



TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

---

Fakultät für Mathematik  
Professur für Angewandte Funktionalanalysis

# Diplomarbeit

Approximationsverfahren zur schnellen Energieberechnung in  
Partikelsystemen

Franziska Nestler

Chemnitz, den 10. September 2012

**Gutachter:** Prof. Dr. Daniel Potts  
Dr. Ralf Hielscher

**Nestler, Franziska**

Approximationsverfahren zur schnellen Energieberechnung in Partikelsystemen

Diplomarbeit, Fakultät für Mathematik

Technische Universität Chemnitz, September 2012

### **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die mich bei der Anfertigung meiner Diplomarbeit unterstützt haben. Besonderer Dank gilt dabei Prof. Dr. Daniel Potts, der mit großem Engagement zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat, und meiner Familie, die mich während des Studiums in allen Belangen unterstützte.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Einige Begriffe aus der Fourier-Analysis . . . . .	5
2.1.1	Fourier-Reihen . . . . .	5
2.1.2	Fourier-Transformation . . . . .	6
2.1.3	Die Poissonsche Summenformel . . . . .	7
2.1.4	Schnelle Fourier-Transformation (FFT) . . . . .	9
2.1.5	Nichtäquidistante schnelle Fourier-Transformation (NFFT) . . . . .	10
2.2	Anharmonische Fourier-Reihen . . . . .	13
2.2.1	ESPRIT-Algorithmus . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Partikelsysteme mit dreidimensionalen periodischen Randbedingungen</b>	<b>17</b>
3.1	Bedingt konvergente Reihen und Konvergenzfaktoren . . . . .	18
3.2	Die Ewald-Summation . . . . .	19
3.2.1	Der Konvergenzfaktor $e^{-s\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\ ^2}$ . . . . .	24
3.2.2	Zusammenfassung und Algorithmus . . . . .	25
3.2.3	Bewegung eines Teilchens . . . . .	27
3.2.4	Abschätzung des Fehlers bei der Berechnung der Energie . . . . .	28
3.3	Approximation mittels Fourier-Summen von Gauß-Funktionen . . . . .	32
3.3.1	Eindimensionales Modell . . . . .	32
3.3.2	Berechnung der Energie im dreidimensionalen Fall . . . . .	41
3.3.3	Bewegung eines Teilchens . . . . .	48
3.3.4	Optimale Wahl der Parameter und Tests . . . . .	52
3.3.5	Vergleich mit Ergebnissen der Ewald-Methode . . . . .	60
3.3.6	Zusammenfassung der Resultate . . . . .	62
3.4	Vergleich der beiden Methoden . . . . .	65
<b>4</b>	<b>Partikelsysteme mit offenen Randbedingungen</b>	<b>69</b>
4.1	Eindimensionales Modell . . . . .	69
4.2	Berechnung der Energie im dreidimensionalen Fall . . . . .	73
4.3	Bewegung eines Teilchens . . . . .	78
4.4	Optimale Wahl der Parameter und Tests . . . . .	81

<b>5</b>	<b>Partikelsysteme mit gemischten Randbedingungen</b>	<b>89</b>
5.1	Ewald-Summation unter zweidimensionalen periodischen Randbedingungen . . . . .	90
5.1.1	Herleitung . . . . .	91
5.1.2	Bekanntes Verfahren . . . . .	96
5.2	Approximation mittels Fourier-Summen von Gauß-Funktionen . . . . .	97
5.2.1	Approximation der Gauß-Funktionen . . . . .	97
5.2.2	Berechnung der Energie . . . . .	100
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>105</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>109</b>

# 1 Einleitung

Ein wichtiger Bestandteil der angewandten Mathematik ist die Entwicklung effizienter Algorithmen, welche vorallem in rechentechnisch aufwändigen Simulationen in verschiedenen Bereichen der Forschung zur Anwendung kommen.

Als ein Beispiel können die Materialwissenschaften, die sich unter anderem mit der Untersuchung von Systemen einer sehr großen Anzahl von Atomen bzw. Molekülen beschäftigen, genannt werden. Auf der Basis einer bestehenden Theorie können dabei die Eigenschaften bestimmter Substanzen mithilfe von Computersimulationen nahezu exakt beschrieben werden. Sogar die Vorhersage verschiedener Eigenschaften noch unerforschter oder nicht existierender Materialien ist hierbei möglich.

In dieser Arbeit legen wir das Augenmerk auf die Berechnung der Energie geladener Partikelsysteme, was in vielen Anwendungen eine große Rolle spielt, vgl. beispielsweise [10] und darin angegebene Referenzen. Die Positionen der Partikel seien dabei mit  $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^3$  und die zugehörigen Ladungen mit  $q_j \in \mathbb{R}$  bezeichnet. Wird angenommen, dass jede Ladung  $q_j$  eines Teilchens an der Position  $\mathbf{x}_j$  nur in diesem einen Punkt konzentriert ist, so lässt sich die potentielle elektrostatische Energie dieses Systems durch

$$\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \quad (1.1)$$

angeben, wobei  $N$  die Anzahl der Ladungen bezeichnet und  $\epsilon_0$  die elektrische Feldkonstante ist. In vielen Anwendungen werden Partikelsysteme mit nahezu periodischer Struktur in allen drei Raumrichtungen untersucht. Betrachten wir nur einen kleinen Baustein dieser Struktur, dies sei in diesem Fall ein Würfel der Kantenlänge  $L$ , so ist die potentielle elektrostatische Energie der sich in diesem Würfel befindenden  $N$  Teilchen eine Summe der Form

$$\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N ' \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}, \quad (1.2)$$

vgl. [16]. Das Symbol  $'$  in dieser Formel gibt dabei an, dass bei der Summation  $i = j$  im Fall  $\mathbf{n} = (0, 0, 0)$  ausgeschlossen ist. Die Schwierigkeit der Behandlung dieser Formel besteht darin, dass die Summe nur bedingt konvergiert, d.h. ihr Wert wird erst durch Festlegung der Summationsreihenfolge genau definiert. Desweiteren ist im

Falle der Konvergenz bezüglich einer bestimmten Summationsreihenfolge selbige nur sehr langsam.

Die bekannteste Methode zur Berechnung der Energie (1.2) geht zurück auf Ewald [4]. Die sehr langsam konvergierende Summe wird bei diesem Ansatz in zwei exponentiell konvergente Summen aufgespalten. Dabei konvergiert eine der beiden Reihen schnell im Zeitbereich und die andere im Frequenzbereich, weshalb für deren Berechnung ihre Fourier-Reihe verwendet wird.

Um hierbei die schnelle Fourier-Transformation anwenden zu können, muss das Problem zunächst diskretisiert werden, d.h. die Berechnung der Energie erfolgt durch Interpolation über einem endlichen Gitter. Dies ist die Idee bei Partikel-Mesh-Methoden, wie beispielsweise der P<sup>3</sup>M- (particle-particle particle-mesh) Methode. Eine detaillierte Beschreibung dieses und einiger anderer Partikel-Mesh-Ansätze findet sich beispielsweise in [3].

Unter Verwendung der schnellen Fourier-Transformation hat die Ewald-Methode eine Komplexität von  $\mathcal{O}(N \log N)$ , wenn alle Parameter entsprechend optimal gewählt werden. Einen sehr ähnlichen Zugang bietet die Verwendung der schnellen Fourier-Transformation für nichtäquidistante Daten (NFFT), wie beispielsweise in [20] vorgestellt. Die Komplexität von  $\mathcal{O}(N \log N)$  wird bei diesem Ansatz beibehalten.

Einen grundlegend anderen Ansatz nutzt die schnelle Multipole-Methode (FMM) [7], mit der sich die Energie sogar in  $\mathcal{O}(N)$  arithmetischen Operationen berechnen lässt.

In [19] haben wir eine Methode zur Berechnung der Energie (1.1), bei der eine Approximation der Funktion  $\frac{1}{x}$  durch eine Summe von Gauß-Funktionen genutzt wird, vorgestellt. Dabei werden die Gauß-Funktionen wiederum durch anharmonische Fourier-Reihen approximiert. Ausgehend davon wollen wir in dieser Arbeit ein entsprechendes Verfahren zur Berechnung der Energie aus Gleichung (1.2) ableiten, bei dem die Gauß-Funktionen periodisiert und durch Fourier-Reihen approximiert werden. Für die Berechnung der Teilchenwechselwirkungen verwenden wir dabei ebenfalls die NFFT.

Alternativ wollen wir bei der Berechnung der kurzreichweitigen Anteile analog zu [19] an der Verwendung anharmonischer Fourier-Reihen festhalten. Diese bieten gegenüber Fourier-Reihen den Vorteil, dass die zu berechnenden Summen deutlich kürzer ausfallen, jedoch ist bei dieser Methode eine Einteilung der Partikel in Boxen, für die alle Summen einzeln ausgewertet müssen, erforderlich.

Mittels einer Implementierung dieses neuen Verfahrens (Algorithmus 3.3) in MATLAB wollen wir anhand einiger Tests diese beiden Varianten bezüglich ihrer Rechenzeiten vergleichen. Desweiteren wollen wir die erhaltenen Ergebnisse mithilfe der Ewald-Methode auf ihre Genauigkeit prüfen.



---

In vielen Anwendungen ist auch die Frage interessant, wie sich die Gesamtenergie des Systems ändert, wenn die Position eines einzelnen Teilchens verändert wird. Für sogenannte Monte-Carlo-Methoden, in denen in großer Zahl nacheinander einzelne Partikel an eine andere Position verschoben werden und dementsprechend die Energie immer wieder neu berechnet werden muss, ist ein schneller Algorithmus für die Neuberechnung der Energie von großem Interesse.

Werden bei der Berechnung der Energie die wichtigsten Daten abgespeichert, so muss dann bei der Veränderung einer Teilchenposition nur noch ein kleiner Teil der Daten aktualisiert werden. Basierend auf dieser Idee und dem Algorithmus zur Berechnung der Energie, wird in dieser Arbeit auch ein Verfahren für die Energie Neuberechnung (Algorithmus 3.4) vorgestellt und ebenfalls mithilfe von MATLAB implementiert und getestet.

Auch die in [19] vorgestellten Verfahren werden in dieser Arbeit noch einmal aufgegriffen und weiterentwickelt. Dabei wird die Berechnung mittels periodisierten Gauß-Funktionen analog zum periodischen Fall als zusätzliche Komponente integriert und mit der anharmonischen Variante verglichen.

Es ist naheliegend, dass die Algorithmen für das periodische und das nichtperiodische Problem als Grundlage für ein Verfahren zur Energieberechnung in Partikelsystemen mit gemischten Randbedingungen dienen können. Auch diesen Gedanken werden wir in dieser Arbeit aufgreifen.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich wie folgt. In Kapitel 2 werden wir zunächst auf einige Grundbegriffe eingehen. Neben elementaren Begriffen der Fourier-Analyse werden wir auch die bereits erwähnte NFFT kurz beleuchten und den Begriff der anharmonischen Fourier-Reihe einführen.

In Kapitel 3 widmen wir uns dann dem Problem der Energieberechnung unter dreidimensionalen periodischen Randbedingungen. Dabei werden wir die bekannte Ewald-Methode zunächst unter Benutzung von Konvergenzfaktoren herleiten und unter Verwendung der NFFT einen entsprechenden Algorithmus für die Berechnung der Energie formulieren. In Abschnitt 3.3 stellen wir dann einen neuen Algorithmus für die Berechnung dieser Energie vor, der eine Approximation der Funktion  $\frac{1}{x}$  durch eine Summe von Gauß-Funktionen nutzt. Außerdem leiten wir daraus ein Verfahren für die Neuberechnung der Energie bei Änderung einer Teilchenposition ab. Die im Anschluss aufgeführten Ergebnisse einiger Tests geben Aufschluss über die optimal zu wählenden Parameter.

In Kapitel 4 werden wir dann das entsprechende Problem unter offenen Randbedingungen kurz betrachten und dabei die Algorithmen aus [19] nochmals aufgreifen und weiterentwickeln. Auch hier werden wir im Anschluss einige Tests dieser Verfahren auswerten.

Auf die Berechnung der Energie unter gemischten Randbedingungen werden wir

dann in Kapitel 5 eingehen. Dabei werden wir uns insbesondere dem Problem der Energieberechnung für periodische Randbedingungen in zwei Koordinatenrichtungen widmen und die zweidimensionale Ewald-Summation ebenfalls mithilfe eines Konvergenzfaktors herleiten. Im Anschluss werden wir dann aus den in Abschnitt 3.3 und Kapitel 4 vorgestellten Algorithmen ein entsprechendes Verfahren zur Energieberechnung für den Fall für zweidimensionale periodische Randbedingungen ableiten.

## 2 Grundlagen

In diesem Kapitel werden einige Grundbegriffe, die für diese Arbeit von Bedeutung sind, kurz eingeführt. Dabei wird zunächst auf elementare Begriffe der Fourier-Analyse eingegangen. Neben der Einführung von Fourier-Reihen und dem Begriff der Fourier-Transformation werden auch die schnelle Fourier-Transformation (FFT) sowie die schnelle Fourier-Transformation für nichtäquidistante Daten (NFFT) kurz erläutert.

Anschließend wird auch der Begriff der anharmonischen Fourier-Reihe eingeführt und in diesem Zusammenhang der ESPRIT-Algorithmus [21] vorgestellt.

### 2.1 Einige Begriffe aus der Fourier-Analyse

#### 2.1.1 Fourier-Reihen

Grundlage für die Theorie der Fourier-Reihen sind Funktionensysteme der Form

$$\left\{ e^{2\pi i n(\cdot)/L}, n \in \mathbb{Z} \right\}, \quad (2.1)$$

wobei  $L > 0$ . Für die Funktionen des Systems (2.1) gilt die Orthogonalitätsbeziehung

$$\frac{1}{L} \int_0^L e^{2\pi i n x/L} e^{-2\pi i m x/L} dx = \delta_{n,m} \quad (2.2)$$

bezüglich des Skalarproduktes in  $\mathcal{L}_2[0, L]$ , wobei  $\delta_{n,m}$  das Kronecker-Symbol ist. Der Beweis von (2.2) ist beispielsweise in [22, Seite 5] angegeben. Der folgende Satz gibt eine genauere Charakterisierung des Funktionensystems (2.1). Für einen Beweis siehe beispielsweise [6, Seite 150].

**Satz 2.1.** *Das System (2.1) ist eine Basis im Hilbert-Raum  $\mathcal{L}_2[0, L]$ .*

Aus diesem Satz folgt, dass sich jede Funktion  $f \in \mathcal{L}_2[0, L]$  in der Form

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(f) e^{2\pi i n x/L}$$

schreiben lässt, wobei die Summe in der  $\mathcal{L}_2[0, L]$ -Norm gegen  $f$  konvergiert. Die Faktoren  $c_n(f) \in \mathbb{C}$  werden **Fourier-Koeffizienten** von  $f$  genannt. Aus der Orthogonalitätsbeziehung (2.2) folgt unmittelbar, dass diese die Form

$$c_n(f) = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) e^{-2\pi i n x/L} dx$$

haben. Alle Überlegungen lassen sich einfach auf den  $d$ -dimensionalen Fall übertragen. Eine Funktion  $f \in \mathcal{L}_2[0, L]^d$  lässt sich dann eindeutig in der Form

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} c_{\mathbf{n}}(f) e^{2\pi i \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} / L}$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$c_{\mathbf{n}}(f) = \frac{1}{L^d} \int_{[0, L]^d} f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} / L} d\mathbf{x}$$

schreiben, wobei die Konvergenz wieder im  $\mathcal{L}_2$ -Sinne zu verstehen ist. Für  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d$  und  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  ist dabei  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}$  das euklidische Skalarprodukt.

### 2.1.2 Fourier-Transformation

**Definition 2.1.** Für eine Funktion  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$  sei ihre **Fourier-Transformierte**  $\hat{f} = \mathcal{F}f$  im Punkt  $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$  definiert durch

$$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{F}f(\boldsymbol{\xi}) := \int_{\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}.$$

Die Funktion  $\hat{f}$  ist für  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$  wohldefiniert, da für alle  $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$  gilt

$$|\hat{f}(\boldsymbol{\xi})| \leq \int_{\mathbb{R}^d} |f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}}| d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} |f(\mathbf{x})| d\mathbf{x} < \infty.$$

Für die Fourier-Transformation  $\mathcal{F}$  gelten desweiteren die folgenden Eigenschaften.

**Satz 2.2.** Für die Fourier-Transformation  $\mathcal{F}$  auf  $\mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$  gilt:

- $\mathcal{F}$  ist ein linearer Operator, d.h. für alle  $f, g \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$  und  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  ist

$$\mathcal{F}(\alpha f + \beta g) = \alpha \hat{f} + \beta \hat{g}. \quad (2.3)$$

- Ist die Funktion  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$  bezüglich  $x_j$  partiell differenzierbar und die durch  $g(\mathbf{x}) := \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{x})$  definierte Funktion  $g \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$ , so gilt

$$\hat{g}(\boldsymbol{\xi}) = 2\pi i \xi_j \hat{f}(\boldsymbol{\xi}). \quad (2.4)$$

- Für eine Funktion  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$  sei die durch  $g(\mathbf{x}) := x_j f(\mathbf{x})$  definierte Funktion  $g \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R}^d)$ . Dann gilt

$$\hat{g}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{-1}{2\pi i} \cdot \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi_j}(\boldsymbol{\xi}). \quad (2.5)$$

Die Linearitätseigenschaft (2.3) folgt sofort aus der Linearität der Integration und die Differentiationseigenschaften (2.4) und (2.5) können mittels partieller Integration hergeleitet werden, vgl. beispielsweise [22, Seite 304].

**Beispiel 2.1.** Für  $d = 1$  betrachten wir eine Gauß-Funktion der Form

$$g(x) := e^{\beta x^2}$$

mit Parameter  $\beta < 0$ . Analog zu [11, Seite 354] nutzen wir die Differentiationseigenschaften aus Satz 2.2 zur Berechnung der Fourier-Transformierten  $\mathcal{F}g$ . Da nun

$$g'(x) = 2\beta x e^{\beta x^2} = 2\beta x g(x)$$

gilt, folgt unter Anwendung der Fourier-Transformation auf beiden Seiten und den Eigenschaften (2.4) und (2.5)

$$2\pi i \xi \cdot \hat{g}(\xi) = -\frac{2\beta}{2\pi i} \hat{g}'(\xi).$$

Damit genügt die Fourier-Transformierte  $\hat{g}$  der Gauß-Funktion  $g$  der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\hat{g}'(\xi) = \frac{2\pi^2 \xi}{\beta} \hat{g}(\xi),$$

welche offenbar die Lösung

$$\hat{g}(\xi) = \hat{g}(0) \cdot e^{\pi^2 \xi^2 / \beta}$$

besitzt. Der Faktor  $\hat{g}(0)$  ist dabei durch

$$\hat{g}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{|\beta|}}$$

bestimmt. Als Endergebnis erhalten wir damit

$$\hat{g}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{|\beta|}} e^{\pi^2 \xi^2 / \beta}. \quad (2.6)$$

### 2.1.3 Die Poissonsche Summenformel

Für eine Funktion  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$  sei für ein  $L > 0$  ihre  $L$ -Periodisierung  $f_L$  im Punkt  $x$  definiert durch

$$f_L(x) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x + nL), \quad (2.7)$$

insofern diese Summe konvergiert. Der folgende Satz trifft eine Aussage über die Konvergenz der Reihe (2.7) für stetig differenzierbare Funktionen.

**Satz 2.3.** Sei  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$  eine stetig differenzierbare Funktion, für die auch  $f' \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$  gilt. Dann konvergiert  $f_L$  gleichmäßig auf  $\mathbb{R}$  und ist damit stetig auf  $\mathbb{R}$ .

Der Beweis ist beispielsweise in [6, Seite 346] zu finden. Mit den Voraussetzungen obigen Satzes gilt aufgrund der gleichmäßigen Konvergenz der Reihe

$$\begin{aligned} c_n(f_L) &= \frac{1}{L} \int_0^L f_L(x) e^{2\pi i n x / L} dx \\ &= \frac{1}{L} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^L f(x + kL) e^{2\pi i n x / L} dx \\ &= \frac{1}{L} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{kL}^{L+kL} f(x) e^{2\pi i n x / L} dx \\ &= \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{2\pi i n x / L} dx = \frac{1}{L} \hat{f}\left(\frac{n}{L}\right). \end{aligned} \quad (2.8)$$

**Satz 2.4.** Es sei  $f \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$  eine stetig differenzierbare Funktion mit  $f' \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$ . Dann ist die Poissonsche Summenformel

$$f_L(x) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x + nL) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}\left(\frac{n}{L}\right) e^{2\pi i n x / L} \quad (2.9)$$

in jedem Punkt  $x \in \mathbb{R}$  erfüllt. Die Fourier-Reihe der stetigen Funktion  $f_L$  konvergiert dabei gleichmäßig auf  $\mathbb{R}$ .

Die Darstellung von  $f_L$  als Fourier-Reihe folgt dabei unmittelbar aus Gleichung (2.8). Den Beweis für die gleichmäßige Konvergenz der Fourier-Reihe kann beispielsweise [6, Seite 348] entnommen werden.

**Beispiel 2.2.** Wir betrachten erneut die Gauß-Funktion

$$g(x) := e^{\beta x^2}$$

für  $\beta < 0$ . Die Funktion  $g$  ist offenbar stetig differenzierbar und dabei gilt  $g \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$  sowie  $g' \in \mathcal{L}_1(\mathbb{R})$ . Damit folgt mit Satz 2.4 und der Formel (2.6) für  $L > 0$  die Identität

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\beta(x+nL)^2} = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{g}\left(\frac{n}{L}\right) e^{2\pi i n x / L} = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi}{|\beta|}} e^{\pi^2 n^2 / (L^2 \beta)} e^{2\pi i n x / L}.$$

Es sei nun  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ , dann gilt offenbar

$$e^{\beta \|\mathbf{x}\|^2} = \prod_{j=1}^d g(x_j).$$

Damit kann

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} e^{\beta \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} \left( \frac{\pi}{|\beta|} \right)^{\frac{d}{2}} e^{\pi^2 \|\mathbf{n}\|^2 / (L^2 \beta)} e^{2\pi i \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} / L} \quad (2.10)$$

gezeigt werden.

### 2.1.4 Schnelle Fourier-Transformation (FFT)

Im Folgenden sei die  $L$ -periodische Funktion  $f$  nur in den  $N$  äquidistanten Punkten

$$x_k := \frac{kL}{N} \in [0, L), \quad k = 0, \dots, N-1$$

bekannt. Dabei seien die entsprechenden Funktionswerte mit  $f_k := f(x_k)$  bezeichnet. Die Fourier-Koeffizienten  $c_n(f)$  können dann näherungsweise durch eine Quadraturformel berechnet werden. Wird die Rechteckregel angewandt, die im periodischen Fall der Trapezregel entspricht, so wird

$$c_n(f) \approx \hat{f}_n := \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-2\pi i n k / N}$$

erhalten. Es ist leicht einzusehen, dass

$$\hat{f}_n = \hat{f}_{n+rN} \quad \text{für } r \in \mathbb{Z},$$

d.h. die approximierten Fourier-Koeffizienten sind auf jeder Restklasse mod  $N$  identisch. Daher kann  $\hat{f}_n$  nur für gewisse  $n$  eine gute Näherung des Fourier-Koeffizienten  $c_n(f)$  sein. Es kann gezeigt werden, dass Folgendes gilt

$$\hat{f}_n \approx \begin{cases} c_n(f) & n = 0, \dots, \frac{N}{2} - 1 \\ c_{n-N}(f) & n = \frac{N}{2}, \dots, N-1 \end{cases}. \quad (2.11)$$

Eine entsprechende Herleitung ist beispielsweise in [6, Seite 66] zu finden.

**Definition 2.2.** Die Abbildung

$$\mathcal{F}_N : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N, \mathbf{f} = (f_0, \dots, f_{N-1}) \mapsto \hat{\mathbf{f}} = (\hat{f}_0, \dots, \hat{f}_{N-1})$$

wird **diskrete Fourier-Transformation (DFT)** der Ordnung  $N$  genannt.

Die **schnelle Fourier-Transformation (FFT)** ist ein Algorithmus zur effizienten Berechnung der DFT. Es sei dafür im Folgenden  $N = 2m$ . Unter Umformung der

Gleichungen für die diskreten Fourier-Koeffizienten  $\hat{f}_n$  kann

$$\hat{f}_n = \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{2} \left( f_{2k} + e^{-\pi i n/m} f_{2k+1} \right) e^{-2\pi i n k/m}, \quad n = 0, \dots, m-1$$

$$\hat{f}_{n+m} = \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{2} \left( f_{2k} - e^{-\pi i n/m} f_{2k+1} \right) e^{-2\pi i n k/m}, \quad n = 0, \dots, m-1$$

gezeigt werden, vgl. [6, Seite 76]. Die Berechnung einer DFT der Länge  $N$  entspricht also der Berechnung zweier DFT der Länge  $\frac{N}{2}$ , die wiederum der Berechnung von vier DFT der Länge  $\frac{N}{4}$  entsprechen. Diese Strategie ermöglicht also die Berechnung einer DFT der Länge  $N$  in  $\mathcal{O}(N \log N)$  arithmetischen Operationen.

