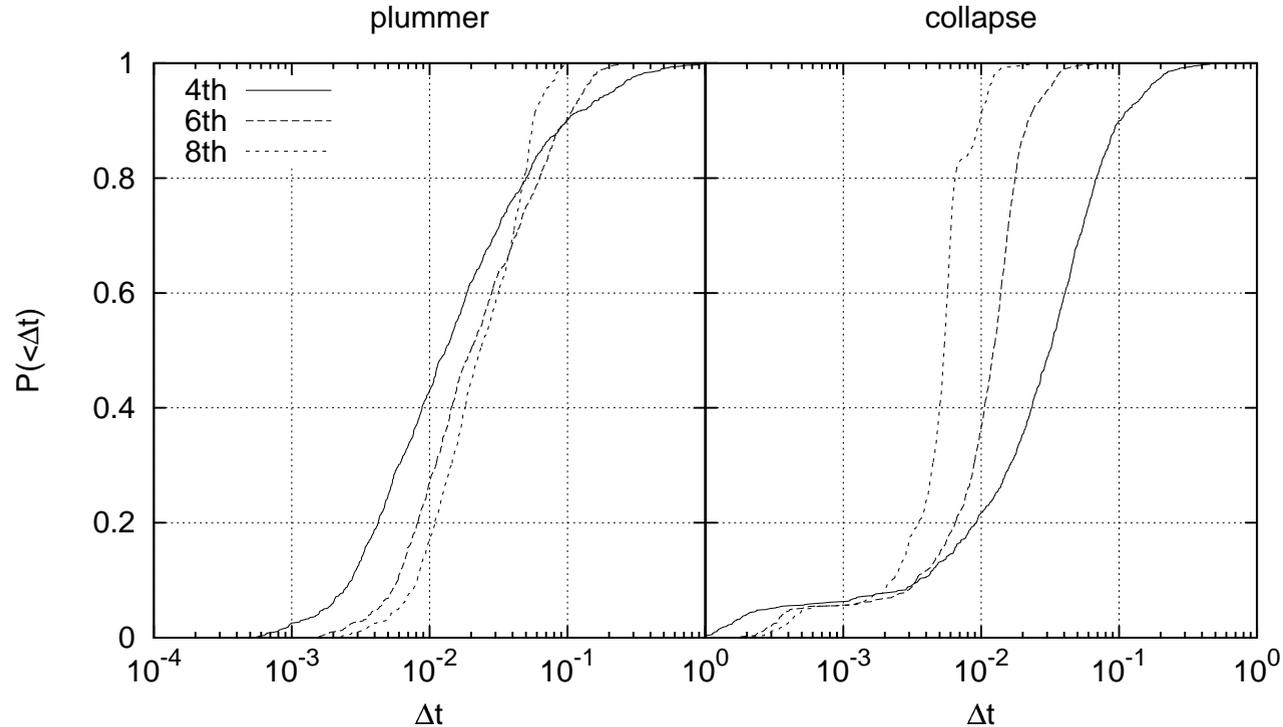
そうではないらしいと判明: Nitadori and JM 2007 の数値実験
やったこと: 1024 体プラマーモデルをコラプスまで計算

中心密度と誤差



8次スキームだとコラプスしても誤差が増えない。

タイムステップ



左:初期条件、右:コラプスした後

- 基本的に外側のほうがタイムステップ長い
- 8次スキームは全体に時間ステップが短くなっている
- 4次スキームでは外側のほうは長いまま

解釈

- 8次スキームでは、外側の粒子がコアの粒子の軌道変化のためにタイムステップが短くなる
- そのため、コラプスしても誤差が増えない
- 4次スキームではそうならない
- 6次は中間的
- 8次スキームは安全だが、「独立時間刻み」といえるか？
- 一番短いタイムステップの30倍程度が限界？