**Satz 2.5.** Die diskrete Fourier-Transformation der Länge  $N$  ist linear und bijektiv. Dabei gilt die Matrix-Vektor-Notation  $\hat{\mathbf{f}} = \frac{1}{N} F_N \mathbf{f}$  mit der Fourier-Matrix

$$F_N = \left( e^{-2\pi i j k / N} \right)_{j,k=0}^{N-1}.$$

Für die Inverse der Fourier-Matrix  $F_N^{-1}$  gilt  $F_N^{-1} = \frac{1}{N} \overline{F_N}$ , d.h. für die inverse Transformation gilt in Matrix-Vektor-Notation  $\mathbf{f} = \overline{F_N} \hat{\mathbf{f}}$ .

Eine entsprechende Herleitung findet sich beispielsweise in [6, Seiten 66-68].

Die DFT und die FFT sind analog auch für Dimensionen  $d > 1$  definiert. Die Fourier-Koeffizienten haben dabei die Form

$$\hat{f}_{\mathbf{n}} := \frac{1}{N_1 \cdot \dots \cdot N_d} \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{k_d=0}^{N_d-1} f_{\mathbf{k}} e^{-2\pi i (n_1 k_1 / N_1 + \dots + n_d k_d / N_d)}.$$

Diese können somit durch  $d$ -malige Anwendung der eindimensionalen Transformation in  $\mathcal{O}\left(\prod_{j=1}^d N_j \cdot \sum_{j=1}^d \log N_j\right)$  arithmetischen Operationen berechnet werden.

### 2.1.5 Nichtäquidistante schnelle Fourier-Transformation (NFFT)

Die NFFT ist ein schneller Algorithmus zur Berechnung der DFT an beliebigen Knoten. Im Folgenden beschränken wir uns auf den 1-periodischen univariaten Fall für gegebene (nichtäquidistante) Punkte  $x_j \in \mathbb{T} = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $j = 1, \dots, M$ . Im Fall für  $L$ -periodische Funktionen mit gegebenen Punkten  $x_j \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$  sind stattdessen die Punkte  $\tilde{x}_j := \frac{x_j}{L}$  einzusetzen. Für gegebene Koeffizienten  $\hat{f}_k$ ,  $k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1$ ,



betrachten wir das Problem der schnellen Berechnung von

$$f_j := f(x_j) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{f}_k e^{-2\pi i k x_j}, \quad j = 1, \dots, M$$

bzw. das adjungierte Problem der Berechnung von

$$h_k := \sum_{j=1}^M f_j e^{2\pi i k x_j}, \quad k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1$$

für gegebene Funktionswerte  $f_j = f(x_j)$ ,  $j = 1, \dots, M$ . Wir betrachten zunächst das trigonometrische Polynom

$$f(x) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{f}_k e^{-2\pi i k x}$$

und approximieren dieses durch eine Linearkombination von Translaten einer 1-periodischen Funktion  $\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \varphi(x+k)$ , d.h.

$$f(x) \approx s_1(x) := \sum_{l=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}-1} g_l \cdot \tilde{\varphi}\left(x - \frac{l}{n}\right),$$

wobei  $n = \sigma N$  mit einem Oversampling-Faktor  $\sigma > 1$ . Die Funktion  $\tilde{\varphi}$  wird dabei so gewählt, dass ihre Fourier-Reihe gleichmäßig konvergiert. Setzen wir

$$\hat{g}_k = \sum_{l=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}-1} g_l e^{-2\pi i k l/n},$$

so gilt

$$\hat{g}_k = \begin{cases} 0 & : k = -\frac{n}{2}, \dots, -\frac{N}{2} - 1 \\ \frac{\hat{f}_k}{c_k(\tilde{\varphi})} & : k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1 \\ 0 & : k = \frac{N}{2}, \dots, \frac{n}{2} - 1 \end{cases},$$

vgl. [14, Seite 16]. Ist die Funktion  $\tilde{\varphi}$  außerhalb des Intervalls  $[-\frac{m}{n}, \frac{m}{n}]$  für  $m \ll n$  klein, so setzen wir  $\psi(x) := \varphi(x) \cdot \chi_{[-\frac{m}{n}, \frac{m}{n}]}(x)$ . Der Parameter  $m$  sei daher als Abschneide-Parameter bezeichnet. Das trigonometrische Polynom  $f$  kann dann durch

$$f(x) \approx s_1(x) \approx s(x) := \sum_{l=[xn]-m}^{[xn]+m} g_l \cdot \tilde{\varphi}\left(x - \frac{l}{n}\right) = \sum_{l=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}-1} g_l \cdot \tilde{\psi}\left(x - \frac{l}{n}\right) \quad (2.12)$$

approximiert werden, wobei  $\tilde{\psi}(x) := \sum_{k \in \mathbb{Z}} \psi(x + k)$ .

Für den  $d$ -dimensionalen Fall setzen wir  $\varphi(\mathbf{x}) := \prod_{j=1}^d \varphi_1(x_j)$  mit der univariaten Funktion  $\varphi_1$ , sodass die Fourier-Koeffizienten der periodisierten Funktion  $\tilde{\varphi}$  die Form  $c_{\mathbf{k}}(\tilde{\varphi}) = \prod_{j=1}^d c_{k_j}(\varphi_1)$  annehmen.

Im Folgenden sei für  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$  das komponentenweise Produkt

$$\mathbf{x} \odot \mathbf{y} := (x_1 \cdot y_1, \dots, x_d \cdot y_d)$$

definiert. Desweiteren definieren wir für  $\mathbf{N} = (N_1, \dots, N_d)$  die Menge

$$I_{\mathbf{N}} := \mathbb{Z}^d \cap \prod_{j=1}^d \left[ -\frac{N_j}{2}, \frac{N_j}{2} \right).$$

Analog zum eindimensionalen Fall wird damit

$$s(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{l} \in I_{\mathbf{n}}} g_{\mathbf{l}} \cdot \tilde{\psi}(\mathbf{x} - \mathbf{n}^{-1} \odot \mathbf{l})$$

als Approximation des trigonometrischen Polynoms

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{N}}} \hat{f}_{\mathbf{k}} e^{-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

erhalten. Dabei ist  $\mathbf{N} = (N_1, \dots, N_d)$  und  $\mathbf{n} := \boldsymbol{\sigma} \odot \mathbf{N}$  mit  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \dots, \sigma_d) > 1$ .

Aus obigen Überlegungen resultiert der Algorithmus zur Berechnung von  $f_j$  für gegebene Punkte  $\mathbf{x}_j \in \mathbb{T}^d$ .

**Algorithmus 2.1** (NFFT).

Gegeben seien  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^d$ ,  $j = 1, \dots, M$ , sowie die Koeffizienten  $\hat{f}_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$ ,  $\mathbf{k} \in I_{\mathbf{N}}$ , für gegebenes  $\mathbf{N} \in 2\mathbb{N}^d$ . Desweiteren sei der  $d$ -dimensionale Oversampling-Faktor  $\boldsymbol{\sigma}$  gegeben.

1. Berechne  $\hat{g}_{\mathbf{k}} := \frac{\hat{f}_{\mathbf{k}}}{c_{\mathbf{k}}(\tilde{\varphi})}$  für alle  $\mathbf{k} \in I_{\mathbf{N}}$ .
2. Berechne  $g_{\mathbf{l}} := \frac{1}{|I_{\mathbf{n}}|} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{N}}} \hat{g}_{\mathbf{k}} e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{n}^{-1} \odot \mathbf{l})}$  für  $\mathbf{l} \in I_{\mathbf{n}}$  mit einer  $d$ -variaten inversen FFT.
3. Berechne  $f_j := \sum_{\mathbf{l} \in I_{\mathbf{n}}} g_{\mathbf{l}} \cdot \tilde{\psi}(\mathbf{x}_j - \mathbf{n}^{-1} \odot \mathbf{l})$  für  $j = 1, \dots, M$ .

Komplexität:  $\mathcal{O}(|I_{\mathbf{N}}| \log |I_{\mathbf{N}}| + M)$

Hierbei kann bei der Berechnung der Werte  $f_j$  die Summation wie im eindimensionalen Fall mit der Funktion  $\tilde{\varphi}$  und eingeschränkter Indexmenge erfolgen, vgl. Gleichung (2.12).

Analog kann der folgende Algorithmus für das adjungierte Problem abgeleitet werden.

**Algorithmus 2.2** (adjungierte NFFT).

Gegeben seien  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^d$  sowie  $f_j \in \mathbb{C}$ ,  $j = 1, \dots, M$ . Desweiteren seien  $\mathbf{N} \in 2\mathbb{N}^d$  sowie der  $d$ -dimensionale Oversampling-Faktor  $\sigma$  gegeben.

1. Berechne  $g_{\mathbf{l}} := \sum_{j=1}^M f_j \cdot \tilde{\psi}(\mathbf{x}_j - \mathbf{n}^{-1} \odot \mathbf{l})$  für  $\mathbf{l} \in I_{\mathbf{n}}$ .
2. Berechne  $\hat{g}_{\mathbf{k}} := \frac{1}{|I_{\mathbf{n}}|} \sum_{\mathbf{l} \in I_{\mathbf{n}}} g_{\mathbf{l}} e^{-2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{n}^{-1} \odot \mathbf{l})}$  für  $\mathbf{k} \in I_{\mathbf{N}}$  mit einer  $d$ -variablen FFT.
3. Berechne  $h_{\mathbf{k}} := \frac{\hat{g}_{\mathbf{k}}}{c_{\mathbf{k}}(\tilde{\varphi})}$  für alle  $\mathbf{k} \in I_{\mathbf{N}}$ .

Komplexität:  $\mathcal{O}(|I_{\mathbf{N}}| \log |I_{\mathbf{N}}| + M)$

Bei der Berechnung der Werte  $\hat{g}_{\mathbf{l}}$  kann dabei wieder die verkürzte Summe unter Verwendung der Funktion  $\tilde{\varphi}$  verwendet werden.

## 2.2 Anharmonische Fourier-Reihen

**Definition 2.3.** Eine Summe der Form

$$a(x) = \sum_{j=1}^P c_j e^{if_j x} \quad (2.13)$$

mit Koeffizienten  $c_j \in \mathbb{C}$  und  $f_j \in \mathbb{R}$  wird als **anharmonische Fourier-Reihe** bezeichnet.

Mit dem im Folgenden vorgestellten ESPRIT-Algorithmus [21] (Estimation of Signal Parameters via Rotational Invariance Techniques) können die Koeffizienten  $f_j$  aus gegebenen Funktionswerten  $a(n)$ ,  $n \in I \subset \mathbb{Z}$ , rekonstruiert werden.

Die kurze Herleitung dieses Algorithmus' ist dabei im Wesentlichen [18, Seiten 488-493] nachempfunden.

### 2.2.1 ESPRIT-Algorithmus

Für die Funktion (2.13) setzen wir zunächst  $s_j(x) := c_j e^{if_j x}$ , sodass  $a(x) = \sum_{j=1}^P s_j(x)$  gilt. Für jedes  $j = 1, \dots, P$  gilt dann offenbar

$$s_j(n+m) = s_j(m) \cdot e^{if_j n} \quad \text{für } n, m \in \mathbb{Z}. \quad (2.14)$$

Für  $M \in \mathbb{N}$  seien im Folgenden die Vektoren

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_M(n) &:= [a(n), a(n+1), \dots, a(n+M-1)]^\top \quad \text{und} \\ \mathbf{v}_M(f) &:= [1, e^{if}, \dots, e^{if(M-1)}]^\top\end{aligned}$$

definiert. Desweiteren definieren wir den Vektor

$$\mathbf{c} := [c_1, \dots, c_P]^\top$$

sowie die Matrizen

$$V_M := [\mathbf{v}_M(f_1) \dots \mathbf{v}_M(f_P)] \quad \text{und} \quad \Phi := \text{diag} \{e^{if_1}, \dots, e^{if_P}\}.$$

Damit können wir unter Verwendung der Eigenschaft (2.14) den Vektor  $\mathbf{a}_M(n)$  auch in der Form

$$\mathbf{a}_M(n) = V_M \Phi^n \mathbf{c} \tag{2.15}$$

schreiben. Die Matrix  $V_M$  kann dabei auch in der Form

$$V_M = \begin{pmatrix} V_{M-1} \\ * \dots * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \dots * \\ V_{M-1} \Phi \end{pmatrix}$$

geschrieben werden, wobei  $* \dots *$  jeweils die fehlende Zeile kennzeichnet.

Für ein gegebenes  $N \in \mathbb{N}$  betrachten wir nun die Hankel-Matrix

$$A := \begin{bmatrix} \mathbf{a}_M(0)^\top \\ \mathbf{a}_M(1)^\top \\ \vdots \\ \mathbf{a}_M(N-1)^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a(0) & a(1) & \dots & a(M-1) \\ a(1) & a(2) & \dots & a(M) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a(N-1) & a(N) & \dots & a(N+M-2) \end{bmatrix}. \tag{2.16}$$

Aus Gleichung (2.15) folgt, dass sämtliche Spalten der Matrix  $A^\top$  Linearkombinationen der Vektoren  $\mathbf{v}_M(f_1), \dots, \mathbf{v}_M(f_P)$  sind und damit

$$\text{im} A^\top = \text{lin} \{ \mathbf{v}_M(f_1), \dots, \mathbf{v}_M(f_P) \} = \text{im} V_M.$$

Es sei nun

$$A = L \Sigma U^*$$

die Singulärwertzerlegung von  $A$ , dabei gilt stets  $\text{im} A^* = \text{im} U$ . Sind die Daten der Matrix  $A$  exakt, so hat  $A$  genau  $P$  von Null verschiedene Singulärwerte. Es sei im Weiteren  $U_s$  die Untermatrix von  $U$  mit den entsprechenden  $P$  Eigenvektoren, d.h.  $U = [U_s \ U_n]$  wobei  $U_n$  die Größe  $M \times (M - P)$  hat. Damit ist also

$$\text{im} A^* = \text{im} U_s.$$

Damit existiert eine invertierbare Matrix  $T$  der Größe  $P \times P$ , sodass

$$V_M = U_s T.$$

Schreiben wir  $U_s$  in der Form

$$U_s = \begin{pmatrix} U_1 \\ * \cdots * \\ U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \cdots * \\ U_2 \end{pmatrix}$$

mit Matrizen  $U_1$  und  $U_2$  der Größe  $(M-1) \times P$ , so folgt

$$V_{M-1} = U_1 T \quad \text{bzw.} \quad V_{M-1} \Phi = U_2 T.$$

Damit haben wir

$$U_1 T \Phi = U_2 T \iff U_2 = U_1 T \Phi T^{-1}.$$

Die Matrix  $\Psi := T \Phi T^{-1}$  hat also die gleichen Eigenwerte wie  $\Phi$ . Durch Bestimmung der Matrix  $\Psi$  und Berechnung deren Eigenwerte sind also die Koeffizienten  $f_j$  bestimmt.

### Algorithmus 2.3 (ESPRIT).

Gegeben sei der Datenvektor  $\mathbf{a} = [a(0), \dots, a(n-1)]^\top$  der Länge  $n$ , die Anzahl  $P$  der Exponentialfunktionen in (2.13) sowie die Fensterlänge  $M > P$ .

1. Setze  $N = n - M + 1$  und konstruiere die Hankel-Matrix  $A$  der Größe  $N \times M$  gemäß (2.16).
2. Berechne die Singulärwertzerlegung  $A = L \Sigma U^*$ .
3. Es sei  $U = (u_{j,k})_{j,k=1}^{M,M}$ . Setze  $U_1 = (u_{j,k})_{j=1,k=1}^{M-1,P}$  sowie  $U_2 = (u_{j,k})_{j=2,k=1}^{M,P}$ .
4. Berechne  $\Psi$  als Kleinste-Quadrate-Lösung der Gleichung  $U_2 = U_1 \Psi$ .
5. Berechne die Eigenwerte  $\lambda_1, \dots, \lambda_P$  von  $\Psi$ .
6. Setze  $f_j := \arg \lambda_j$  für  $j = 1, \dots, P$ .

Wurden die Koeffizienten  $f_j$ ,  $j = 1, \dots, P$ , mit Algorithmus 2.3 bestimmt, so kann dann der Vektor  $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_P)^\top$  als Kleinste-Quadrate-Lösung des überbestimmten Gleichungssystems

$$\mathcal{V} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a} \quad \text{mit} \quad \mathcal{V} = \left( e^{i f_j k} \right)_{k=0, j=1}^{n-1, P}$$

ermittelt werden.



### 3 Partikelsysteme mit dreidimensionalen periodischen Randbedingungen

Im Folgenden betrachten wir ein System von  $N$  Teilchen mit Positionen  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3$  in einer Box der Kantenlänge  $L$  und den Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ . Werden periodische Randbedingungen angenommen, d.h. für jedes Teilchen  $\mathbf{x}_j$  mit der Ladung  $q_j$  und alle Vektoren  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$  folgt die Existenz eines weiteren Teilchens mit gleicher Ladungen im Punkt  $\mathbf{x}_j + \mathbf{n}L$ , so nimmt, wie bereits in der Einleitung dieser Arbeit beschrieben, die potentielle elektrostatische Gesamtenergie der  $N$  Teilchen die Form

$$\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \prime \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}$$

an, wobei  $\epsilon_0$  die elektrische Feldkonstante ist. Die unendliche Summe ist nur bedingt konvergent, d.h. von der Summationsreihenfolge abhängig.

Abbildung 3.1 veranschaulicht, welche Wechselwirkungen in die Berechnung der Energie unter periodischen Randbedingungen eingehen. Dies sind nur diejenigen Wechselwirkungen, an denen Partikel der Box  $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3$  beteiligt sind. Alle Wechselwirkungen innerhalb dieser Box gehen dabei doppelt ein.

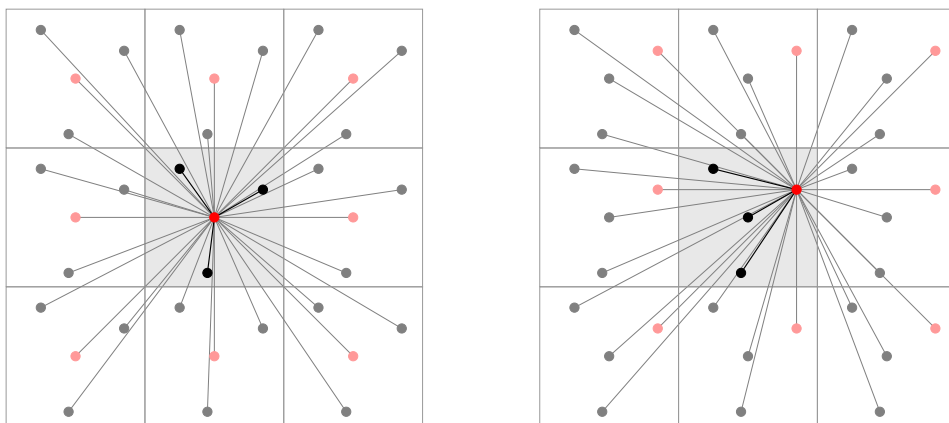


Abbildung 3.1: Zweidimensionale Veranschaulichung der periodischen Randbedingungen

### 3.1 Bedingt konvergente Reihen und Konvergenzfaktoren

Wir definieren im Folgenden die Energie

$$E := \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}, \quad (3.1)$$

deren Wert durch die bedingte Konvergenz der Reihe nicht definiert ist. Der Wert  $E$  wird erst durch eine Festlegung der Summationsreihenfolge genau definiert. Bei der Berechnung von  $E$  kann dann beispielsweise auf Konvergenzfaktoren zurückgegriffen werden. Hierfür werden im Folgenden einige Resultate aus [2] aufgegriffen.

**Satz 3.1.** *Es sei*

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n = l$$

*eine bedingt konvergente Reihe. Desweiteren sei  $f$  eine Funktion in zwei Veränderlichen mit den folgenden Eigenschaften:*

- $f(n, s)$  ist stetig bezüglich  $s \geq 0$ .
- $f(n, 0) = 1$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ .
- $f(n+1, s) \leq f(n, s)$  für alle  $s \geq 0$  und  $n \in \mathbb{N}$ .
- $0 \leq f(n, s) \leq 1$  für alle  $s \geq 0$  und  $n \in \mathbb{N}$ .

*Dann ist die Reihe*

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n f(n, s)$$

*gleichmäßig konvergent bezüglich  $s \geq 0$  und es gilt*

$$\lim_{s \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{\infty} c_n f(n, s) = l.$$

Der Beweis dieses Satzes ist in [2, Seite 30] angegeben. Im Folgenden betrachten wir eine bedingt konvergente Reihe

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\mathbf{n}}$$



mit Indizes  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$ . Wir definieren zunächst die Indextmengen

$$\begin{aligned}
 D_0 &:= \{(0, 0, 0)\} \\
 D_1 &:= \{(\pm 1, 0, 0), \text{etc.}\} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 : \|\mathbf{n}\| = 1\} \\
 D_2 &:= \{(\pm 1, \pm 1, 0), \text{etc.}\} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 : \|\mathbf{n}\| = \sqrt{2}\} \\
 D_3 &:= \{(\pm 1, \pm 1, \pm 1)\} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 : \|\mathbf{n}\| = \sqrt{3}\} \\
 D_4 &:= \{(\pm 2, 0, 0), \text{etc.}\} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 : \|\mathbf{n}\| = 2\} \\
 D_5 &:= \{(\pm 2, \pm 1, 0), \text{etc.}\} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 : \|\mathbf{n}\| = \sqrt{5}\} \\
 D_6 &:= \{(\pm 2, \pm 1, \pm 1), \text{etc.}\} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 : \|\mathbf{n}\| = \sqrt{6}\} \\
 &\vdots
 \end{aligned}$$

und definieren die sphärische Summationsreihenfolge gemäß

$$\sum_{N=0}^{\infty} \left( \sum_{\mathbf{n} \in D_N} a_{\mathbf{n}} \right) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{n} : \|\mathbf{n}\| \leq m} a_{\mathbf{n}} =: l_{\text{sph}}. \quad (3.2)$$

Für einen Konvergenzfaktor  $f$ , der die Voraussetzungen in Satz 3.1 erfüllt, folgt dann

$$\lim_{s \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\mathbf{n}} f(\|\mathbf{n}\|, s) = l_{\text{sph}},$$

da bei der oben definierten sphärischen Summation die Bildung des Grenzwertes über schrittweise Berücksichtigung von Indizes  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$  derselben Norm erfolgt. Beispielsweise kann als Konvergenzfaktor

$$f(\|\mathbf{n}\|, s) = e^{-s\|\mathbf{n}\|^2}$$

verwendet werden. Eine graphische Darstellung zur sphärischen Summation für  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2$  ist in Abbildung 3.2 zu sehen.

## 3.2 Die Ewald-Summation

Im Folgenden setzen wir stets die elektrische Neutralität des Teilchensystems voraus, d.h. es soll gelten

$$\sum_{j=1}^N q_j = 0. \quad (3.3)$$

Für die Berechnung der Energie aus (3.1) benutzen wir die sphärische Summationsreihenfolge. Für ein  $\alpha > 0$  verwenden wir dabei im Folgenden die Identität

$$\frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} = \frac{\text{erfc}(\alpha\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} + \frac{\text{erf}(\alpha\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|},$$

			7	6	7		
		5	4	3	4	5	
7	4	2	1	2	4	7	
6	3	1	0	1	3	6	
7	4	2	1	2	4	7	
		5	4	3	4	5	
			7	6	7		

Abbildung 3.2: Zweidimensionale Veranschaulichung der sphärischen Summationsreihenfolge

wobei

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

die Error-Funktion und  $\operatorname{erfc}(x) := 1 - \operatorname{erf}(x)$  die komplementäre Error-Funktion ist. Dieser Ansatz wird beispielsweise in [3, Seite 2] beschrieben. Da der Grenzwert

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\operatorname{erf}(\alpha x)}{x} = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}$$

existiert, können wir  $E$  in der Form

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\operatorname{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} \\ &+ \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\operatorname{erf}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N q_j^2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

schreiben. Die erste Summe ist aufgrund des schnellen Abfalls der komplementären Error-Funktion absolut konvergent. Da die unendliche Summe in (3.1) bedingt konvergent ist, folgt die bedingte Konvergenz der zweiten unendlichen Summe in (3.4). Für deren Berechnung definieren wir

$$E(s) := \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-s \|\mathbf{n}L\|^2} \frac{\operatorname{erf}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}$$

und bilden den Grenzwert  $\lim_{s \rightarrow 0} E(s)$ . In  $E(s)$  setzen wir nun die Definition der Error-Funktion ein und erhalten mit der Substitution  $z = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^{-1}t$

$$E(s) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \int_0^\alpha e^{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2 z^2 - s \|\mathbf{n}L\|^2} dz. \quad (3.5)$$

Um die Poissonsche Summenformel anwenden zu können, müssen wir noch den Term

$$\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2 z^2 + s \|\mathbf{n}L\|^2$$

umformen. Dazu nutzen wir die Identität [2, Gleichung (3.37)], die wir im Folgenden herleiten.

$$\begin{aligned} & z^2 \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2 + s \|\mathbf{n}L\|^2 \\ = & z^2 \left\| \frac{s}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \mathbf{n}L \right\|^2 + s \left\| \mathbf{n}L + \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) - \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\|^2 \\ = & \frac{z^2 s^2}{(z^2+s)^2} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 + \frac{2z^2 s}{z^2+s} \left\langle \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \mathbf{n}L \right\rangle + z^2 \left\| \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \mathbf{n}L \right\|^2 \\ & + \frac{s z^4}{(z^2+s)^2} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 - \frac{2z^2 s}{z^2+s} \left\langle \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \mathbf{n}L \right\rangle + s \left\| \mathbf{n}L + \frac{z^2}{z^2+s} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\|^2 \\ = & (s + z^2) \left\| \mathbf{n}L + \frac{z^2}{s+z^2} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\|^2 + \frac{z^2 s (z^2+s)}{(z^2+s)^2} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 \\ = & (s + z^2) \left\| \mathbf{n}L + \frac{z^2}{s+z^2} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\|^2 + \frac{z^2 s}{z^2+s} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 \\ = & \frac{z^4}{s+z^2} \left\| \mathbf{n}L \cdot \frac{z^2+s}{z^2} + (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\|^2 + \frac{z^2 s}{z^2+s} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2. \end{aligned}$$

Unter Vertauschung von Summation und Integration in (3.5) sowie Anwendung der Formel (2.10) erhalten wir damit

$$\begin{aligned} E(s) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2 z^2 - s \|\mathbf{n}L\|^2} dz \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-\frac{z^2 s}{z^2+s} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{-\frac{z^4}{s+z^2} \left\| \mathbf{n}L \cdot \frac{z^2+s}{z^2} + (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\|^2} dz \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-\frac{z^2 s}{z^2+s} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{L^3 (z^2 + s)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{(z^2+s)L^2}} e^{\frac{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) z^2}{(z^2+s)L}} dz. \end{aligned}$$

In der erhaltenen unendlichen Summe isolieren wir den Term für  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  und betrachten zunächst die Summe

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-\frac{z^2 s}{z^2+s} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{L^3 (z^2 + s)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{(z^2+s)L^2}} e^{\frac{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) z^2}{(z^2+s)L}} dz,$$

welche absolut und gleichmäßig für  $s \geq 0$  konvergiert. Verschieben wir das Integral in die Summe und lassen in jedem Summanden  $s$  gegen Null gehen, so verbleibt die Berechnung des Integrals

$$\int_0^\alpha \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (z^2 L^2)}}{z^3} dz,$$

welches offenbar für alle  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  existiert. Daher können wir in obiger Summe den Grenzübergang  $s \rightarrow 0$  mit der Integration vertauschen und erhalten

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z} \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) / L} \int_0^\alpha \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (z^2 L^2)}}{z^3} dz \\ &= \frac{2\pi}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z} \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) / L} \int_{-\infty}^{-\frac{1}{\alpha^2}} \frac{1}{2} e^{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 y / L^2} dy \\ &= \frac{2\pi}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z} \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) / L} \frac{L^2 e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{2\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2} \\ &= \frac{1}{\pi L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z} \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) / L} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} =: E^L. \end{aligned}$$

Definieren wir für  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}$  die Summen  $S(\mathbf{k}) := \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j / L}$ , so können wir  $E^L$  auch in der Form

$$E^L = \frac{1}{\pi L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2$$

schreiben. Der restliche Term für  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  sei im Folgenden mit

$$E^{\text{correct}} := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{2\pi}{L^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \int_0^\alpha \frac{e^{-\frac{z^2 s}{z^2 + s} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}{(z^2 + s)^{\frac{3}{2}}} dz$$

bezeichnet. Mit der Substitution  $y = \frac{z^2}{z^2 + s}$  erhalten wir

$$dy = \frac{2zs}{(z^2 + s)^2} dz = \frac{2s\sqrt{y}}{(z^2 + s)^{\frac{3}{2}}} dz$$

und damit

$$E^{\text{correct}} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{2\pi}{L^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \int_0^{\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + s}} \frac{e^{-ys \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}{2s\sqrt{y}} dy.$$

Für die Herleitung der Darstellung des Integrals [2, Gleichung (3.21)] nutzen wir die Taylor-Entwicklung

$$e^{-y\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 s} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k y^k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^{2k} \frac{s^k}{k!}$$

der Funktion  $f(s) = e^{-y\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 s}$  im Punkt  $s_0 = 0$ . Daraus erhalten wir unter Beachtung, dass für die obere Integralgrenze

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + s} = 1$$

gilt, das Resultat

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\alpha^2}{\alpha^2+s}} \frac{e^{-ys\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}{2s\sqrt{y}} dy &= \int_0^{\frac{\alpha^2}{\alpha^2+s}} \left( \frac{1}{2s\sqrt{y}} - \frac{\sqrt{y}}{2} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 \right) dy + \mathcal{O}(s) \\ &= \frac{\sqrt{y}}{s} \Big|_{y=0}^{\frac{\alpha^2}{\alpha^2+s}} - \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{3} y^{\frac{3}{2}} \Big|_{y=0}^{\frac{\alpha^2}{\alpha^2+s}} + \mathcal{O}(s) \\ &= \frac{1}{s} \left( \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + s} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{3} \left( \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + s} \right)^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(s) \\ &= \frac{1}{s} \left( \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + s} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{3} + \mathcal{O}(s) \text{ für } s \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Damit gilt aufgrund der Voraussetzung (3.3)

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \int_0^{\frac{\alpha^2}{\alpha^2+s}} \frac{e^{-ys\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}{2s\sqrt{y}} dy &= 0 - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 + \mathcal{O}(s) \\ &= -\frac{2}{3} \sum_{i=1}^N q_i \|\mathbf{x}_i\|^2 \sum_{j=1}^N q_j + \frac{2}{3} \left\langle \sum_{j=1}^N q_j \mathbf{x}_j, \sum_{j=1}^N q_j \mathbf{x}_j \right\rangle + \mathcal{O}(s) = \frac{2}{3} \left\| \sum_{j=1}^N q_j \mathbf{x}_j \right\|^2 + \mathcal{O}(s). \end{aligned}$$

Für den Korrekturterm  $E^{\text{correct}}$  erhalten wir also durch Bildung des Grenzwertes für  $s \rightarrow 0$

$$E^{\text{correct}} = \frac{4\pi}{3L^3} \left\| \sum_{j=1}^N q_j \mathbf{x}_j \right\|^2. \quad (3.6)$$

Als Endresultat erhalten wir damit

$$E = \underbrace{\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{nL}\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{nL}\|}}_{=: E^{\text{S}}} + E^{\text{L}} + E^{\text{correct}} - \underbrace{\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N q_j^2}_{=: E^{\text{self}}} \quad (3.7)$$

unter Verwendung der sphärischen Summationsreihenfolge (3.2).

### 3.2.1 Der Konvergenzfaktor $e^{-s\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2}$

Im Folgenden wollen wir untersuchen, inwieweit sich der Grenzwert der unendlichen Summe (3.1) ändert, wenn statt  $e^{-s\|\mathbf{n}L\|^2}$  der Konvergenzfaktor  $e^{-s\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2}$  verwendet wird. Anstelle von

$$E := \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\substack{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 \\ \|\mathbf{n}\| \leq m}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}$$

wollen wir also die Energie  $E$  über den Grenzwert

$$E := \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{\substack{i,j=1 \\ 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\| \leq m}}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} \quad (3.8)$$

berechnen. Analog zu (3.5) erhalten wir wiederum mit der Substitution  $z = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^{-1}t$

$$E(s) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \int_0^\alpha e^{-(z^2+s)\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2} dz.$$

Durch Vertauschung von Summation und Integration sowie Anwendung von (2.10) erhalten wir

$$E(s) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{L^3(z^2+s)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{-\pi^2\|\mathbf{k}\|^2}{(s+z^2)L^2}} e^{\frac{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{(z^2+s)L}} dz$$

und

$$\lim_{s \rightarrow 0} E(s) = \frac{1}{\pi L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} \frac{e^{-\pi^2\|\mathbf{k}\|^2/(\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2 + \lim_{s \rightarrow 0} \frac{2\pi}{L^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \mathcal{I}_{\alpha,s},$$

wobei

$$\mathcal{I}_{\alpha,s} := \int_0^\alpha \frac{dz}{(z^2+s)^{\frac{3}{2}}}.$$

Das Integral  $\mathcal{I}_{\alpha,s}$  existiert für alle  $\alpha, s > 0$  und ist offenbar unabhängig von  $i$  und  $j$ . Aufgrund der vorausgesetzten elektrischen Neutralität des Teilchensystems gilt daher

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \mathcal{I}_{\alpha,s} = \mathcal{I}_{\alpha,s} \sum_{i=1}^N q_i \sum_{j=1}^N q_j = 0$$

und damit

$$\lim_{s \rightarrow 0} E(s) = \frac{1}{\pi L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2 = E^L.$$

Bei der Verwendung des Konvergenzfaktors  $e^{-s \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2}$  wird also das Resultat

$$E = E^S + E^L - E^{\text{self}}$$

erhalten, wobei  $E^S$  und  $E^{\text{self}}$  wie in Gleichung (3.7) definiert sind.

### 3.2.2 Zusammenfassung und Algorithmus

Bei der Ewald-Summation wird für die Berechnung der Energie aus (3.1) selbige in einen kurzreichweitigen und einen langreichweitigen Teil zerlegt. Dies geschieht durch die Aufspaltung der Funktion  $\frac{1}{x}$  gemäß

$$\frac{1}{x} = \frac{\text{erf}(\alpha x)}{x} + \frac{\text{erfc}(\alpha x)}{x}$$

mit dem sogenannten Ewald-Parameter  $\alpha > 0$ . Die Werte der Funktion  $\frac{\text{erfc}(\alpha x)}{x}$  sind dabei für wachsendes  $x$  vernachlässigbar klein, sodass die Summation früh abgebrochen werden kann. Die Summe der langreichweitigen Anteile kann unter Ausnutzung der Neutralität des Teilchensystems mithilfe der Poissonschen Summenformel als Fourier-Reihe dargestellt werden. Da die Funktion  $\frac{\text{erf}(\alpha x)}{x}$  im Zeitbereich schlecht lokalisiert ist, kann die Summation im Fourier-Bereich früh abgebrochen werden.

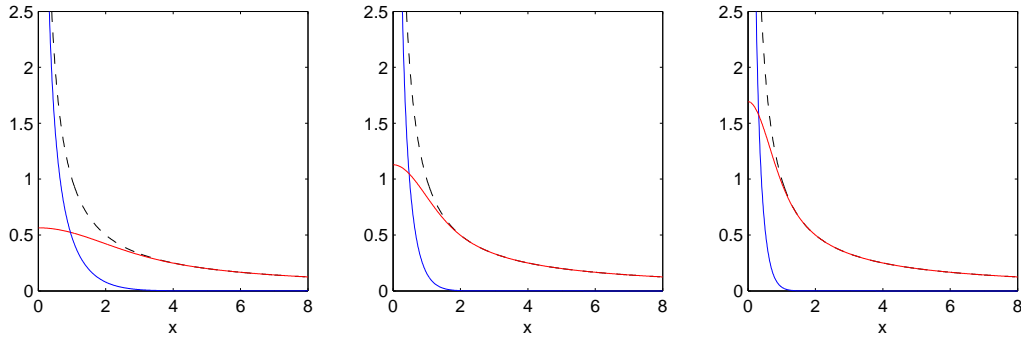


Abbildung 3.3: Die Funktionen  $\frac{1}{x}$  (schwarz),  $\frac{\text{erfc}(\alpha x)}{x}$  (blau) und  $\frac{\text{erf}(\alpha x)}{x}$  (rot) für  $\alpha = \frac{1}{2}$ ,  $\alpha = 1$  und  $\alpha = \frac{3}{2}$

Wird die Energie  $E$  gemäß (3.8) als Grenzwert der Summation über alle Paare von

Teilchen mit einem gegen unendlich strebenden maximalen Abstand definiert, so erhalten wir das Resultat

$$E = E^S + E^L - E^{\text{self}},$$

wobei

$$\begin{aligned} E^S &= \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} \\ E^L &= \frac{1}{\pi L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2 \\ E^{\text{self}} &= \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N q_j^2. \end{aligned}$$

Bei der Berechnung des kurzreichweitigen Anteils  $E^S$  müssen nur Teilchenabstände  $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\| \leq c$  für ein gut gewähltes  $c > 0$  berücksichtigt werden. Die restlichen Terme werden vernachlässigt. Bei der Berechnung von  $E^L$  werden alle Fourier-Koeffizienten, für die  $\|\mathbf{k}\| > K$  für ein hinreichend gut gewähltes  $K$  gilt, nicht einbezogen. Die Wahl der Abschneideparameter  $c$  und  $K$  kann dabei mithilfe bekannter Fehlerabschätzungen erfolgen, vgl. dazu Abschnitt 3.2.4.

Wird die Energie  $E$  als Grenzwert der sphärischen Summation (3.2) definiert, so muss der Korrekturterm  $E^{\text{correct}}$  aus Gleichung (3.6), welcher sich in  $\mathcal{O}(N)$  arithmetischen Operationen berechnen lässt, einbezogen werden.

Bei den folgenden Algorithmen werden wir jedoch auf die Einbeziehung des Korrekturterms  $E^{\text{correct}}$  verzichten.

### Algorithmus 3.1 (Schnelle Ewald-Methode).

Gegeben seien Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3$ , deren Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ , der Bedingung (3.3) genügen, der Ewald-Parameter  $\alpha > 0$  sowie die Abschneideparameter  $c > 0$  im Nahfeld und  $K > 0$  im Fernfeld.

1. Fernfeld: Berechne

$$S(\mathbf{k}) := \sum_{j=1}^N q_j e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j / L}$$

für alle  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 : 0 < \|\mathbf{k}\| \leq K$  mit der adjungierten NFFT, vgl. Algorithmus 2.2, und setze

$$E^L = \frac{1}{\pi L} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \\ 0 < \|\mathbf{k}\| \leq K}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2.$$



2. Nahfeld: Bestimme die Menge

$$R := \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3 \times [-\frac{L}{2} - c, \frac{L}{2} + c]^3 : 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq c\},$$

wobei der Index  $j$  alle Teilchen sowie deren periodische Abbilder durchläuft, und setze

$$E^S = \sum_{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in R} q_i q_j \frac{\operatorname{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}.$$

3. Berechne die Gesamtenergie durch

$$E \approx E^L + E^S - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N q_j^2 =: E^{\text{Ewald}}.$$

### 3.2.3 Bewegung eines Teilchens

In diesem Abschnitt wollen wir untersuchen, wie die Energie neu berechnet werden kann, wenn sich die Position eines Teilchens  $\mathbf{x}_p$  zu  $\mathbf{x}'_p$  ändert. Analog werden auch die Positionen aller periodischen Abbilder  $\mathbf{x}_p + \mathbf{n}L$  des Teilchens geändert.

Die Summen  $S(\mathbf{k})$  für  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 : 0 < \|\mathbf{k}\| \leq K$  können wir zunächst schnell gemäß

$$S(\mathbf{k})' := S(\mathbf{k}) + q_p \left( e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'_p / L} - e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_p / L} \right)$$

aktualisieren. Die Berechnungen im Nahfeld müssen analog zu Algorithmus 3.1 bezüglich  $\mathbf{x}_p$  und  $\mathbf{x}'_p$  durchgeführt werden.

#### Algorithmus 3.2.

Gegeben seien Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3$  und die zugehörigen Ladungen  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ .  $E^{\text{Ewald}}$  sei die aus Algorithmus 3.1 mit dem Ewald-Parameter  $\alpha$  sowie den Abschneideparametern  $c$  und  $K$  erhaltene Näherung der Gesamtenergie und  $E^L$  der berechnete langreichweitige Anteil. Desweiteren sei für die Position  $\mathbf{x}_p$  eine neue Position  $\mathbf{x}'_p$  gegeben.

1. Fernfeld: Setze zunächst

$$E^{\text{Ewald}} := E^{\text{Ewald}} - E^L.$$

Für alle  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 : 0 < \|\mathbf{k}\| \leq K$  aktualisiere  $S(\mathbf{k})$  gemäß

$$S(\mathbf{k}) := S(\mathbf{k}) + q_p \left( e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'_p / L} - e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_p / L} \right)$$

und setze

$$E^L := \frac{1}{\pi L} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \\ 0 < \|\mathbf{k}\| \leq K}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2.$$

Aktualisiere die Energie gemäß

$$E^{\text{Ewald}} := E^{\text{Ewald}} + E^L.$$

2. Nahfeld: Wir definieren zunächst die Mengen

$$U_1 := \{\mathbf{x}_p + \mathbf{n}L : \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\} \quad \text{und} \quad U_2 := \{\mathbf{x}'_p + \mathbf{n}L : \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}.$$

Desweiteren seien

$$R_1 := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : \mathbf{x}_j \in U_1 \vee \mathbf{x}_l \in U_1, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l \notin U_2 \text{ und } 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq c\}$$

und

$$R_2 := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : \mathbf{x}_j \in U_2 \vee \mathbf{x}_l \in U_2, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l \notin U_1 \text{ und } 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq c\},$$

wobei jeweils  $(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3 \times [-\frac{L}{2} - c, \frac{L}{2} + c]^3$ .

Damit lässt sich die neue Gesamtenergie gemäß

$$\begin{aligned} E^{\text{Ewald}} := E^{\text{Ewald}} &- \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_1} q_l q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j\|)}{\|\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j\|} \\ &+ \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_2} q_l q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j\|)}{\|\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j\|} \end{aligned}$$

berechnen.

### 3.2.4 Abschätzung des Fehlers bei der Berechnung der Energie

Für die Berechnung der Energie durch die Ewald-Summation sind bereits Abschätzungen für den Gesamtfehler bekannt. In [15] werden bei der Abschätzung der Gesamtabweichung der Fehler

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{\substack{i, j=1 \\ \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\| > c}}^N q_i q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}$$

bei den Berechnungen im Nahfeld sowie der Fehler im Fernfeld

$$\frac{1}{\pi L} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \\ \|\mathbf{k}\| > K}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} |S(\mathbf{k})|^2$$

getrennt betrachtet. Im Folgenden werden die wesentlichen Schritte dieser Herleitung kurz erläutert und die entsprechenden Fehlerterme angegeben. Dabei wird häufig von der Näherung [15, Gleichung (12)]

$$\int_A^\infty e^{-Bx^2} f(x) dx \approx e^{-BA^2} \cdot \frac{f(A)}{2BA}, \quad (3.9)$$

wobei für  $B > 0$ , Gebrauch gemacht. Diese Näherung gilt, falls das Integral existiert und die Funktion  $f$  der Bedingung  $\frac{d}{dx} \left( \frac{f(x)}{2Bx} \right) \ll f(x) \forall x \geq A$  genügt.

### Fehler bei den Berechnungen im Nahfeld

Für einen festen Index  $m$  betrachten wir zunächst den Fehler

$$\theta_m^S := q_m \sum_{j=1}^N \sum_{\substack{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 \\ \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_m + \mathbf{n}L\| > c}} q_j \frac{\operatorname{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_m + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_m + \mathbf{n}L\|}.$$

Unter der Annahme, dass die Fehlerterme einer Standard-Normalverteilung unterliegen und die Teilchen unabhängig voneinander verteilt sind, wird für die Standardabweichung  $\sigma(\theta_m^S)$  das Resultat

$$\sigma^2(\theta_m^S) \approx \frac{q_m^2 Q}{L^3} \int_c^\infty \operatorname{erfc}^2(\alpha r) 4\pi r dr$$

erhalten, vgl. [15, Gleichung (14)]. Dabei ist

$$Q := \sum_{j=1}^N q_j^2.$$

Durch zweimalige Anwendung der Näherung (3.9) erhalten wir daraus

$$\sigma^2(\theta_m^S) \approx \frac{q_m^2 Q c}{L^3} \cdot \frac{e^{-2\alpha^2 c^2}}{\alpha^4 c^4}$$

entsprechend [15, Gleichung (15)]. Unter der Annahme, dass die einzelnen Fehlerterme voneinander unabhängig sind, können wir die gesamte quadratische Abweichung  $\sigma^2(E^S)$  gemäß

$$\sigma^2(E^S) = \sum_{m=1}^N \sigma^2(\theta_m^S) \approx \frac{Q^2 c}{L^3} \cdot \frac{e^{-2\alpha^2 c^2}}{\alpha^4 c^4}$$

berechnen. Damit gilt für die Abweichung  $\sigma(E^S)$  von der Energie  $E^S$  die Näherung

$$\sigma(E^S) \approx Q \cdot \frac{\sqrt{cL^{-3}}}{\alpha^2 c^2} \cdot e^{-\alpha^2 c^2} =: \epsilon^S. \quad (3.10)$$

### Fehler bei den Berechnungen im Fernfeld

Für feste Indizes  $m$  und  $j$  betrachten wir den Fehlerterm

$$\theta_{mj}^L := \frac{q_m q_j}{\pi L} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \\ \|\mathbf{k}\| > K}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} e^{2\pi i (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_m) / L}.$$

Für dessen Berechnung verwenden wir die Näherung

$$\sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \\ \|\mathbf{k}\| > K}} \approx \int_{\|\mathbf{k}\| > K} d\mathbf{k} = \int_K^\infty k^2 dk \int_{-1}^1 dz \int_0^{2\pi} d\varphi, \quad (3.11)$$

wobei Kugelkoordinaten  $(k, \vartheta, \varphi)$  mit  $z := \cos \vartheta$  und der Eigenschaft  $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_m) = \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_m\| \cdot k z$  verwendet werden, vgl. [15, Formel (20)]. Durch Anwendung von (3.11) auf die Summe  $\theta_{mj}^L$  wird für  $m \neq j$

$$\theta_{mj}^L \approx 2q_m q_j e^{-\pi^2 K^2 / (\alpha L)^2} \cdot \frac{\alpha^2 L}{\pi^2 K} \cdot \frac{\sin Y}{Y} \quad \text{mit } Y := \frac{2\pi K \|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_j\|}{L}$$

erhalten, vgl. [15, Gleichung (24)]. Es bleibt nun die Berechnung des Fehlers

$$\sum_{m=1}^N \sum_{j=1}^N \theta_{mj}^L = \sum_{\substack{m,j=1 \\ m \neq j}}^N \theta_{mj}^L + \sum_{j=1}^N \theta_{jj}^L.$$

Dafür betrachten wir zunächst den zweiten Teil der Summe und erhalten unter Verwendung von (3.11) und (3.9)

$$\sum_{j=1}^N \theta_{jj}^L = \frac{Q}{\pi L} \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \\ \|\mathbf{k}\| > K}} \frac{e^{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 / (\alpha L)^2}}{\|\mathbf{k}\|^2} \approx \frac{2Q\alpha^2 L}{\pi^2 K} \cdot e^{-\pi^2 K^2 / (\alpha L)^2} =: \epsilon^{\text{Diag}}, \quad (3.12)$$

vgl. [15, Gleichung (27)]. Für die Berechnung des Fehlers

$$\sum_{\substack{m,j=1 \\ m \neq j}}^N \theta_{mj}^L$$

sind weitere Annahmen und Vereinfachungen nötig, auf die hier nicht genauer eingegangen werden soll, vgl. dazu [15, Seite 355 ff.]. Wir erhalten das Resultat

$$\sum_{\substack{m,j=1 \\ m \neq j}}^N \theta_{mj}^L \approx \sigma(E^L) \approx \frac{\sqrt{2}Q\alpha}{K^{\frac{3}{2}}\pi^2} \cdot e^{-\pi^2 K^2 / (\alpha L)^2} =: \epsilon^L. \quad (3.13)$$

Diese Fehlerabschätzungen sind ein wichtiges Hilfsmittel bei der Wahl der Parameter  $\alpha$ ,  $c$  und  $K$  in Algorithmus 3.1. Wird eine gewisse Genauigkeit vorgegeben, so können die Parameter mithilfe dieser Abschätzungen optimal hinsichtlich der Anzahl benötigter arithmetischer Operationen gewählt werden. Neben den in diesem Abschnitt aufgeführten Fehlern kommt dann nur noch der Fehler, der bei der Berechnung der Summen  $S(\mathbf{k})$  in Algorithmus 3.1 durch die Approximation mit der NFFT entsteht, hinzu.

### 3.3 Approximation mittels Fourier-Summen von Gauß-Funktionen

Wir betrachten wieder die Aufgabe der Approximation von

$$E := \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}, \quad (3.14)$$

wobei hier  $L$  von vorn herein festgelegt sein soll. Wir wählen wie in [19] auch in dieser Arbeit

$$\mathbf{x}_j \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]^3 \quad \text{mit } L = 200.$$

Systeme mit anderen Werten für  $L$  können dann mithilfe einer entsprechenden Skalierung behandelt werden.

Die im Folgenden vorgestellte Methode zur Approximation der Energie  $E$  basiert auf einer Entwicklung der Funktion  $\frac{1}{x}$  in eine Summe von Gauß-Funktionen, welche dann wiederum durch Fourier-Reihen bzw. anharmonische Fourier-Reihen approximiert werden.

Im folgenden Abschnitt wird die Idee zunächst für den eindimensionalen Fall vorgestellt. Anschließend wird diese dann auf den dreidimensionalen Fall übertragen.

#### 3.3.1 Eindimensionales Modell

Wir betrachten das zu (3.14) analoge eindimensionale Problem der Berechnung von

$$E := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{|x_i - x_j + nL|}. \quad (3.15)$$

Für  $t \in [1, l]$  betrachten wir zunächst eine Approximation der Form

$$\frac{1}{\sqrt{t}} \approx \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k t} \quad (3.16)$$

mit geeigneten Koeffizienten  $f_k < 0$  und  $c_k > 0$  für  $k = 1, \dots, M \in \mathbb{N}$ . Hierbei verwenden wir die Resultate aus [9], die eine Vielzahl derartiger Approximationen zur Verfügung stellen. Mit

$$\varepsilon := \max_{t \in [1, l]} \left| \frac{1}{\sqrt{t}} - \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k t} \right|$$

bezeichnen wir den entsprechenden Approximationsfehler, der im Folgenden als ein Genauigkeitsgrad angesehen wird. Substituieren wir  $x := \sqrt{t}$  in (3.16), so erhalten

wir

$$\frac{1}{x} \approx \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k x^2} \quad \forall x \in [1, \sqrt{l}], \quad (3.17)$$

also eine Approximation der Funktion  $\frac{1}{x}$  mittels Gauß-Funktionen mit Approximationsfehler  $\varepsilon$ .

**Bemerkung 3.1.** Die Approximation (3.17) gilt auch für alle  $x \in [1, \infty)$ , jedoch mit einem größeren Approximationsfehler. Da sowohl die Funktion  $\frac{1}{x}$  als auch die Summe der Gauß-Funktionen monoton fallend gegen Null gehen, gilt

$$\max_{x \in [1, \infty)} \left| \frac{1}{x} - \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k x^2} \right| < \frac{1}{\sqrt{l}} + \varepsilon.$$

Verwenden wir beispielsweise die Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$ , so haben wir über dem Intervall  $[1, \sqrt{l}]$  einen maximalen absoluten Fehler  $\varepsilon \approx 4.93 \cdot 10^{-6}$ . Für das Intervall  $[1, \infty)$  erhalten wir die Abschätzung  $\frac{1}{\sqrt{l}} + \varepsilon \approx 2.24 \cdot 10^{-3}$ .

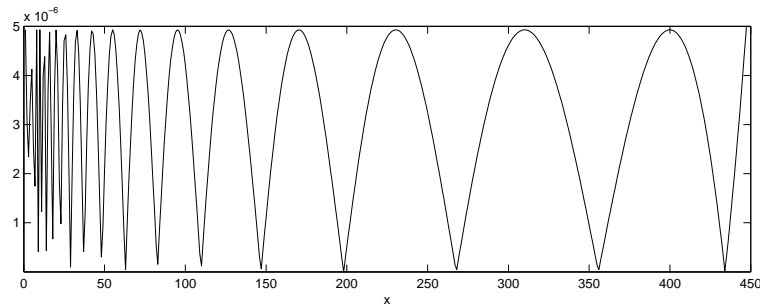


Abbildung 3.4: Absoluter Fehler über dem Intervall  $[1, \sqrt{l}]$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$

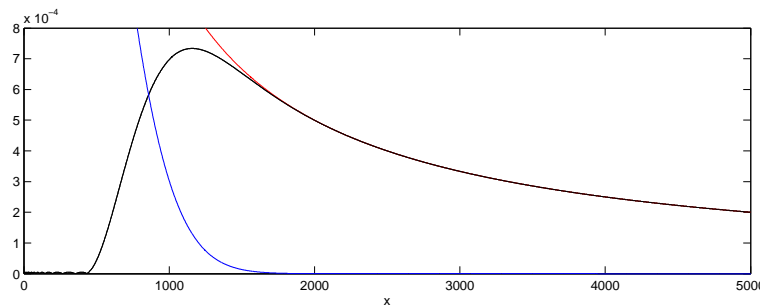


Abbildung 3.5: Absoluter Fehler (schwarz) über einem größeren Intervall bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$ , die Funktion  $\frac{1}{x}$  (rot) und die Summe der Gauß-Funktionen (blau) sind ebenfalls dargestellt

Definieren wir die Energie  $E$  über den Grenzwert

$$E := \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\substack{i,j=1 \\ 0 < |x_i - x_j + nL| \leq m}}^N \frac{q_i q_j}{|x_i - x_j + nL|},$$

so folgt, falls dieser Grenzwert existiert und die Approximation (3.17) gut genug ist, dass

$$\begin{aligned} E &\approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k(x_i - x_j + nL)^2} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k(x_i - x_j + nL)^2} - \sum_{i=1}^N q_i^2 \sum_{k=1}^M c_k \end{aligned} \quad (3.18)$$

gilt. Dabei ist (3.18) aber nur dann eine Approximation der Energie für den Fall, dass alle Teilchenabstände größer oder gleich 1 sind.

Für jedes  $k = 1, \dots, M$  definieren wir nun das Intervall

$$[-\tilde{t}_k, \tilde{t}_k] := \left\{ x \in \mathbb{R} : c_k e^{f_k x^2} \geq \varepsilon \right\}$$

mit der Intervallgrenze  $\tilde{t}_k = \sqrt{\ln\left(\frac{\varepsilon}{c_k}\right) \cdot \frac{1}{f_k}}$ . Desweiteren definieren wir

$$t_k := \begin{cases} \min_{n \in \mathbb{N}} \left\{ \frac{200}{n} : \frac{200}{n} \geq \tilde{t}_k \right\} & : \tilde{t}_k \leq 200 \\ \tilde{t}_k & : \text{sonst} \end{cases}.$$

Damit ist  $L = 200$  stets ein Vielfaches der Trägerlänge  $t_k \geq \tilde{t}_k$ , was für die zugrundeliegende Periodizität im Weiteren von Vorteil ist. Die Gauß-Funktionen seien im Folgenden so sortiert, dass stets  $t_k \geq t_{k+1}$  gilt. Hierbei sei

$$M_0 := \max\{k : t_k > 200\},$$

d.h. für  $k = 1, \dots, M_0$  ist  $[-200, 200] \subset [-t_k, t_k]$ .

Im Fall  $t_k \leq 200$  bzw.  $k > M_0$  bestimmen wir nun im Intervall  $[-2t_k, 2t_k]$  eine Approximation der Form

$$e^{f_k x^2} \approx \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x}, \quad (3.19)$$



wobei  $\tilde{\rho}_{r,k} \in \mathbb{C}$  und  $i\omega_{r,k} \in \mathbb{R}$  (anharmonische Fourier-Reihe). Dabei sei  $\tilde{N}_k \in \mathbb{N}$  so gewählt, dass

$$\max_{x \in [-2t_k, 2t_k]} \left| e^{f_k x^2} - \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x} \right| \leq \frac{\varepsilon}{|c_k|} \quad \forall k = M_0 + 1, \dots, M. \quad (3.20)$$

Eine derartige Approximation kann mithilfe des ESPRIT-Algorithmus' 2.3 erhalten werden.

**Bemerkung 3.2.** Für die Bestimmung der Parameter  $\omega_{r,k}$  werden dem ESPRIT-Algorithmus 2.3 die Funktionswerte von  $n = 2000$  im jeweiligen Intervall äquidistanten Punkten übergeben, der Parameter  $M$  wird auf 1000 gesetzt.

Durch anschließendes Lösen des überbestimmten Gleichungssystems werden  $\tilde{\rho}_{r,k} \in \mathbb{R}_+$  erhalten. Die Ungleichung (3.20) wird dann in  $10^4$  äquidistanten Punkten überprüft. Der Eingabeparameter  $P$  wird solange schrittweise erhöht, bis (3.20) in diesen Punkten erfüllt ist.

Im Weiteren betrachten wir für jedes  $k = 1, \dots, M$  die  $L$ -periodisierte Gauß-Funktion

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL)^2}.$$

Diese Funktion kann gemäß Gleichung (2.10) für  $d = 1$  jeweils in eine Fourier-Reihe entwickelt werden. Wir erhalten

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL)^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x / L}$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$\tilde{d}_{n,k} = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot e^{\pi^2 n^2 / (L^2 f_k)}.$$

Im Folgenden betrachten wir jeweils eine Approximation

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL)^2} \approx \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x / L} =: S_{\tilde{P}_k} \quad (3.21)$$

der periodisierten Gauß-Funktion mit einem hinreichend groß gewählten  $\tilde{P}_k$ , für das

$$\left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL)^2} - S_{\tilde{P}_k} \right| \leq \frac{\varepsilon}{|c_k|} \quad \forall x \in [0, 200] \quad (3.22)$$

erfüllt ist. Im Gegensatz zu (3.20) kann die Ungleichung (3.22) nicht durch direktes Nachrechnen in einer Auswahl von Punkten überprüft werden. Wir schätzen den Approximationsfehler stattdessen folgendermaßen nach oben ab

$$\begin{aligned}
 \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL)^2} - S_{\tilde{P}_k} \right| &\leq \sum_{|n| > \tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} \\
 &= 2 \cdot \sum_{n=\tilde{P}_k+1}^R \tilde{d}_{n,k} + \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \sum_{n=R+1}^{\infty} e^{\pi^2 n^2 / (L^2 f_k)} \\
 &\leq 2 \cdot \sum_{n=\tilde{P}_k+1}^R \tilde{d}_{n,k} + \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \sum_{n=R+1}^{\infty} e^{\pi^2 n / (L^2 f_k)} \\
 &= 2 \cdot \sum_{n=\tilde{P}_k+1}^R \tilde{d}_{n,k} + \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \frac{e^{\pi^2 R / (L^2 f_k)}}{1 - e^{\pi^2 / (L^2 f_k)}} \stackrel{!}{\leq} \frac{\varepsilon}{|C_k|}, \quad (3.23)
 \end{aligned}$$

wobei  $R > \tilde{P}_k$ .  $\tilde{P}_k$  wird bestimmt, indem  $R$  zunächst so gewählt wird, sodass die Abschätzung für den Reihenrest vernachlässigbar klein wird, in etwa

$$\text{wähle } R \text{ groß genug, sodass } \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \frac{e^{\pi^2 R / (L^2 f_k)}}{1 - e^{\pi^2 / (L^2 f_k)}} \leq \varepsilon^2.$$

Wurde  $R$  dementsprechend gewählt, so kann dann  $\tilde{P}_k$  kleinstmöglich gewählt werden, sodass die Ungleichung in (3.23) erfüllt ist.

**Beispiel 3.1.** *Im Folgenden werden zur Veranschaulichung für ein konkretes Beispiel alle bereits definierten Größen aufgeführt. Für die Approximation (3.17) wurden dabei  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  gewählt, vgl. Tabelle 3.1. In diesem Fall werden  $\varepsilon \approx 4.93 \cdot 10^{-6}$  und  $M_0 = 3$  erhalten.*

*Wählt man beispielsweise die Approximation (3.17) mit  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen, erhält man  $\varepsilon \approx 3.08 \cdot 10^{-6}$  und  $M_0 = 8$ . Weiterhin werden  $t_1 \approx 199915.87$  und für die schmalste Gauß-Funktion mit  $t_{20} \approx 1.75$  eine Summe der Länge  $2\tilde{P}_{20} + 1 = 855$  erhalten.*

$k$	$f_k$	$c_k$	$t_k$	$\tilde{N}_k$	$2\tilde{P}_k + 1$
1	-2.4827e-06	3.6286e-03	1630.61		1
2	-2.6677e-05	4.7035e-03	507.13		1
3	-1.0878e-04	7.5140e-03	259.57		3
4	-3.6678e-04	1.2600e-02	200.00	16	7
5	-1.1340e-03	2.0792e-02	100.00	15	11
6	-3.2876e-03	3.3519e-02	66.67	17	21
7	-9.0326e-03	5.2893e-02	33.33	15	35
8	-2.3693e-02	8.1910e-02	22.22	16	57
9	-5.9677e-02	1.2475e-01	13.33	16	91
10	-1.4501e-01	1.8720e-01	8.70	17	145
11	-3.4132e-01	2.7731e-01	5.71	17	227
12	-7.8129e-01	4.0689e-01	3.85	18	349
13	-1.7513e+00	5.9848e-01	2.60	18	533
14	-3.9424e+00	9.4073e-01	1.77	19	815

Tabelle 3.1: Übersicht für die Approximation (3.17) mit  $M = 14$  Gauß-Funktionen im Intervall  $[1, \sqrt{2} \cdot 10^5]$

### Berechnung der Energie

Beispiel 3.1 können wir entnehmen, dass die Anzahl der Fourier-Koeffizienten für die Approximation der periodisierten Gauß-Funktion mit wachsendem Index  $k$  sehr schnell anwächst, wohingegen die Länge der anharmonischen Fourier-Reihe aufgrund der Einschränkung auf das Intervall  $[-2t_k, 2t_k]$  nur sehr langsam zunimmt. Im Folgenden wollen wir daher bei der Berechnung der Energie zunächst die Approximation mittels periodisierten Gauß-Funktionen nutzen und ab einem bestimmten Index  $k$  zur Verwendung der anharmonischen Fourier-Reihen übergehen.

Im Folgenden sei dafür  $M_1 \geq M_0$  gewählt. Für die Approximation der Energie nutzen wir nun Fourier-Summen (3.21) im Fall  $k = 1, \dots, M_1$  und anharmonische Fourier-Reihen (3.19) für  $k > M_1$ . Daher soll  $M_1$  im Weiteren als Splitting-Parameter bezeichnet werden. Wir betrachten zunächst den mittels periodisierten Gauß-Funktionen berechneten Teil der Energie

$$E_1 := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=1}^{M_1} c_k e^{f_k(x_i - x_j + nL)^2}. \quad (3.24)$$

Da die unendliche Summe in (3.24) stets konvergiert, können wir die Summations-

reihenfolge vertauschen und erhalten

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j c_k \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x_i - x_j + nL)^2} \\
 &\approx \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j c_k \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n(x_i - x_j)/L} \\
 &= \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} c_k \tilde{d}_{n,k} \left( \sum_{i=1}^N q_i e^{2\pi i n x_i / L} \right) \left( \sum_{j=1}^N q_j e^{-2\pi i n x_j / L} \right) \\
 &= \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} d_{n,k} |\hat{q}_n|^2, \tag{3.25}
 \end{aligned}$$

wobei  $d_{n,k} := c_k \tilde{d}_{n,k}$  und  $\hat{q}_n := \sum_{j=1}^N q_j e^{2\pi i n x_j / L}$ . Die Summen  $\hat{q}_n$  können dabei mit der adjungierten NFFT schnell berechnet werden, vgl. Algorithmus 2.2.

Für den Fall  $k > M_1$  betrachten wir zunächst die Summen

$$h_k(x) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^N q_j e^{f_k(x_j - x + nL)^2}.$$

Für den mittels anharmonischen Fourier-Reihen berechneten Teil der Energie

$$E_2 := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=M_1+1}^M c_k e^{f_k(x_j - x_i + nL)^2} \tag{3.26}$$

folgt damit durch Vertauschung der Summationsreihenfolge

$$\begin{aligned}
 E_2 &= \sum_{k=M_1+1}^M c_k \sum_{i=1}^N q_i \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^N q_j e^{f_k(x_j - x_i + nL)^2} \\
 &= \sum_{k=M_1+1}^M c_k \sum_{i=1}^N q_i h_k(x_i). \tag{3.27}
 \end{aligned}$$

Die Approximation (3.19) ist jeweils im Intervall  $[-2t_k, 2t_k]$  gültig. Außerdem sollen im Folgenden alle Teilchenabstände größer oder gleich  $t_k$  bei der Approximation der Energie vernachlässigt werden.

Dafür unterteilen wir nun das Intervall  $[-100, 100]$  in Teilintervalle der Länge  $t_k$  und bezeichnen diese mit

$$I_{s,k} \quad \text{für } s = 1, \dots, A_k,$$

wobei  $A_k = \frac{200}{t_k}$  die jeweilige Anzahl an Teilintervallen ist. Am Rand ergänzen wir  $[-100, 100]$  durch zwei weitere Intervalle

$$I_{0,k} := [-(100 + t_k), -100] \quad \text{und} \quad I_{A_k+1,k} := [100, 100 + t_k],$$

wobei folgendes gelten soll:

- $\forall x_j \in I_{1,k} \Rightarrow x_j + 200 \in I_{A_k+1,k}$
- $\forall x_j \in I_{A_k,k} \Rightarrow x_j - 200 \in I_{0,k}$ .

Im Folgenden bezeichnen wir mit  $J_{s,k} := I_{s-1,k} \cup I_{s,k} \cup I_{s+1,k}$  die Vereinigung des Intervalls  $I_{s,k}$  mit seinen beiden Nachbarintervallen. Mit obigen Überlegungen gilt dann für ein  $x_j \in I_{s,k}$  die Näherung

$$\begin{aligned} c_k h_k(x_j) &\approx \sum_{x_i \in J_{s,k}} c_k q_i e^{f_k(x_i - x_j)^2} \\ &\approx \sum_{x_i \in J_{s,k}} q_i \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \rho_{r,k} e^{\omega_{r,k}(x_i - x_j)} \\ &= \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \rho_{r,k} e^{-\omega_{r,k} x_j} \cdot \left( \sum_{x_i \in I_{s-1,k}} q_i e^{\omega_{r,k} x_i} + \sum_{x_i \in I_{s,k}} q_i e^{\omega_{r,k} x_i} + \sum_{x_i \in I_{s+1,k}} q_i e^{\omega_{r,k} x_i} \right) \\ &= \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \rho_{r,k} e^{-\omega_{r,k} x_j} \cdot \left( \hat{q}_{r,k}^{s-1} + \hat{q}_{r,k}^s + \hat{q}_{r,k}^{s+1} \right), \end{aligned} \quad (3.28)$$

wobei  $\hat{q}_{r,k}^s := \sum_{x_i \in I_{s,k}} q_i e^{\omega_{r,k} x_i}$ . Dabei können insbesondere die Terme für die Randboxen durch

$$\begin{aligned} \hat{q}_{r,k}^{A_k+1} &= \sum_{x_i \in I_{1,k}} q_i e^{\omega_{r,k}(x_i+200)} = e^{200\omega_{r,k}} \cdot \hat{q}_{r,k}^1 \quad \text{und} \\ \hat{q}_{r,k}^0 &= \sum_{x_i \in I_{A_k,k}} q_i e^{\omega_{r,k}(x_i-200)} = e^{-200\omega_{r,k}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{A_k} \end{aligned}$$

schnell berechnet werden.

Wir definieren nun die Energiebeiträge

$$\begin{aligned} E_{s,k} &:= c_k \sum_{x_i \in I_{s,k}} q_i h_k(x_i) \\ &\stackrel{(3.28)}{\approx} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \rho_{r,k} \underbrace{(\hat{q}_{r,k}^{s-1} + \hat{q}_{r,k}^s + \hat{q}_{r,k}^{s+1})}_{=: \sigma_{r,k}^s} \cdot \overline{\hat{q}_{r,k}^s}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Damit können wir nun  $E_2$  gemäß

$$E_2 = \sum_{k=M_1+1}^M c_k \sum_{i=1}^N q_i h_k(x_i) = \sum_{k=M_1+1}^M \sum_{s=1}^{A_k} c_k \sum_{x_i \in I_{s,k}} q_i h_k(x_i) = \sum_{k=M_1+1}^M \sum_{s=1}^{A_k} E_{s,k}$$

berechnen. Für einen gegebenen Splitting-Parameter  $M_1$  erhalten wir also für die Gesamtenergie  $E$  des Systems aus (3.18) die Näherung

$$E \approx \tilde{E} := E_1 + E_2 - \sum_{i=1}^N q_i^2 \sum_{k=1}^M c_k,$$

falls alle Teilchenabstände größer oder gleich 1 sind. Dabei sind für die Berechnung von  $E_1$  und  $E_2$  die Approximationen (3.25) und (3.29) einzusetzen.

In den Abbildungen 3.6 und 3.7 ist veranschaulicht, welche Abstände zu anderen Teilchen in die Berechnung der Energie eingehen. Wird die Gauß-Funktion periodisiert, so müssen keine zusätzlichen Teilchenpositionen erzeugt werden, da alle Abstände zu periodischen Abbildern durch die Periodisierung in die Berechnung einbezogen werden. Die Periodisierung einer schmalen und einer breiten Gauß-Funktion ist in Abbildung 3.6 zu sehen.

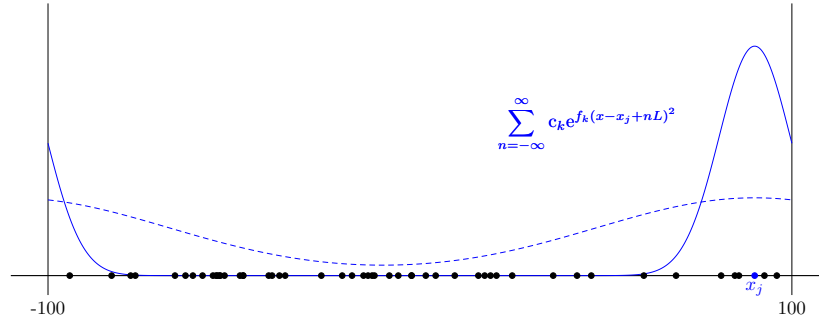


Abbildung 3.6: Veranschaulichung der Approximation durch periodisierte Gauß-Funktionen

Für die schmale Gauß-Funktion können wir alternativ die Approximation durch die anharmonische Fourier-Reihe verwenden. Dafür wird das Intervall in mehrere Abschnitte unterteilt. Dabei müssen für jedes Teilchen  $x_j \in I_{s,k}$  nur die Abstände zu Partikeln der umliegenden Teilintervalle  $J_{s,k}$  berücksichtigt werden, vgl. Abbildung 3.7. Für die Berechnungen in den äußeren Bereichen ergänzen wir am Rand jeweils ein zusätzliches Intervall mit periodischen Abbildern von Partikeln, wie in dieser Abbildung durch den rot gefärbten Bereich gekennzeichnet ist.

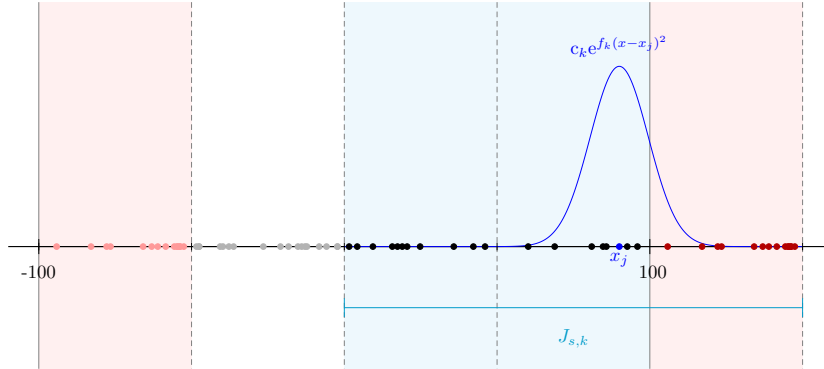


Abbildung 3.7: Veranschaulichung der Approximation durch anharmonische Fourier-Reihen

### Nahfeldkorrektur

Im Fall, dass nicht alle Teilchenabstände größer oder gleich 1 sind, ist die Menge

$$R := \{(x_j, x_k) : 0 < |x_j - x_k| \leq 1\},$$

wobei  $x_j \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$  und  $x_k \in [-\frac{L}{2} - 1, \frac{L}{2} + 1]$ , zu bestimmen. Damit kann dann die Energie gemäß

$$E \approx \tilde{E} + \sum_{(x_i, x_j) \in R} q_i q_j \left( \frac{1}{|x_i - x_j|} - \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k(x_i - x_j)^2} \right) \quad (3.30)$$

approximiert werden.

### 3.3.2 Berechnung der Energie im dreidimensionalen Fall

Im Folgenden seien  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  und  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$  komponentenweise durch  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  und  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  gegeben. Für jeden Index  $k$  gilt nun

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} &= \sum_{n_1 = -\infty}^{\infty} e^{f_k(x_1 + n_1 L)^2} \cdot \sum_{n_2 = -\infty}^{\infty} e^{f_k(x_2 + n_2 L)^2} \cdot \sum_{n_3 = -\infty}^{\infty} e^{f_k(x_3 + n_3 L)^2} \\ &\approx \sum_{n = -\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_1 / L} \cdot \sum_{n = -\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_2 / L} \cdot \sum_{n = -\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_3 / L}. \end{aligned}$$

Wir betrachten nun die Index-Mengen

$$\tilde{Y}_k := \left\{ \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3 : n_1, n_2, n_3 = -\tilde{P}_k, \dots, \tilde{P}_k \right\}$$

und definieren für  $\mathbf{n} \in \tilde{Y}_k$  die dreidimensionalen Faktoren  $\boldsymbol{\psi}_{\mathbf{n}}$  und die Koeffizienten  $\tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k}$  gemäß

$$\boldsymbol{\psi}_{\mathbf{n}} := \left( \frac{2\pi i n_1}{L}, \frac{2\pi i n_2}{L}, \frac{2\pi i n_3}{L} \right) \quad \text{ sowie } \quad \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} := \tilde{d}_{n_1,k} \cdot \tilde{d}_{n_2,k} \cdot \tilde{d}_{n_3,k}.$$

Damit erhalten wir die Approximationen

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} \approx \sum_{\mathbf{n} \in \tilde{Y}_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\boldsymbol{\psi}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}} \quad (3.31)$$

der Länge  $|\tilde{Y}_k| = (2\tilde{P}_k + 1)^3 =: P_k$ . Für den anharmonischen Fall erhalten wir analog mit

$$\{\boldsymbol{\omega}_{j,k}\}_{j=1}^{N_k} := \{(\omega_{j_1,k}, \omega_{j_2,k}, \omega_{j_3,k}) : j_1, j_2, j_3 = 1, \dots, \tilde{N}_k\}$$

und

$$\tilde{\zeta}_{j,k} := \tilde{\rho}_{j_1,k} \cdot \tilde{\rho}_{j_2,k} \cdot \tilde{\rho}_{j_3,k} \quad \text{ für } \boldsymbol{\omega}_{j,k} = (\omega_{j_1,k}, \omega_{j_2,k}, \omega_{j_3,k})$$

für alle  $\mathbf{x} \in [-2t_k, 2t_k]^3$  die Approximation

$$e^{f_k \|\mathbf{x}\|^2} \approx \sum_{j=1}^{N_k} \tilde{\zeta}_{j,k} e^{\boldsymbol{\omega}_{j,k} \cdot \mathbf{x}}, \quad (3.32)$$

wobei  $N_k := \tilde{N}_k^3$  gesetzt wird. Aufgrund der Dreiecksungleichung gilt dabei

$$\begin{aligned} & \max_{x_1, x_2, x_3 \in [-2t_k, 2t_k]} \left| e^{f_k(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)} - \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_1} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_2} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_3} \right| \\ & \leq \max_{x_1, x_2, x_3 \in [-2t_k, 2t_k]} \left| e^{f_k x_1^2} - \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_1} \right| \left| e^{f_k x_2^2} e^{f_k x_3^2} \right| + \dots \\ & \dots \max_{x_1, x_2, x_3 \in [-2t_k, 2t_k]} \left| e^{f_k x_2^2} - \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_2} \right| \left| e^{f_k x_3^2} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_1} \right| + \dots \\ & \dots \max_{x_1, x_2, x_3 \in [-2t_k, 2t_k]} \left| e^{f_k x_3^2} - \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_3} \right| \left| \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_1} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r,k} e^{\omega_{r,k} x_2} \right| \\ & \stackrel{(3.20)}{\leq} \frac{\varepsilon}{|c_k|} \cdot \left[ 1 + \left( 1 + \frac{\varepsilon}{|c_k|} \right) + \left( 1 + \frac{\varepsilon}{|c_k|} \right)^2 \right] = \frac{3\varepsilon + 3\frac{\varepsilon^2}{|c_k|} + \frac{\varepsilon^3}{|c_k|^2}}{|c_k|} =: \frac{\delta_k}{|c_k|}. \quad (3.33) \end{aligned}$$



Da viele der Koeffizienten  $\tilde{\zeta}_{j,k}$  betragsmäßig sehr klein sind, ist es sinnvoll nur die für die Approximation wesentlichen in die Berechnung einfließen zu lassen. Wir wählen dafür die  $n_k \leq N_k$  betragsmäßig größten Koeffizienten, sodass immernoch

$$\max_{\mathbf{x} \in [-2t_k, 2t_k]^3} \left| e^{f_k \|\mathbf{x}\|^2} - \sum_{r=1}^{n_k} \tilde{\zeta}_{r,k} e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad (3.34)$$

gilt, dabei seien die übrig gebliebenen Koeffizienten neu von 1 bis  $n_k$  durchnummeriert. Der Approximationsfehler (3.33) kann analog für die Näherung (3.31) gezeigt werden. Auch hier sollen nun nur die betragsmäßig größten  $p_k \leq P_k$  Koeffizienten gewählt werden, sodass dieser Approximationsfehler erhalten bleibt. Hierfür bezeichnen wir mit  $Y_k \subset \tilde{Y}_k$  die Menge der  $p_k = |Y_k|$  betragsmäßig größten Koeffizienten, für die

$$\left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} - \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\psi_{\mathbf{n},k} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad \forall \mathbf{x} \in [0, 200]^3 \quad (3.35)$$

erfüllt ist. Ungleichung (3.34) kann wieder durch direktes Nachrechnen in einer entsprechend großen Auswahl von Punkten des Gebiets  $[-2t_k, 2t_k]^3$  überprüft werden. Die Gültigkeit von (3.35) wird durch die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} - \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\psi_{\mathbf{n},k} \cdot \mathbf{x}} \right| \\ & \leq \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3 \setminus Y_k} \tilde{d}_{n_1,k} \cdot \tilde{d}_{n_2,k} \cdot \tilde{d}_{n_3,k} = \left( \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{d}_{n,k} \right)^3 - \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} \\ & \stackrel{(3.23)}{\leq} \left( \tilde{d}_{0,k} + 2 \cdot \sum_{n=1}^R \tilde{d}_{n,k} + \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \frac{e^{\pi^2 R/L^2 f_k}}{1 - e^{\pi^2/L^2 f_k}} \right)^3 - \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} \stackrel{!}{\leq} \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad (3.36) \end{aligned}$$

garantiert, wobei  $R \in \mathbb{N}$ . Dabei wird bei der Wahl von  $R$  analog zum eindimensionalen Fall vorgegangen.

Ähnlich zum eindimensionalen Fall kann nun die Energie

$$E := \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}$$

approximiert werden. In der folgenden Tabelle ist hierfür veranschaulicht, wie sich die Berechnungen auf den dreidimensionalen Fall übertragen. Dabei sind analog die Koeffizienten  $\gamma_{\mathbf{n},k} := \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} c_k$  und  $\zeta_{r,k} := \tilde{\zeta}_{r,k} c_k$  definiert.

eindimensional	dreidimensional
Verwendung von periodisierten Gauß-Funktionen, $k = 1, \dots, M_1$	
$E_1 \approx \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} d_{n,k}  \hat{q}_n ^2$ mit $\hat{q}_n := \sum_{j=1}^N q_j e^{2\pi i n x_j / L}$	$E_1 \approx \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k}  \hat{q}_{\mathbf{n}} ^2$ mit $\hat{q}_{\mathbf{n}} := \sum_{j=1}^N q_j e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_j}$
Verwendung anharmonischer Fourier-Reihen, $k = M_1 + 1, \dots, M$	
Einteilung von $[-100, 100]$ in Teilintervalle der Länge $t_k$ : $I_{s,k}$ mit $s = 1, \dots, A_k$	Einteilung von $[-100, 100]^3$ in Boxen der Kantenlänge $t_k$ : $I_{\mathbf{s},k}$ mit $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3) \in \{1, \dots, A_k\}^3$
Ergänzen das Intervall am Rand durch $I_{0,k}$ und $I_{A_k+1,k}$	Ergänzen den Würfel an den Rändern durch $I_{\mathbf{t},k}$ , wobei $\mathbf{t} = (t_1, t_2, t_3)$ und $\exists t_i \in \{0, A_k + 1\}$
Nachbarintervalle: $J_{s,k} = I_{s-1,k} \cup I_{s,k} \cup I_{s+1,k}$	Nachbarboxen: $J_{\mathbf{s},k} = \bigcup_{\mathbf{i} \in \{-1,0,1\}^3} I_{\mathbf{s}+\mathbf{i},k}$
Für alle Intervalle $I_{s,k}$ sei $\hat{q}_{r,k}^s := \sum_{x_i \in I_{s,k}} q_i e^{\omega_{r,k} x_i}$ . Für alle inneren Intervalle setzen wir $\sigma_{r,k}^s = \hat{q}_{r,k}^{s-1} + \hat{q}_{r,k}^s + \hat{q}_{r,k}^{s+1}$ . $(r = 1, \dots, \tilde{N}_k)$	Für alle Boxen $I_{\mathbf{s},k}$ sei $\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}} := \sum_{x_i \in I_{\mathbf{s},k}} q_i e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_i}$ . Für alle inneren Boxen setzen wir $\sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{t}: I_{\mathbf{t},k} \subset J_{\mathbf{s},k}} \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}}$ . $(r = 1, \dots, n_k)$
$E_{s,k} \approx \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \rho_{r,k} \sigma_{r,k}^s \cdot \overline{\hat{q}_{r,k}^s}$ $E_2 = \sum_{k=M_1+1}^M \sum_{s=1}^{A_k} E_{s,k}$	$E_{\mathbf{s},k} \approx \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} \cdot \overline{\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}}}$ $E_2 = \sum_{k=M_1+1}^M \sum_{s_1=1}^{A_k} \sum_{s_2=1}^{A_k} \sum_{s_3=1}^{A_k} E_{\mathbf{s},k}$
$E \approx E_1 + E_2 - \sum_{i=1}^N q_i^2 \sum_{k=1}^M c_k, \text{ falls alle Teilchenabstände größer oder gleich 1 sind.}$	

Tabelle 3.2: Übertragung aller Berechnungen auf den dreidimensionalen Fall

**Beispiel 3.2.** In den nachstehenden Tabellen sind für die Approximationen (3.17) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  bzw.  $M = 20$  und  $l = 8 \cdot 10^{10}$  einige Werte für  $n_k$  und  $p_k$  aufgeführt. Wie im eindimensionalen Fall können wir erkennen, dass die Werte für  $p_k$  mit wachsendem Index  $k$  deutlich schneller anwachsen.

$k$	$n_k$	$p_k$	$k$	$n_k$	$p_k$
4	2.64e+03	1.70e+02	9	1.40e+03	7.80e+01
5	2.15e+03	1.13e+03	10	5.89e+03	4.32e+02
6	3.20e+03	5.49e+03	11	4.22e+03	2.27e+03
7	2.23e+03	2.73e+04	12	2.83e+03	1.13e+04
8	2.88e+03	1.27e+05	13	2.56e+03	5.22e+04
9	2.76e+03	5.78e+05	14	2.72e+03	2.10e+05
10	3.11e+03	2.33e+06	15	3.37e+03	8.64e+05
11	3.33e+03	8.93e+06	16	3.38e+03	3.34e+06
			17	3.76e+03	1.37e+07

Tabelle 3.3: Einige Werte für  $n_k$  und  $p_k$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen (links) und mit  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen (rechts)

### Nahfeldkorrektur

Im Folgenden sei der sogenannte Nahfeld-Parameter  $M_2 \geq M_0$  fest gewählt. Anstatt alle  $M$  Gauß-Funktionen für die Approximation der Energie zu benutzen, wollen wir im Folgenden nur die  $M_2$  ersten Gauß-Funktionen für die Approximation verwenden. Hierzu betrachten wir die Menge

$$R_{M_2} := \left\{ (\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]^3 \times \left[-\frac{L}{2} - t_{M_2+1}, \frac{L}{2} + t_{M_2+1}\right]^3 : 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq t_{M_2+1} \right\}.$$

Im Fall  $M_2 = M$  setzen wir dabei  $t_{M+1} := 1$ . Ist  $R_{M_2} = \emptyset$ , so kann  $E$  analog zu Tabelle 3.2 näherungsweise durch

$$E \approx \tilde{E} := \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 + \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s_1=1}^{A_k} \sum_{s_2=1}^{A_k} \sum_{s_3=1}^{A_k} E_{\mathbf{s},k} - \sum_{i=1}^N q_i^2 \sum_{k=1}^{M_2} c_k$$

berechnet werden, wobei der Splitting-Parameter  $M_1$  so gewählt sei, dass  $M_0 \leq M_1 \leq M_2$  gilt. Andernfalls muss die Menge  $R_{M_2}$  bestimmt und eine Nahfeldkorrektur vorgenommen werden, d.h. wir berechnen die Energie gemäß

$$E \approx \tilde{E} + \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_{M_2}} q_j q_l \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|} - \sum_{k=1}^{M_2} c_k e^{f_k \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|^2} \right). \quad (3.37)$$

Im Folgenden sei für ein festes  $M_2$  die Funktion  $F$  durch

$$F(x) := \sum_{k=1}^{M_2} c_k e^{f_k x^2}$$

gegeben. Die erneute exakte Berechnung aller Werte  $F(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|)$  in (3.37) ist sehr aufwändig. Diese sollen daher nur approximiert werden. Dazu betrachten wir die Menge von Stützstellen

$$T_{M_2} := \left\{ 0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_{a_{M_2}} = t_{M_2+1} \right\}$$

und approximieren  $F$  mittels der durch  $T_{M_2}$  erzeugten stückweise linearen Interpolation, d.h.

$$F(x) \approx \frac{F(\tau_{k+1}) - F(\tau_k)}{\tau_{k+1} - \tau_k} \cdot (x - \tau_k) + F(\tau_k) =: \tilde{F}(x), \quad (3.38)$$

wobei  $\tau_k \leq x \leq \tau_{k+1}$ . Die Anzahl der Stützstellen  $a_{M_2}$  wird dabei jeweils so groß gewählt, sodass der Approximationsfehler  $|F(x) - \tilde{F}(x)|$  stets kleiner als  $\varepsilon$  ist.

**Beispiel 3.3.** Für die Approximationen (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  bzw.  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$  können beispielsweise die in den nachstehenden Tabellen aufgeführten Anzahlen von Stützstellen verwendet werden.

$M_2$	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$a_{M_2}$	50	60	90	90	130	160	200	250	320	400	490	520

Tabelle 3.4: Anzahl von Stützstellen für die Approximation mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$

$M_2$	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$a_{M_2}$	40	90	100	110	130	170	220	270	340	430	530	650	680

Tabelle 3.5: Anzahl von Stützstellen für die Approximation mit  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$

### Algorithmus

Die in diesem Abschnitt beschriebene Methode zur Approximation der Energie wollen wir im Folgenden mithilfe eines Algorithmus' veranschaulichen. Für jedes  $k > M_1$  sei dabei

$$S^{\text{inner}} := \{1, \dots, A_k\}^3$$

die Menge aller Indizes von Boxen in  $[-100, 100]^3$  und

$$S^{\text{outer}} := \{0, \dots, A_k + 1\}^3 \setminus S^{\text{inner}}$$

die Menge aller Indizes der Randboxen. Desweiteren sei für jeden Index  $\mathbf{t} \in S^{\text{outer}}$  der zugehörige innere Index  $\mathbf{t}^{\text{in}} \in S^{\text{Inner}}$  gegeben, d.h. wir schreiben  $\mathbf{t}$  in der Form

$$\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{in}} + A_k \mathbf{t}^{\text{diff}}, \text{ wobei } \mathbf{t}^{\text{diff}} \in \{-1, 0, 1\}^3.$$

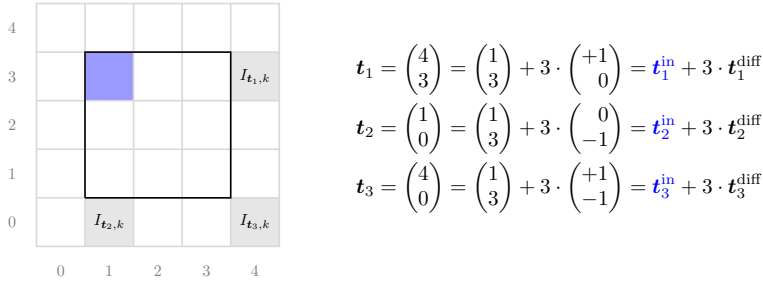


Abbildung 3.8: Eine innere Box (blau) und deren periodische Abbilder

### Algorithmus 3.3.

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  und die zugehörigen Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ , der Splitting-Parameter  $M_1 \geq M_0$  sowie der Nahfeld-Parameter  $M_2 \geq M_1$ , wobei die Approximation (3.16) mit gewissen Größen  $l$  und  $M$  zugrunde liegt. Sowohl die benötigten Koeffizienten für die Fourier-Reihen ( $\psi_{\mathbf{n}}$ ,  $\gamma_{\mathbf{n},k}$ ,  $\omega_{r,k}$  und  $\zeta_{r,k}$ ) als auch die Interpolationsdaten seien vorberechnet.

- *Vorberechnungen:* Im Vorfeld wird für jedes  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  die Einteilung der Teilchen in Boxen abgespeichert.

1. *Approximation mittels Fourier-Reihen:* Berechne

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} = \sum_{j=1}^N q_j e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{für alle } \mathbf{n} \in Y_{M_1}.$$

in  $\mathcal{O}(p_{M_1} \log p_{M_1} + N)$  arithmetischen Operationen mit der adjungierten NFFT (vgl. Algorithmus 2.2) und berechne den ersten Teil der Energie

$$E_1 = \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{n} \in Y_{M_1}} \underbrace{\left( \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{n} \in Y_k}}^{M_1} \gamma_{\mathbf{n},k} \right)}_{\text{vorberechnet}} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2$$

mit  $\approx 3p_{M_1}$  zusätzlichen arithmetischen Operationen.

2. *Approximation mittels anharmonischer Fourier-Reihen:*

Für  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  berechne

$$\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{\mathbf{s},k}} q_j e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{und} \quad \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}} = e^{200\omega_{r,k} \cdot \mathbf{t}^{\text{diff}}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}^{\text{in}}}$$

für alle  $r = 1, \dots, n_k$ ,  $\mathbf{s} \in S^{\text{inner}}$  und  $\mathbf{t} \in S^{\text{outer}}$ . Desweiteren berechne

$$\sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{t}: I_{\mathbf{t},k} \subset J_{\mathbf{s},k}} \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}} \quad \text{und} \quad E_{\mathbf{s},k} = \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} \overline{\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}}} \cdot \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}}$$

für alle  $r = 1, \dots, n_k$  und  $\mathbf{s} \in S^{\text{inner}}$ .

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx \sum_{k=M_1+1}^{M_2} n_k (8N + 8a_k^{\text{out}} + 26a_k^{\text{in}} + 3a_k^{\text{in}})$

Dabei seien für jedes  $k$  die Anzahl der inneren Boxen durch  $a_k^{\text{in}}$  und die der äußeren Boxen durch  $a_k^{\text{out}}$  gegeben.

3. *Berechne*

$$\tilde{E} = E_1 + \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s_1=1}^{A_k} \sum_{s_2=1}^{A_k} \sum_{s_3=1}^{A_k} E_{\mathbf{s},k} - \sum_{j=1}^N q_j^2 \sum_{k=1}^{M_2} c_k.$$

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx NM_2 + \sum_{k=M_1+1}^{M_2} a_k^{\text{in}}$ .

4. *Nahfeldkorrektur: Bestimme die Menge*

$$R_{M_2} := \left\{ (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]^3 \times \left[-\frac{L}{2} - t_{M_2+1}, \frac{L}{2} + t_{M_2+1}\right]^3 : 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq t_{M_2+1} \right\}.$$

und berechne die Gesamtenergie durch

$$E \approx \tilde{E} := \tilde{E} + \sum_{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in R_{M_2}} q_i q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} - \underbrace{\sum_{k=1}^{M_2} c_k e^{f_k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}_{\approx \tilde{F}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)} \right).$$

### 3.3.3 Bewegung eines Teilchens

Im Folgenden betrachten wir die Aufgabe der Neuberechnung der Energie bei Verschiebung eines Teilchens, d.h. eine bestimmte Position  $\mathbf{x}_p$  wird zu  $\mathbf{x}'_p$  verändert und analog dazu werden auch alle periodischen Abbilder  $\mathbf{x}_p + \mathbf{n}L$  durch  $\mathbf{x}'_p + \mathbf{n}L$  ersetzt.

Zunächst können wir den neuen mittels periodisierten Gauß-Funktionen approximierten Anteil  $E'_1$  gemäß

$$E'_1 := \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}'_{\mathbf{n}}|^2$$

berechnen, wobei

$$\hat{q}'_{\mathbf{n}} := \hat{q}_{\mathbf{n}} + q_p \left( e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'_p} - e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_p} \right).$$

Für ein  $k > M_1$  sei im Folgenden  $\mathbf{x}_p \in I_{\mathbf{s}_1,k}$  und  $\mathbf{x}'_p \in I_{\mathbf{s}_2,k}$ . Zunächst können wir für alle  $r = 1, \dots, n_k$  die aus der Berechnung der Energie erhaltenen Werte  $\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1}$  und  $\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2}$  gemäß

$$\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1'} := \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1} - q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_p}$$

bzw.

$$\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2'} := \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2} + q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}'_p}$$

aktualisieren. Außerdem müssen auch die periodischen Abbilder der Teilchen  $\mathbf{x}_p$  und  $\mathbf{x}'_p$  beachtet werden. Dafür müssen wir die folgenden beiden Schritte in den Algorithmus integrieren:

- $\forall \mathbf{t} \in \{\mathbf{s}_1 + A_k \mathbf{i} : \mathbf{i} \in \mathbb{Z}^3\} \cap S^{\text{outer}} =: \mathcal{Y}_1$  setze  $\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}'} := e^{200\omega_{r,k} \cdot \mathbf{t}^{\text{diff}}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1'}$  und
- $\forall \mathbf{t} \in \{\mathbf{s}_2 + A_k \mathbf{i} : \mathbf{i} \in \mathbb{Z}^3\} \cap S^{\text{outer}} =: \mathcal{Y}_2$  setze  $\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}'} := e^{200\omega_{r,k} \cdot \mathbf{t}^{\text{diff}}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2'}$ .

Da die im Voraus definierten Energiebeiträge nicht nur von Teilchen in einer Box, sondern auch von denen in allen Nachbarboxen abhängen, müssen zunächst auch alle Werte  $\sigma_{r,k}^{\mathbf{s}}$ , wobei der Parameter  $\mathbf{s}$  alle innere Nachbarindizes der Mengen  $\mathcal{Y}_1 \cup \mathbf{s}_1$  und  $\mathcal{Y}_2 \cup \mathbf{s}_2$  durchläuft, aktualisiert werden.

Anschließend können dann die entsprechenden Energiebeiträge neu berechnet und mit einer erneuten, sich ausschließlich auf  $\mathbf{x}_p$ ,  $\mathbf{x}'_p$  und deren periodische Abbilder beziehenden, Nahfeldkorrektur ein neuer Wert für  $\tilde{E}$  erhalten werden. Der folgende Algorithmus fasst diese Überlegungen zusammen.

#### Algorithmus 3.4.

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  und die Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ .  $\tilde{E}$  sei die aus Algorithmus 3.3 mit Splitting-Parameter  $M_1$  und Nahfeld-Parameter  $M_2$  erhaltene Energie. Gegeben sei nun ein eventuell von  $M_2$  abweichender neuer Nahfeld-Parameter  $\tilde{M}_2$  mit  $M_0 \leq \tilde{M}_2 \leq M_2$  sowie die neue Teilchenposition  $\mathbf{x}'_p$ .

1. Für  $\tilde{M} := \min\{\tilde{M}_2, M_1\}$  setze zunächst

$$\tilde{E} = \tilde{E} - \sum_{k=1}^{\tilde{M}} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2,$$

wobei die auftretende Doppelsumme als Teilsumme von  $E_1$  aus Algorithmus 3.3 als vorberechnet betrachtet wird, und berechne anschließend

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} := \hat{q}_{\mathbf{n}} + q_p \left( e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'_p} - e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_p} \right) \quad \forall \mathbf{n} \in Y_{\tilde{M}}.$$

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx 15p_{\tilde{M}}$ .

2. Berechne dann den neuen mittels periodisierten Gauß-Funktionen approximierten Anteil

$$E_1 := \sum_{k=1}^{\tilde{M}} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{n} \in Y_{\tilde{M}}} \left( \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{n} \in Y_k}}^{\tilde{M}} \gamma_{\mathbf{n},k} \right) |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2$$

und aktualisiere die Energie durch  $\tilde{E} := \tilde{E} + E_1$ .

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx 3p_{\tilde{M}}$ .

3. Für  $k = \tilde{M} + 1, \dots, \tilde{M}_2$

- Es seien  $\mathbf{x}_p \in I_{\mathbf{s}_1,k}$  und  $\mathbf{x}'_p \in I_{\mathbf{s}_2,k}$ . Wir definieren die Indexmengen

$$\mathcal{Y}_1 := \{\mathbf{s}_1 + A_k \mathbf{i} : \mathbf{i} \in \mathbb{Z}^3\} \cap S^{\text{outer}}$$

sowie

$$\mathcal{Y}_2 := \{\mathbf{s}_2 + A_k \mathbf{i} : \mathbf{i} \in \mathbb{Z}^3\} \cap S^{\text{outer}}.$$

Desweiteren sei im Folgenden

$$\mathcal{Y} := \bigcup_{\mathbf{t} \in \mathcal{Y}_1 \cup \mathcal{Y}_2 \cup \{\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2\}} J_{\mathbf{t},k}.$$

- Für  $r = 1, \dots, n_k$  setze zunächst für alle inneren Boxen  $I_{\mathbf{s},k} \subset \mathcal{Y}$

$$\sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} := \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} - \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}} \quad \forall \mathbf{t} \in \mathcal{Y}_1 \cup \mathcal{Y}_2 \cup \{\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2\} : I_{\mathbf{s},k} \subset J_{\mathbf{t},k}$$

und aktualisiere die Werte

$$\begin{aligned} \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1} &:= \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1} - q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_p} \\ \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2} &:= \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2} + q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}'_p}. \end{aligned}$$

Desweiteren setze

$$\begin{aligned} \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}} &:= e^{200\omega_{r,k} \cdot \mathbf{t}^{\text{diff}}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_1} \quad \forall \mathbf{t} \in \mathcal{Y}_1 \\ \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}} &:= e^{200\omega_{r,k} \cdot \mathbf{t}^{\text{diff}}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}_2} \quad \forall \mathbf{t} \in \mathcal{Y}_2 \end{aligned}$$

sowie für jede innere Box  $I_{\mathbf{s},k} \subset \mathcal{Y}$

$$\sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} := \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} + \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{t}} \quad \forall \mathbf{t} \in \mathcal{Y}_1 \cup \mathcal{Y}_2 \cup \{\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2\} : I_{\mathbf{s},k} \subset J_{\mathbf{t},k}.$$



Anzahl arithmetischer Operationen

$$\leq \sum_{k=\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} (2 \cdot 27 + 2 \cdot 8 + 2 \cdot 7 \cdot 8 + 2 \cdot 27) n_k = 236 \cdot \sum_{k=\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} n_k$$

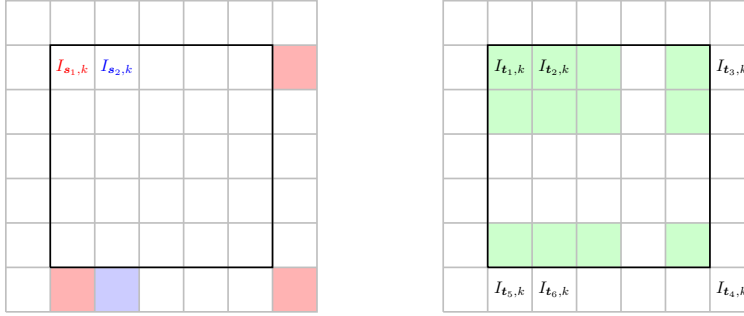


Abbildung 3.9: Zweidimensionale Veranschaulichung aller Boxen der Indexmengen  $\mathcal{Y}_1$  (rot) und  $\mathcal{Y}_2$  (blau) sowie die Menge der Boxen  $I_{s,k}$ , für die die Summen  $\sigma_{r,k}^s$  neu berechnet werden (grün)

4. Für  $k = \tilde{M} + 1, \dots, \tilde{M}_2$ :

- Ziehe die alten Energiebeiträge ab:

$$\tilde{E} := \tilde{E} - \sum_{I_{t,k} \subset \mathcal{Y}} E_{t,k}$$

- Berechne diese neu:

$$E_{t,k} := \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} \overline{q_{r,k}^t} \sigma_{r,k}^t \quad \forall t : I_{t,k} \subset \mathcal{Y}$$

- Addiere die neuen Beiträge:

$$\tilde{E} := \tilde{E} + \sum_{I_{t,k} \subset \mathcal{Y}} E_{t,k}$$

$$\text{Anzahl arithmetischer Operationen} \leq \sum_{k=\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} (2 \cdot 27 + 3 \cdot 2 \cdot 27 n_k + 2 \cdot 27)$$

5. Nahfeldkorrektur: Wir definieren zunächst die Mengen

$$U_1 := \{\mathbf{x}_p + \mathbf{n}L : \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\} \quad \text{und} \quad U_2 := \{\mathbf{x}'_p + \mathbf{n}L : \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}.$$

Desweiteren seien

$$R_1 := \left\{ (\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : \mathbf{x}_j \in U_1 \vee \mathbf{x}_l \in U_1, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l \notin U_2 \text{ und } 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq t_{\tilde{M}_2+1} \right\}$$

und

$$R_2 := \left\{ (\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : \mathbf{x}_j \in U_2 \vee \mathbf{x}_l \in U_2, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l \notin U_1 \text{ und } 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq t_{\tilde{M}_2+1} \right\},$$

wobei jeweils  $(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3 \times [-\frac{L}{2} - t_{\tilde{M}_2+1}, \frac{L}{2} + t_{\tilde{M}_2+1}]^3$ .

Damit lässt sich die neue Gesamtenergie gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{E} = \tilde{E} + & \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_1} q_l q_j \left( \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|) - \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|} \right) \\ & + \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_2} q_l q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|} - \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|) \right). \end{aligned}$$

berechnen.

### 3.3.4 Optimale Wahl der Parameter und Tests

Für den im letzten Abschnitt vorgestellten Algorithmus zur Berechnung der Energie sind im Vorfeld der Splitting-Parameter  $M_1$  und der Nahfeld-Parameter  $M_2$  zu wählen.

Die Berechnung mittels periodisierten Gauß-Funktionen wird mit wachsendem  $M_1$  durch die mit größer werdendem Index  $k$  schnell wachsende Anzahl von Fourier-Koeffizienten immer umfangreicher. Analog wächst der Aufwand auch für die Berechnung der Energiebeiträge mithilfe anharmonischer Fourier-Reihen mit wachsendem Index  $k$  der Gauß-Funktionen. Hierbei ist jedoch nicht die wachsende Anzahl der Koeffizienten ausschlaggebend, sondern die rapide anwachsende Zahl an Boxen, vgl. beispielsweise Tabelle 3.1.

Es stellt sich also zum einen die Frage, inwieweit es günstiger ist, Fourier-Reihen oder anharmonische Fourier-Reihen für die Approximation der einzelnen Gauß-Funktionen zu verwenden. Zum anderen stellt sich die Frage nach einem optimalen Parameter  $M_2$ . Wohingegen die Berechnung der Energiebeiträge mit wachsendem  $k$  immer aufwändiger wird, sinkt die Nahfeldkorrektur im Aufwand. Es ist also zu vermuten, dass es eine bezüglich der Rechenzeit optimale Kombination von  $M_1$  und  $M_2$  gibt, welche insbesondere von der Teilchenzahl  $N$  abhängig ist.

Für alle folgenden Tests wurden sowohl die schnelle Ewald-Methode 3.1 als auch die Algorithmen 3.3 und 3.4 in MATLAB implementiert. Für die Berechnungen der adjungierten NFFT wird die in MATLAB eingebundene Version der Implementierung aus [13] genutzt. Dabei verwenden wir als Fensterfunktion  $\varphi$  die Kaiser-Bessel-Funktion mit Abschneideparameter  $m = 3$ , vgl. dazu [14, Anhang C].

**Beispiel 3.4.** *Obige Überlegungen werden nun an konkreten Beispielen demonstriert. Wir betrachten jeweils ein System mit  $N$  Teilchen, die zufällig in  $[-100, 100]^3$  verteilt werden. Dabei haben  $\frac{N}{2}$  Teilchen die Ladung  $+1$  sowie  $\frac{N}{2}$  Teilchen die Ladung  $-1$ . Desweiteren wählen wir in (3.17) zunächst  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$ , vgl. Beispiel 3.1. Entsprechende Rechenzeiten sind den Tabellen 3.6, 3.7 und 3.8 zu entnehmen.*

*Verwenden wir die ebenfalls in Beispiel 3.1 erwähnte Approximation mit  $M = 20$  und  $l = 8 \cdot 10^{10}$ , so werden für jeweils ein Teilchensystem die in den Tabellen 3.9, 3.10 und 3.11 aufgeführten Rechenzeiten erhalten.*

	$M_1 = 4$	$M_1 = 5$	$M_1 = 6$	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$	$M_1 = 9$
$M_2 = 5$	5.90s	5.21s				
$M_2 = 6$	1.97s	1.36s	0.64s			
$M_2 = 7$	2.87s	2.36s	1.66s	0.89s		
$M_2 = 8$	7.91s	6.60s	5.70s	4.92s	3.17s	

Tabelle 3.6: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 3.3 für ein System mit  $N = 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 4$	$M_1 = 5$	$M_1 = 6$	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$	$M_1 = 9$
$M_2 = 5$	13.99s	12.88s				
$M_2 = 6$	2.99s	2.49s	1.23s			
$M_2 = 7$	3.78s	3.08s	2.05s	1.06s		
$M_2 = 8$	8.09s	7.62s	6.32s	5.36s	3.34s	

Tabelle 3.7: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 3.3 für ein System mit  $N = 1.5 \cdot 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen

*Diese Tests zeigen, dass es tatsächlich eine von der Teilchenanzahl  $N$  abhängige optimale Kombination der Parameter  $M_1$  und  $M_2$  gibt. Den beiden Tabellen kann weiterhin entnommen werden, dass sich die Approximation durch anharmonische Fourier-Reihen im Gegensatz zur Periodisierung bei der aktuellen Implementierung nicht lohnt, denn es wird jeweils eine optimale Parameterwahl mit  $M_1 = M_2$  erhalten, d.h. es entfällt Schritt 2 in Algorithmus 3.3.*

	$M_1 = 4$	$M_1 = 5$	$M_1 = 6$	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$	$M_1 = 9$
$M_2 = 5$	56.03s	53.27s				
$M_2 = 6$	8.08s	8.70s	6.71s			
$M_2 = 7$	7.78s	6.57s	4.34s	2.27s		
$M_2 = 8$	12.32s	10.76s	8.24s	6.54s	3.75s	

Tabelle 3.8: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 3.3 für ein System mit  $N = 3 \cdot 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 10$	$M_1 = 11$	$M_1 = 12$	$M_1 = 13$	$M_1 = 14$
$M_2 = 11$	3.23s	1.81s			
$M_2 = 12$	2.24s	1.42s	0.63s		
$M_2 = 13$	4.09s	3.19s	2.38s	1.41s	
$M_2 = 14$	9.07s	8.00s	7.29s	6.30s	3.80s

Tabelle 3.9: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 3.3 für ein System mit  $N = 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 10$	$M_1 = 11$	$M_1 = 12$	$M_1 = 13$	$M_1 = 14$
$M_2 = 11$	6.08s	4.83s			
$M_2 = 12$	3.38s	2.02s	0.96s		
$M_2 = 13$	5.32s	3.76s	2.75s	1.54s	
$M_2 = 14$	10.27s	9.06s	8.04s	6.84s	4.10s

Tabelle 3.10: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 3.3 für ein System mit  $N = 1.5 \cdot 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 10$	$M_1 = 11$	$M_1 = 12$	$M_1 = 13$	$M_1 = 14$
$M_2 = 11$	23.39s	21.05s			
$M_2 = 12$	7.49s	4.93s	3.03s		
$M_2 = 13$	8.36s	5.85s	3.96s	2.04s	
$M_2 = 14$	14.35s	11.90s	10.00s	7.98s	4.57s

Tabelle 3.11: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 3.3 für ein System mit  $N = 3 \cdot 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen

Im Folgenden soll nun noch die Wahl der Parameter  $M_1$  und  $\tilde{M}_2$  für Algorithmus 3.4 untersucht werden. Es ist zunächst zu bemerken, dass bis auf die Nahfeldkorrektur sämtliche Schritte dieses Algorithmus' unabhängig von der Teilchenanzahl sind. Daher ist auch der optimale Wert für den Parameter  $M_1$  unabhängig von der Teilchenanzahl  $N$ . Die in Algorithmus 3.4 aufgeführten Anzahlen arithmetischer Operationen sind in Tabelle 3.12 aufgeführt. Dabei ist

$$Z_k := 18 \cdot p_k$$

die Anzahl der benötigten Rechenoperationen für die auf periodisierten Gauß-Funktionen basierende Berechnung des Anteils  $E_1$  im Fall  $M_1 = k$ . Demnach kann  $Z_k - Z_{k-1}$  als die Anzahl arithmetischer Operationen für die Berechnungen bezüglich der  $k$ -ten Gauß-Funktion im Falle einer Periodisierung angesehen werden. Desweiteren ist

$$\tilde{Z}_k := (236 + 3 \cdot 2 \cdot 27) \cdot n_k + 2 \cdot 2 \cdot 27 = 398 \cdot n_k + 108$$

eine Abschätzung der Anzahl arithmetischer Operationen im Falle einer Approximation durch die anharmonische Fourier-Reihe.

$k$	$Z_k - Z_{k-1}$	$\tilde{Z}_k$	$k$	$Z_k - Z_{k-1}$	$\tilde{Z}_k$
4	2.59e+03	1.05e+06	9	1.10e+03	5.56e+05
5	1.72e+04	8.57e+05	10	6.37e+03	2.35e+06
6	7.86e+04	1.27e+06	11	3.31e+04	1.68e+06
7	3.92e+05	8.87e+05	12	1.62e+05	1.13e+06
8	1.80e+06	1.14e+06	13	7.35e+05	1.02e+06
9	8.12e+06	1.10e+06	14	2.84e+06	1.08e+06
10	3.16e+07	1.24e+06	15	1.18e+07	1.34e+06

Tabelle 3.12: Abschätzung der benötigten arithmetischen Operationen gemäß Algorithmus 3.4 bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  (links) und mit  $M = 20$  und  $l = 8 \cdot 10^{10}$  (rechts)

Es wird ersichtlich, dass theoretisch im Fall  $k > 7$  bzw.  $k > 13$  die Verwendung anharmonischer Fourier-Reihen günstiger als ist, d.h. es ist  $M_1 = 7$  bzw.  $M_1 = 13$  zu wählen. Inwieweit diese Vorhersage mit den tatsächlichen Rechenzeiten vergleichbar ist, sollen die folgenden Tests zeigen.

**Beispiel 3.5.** *Tabelle 3.13 zeigt durchschnittliche Rechenzeiten für die Bewegung eines Teilchens, wobei in (3.17) wieder  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  bzw.  $M = 20$  und  $l = 8 \cdot 10^{10}$  gewählt seien. Dabei ist jeweils  $\vartheta_k$  die durchschnittliche Rechenzeit für die Neuberechnung von  $E_1$  im Fall  $M_1 = k$  und  $\tilde{\vartheta}_k$  die entsprechende durchschnittliche Rechenzeit zur Neuberechnung der Energiebeiträge für die  $k$ -te Gauß-Funktion im*

anharmonischen Fall. Der Durchschnitt wird über 100 Testläufe gebildet, wobei die Positionen  $\mathbf{x}_p$  und  $\mathbf{x}'_p$  jeweils zufällig in  $[-100, 100]^3$  gewählt wurden. Die Ladung wurde jeweils auf  $q_p = 1$  festgelegt.

$k$	$\vartheta_k - \vartheta_{k-1}$	$\tilde{\vartheta}_k$	$k$	$\vartheta_k - \vartheta_{k-1}$	$\tilde{\vartheta}_k$
4	6.8100e-06s	5.9571e-03s	9	2.7140e-05s	4.0910e-03s
5	1.5514e-04s	6.0605e-03s	10	8.0270e-05s	1.2545e-02s
6	6.8041e-04s	1.8178e-02s	11	3.1778e-04s	1.3355e-02s
7	1.4306e-03s	2.4580e-02s	12	9.4724e-04s	2.3419e-02s
8	8.8493e-03s	3.5477e-02s	13	2.8959e-03s	2.9205e-02s
9	4.5360e-02s	4.0544e-02s	14	1.5717e-02s	3.8213e-02s
10	1.7113e-01s	6.2487e-02s	15	6.5023e-02s	5.3450e-02s

Tabelle 3.13: Durchschnittliche Rechenzeiten für den von der Teilchenanzahl  $N$  unabhängigen Teil von Algorithmus 3.4, wobei  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  (links) bzw.  $M = 20$  und  $l = 8 \cdot 10^{10}$  (rechts) in (3.17)

Experimentell wurde also eine optimale Wahl  $M_1 = 8$  bzw.  $M_1 = 14$  ermittelt, was relativ gut mit den theoretischen Überlegungen übereinstimmt.

Im Folgenden soll nun auf die Wahl des Nahfeld-Parameters  $\tilde{M}_2$  eingegangen werden. Es ist wieder anzunehmen, dass es für eine bestimmte Zahl  $N$  von Teilchen ein bezüglich der Rechenzeit optimales  $\tilde{M}_2$  gibt. Der Splitting-Parameter  $M_1$  kann dabei, wie oben beschrieben, unabhängig von  $N$  apriori optimal festgelegt werden.

**Beispiel 3.6.** Im Folgenden sei ein Teilchensystem von  $N$  Teilchen gegeben. Dabei seien die Ladungen wie im letzten Beispiel festgelegt. Zunächst werde die Energie  $\tilde{E}$  mit Algorithmus 3.3 und gewissen Parametern  $M_2$  und  $M_1$  berechnet. Dabei sei der Splitting-Parameter  $M_1$  optimal hinsichtlich des Updates gewählt.

Für den folgenden Test werden nun 100 der  $N$  Teilchen zufällig gewählt und nacheinander an eine ebenso zufällig gewählte neue Position verschoben, wobei die neue Energie jeweils mit Algorithmus 3.4 berechnet wird.

Im Weiteren ist mit  $t_{\text{ind}}$  die durchschnittliche Rechenzeit für den von  $N$  unabhängigen Teil bezeichnet,  $t_{\text{sum}}$  gibt die durchschnittliche Gesamtlaufzeit an. Einige Testergebnisse sind den Tabellen 3.14 und 3.15 zu entnehmen.

Die optimale Rechenzeit ist jeweils grau hinterlegt. Der Wert für das optimal zu wählende  $\tilde{M}_2$  wird dabei mit steigender Teilchenzahl  $N$  größer. Jedoch steigt der Wert von  $\tilde{M}_2$  mit wachsendem  $N$  nur sehr langsam. Optimale Parameterkombinationen mit  $\tilde{M}_2 > M_1$  wird es daher erst ab enorm großen Teilchenzahlen geben.

$\tilde{M}_2 =$	4	5	6	7	8
$N = 10^4, M_1 = M_2 = 8$					
$t_{\text{ind}}$ in s	1.37e-04	3.43e-04	7.20e-04	2.16e-03	1.07e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	5.99e-03	3.31e-03	2.61e-03	3.90e-03	1.27e-02
$N = 2 \cdot 10^4, M_1 = M_2 = 8$					
$t_{\text{ind}}$ in s	1.60e-04	3.51e-04	7.24e-04	2.14e-03	1.07e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	1.08e-02	4.67e-03	2.85e-03	4.03e-03	1.27e-02
$N = 10^5, M_1 = M_2 = 8$					
$t_{\text{ind}}$ in s	1.71e-04	3.96e-04	7.12e-04	2.21e-03	1.02e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	5.57e-02	1.73e-02	4.06e-03	4.64e-03	1.24e-02
$N = 3 \cdot 10^5, M_1 = M_2 = 8$					
$t_{\text{ind}}$ in s	1.88e-04	3.94e-04	7.61e-04	2.26e-03	1.04e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	1.96e-01	5.02e-02	7.42e-03	5.59e-03	1.29e-02
$N = 5 \cdot 10^5, M_1 = M_2 = 8$					
$t_{\text{ind}}$ in s	1.90e-04	4.06e-04	8.17e-04	2.20e-03	1.05e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	3.49e-01	8.76e-02	1.14e-02	6.56e-03	1.33e-02

Tabelle 3.14: Durchschnittliche Laufzeiten von Algorithmus 3.4, wobei die Approximation (3.17) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  zugrunde liegt

$\tilde{M}_2 =$	10	11	12	13	14
$N = 10^4, M_1 = M_2 = 14$					
$t_{\text{ind}}$ in s	1.93e-04	5.75e-04	1.06e-03	4.11e-03	1.73e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	6.30e-03	2.97e-03	2.94e-03	6.03e-03	1.93e-02
$N = 10^5, M_1 = M_2 = 14$					
$t_{\text{ind}}$ in s	2.20e-04	5.98e-04	1.07e-03	3.70e-03	1.73e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	5.51e-02	7.85e-03	3.94e-03	6.02e-03	1.94e-02
$N = 3 \cdot 10^5, M_1 = M_2 = 14$					
$t_{\text{ind}}$ in s	2.34e-04	6.28e-04	1.13e-03	3.85e-03	1.71e-02
$t_{\text{sum}}$ in s	1.97e-01	2.14e-02	6.12e-03	6.80e-03	1.95e-02

Tabelle 3.15: Durchschnittliche Laufzeiten von Algorithmus 3.4, wobei die Approximation (3.17) mit  $M = 20$  und  $l = 8 \cdot 10^{10}$  zugrunde liegt

Im Weiteren wird Algorithmus 3.4 noch auf seine Genauigkeit überprüft, d.h. die aus diesem Algorithmus resultierende Energie des veränderten Teilchensystems wird mit derjenigen verglichen, die mit Algorithmus 3.3 für das gleiche Teilchensystem erhalten wird.

**Beispiel 3.7.** Analog zum vorangegangenen Beispiel betrachten wir wieder ein System von  $N$  Teilchen. Zufällig werden nun  $n$  dieser Teilchen gewählt und an eine neue Position verschoben. Dabei werde die Energie  $\tilde{E}$  mit Algorithmus 3.4 jeweils zu  $\tilde{E}^{\text{update}}$  aktualisiert.

Desweiteren berechnen wir die Energie des veränderten Teilchensystems mit Algorithmus 3.3. Dabei werden die Parameter  $M_1$  und  $M_2$  weiterhin verwendet. Der daraus erhaltene Wert werde im Folgenden mit  $E^{\text{res}}$  bezeichnet. Schließlich wird daraus der relative Fehler

$$e_{\text{rel}} := \frac{|\tilde{E}^{\text{update}} - \tilde{E}^{\text{res}}|}{|\tilde{E}^{\text{res}}|} \quad (3.39)$$

bestimmt. Einige Ergebnisse sind in Tabelle 3.16 zu finden.

$N = 10^4, M_1 = 7, M_2 = 7$			
$\tilde{M}_2 =$	5	6	7
$n = 100$	3.98e-05	1.22e-05	8.99e-07
$n = 200$	2.09e-04	3.08e-05	1.63e-06
$n = 500$	7.51e-05	3.04e-05	3.22e-06
$N = 2 \cdot 10^4, M_1 = 7, M_2 = 7$			
$\tilde{M}_2 =$	5	6	7
$n = 100$	4.34e-05	1.83e-05	7.25e-07
$n = 200$	4.14e-05	1.39e-05	7.50e-07
$n = 500$	5.10e-05	2.07e-05	1.05e-06

Tabelle 3.16: Mittlere relative Fehler über je 100 Testläufe, wobei die Approximation (3.17) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  zugrunde liegt

## Simulation

Im Folgenden wird die Aufgabe betrachtet, den Betrag der Gesamtenergie eines Teilchensystems durch Verschieben einzelner Teilchen zu minimieren. Die Position eines Teilchens soll sich dabei nur minimal ändern. Es sei also ein  $\eta > 0$  gegeben. Für ein gegebenes  $\mathbf{x} \in [-100, 100]^3$  sei  $W_\eta(\mathbf{x})$  der Würfel der Kantenlänge  $2\eta$  mit Mittelpunkt  $\mathbf{x}$ , wobei wir  $[-100, 100]^3$  als Torus auffassen.

Bei der folgenden Simulation werden alle Teilchen  $\mathbf{x}_j, j = 1 \dots, N$ , nacheinander innerhalb des Würfels  $W_\eta(\mathbf{x}_j)$  verschoben. Ist die mit Algorithmus 3.4 berechnete Energie betragsmäßig kleiner als die Ausgangsenergie, so wird die neue Position des Teilchens übernommen:



**Algorithmus 3.5.**

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j$ , deren Ladungen  $q_j$  sowie der Splitting-Parameter  $M_1$ , der Nahfeld-Parameter  $M_2$ ,  $\eta > 0$  und  $\kappa \in \mathbb{N}$ .

- Berechne  $\tilde{E}$  mit Algorithmus 3.3 und den Parametern  $M_1$  und  $\tilde{M}_2$
- setze  $l := 1$
- solange  $l \leq \kappa$ 
  - Für  $j = 1, \dots, N$ 
    1. Wähle zufällig  $\mathbf{x}'_j \in W_\eta(\mathbf{x}_j)$
    2. Berechne die neue Energie  $\tilde{E}^{\text{update}}$  mit Algorithmus 3.4
    3. Falls  $|\tilde{E}^{\text{update}}| < |\tilde{E}|$ , setze  $\mathbf{x}_j := \mathbf{x}'_j$ ,  $\tilde{E} := \tilde{E}^{\text{update}}$  und überschreibe alle geänderten Variablen
  - setze  $l := l + 1$

**Beispiel 3.8.** Wir betrachten ein System von  $N = 10^4$  Teilchen. Grundlage der Simulation soll zunächst wieder die Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen sein. Auch wenn die Kombination  $M_1 = 6$ ,  $\tilde{M}_2 = 7$  nicht optimal hinsichtlich der Rechenzeit von Algorithmus 3.4 ist, wird sie für dieses Beispiel verwendet. Für Algorithmus 3.5 setzen wir  $\kappa = 1$  und  $\eta = 1.5$ . Während der Simulation wird jeweils nach Änderung von 200 Teilchenpositionen außerdem die Energie des aktuellen Teilchensystems  $\tilde{E}^{\text{res}}$  berechnet und der relative Fehler (3.39) ausgewertet. In Tabelle 3.17 sei mit  $n$  die Anzahl bereits verschobener Teilchen bezeichnet.

$n$	$\tilde{E}$	$e_{\text{rel}}$
200	-1.2567e+02	9.5437e-07
400	-1.0105e+02	7.1006e-07
600	-6.9953e+01	1.0919e-06
800	-4.3015e+01	4.0483e-06
1000	-2.1316e+01	1.4298e-06
1141	-1.0538e-05	9.5457e-01

Tabelle 3.17: Verlauf der Energie und des relativen Fehlers

**Beispiel 3.9.** Wir betrachten wieder ein System von  $N = 10^4$  Teilchen, dieses hat dabei zu Beginn eine Energie von  $\tilde{E} \approx -1.7820 \cdot 10^3$ . Die Simulation wird nun mit den Parametern  $M_1 = M_2 = 6$ ,  $\kappa = 15$  sowie  $\delta = 1$  durchgeführt. Die relativen Fehler werden dabei jeweils nach Änderung von 8000 Teilchenpositionen ausgewertet und sind in Tabelle 3.18 aufgeführt.

$n$	$\tilde{E}$	$e_{\text{rel}}$
8000	-1.7045e+03	6.5957e-08
16000	-1.5988e+03	6.4210e-08
24000	-1.4644e+03	9.5115e-08
32000	-1.2959e+03	1.8149e-07
40000	-1.0778e+03	1.4966e-08
48000	-8.0185e+02	1.0716e-07
56000	-4.4787e+02	4.7396e-07
63698	-3.2268e-04	1.0157e+00

Tabelle 3.18: Verlauf der Energie und des relativen Fehlers

**Bemerkung 3.3.** Die Minimierung der Energie bekommt eine andere Bedeutung, wenn die sphärische Summationsreihenfolge (3.2) als Grundlage für die Berechnung der Energie dient. Dann muss der Korrekturterm  $E^{\text{correct}}$  aus Gleichung (3.6) einbezogen werden. Die Schritte in Algorithmus 3.5 müssten dann wie folgt angepasst werden.

- Berechne  $\tilde{E}$  mit Algorithmus 3.3 sowie  $\mathbf{y} := \sum_{j=1}^N q_j \mathbf{x}_j$ .
- Setze  $\tilde{E}^{\text{sph}} := \tilde{E} + \frac{4\pi}{3L^3} \|\mathbf{y}\|^2$ .
- Für jede neue Position  $\mathbf{x}'_j$  setze  $\mathbf{y}' := \mathbf{y} + q_p(\mathbf{x}'_j - \mathbf{x}_j)$  und berechne die neue Energie  $\tilde{E}^{\text{update}}$  mit Algorithmus 3.4.
- Akzeptiere die neue Position, falls  $\left| \tilde{E}^{\text{update}} + \frac{4\pi}{2L^3} \|\mathbf{y}'\|^2 \right| < \left| \tilde{E}^{\text{sph}} \right|$ .

### 3.3.5 Vergleich mit Ergebnissen der Ewald-Methode

In diesem Kapitel soll nun noch geklärt werden, inwieweit die mit Algorithmus 3.3 erhaltenen Werte für die Energie  $E$  mit denen der Ewald-Methode übereinstimmen. Hierfür benötigen wir Parameter  $\alpha$ ,  $c$  und  $K$ , für die die Fehler (3.10), (3.12) und (3.13) klein sind. Außerdem sollte der durch Verwendung der adjungierten NFFT entstehende Fehler gering ausfallen.

**Beispiel 3.10.** Wählen wir  $\alpha = 0.06$ ,  $c = \frac{200}{3} = 66.66$  und  $K = 16$  für die Berechnung der Energie mit der schnellen Ewald-Methode, so erhalten wir für die Fehlerabschätzungen (3.10), (3.12) und (3.13)

$$\begin{aligned} \epsilon^{\text{S}} &\approx 2.0304 \cdot 10^{-7} \\ \epsilon^{\text{Diag}} &\approx 2.1869 \cdot 10^{-6} \\ \epsilon^{\text{L}} &\approx 3.2216 \cdot 10^{-8} \end{aligned}$$

für die Teilchenanzahl  $N = 10^4$  und  $Q = \sum_{j=1}^N q_j^2 = N$ . Neben diesen Fehlern, kommt nur noch der Fehler, der durch die Approximation mithilfe der adjungierten NFFT entsteht, hinzu.

Verwenden wir bei der NFFT als Fensterfunktion die Kaiser-Bessel-Funktion mit Abschneideparameter  $m = 3$ , so erhalten wir den folgenden mittleren absoluten Fehler bei der Berechnung des langreichweitigen Anteils  $E^L$

$$|E^L - E_{\text{exakt}}^L| \approx 5.0930 \cdot 10^{-4}.$$

Dabei bezeichnet  $E_{\text{exakt}}^L$  den Wert des langreichweitigen Anteils der Energie, der durch exakte Berechnung der Summen  $S(\mathbf{k})$  in Algorithmus 3.1 erhalten wird. Der Durchschnitt wurde dabei über 100 Tests mit Partikelsystemen der Größe  $N = 10^4$  gebildet.

**Beispiel 3.11.** Wir betrachten ein System von  $N = 10^4$  Teilchen. Diese sind zufällig in  $[-100, 100]^3$  verteilt. Dabei haben wieder  $\frac{N}{2}$  Teilchen die Ladung  $+1$  und die übrigen Teilchen die Ladung  $-1$ . Für die Berechnung der Energie mit Algorithmus 3.3 verwenden wir stets eine Parameterwahl mit  $M_1 = M_2$ .

Für die Ewald-Methode 3.1 wählen wir wie in Beispiel 3.10 den Ewald-Parameter  $\alpha = 0.06$  sowie die Abschneideparameter  $c = 66.66$  und  $K = 16$ . Es sei mit  $\tilde{E}$  die aus Algorithmus 3.3 erhaltene Energie bezeichnet. Im Weiteren betrachten wir die Fehler

$$e_{\text{abs}} := |E^{\text{Ewald}} - \tilde{E}| \quad \text{und} \quad e_{\text{rel}} := \frac{|E^{\text{Ewald}} - \tilde{E}|}{|E^{\text{Ewald}}|}.$$

Einige mittlere absolute sowie relative Fehler über 100 Tests sind in Tabelle 3.19 zu finden. Dabei wurden für die Approximation (3.17) verschiedene Werte für  $M$  und  $l$  sowie für  $M_1$  und  $M_2$  verwendet.

Als Resultat ist festzuhalten, dass die Ergebnisse beider Methoden gut übereinstimmen. Bei den Approximationen mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  bzw.  $l = 8 \cdot 10^{10}$  und  $M = 20$ , die beide in etwa den gleichen Approximationsfehler  $\varepsilon$  aufweisen, sind dabei vergleichbare mittlere Fehler erhalten worden. Genauere Ergebnisse werden hingegen durch die Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$ ,  $M = 20$  und dem kleineren Approximationsfehler  $\varepsilon \approx 6.28 \cdot 10^{-8}$  erhalten.

**Beispiel 3.12.** Wir betrachten das gleiche Partikelsystem wie in Beispiel 3.9. Für die Berechnung der Energieänderung mit Algorithmus 3.3 wählen wir hier die Parameter  $M_1 = M_2 = 6$  bei Verwendung der Approximation (3.17) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen. Die relativen Fehler werden wieder jeweils nach Änderung von 8000 Teilchenpositionen, nun aber bezüglich der schnellen Ewald-Methode 3.1, ausgewertet. Für die Ewald-Summation werden hierbei die gleichen Parameter wie im vorangegangenen Beispiel gewählt. Die entsprechenden relativen Fehler sind in Tabelle 3.20 aufgeführt.

$M = 14, l = 2 \cdot 10^5, \varepsilon \approx 4.93 \cdot 10^{-6}$			
$M_1$	5	6	7
$e_{\text{abs}}$	3.4756e-01	4.2618e-01	5.2869e-01
$e_{\text{rel}}$	3.3626e-03	3.7462e-03	4.5075e-03
$M = 20, l = 2 \cdot 10^5, \varepsilon \approx 6.28 \cdot 10^{-8}$			
$M_1$	9	10	11
$e_{\text{abs}}$	7.3373e-02	8.3894e-02	7.6388e-02
$e_{\text{rel}}$	8.2064e-04	9.2617e-04	8.4941e-04
$M = 20, l = 8 \cdot 10^{10}, \varepsilon \approx 3.08 \cdot 10^{-6}$			
$M_1$	11	12	13
$e_{\text{abs}}$	4.3689e-01	4.3831e-01	6.0724e-01
$e_{\text{rel}}$	4.7019e-03	4.6961e-03	6.3430e-03

Tabelle 3.19: Mittlere absolute und relative Fehler bezüglich  $E^{\text{Ewald}}$  für verschiedene Approximationen und Werte für den Parameter  $M_1 = M_2$

$n$	$\tilde{E}$	$e_{\text{rel}}$
8000	-1.7029e+03	4.5891e-05
16000	-1.5967e+03	4.9479e-05
24000	-1.4633e+03	5.4248e-05
32000	-1.2937e+03	5.4632e-05
40000	-1.0838e+03	6.0883e-05
48000	-8.0885e+02	7.3239e-05
56000	-4.5252e+02	1.0856e-04
63723	1.5156e-06	9.9996e-01

Tabelle 3.20: Verlauf der Energie und des relativen Fehlers bezüglich der Ewald-Methode

### 3.3.6 Zusammenfassung der Resultate

Die in diesem Abschnitt vorgestellte Methode zur Berechnung der Energie eines Partikelsystems mit dreidimensionalen periodischen Randbedingungen basiert auf einer Approximation

$$\frac{1}{x} \approx \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k x^2}$$

der Funktion  $\frac{1}{x}$  durch eine Summe von Gauß-Funktionen in einem Intervall  $[1, \sqrt{l}]$ . Algorithmus 3.3 fasst die wesentlichen Schritte für die Berechnung der Energie zusammen. Algorithmus 3.4 veranschaulicht wie die Energie bei Veränderung einer Teil-

chenposition neu berechnet werden kann.

Die Gauß-Funktionen werden dabei für die Berechnungen periodisiert und in eine Fourier-Reihe entwickelt. Alternativ kann für die schmalen Gauß-Kurven auch eine Entwicklung in eine anharmonische Fourier-Reihe verwendet werden. Für die Berechnung der einzelnen Energiebeiträge werden dabei die Teilchen in Boxen eingeteilt.

Die vorangegangenen Tests zeigen, dass es sowohl für die Berechnung der Energie als auch für die Neuberechnung der Energie bei Änderung einer Teilchenposition hinsichtlich der verwendeten Implementierung günstiger ist, die Fourier-Reihen der periodisierten Gauß-Funktionen für die Approximation zu verwenden.

Für die Berechnung der Energie des Partikelsystems kann also alternativ der folgende Algorithmus herangezogen werden.

### Algorithmus 3.6.

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  und die zugehörigen Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}^3, j = 1, \dots, N$ , sowie der Splitting-Parameter  $M_1 \geq M_0$ , wobei die Approximation (3.17) mit gewissen Größen  $l$  und  $M$  zugrunde liegt. Sowohl die benötigten Koeffizienten für die Fourier-Reihen ( $\psi_{\mathbf{n}}$  und  $\gamma_{\mathbf{n},k}$ ) als auch die Interpolationsdaten seien vorberechnet.

1. Fernfeld: Berechne

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} = \sum_{j=1}^N q_j e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{für } \mathbf{n} \in Y_{M_1}.$$

in  $\mathcal{O}(p_{M_1} \log p_{M_1} + N)$  arithmetischen Operationen mit der adjungierten NFFT (vgl. Algorithmus 2.2). und berechne

$$E_1 := \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{n} \in Y_{M_1}} \left( \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{n} \in Y_k}}^{M_1} \gamma_{\mathbf{n},k} \right) |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2.$$

mit  $\approx 3p_{M_1}$  zusätzlichen arithmetischen Operationen.

2. Nahfeld: Bestimme die Menge

$$R_{M_1} := \left\{ (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in \left[-\frac{l}{2}, \frac{l}{2}\right]^3 \times \left[-\frac{l}{2} - t_{M_1+1}, \frac{l}{2} + t_{M_1+1}\right]^3 : 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq t_{M_1+1} \right\}.$$

und berechne die Gesamtenergie durch

$$E \approx \tilde{E} := E_1 + \sum_{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in R_{M_1}} q_i q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} - \underbrace{\sum_{k=1}^{M_1} c_k e^{f_k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}_{\approx \tilde{F}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)} \right).$$

Für die Neuberechnung der Energie wird dann Algorithmus 3.7 verwendet.

**Algorithmus 3.7.**

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  und die zugehörigen Ladungen  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ .  $\tilde{E}$  sei die aus Algorithmus 3.6 mit dem Splitting-Parameter  $M_1$  erhaltene Energie. Gegeben sei nun der Splitting-Parameter  $\tilde{M}_1 \leq M_1$  sowie die neue Teilchenposition  $\mathbf{x}'_p$ .

1. Für  $\tilde{M} := \min\{\tilde{M}_1, M_1\}$  setze zunächst

$$\tilde{E} := \tilde{E} - \sum_{k=1}^{\tilde{M}} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2$$

und berechne anschließend

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} := \hat{q}_{\mathbf{n}} + q_p \left( e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'_p} - e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_p} \right) \quad \forall \mathbf{n} \in Y_{\tilde{M}}.$$

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx 15p_{\tilde{M}}$ .

2. Berechne dann den neuen mittels periodisierten Gauß-Funktionen approximierten Anteil

$$E_1 := \sum_{k=1}^{\tilde{M}} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{n} \in Y_{\tilde{M}}} \left( \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{n} \in Y_k}}^{\tilde{M}} \gamma_{\mathbf{n},k} \right) |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2$$

und aktualisiere die Energie durch  $\tilde{E} := \tilde{E} + E_1$ .

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx 3p_{\tilde{M}}$ .

3. Nahfeldkorrektur: Wir definieren zunächst die Mengen

$$U_1 := \{\mathbf{x}_p + \mathbf{n}L : \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\} \quad \text{und} \quad U_2 := \{\mathbf{x}'_p + \mathbf{n}L : \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}.$$

Desweiteren seien

$$R_1 := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : \mathbf{x}_j \in U_1 \vee \mathbf{x}_l \in U_1, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l \notin U_2 \text{ und } 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq t_{\tilde{M}+1}\}$$

und

$$R_2 := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : \mathbf{x}_j \in U_2 \vee \mathbf{x}_l \in U_2, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l \notin U_1 \text{ und } 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq t_{\tilde{M}+1}\},$$

wobei jeweils  $(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3 \times [-\frac{L}{2} - t_{\tilde{M}+1}, \frac{L}{2} + t_{\tilde{M}+1}]^3$ .

Damit lässt sich die neue Gesamtenergie gemäß

$$\begin{aligned}\tilde{E} = \tilde{E} + & \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_1} q_l q_j \left( \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|) - \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|} \right) \\ & + \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_2} q_l q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|} - \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|) \right)\end{aligned}$$

berechnen.

### 3.4 Vergleich der beiden Methoden

In den Abschnitten 3.2 und 3.3 wurde jeweils eine Methode zur Berechnung der Energie eines Partikelsystems mit dreidimensionalen periodischen Randbedingungen vorgestellt. Wie die vorangegangenen Tests zeigen, stimmen dabei die erhaltenen Ergebnisse gut überein. Es stellt sich nun die Frage, auf welcher Basis diese beiden verschiedenen Methoden sinnvoll verglichen werden können. Im Folgenden wird dafür auf die Fehlerabschätzungen (3.10), (3.12) und (3.13) zurückgegriffen.

Für die folgenden Überlegungen soll wieder eine Energie  $E^{\text{Ewald}}$ , die aus Algorithmus 3.1 erhalten wird und für die die abgeschätzten Fehler sehr klein ausfallen, als Referenzwert dienen.

Für die mit Algorithmus 3.6 und dem Splitting-Parameter  $M_1$  berechnete Energie  $\tilde{E}$  sei desweiteren ein experimenteller mittlerer absoluter Fehler  $e_{\text{abs}}$  bezüglich  $E^{\text{Ewald}}$  bekannt. Für einen Vergleich der beiden Methoden betrachten wir nun die folgende Aufgabe:

Finde Parameter  $c$ ,  $\alpha$  und  $K$ , sodass

$$\epsilon := \epsilon^{\text{S}} + \epsilon^{\text{Diag}} + \epsilon^{\text{L}} \leq e_{\text{abs}}. \quad (3.40)$$

Den Parameter  $c$  für die schnelle Ewald-Methode wählen wir jeweils

$$c := t_{M_1+1},$$

sodass die Berechnungen im Nahfeld bei beiden Algorithmen eine vergleichbare Anzahl arithmetischer Operationen in Anspruch nehmen. Die Parameter  $\alpha$  und  $K$  wählen wir dann so, dass (3.40) gilt und  $K$  zugleich einen möglichst kleinen Wert annimmt.

Diese mögliche Vergleichsstrategie wird im Folgenden am Beispiel von Systemen mit  $N = 10^4$  Teilchen durchgeführt. Dabei wird auf die im letzten Abschnitt aufgeführten mittleren absoluten Fehler zurückgegriffen.

**Beispiel 3.13.** Für die in Tabelle 3.19 aufgeführten absoluten Fehler für ein System von  $N = 10^4$  Partikeln mit Ladungen  $\pm 1$  erhält man die in Tabelle 3.21 aufgeführten Parameter für die Ewald-Methode.

Dabei ist  $p_{M_1}$  die Anzahl der benötigten Fourier-Koeffizienten in Algorithmus 3.6 und

$$r_K := |\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 : 0 < \|\mathbf{k}\| \leq K|$$

die entsprechende Länge der zu berechnenden adjungierten NFFT bei der schnellen Ewald-Methode.

Algorithmus 3.6			Schnelle Ewald-Methode				
$M_1$	$p_{M_1}$	$e_{\text{abs}}$	$c$	$\alpha$	$K$	$r_K$	$\epsilon$
$M = 14, l = 2 \cdot 10^5$							
5	1.126e+03	3.48e-01	66.67	0.030	5	5.150e+02	2.13e-01
6	5.493e+03	4.26e-01	33.33	0.055	9	3.071e+03	3.99e-01
7	2.729e+04	5.29e-01	22.22	0.075	13	9.171e+03	4.80e-01
$M = 20, l = 2 \cdot 10^5$							
9	2.147e+04	7.34e-02	40.00	0.055	10	4.169e+03	7.24e-02
10	6.396e+04	8.39e-02	28.57	0.075	14	1.151e+04	7.21e-02
11	1.985e+05	7.64e-02	18.18	0.115	22	4.447e+04	7.29e-02
$M = 20, l = 8 \cdot 10^{10}$							
11	2.271e+03	4.37e-01	50.00	0.035	7	1.419e+03	3.86e-01
12	1.130e+04	4.38e-01	28.57	0.060	11	5.575e+03	3.74e-01
13	5.216e+04	6.07e-01	18.18	0.090	16	1.708e+04	4.72e-01

Tabelle 3.21: Erhaltene Parameter für verschiedene Werte für  $l$ ,  $M$  und  $M_1$

In Tabelle 3.22 sind für diese Kombinationen von  $c$ ,  $\alpha$  und  $K$  die mittleren relativen und absoluten Fehler bezüglich  $E^{\text{Ewald}}$  (wieder mit den Parametern  $\alpha = 0.06$ ,  $c = 66.66$  und  $K = 16$  erhalten) über 100 Testläufe angegeben.

Die erhaltenen mittleren absoluten Fehler stimmen jeweils gut mit dem prognostizierten Fehler  $\epsilon$  überein. Demnach sind die erhaltenen Parameterkombinationen tatsächlich eine gute Grundlage für den Vergleich beider Methoden.

Tabelle 3.21 zeigt zudem, dass die schnelle Ewald-Methode dabei hinsichtlich der Anzahl arithmetischer Operationen besser abschneidet, da stets  $r_K < p_{M_1}$  erhalten wird.



$c$	$\alpha$	$K$	$\epsilon$	$e_{\text{abs}}$	$e_{\text{rel}}$
66.67	0.030	5	2.13e-01	1.26e-01	2.12e-03
33.33	0.055	9	3.99e-01	2.27e-01	4.61e-03
22.22	0.075	13	4.80e-01	3.36e-01	6.99e-03
40.00	0.055	10	7.24e-02	4.25e-02	1.03e-03
28.57	0.075	14	7.21e-02	5.33e-02	1.40e-03
18.18	0.115	22	7.29e-02	4.41e-02	6.87e-04
50.00	0.035	7	3.86e-01	3.56e-01	5.04e-03
28.57	0.060	11	3.74e-01	3.10e-01	6.37e-03
18.18	0.090	16	4.72e-01	3.26e-01	4.35e-03

Tabelle 3.22: Mittlere absolute und relative Fehler bezüglich  $E^{\text{Ewald}}$  für verschiedene Parameter  $c$ ,  $\alpha$  und  $K$



## 4 Partikelsysteme mit offenen Randbedingungen

In diesem Kapitel betrachten wir Partikelsysteme ohne periodische Randbedingungen, d.h. wir wollen die endliche Summe

$$E := \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \quad (4.1)$$

für gegebene Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^3$  und den Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ , berechnen. Die Positionen seien dabei wie im letzten Abschnitt gemäß  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  gewählt. Der exakte Wert dieser Summe lässt sich offenbar in  $\mathcal{O}(N^2)$  arithmetischen Operationen berechnen.

Ausgangspunkt für diesen Abschnitt ist die Arbeit [19], in der das Problem zur Berechnung der Energie (4.1) mittels Gauß-Funktionen und anharmonischen Fourier-Reihen betrachtet wird. Ähnlich zum periodischen Fall sollen auch hier alternativ Approximationen mit Fourier-Reihen genutzt werden. Es ist dabei zu prüfen inwiefern durch diese zusätzliche Komponente Verbesserungen der Ergebnisse aus [19] erzielt werden können.

### 4.1 Eindimensionales Modell

Grundlage ist wieder eine Approximation

$$\left| \frac{1}{x} - \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k x^2} \right| \leq \varepsilon \quad \forall x \in [1, \sqrt{l}] \quad (4.2)$$

der Funktion  $\frac{1}{x}$  mittels Gauß-Funktionen und dem Approximationsfehler  $\varepsilon$ . Für den später behandelten dreidimensionalen Fall, sei an dieser Stelle bemerkt, dass für zwei Punkte  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y} \in [-100, 100]^3$  stets

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \leq 3 \cdot 200^2 = 12 \cdot 10^4$$

gilt. Deshalb ist eine Wahl von  $l \geq 12 \cdot 10^4$  sinnvoll. Für die Approximation der Energie wurden in [19] anharmonische Fourier-Reihen verwendet. Für jede Gauß-Funktion ist dabei das Intervall  $[-t_k^*, t_k^*]$  durch

$$[-t_k^*, t_k^*] = \left\{ x \in [-200, 200] : c_k e^{f_k x^2} \geq \varepsilon \right\} \iff t_k^* = \min \left\{ 200, \sqrt{\ln \frac{\varepsilon}{c_k} \cdot \frac{1}{f_k}} \right\}$$

definiert. Im Intervall  $[-b_k^*, b_k^*]$  mit  $b_k^* := \min\{200, 2t_k^*\}$  wird dann eine Approximation

$$e^{f_k x^2} \approx \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \tilde{\rho}_{r,k}^* e^{\omega_{r,k}^* x}$$

mit Koeffizienten  $\rho_{r,k}^* \in \mathbb{C}$  und  $i\omega_{r,k}^* \in \mathbb{R}$  zur Berechnung der Energiebeiträge verwendet. Im Folgenden seien die Gauß-Funktionen wieder so sortiert, dass jeweils  $t_k^* \geq t_{k+1}^*$  gilt. Dabei sei

$$M_0^* := \max\{k : b_k^* = 200\}. \quad (4.3)$$

Bei der Berechnung der Energiebeiträge ist für  $k = 1, \dots, M_0^*$  keine Einteilung in Boxen nötig. Daher definieren wir

$$A_k^* := \begin{cases} 1 & \text{für } k = 1, \dots, M_0^* \\ \left\lceil \frac{200}{t_k^*} \right\rceil & \text{sonst} \end{cases}$$

als die entsprechende Anzahl an Teilintervallen von  $[-100, 100]$ . Diese seien mit

$$I_{s,k} \text{ für } s = 1, \dots, A_k^*$$

bezeichnet. Da die Approximation durch die anharmonische Fourier-Reihe jeweils im Intervall  $[-b_k^*, b_k^*]$  gut ist, können mit dieser alle Abstände von Teilchen gleicher oder direkt benachbarter Intervalle näherungsweise berechnet werden. Damit erhält man analog zu Formel (3.29)

$$E_{s,k} := c_k \sum_{x_j \in I_{s,k}} q_j \sum_{i=1}^N q_i e^{f_k (x_i - x_j)^2} \approx \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \rho_{r,k}^* \sigma_{r,k}^s \cdot \overline{\hat{q}_{r,k}^s}. \quad (4.4)$$

Dabei sind wieder die Koeffizienten  $\rho_{r,k}^* := c_k \tilde{\rho}_{r,k}^*$  sowie die Größen

$$\hat{q}_{r,k}^s := \sum_{x_i \in I_{s,k}} q_i e^{\omega_{r,k}^* x_i} \quad \text{und} \quad \sigma_{r,k} := \hat{q}_{r,k}^{s-1} + \hat{q}_{r,k}^s + \hat{q}_{r,k}^{s+1}$$

definiert, wobei  $\hat{q}_{r,k}^0 = \hat{q}_{r,k}^{A_k^*+1} := 0$  gesetzt wird.

Neben dem Ansatz mit anharmonischen Fourier-Reihen betrachten wir in dieser Arbeit eine weitere Möglichkeit, bei der für die schmalen Gauß-Funktionen keine Einteilung in Boxen nötig ist. Dafür wird im Fall  $k > M_0^*$  eine Periodisierung der Gauß-Funktionen verwendet. Die Periode  $L^*$  muss dabei deutlich größer als die Intervalllänge 200 gewählt werden, da keine periodischen Randbedingungen vorliegen. Daher wählen wir

$$L^* := 200 + t_{M_0^*+1}^* < 300,$$

sodass für  $k \geq M_0^* + 1$  und  $x \in [-200, 200]$

$$c_k e^{f_k x^2} \approx c_k \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k (x+nL^*)^2} \approx c_k \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{d}_{n,k}^* e^{2\pi i n x / L^*}$$

gilt, vgl. Abbildung 4.1.

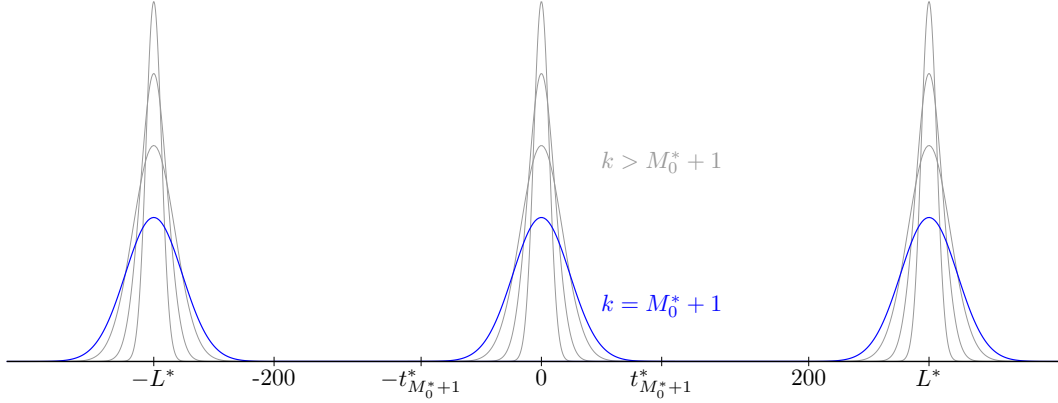


Abbildung 4.1: Translate der Funktionen  $c_k e^{f_k x^2}$  für  $k = M_0^* + 1$  (blau dargestellt) und für  $k > M_0^* + 1$  (in grau)

Die Fourier-Koeffizienten  $\tilde{d}_{n,k}^*$  sind dabei gegeben durch

$$\tilde{d}_{n,k}^* = \frac{1}{L^*} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot e^{\pi^2 n^2 / (L^{*2} f_k)}.$$

Für die Berechnung der Energie wählen wir wieder  $\tilde{P}_k^* \in \mathbb{N}$  so, dass

$$\left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k (x+nL^*)^2} - \sum_{n=-\tilde{P}_k^*}^{\tilde{P}_k^*} \tilde{d}_{n,k}^* e^{2\pi i n x / L^*} \right| \leq \frac{\varepsilon}{|c_k|} \quad \forall x \in [-200, 200].$$

Bei der Bestimmung von  $\tilde{P}_k^*$  wird dabei wieder eine Ungleichung der Form (3.23) verwendet.

**Beispiel 4.1.** Für die Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen mit dem Approximationsfehler  $\varepsilon \approx 4.93 \cdot 10^{-6}$  erhält man beispielsweise  $M_0^* = 4$  sowie  $L^* \approx 285.8$ . Tabelle 4.1 gibt zudem eine Übersicht über die erhaltenen Werte der oben definierten Größen. Für die Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen mit Approximationsfehler  $\varepsilon \approx 6.28 \cdot 10^{-8}$  sind die entsprechenden Größen in Tabelle 4.2 aufgeführt. Dabei werden außerdem  $M_0^* = 6$  und  $L^* \approx 298.5$  erhalten.

$k$	$f_k$	$c_k$	$t_k^*$	$b_k^*$	$\tilde{N}_k^*$	$2\tilde{P}_k^* + 1$
1	-2.4827e-06	3.6286e-03	200.00	200.00	2	
2	-2.6677e-05	4.7035e-03	200.00	200.00	4	
3	-1.0878e-04	7.5140e-03	200.00	200.00	6	
4	-3.6678e-04	1.2600e-02	146.26	200.00	9	
5	-1.1340e-03	2.0792e-02	85.80	171.59	13	17
6	-3.2876e-03	3.3519e-02	51.81	103.62	14	29
7	-9.0326e-03	5.2893e-02	32.05	64.11	15	49
8	-2.3693e-02	8.1910e-02	20.25	40.51	15	81
9	-5.9677e-02	1.2475e-01	13.03	26.07	16	131
10	-1.4501e-01	1.8720e-01	8.53	17.05	16	207
11	-3.4132e-01	2.7731e-01	5.66	11.32	17	323
12	-7.8129e-01	4.0689e-01	3.81	7.61	17	499
13	-1.7513e+00	5.9848e-01	2.59	5.17	18	761
14	-3.9424e+00	9.4073e-01	1.76	3.51	19	1165

Tabelle 4.1: Übersicht für die Approximation (4.2) mit  $M = 14$  Gauß-Funktionen im Intervall  $[1, \sqrt{2} \cdot 10^5]$

$k$	$f_k$	$c_k$	$t_k^*$	$b_k^*$	$\tilde{N}_k^*$	$2\tilde{P}_k^* + 1$
1	-1.5858e-06	2.8637e-03	200.00	200.00	3	
2	-1.5216e-05	3.1548e-03	200.00	200.00	4	
3	-4.8736e-05	3.8885e-03	200.00	200.00	6	
4	-1.2068e-04	5.2704e-03	200.00	200.00	8	
5	-2.7419e-04	7.4525e-03	200.00	200.00	10	
6	-5.9938e-04	1.0612e-02	141.71	200.00	14	
7	-1.2774e-03	1.5037e-02	98.47	196.93	19	23
8	-2.6658e-03	2.1147e-02	69.09	138.19	20	33
9	-5.4591e-03	2.9508e-02	48.91	97.82	20	47
10	-1.0987e-02	4.0871e-02	34.90	69.81	21	69
11	-2.1757e-02	5.6216e-02	25.10	50.19	21	97
12	-4.2439e-02	7.6817e-02	18.17	36.35	22	137
13	-8.1619e-02	1.0432e-01	13.25	26.49	22	193
14	-1.5490e-01	1.4086e-01	9.72	19.43	23	267
15	-2.9034e-01	1.8919e-01	7.17	14.34	23	371
16	-5.3794e-01	2.5292e-01	5.32	10.63	24	509
17	-9.8634e-01	3.3712e-01	3.96	7.93	24	697
18	-1.7940e+00	4.5018e-01	2.97	5.93	25	949
19	-3.2586e+00	6.1227e-01	2.22	4.44	25	1291
20	-6.0588e+00	9.1092e-01	1.65	3.30	26	1785

Tabelle 4.2: Übersicht für die Approximation (4.2) mit  $M = 20$  Gauß-Funktionen im Intervall  $[1, \sqrt{2} \cdot 10^5]$

## Berechnung der Energie

Wir berechnen zunächst den mittels anharmonischen Fourier-Reihen approximierten Teil der Energie

$$E_1 := \sum_{k=1}^{M_0^*} \sum_{s=1}^{A_k^*} E_{s,k} = \sum_{k=1}^{M_0^*} E_{1,k}$$

und verwenden für die übrigen Berechnungen die  $L^*$ -periodisierten Gauß-Funktionen sowie die anharmonischen Fourier-Reihen unter Einteilung der Teilchen in Boxen. Hierfür sei der Splitting-Parameter  $M_1 \geq M_0^*$  gegeben. Der mittels periodisierten Gauß-Funktionen approximierte Anteil  $E_2$  ergibt sich dann analog zu (3.25) gemäß

$$E_2 := \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} c_k e^{f_k(x_i-x_j)^2} \approx \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} \sum_{n=-\tilde{P}_k^*}^{\tilde{P}_k^*} d_{n,k}^* |\hat{q}_n|^2,$$

wobei wieder  $d_{n,k}^* := c_k \tilde{d}_{n,k}^*$  und  $\hat{q}_n := \sum_{j=1}^N q_j e^{2\pi i n x_j / L^*}$ . Für einen gegebenen Nahfeld-Parameter  $M_2 \geq M_1$  wird dann der letzte Energieanteil gemäß

$$E_3 := \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s=1}^{A_k^*} E_{s,k}$$

berechnet, wobei für  $E_{s,k}$  die Näherung (4.4) eingesetzt wird. Sind alle Teilchenabstände größer oder gleich  $t_{M_2+1}^*$ , so gilt für die Energie  $E$  des Systems

$$E \approx E_1 + E_2 + E_3 - \sum_{i=1}^N q_i^2 \sum_{k=1}^{M_2} c_k.$$

In Abbildung 4.2 ist eine mögliche Aufspaltung der Funktion  $\frac{1}{x}$  dargestellt. Dabei sind die Summen der Gauß-Funktionen, die für die Berechnung der Energien  $E_1$  und  $E_2$  benutzt werden, getrennt dargestellt. Die Summe der restlichen Gauß-Funktionen, die bei der Berechnung von  $E_3$  verwendet werden können, ist ebenfalls abgebildet.

## 4.2 Berechnung der Energie im dreidimensionalen Fall

Für die dreidimensionalen Berechnungen definieren wir analog zum periodischen Fall die Indexmengen

$$\tilde{Y}_k := \left\{ \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3 : n_1, n_2, n_3 = -\tilde{P}_k^*, \dots, \tilde{P}_k^* \right\}$$

sowie die dreidimensionalen Faktoren  $\psi_{\mathbf{n}}$  und die Koeffizienten  $\tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k}$  gemäß

$$\psi_{\mathbf{n}} := \left( \frac{2\pi i n_1}{L^*}, \frac{2\pi i n_2}{L^*}, \frac{2\pi i n_3}{L^*} \right) \quad \text{bzw.} \quad \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} := \tilde{d}_{n_1,k}^* \cdot \tilde{d}_{n_2,k}^* \cdot \tilde{d}_{n_3,k}^*$$

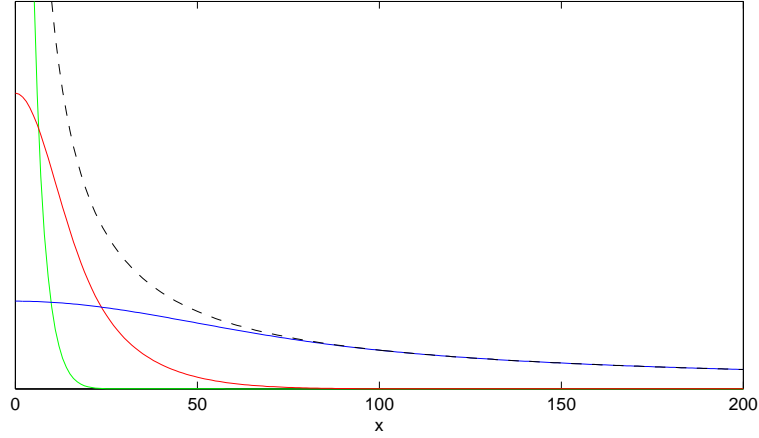


Abbildung 4.2: Die Funktion  $\frac{1}{x}$  (schwarz) sowie die jeweilige Summe der Gauß-Funktionen in  $E_1$  (blau) und in  $E_2$  (rot), die Summe aller restlichen Gauß-Funktionen ist in grün dargestellt

für alle  $\mathbf{n} \in \tilde{Y}_k$ . Für den anharmonischen Fall setzen wir

$$\{\omega_{j,k}\}_{j=1}^{N_k} := \left\{ (\omega_{j_1,k}^*, \omega_{j_2,k}^*, \omega_{j_3,k}^*) : j_1, j_2, j_3 = 1, \dots, \tilde{N}_k^* \right\}$$

und entsprechend

$$\tilde{\zeta}_{j,k} := \tilde{\rho}_{j_1,k}^* \cdot \tilde{\rho}_{j_2,k}^* \cdot \tilde{\rho}_{j_3,k}^* \quad \text{für} \quad \omega_{j,k} = (\omega_{j_1,k}^*, \omega_{j_2,k}^*, \omega_{j_3,k}^*).$$

Damit erhalten wir also Approximationen der Gauß-Funktionen der Länge  $|\tilde{Y}_k| = 2\tilde{P}_k^* + 1 =: P_k$  im Falle einer Periodisierung und der Länge  $N_k := \tilde{N}_k^{*3}$  im anharmonischen Fall, wobei letztere Approximationen nur im Bereich  $[-b_k^*, b_k^*]^3$  gelten. Dabei gilt wieder die Abschätzung (3.33).

Im Folgenden seien nun  $n_k \leq N_k$  und  $p_k = |Y_k| \leq P_k$  für  $Y_k \subset \tilde{Y}_k$  wieder möglichst klein gewählt, sodass immernoch

$$\left| e^{f_k \|\mathbf{x}\|^2} - \sum_{r=1}^{n_k} \tilde{\zeta}_{r,k} e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad \forall \mathbf{x} \in [-b_k^*, b_k^*]^3$$

bzw.

$$\left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L^*\|^2} - \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\psi_{\mathbf{n},k} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad \forall \mathbf{x} \in [-200, 200]^3$$

gilt. Erstere Ungleichung ist wieder in einer großen Anzahl an Punkten des Gebietes  $[-b_k^*, b_k^*]^3$  zu überprüfen. Um die Gültigkeit der zweiten Ungleichung zu garantieren, ist wieder eine Abschätzung der Form (3.36) zu verwenden.



**Beispiel 4.2.** *Liegt die Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  bzw.  $M = 20$  zugrunde, so werden die in der folgenden Tabelle aufgeführten Werte für  $n_k$  und  $p_k$  erhalten.*

$k$	$n_k$	$p_k$	$k$	$n_k$	$p_k$
5	1.49e+03	2.97e+03	7	4.65e+03	7.46e+03
6	1.77e+03	1.63e+04	8	5.11e+03	2.40e+04
7	2.08e+03	8.14e+04	9	5.42e+03	8.73e+04
8	2.31e+03	3.76e+05	10	5.90e+03	2.17e+05
9	2.64e+03	1.63e+06	11	6.25e+03	6.63e+05
10	2.92e+03	6.87e+06	12	6.75e+03	1.89e+06
			13	7.11e+03	5.06e+06

Tabelle 4.3: Einige Werte für  $n_k$  und  $p_k$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  (links) bzw.  $M = 20$  (rechts)

**Bemerkung 4.1.** *Es ist zu beachten, dass im Fall der Verwendung von  $L^*$ -periodisierten Gauß-Funktionen der Ausdruck  $\frac{\delta_k}{|c_k|}$  nicht der tatsächliche Approximationsfehler ist. Dieser ist gegeben durch*

$$\max_{\mathbf{x} \in [-200, 200]^3} \left| e^{f_k \|\mathbf{x}\|^2} - \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\psi_{\mathbf{n},k} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \underbrace{\max_{\mathbf{x} \in [-200, 200]^3} \left| e^{f_k \|\mathbf{x}\|^2} - \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L^*\|^2} \right|}_{\text{klein}} + \frac{\delta_k}{|c_k|}.$$

Im Weiteren seien wieder die Koeffizienten  $\gamma_{\mathbf{n},k} := c_k \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k}$  sowie  $\zeta_{r,k} := c_k \tilde{\zeta}_{r,k}$  definiert. Für den anharmonischen Fall unterteilen wir  $[-100, 100]^3$  in Boxen maximaler Kantenlänge  $t_k^*$  und bezeichnen diese mit  $I_{\mathbf{s},k}$ . Dabei ist  $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)$  ein Multi-Index, dessen Komponenten  $s_1, s_2, s_3 \in \{1, \dots, A_k^*\}^3$  erfüllen. Für jede Box  $I_{\mathbf{s},k}$  definieren wir wieder die Summen

$$\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}} := \sum_{\mathbf{x}_i \in I_{\mathbf{s},k}} q_i e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_i} \quad \text{und} \quad \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} := \sum_{t: I_{t,k} \subset I_{\mathbf{s},k}} \hat{q}_{r,k}^t$$

sowie den Energie-Beitrag

$$E_{\mathbf{s},k} := c_k \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{\mathbf{s},k}} q_j \sum_{i=1}^N e^{f_k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2} \approx \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} \cdot \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}}.$$

Analog zum eindimensionalen Fall haben wir nun eine Approximation der Energie

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}$$

mit gegebenem Splitting-Parameter  $M_1$  und Nahfeld-Parameter  $M_2$  gemäß

$$E \approx \tilde{E} := E_1 + E_2 + E_3 - \sum_{i=1}^N q_i^2 \sum_{k=1}^{M_2} c_k^2,$$

falls alle Teilchenabstände größer oder gleich  $t_{M_2+1}^*$  sind. Dabei ist

$$\begin{aligned} E_1 &:= \sum_{k=1}^{M_0^*} E_{1,k} \\ E_2 &\approx \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 \\ E_3 &:= \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s_1=1}^{A_k^*} \sum_{s_2=1}^{A_k^*} \sum_{s_3=1}^{A_k^*} E_{\mathbf{s},k}. \end{aligned}$$

### Nahfeldkorrektur

Für einen gegebenen Nahfeld-Parameter  $M_2$  betrachten wir wieder die Funktion

$$F(x) = \sum_{k=1}^{M_2} c_k e^{f_k x^2}.$$

Dazu sei die Menge  $T_{M_2}$  von Stützstellen gegeben durch

$$T_{M_2} := \{0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_{a_{M_2}} = t_{M_2+1}^*\}.$$

Die Anzahl  $a_{M_2}$  an Stützstellen sei dabei so groß gewählt, dass der Approximationsfehler  $|F(x) - \tilde{F}(x)|$  stets kleiner  $\varepsilon$  ist. Dabei ist die stückweise lineare Interpolation  $\tilde{F}$  gemäß Formel (3.38) gegeben. Ist die Menge

$$R_{M_2} := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) : 0 < \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\| \leq t_{M_2+1}^*\}$$

nichtleer, so gilt also

$$E \approx \tilde{E} + \sum_{(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) \in R_{M_2}} q_j q_l \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|} - \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l\|) \right).$$

Der folgende Algorithmus fasst die einzelnen Schritte zur Approximation der Energie zusammen.

**Algorithmus 4.1.**

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  sowie die zugehörigen Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ , der Splitting-Parameter  $M_1 \geq M_0^*$  und der Nahfeld-Parameter  $M_2 \geq M_1$ , wobei die Approximation (4.2) mit gewissen Größen  $l$  und  $M$  zugrunde liegt und  $M_0^*$  wie in (4.3) definiert ist. Sowohl die benötigten Koeffizienten für die Fourier-Reihen ( $\psi_{\mathbf{n}}$ ,  $\gamma_{\mathbf{n},k}$ ,  $\omega_{r,k}$  und  $\zeta_{r,k}$ ) als auch die Interpolationsdaten seien vorberechnet.

- *Vorberechnungen:* Im Vorfeld wird für jedes  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  die Einteilung der Teilchen in Boxen abgespeichert.

 1. *Approximation mittels anharmonischen Fourier-Reihen (global):*

Für  $k = 1, \dots, M_0^*$  berechne

$$\hat{q}_{r,k}^1 = \sum_{j=1}^N q_j e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{für alle } r = 1, \dots, n_k$$

und setze

$$E_1 = \sum_{k=1}^{M_0^*} \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} |\hat{q}_{r,k}^1|^2.$$

$$\text{Anzahl arithmetischer Operationen} \approx \sum_{k=1}^{M_0^*} (8Nn_k + 3n_k)$$

 2. *Approximation mittels Fourier-Reihen: Berechne*

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} = \sum_{j=1}^N q_j e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{für alle } \mathbf{n} \in Y_{M_1}$$

in  $\mathcal{O}(p_{M_1} \log p_{M_1} + N)$  arithmetischen Operationen mit der adjungierten NFFT (vgl. Algorithmus 2.2) und berechne

$$E_2 = \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{n} \in Y_{M_1}} \underbrace{\left( \sum_{\substack{k=M_0^*+1 \\ \mathbf{n} \in Y_k}}^{M_1} \gamma_{\mathbf{n},k} \right)}_{\text{vorberechnet}} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2$$

mit  $\approx 3p_{M_1}$  zusätzlichen arithmetischen Operationen.

3. Approximation mittels anharmonischen Fourier-Reihen (lokal):

Für  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  berechne

$$\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{\mathbf{s},k}} q_j e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_j}, \quad \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} = \sum_{t: I_{t,k} \subset J_{\mathbf{s},k}} \hat{q}_{r,k}^t \quad \text{und} \quad E_{\mathbf{s},k} = \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} \sigma_{r,k}^{\mathbf{s}} \cdot \overline{\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{s}}}$$

für alle  $r = 1, \dots, n_k$  und  $\mathbf{s} \in \{1, \dots, A_k^*\}^3$ . Setze

$$E_3 = \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s_1=1}^{A_k^*} \sum_{s_2=1}^{A_k^*} \sum_{s_3=1}^{A_k^*} E_{\mathbf{s},k}.$$

$$\text{Anzahl arithmetischer Operationen} \approx \sum_{k=M_1+1}^{M_2} (8Nn_k + 26n_k A_k^{*3} + 3n_k A_k^{*3} + A_k^{*3}).$$

4. Setze

$$\tilde{E} = E_1 + E_2 + E_3 - \sum_{j=1}^N q_j^2 \sum_{k=1}^{M_2} c_k.$$

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx NM_2$ .

5. Nahfeldkorrektur: Bestimme die Menge

$$R_{M_2} = \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) : 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq t_{M_2+1}^*\}$$

und berechne die Gesamtenergie durch

$$E \approx \tilde{E} := \tilde{E} + \sum_{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in R_{M_2}} q_i q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} - \tilde{F}(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) \right).$$

### 4.3 Bewegung eines Teilchens

Wird die Teilchenposition  $\mathbf{x}_p, p \in \{1, \dots, L\}$ , durch  $\mathbf{x}'_p$  ersetzt, so kann die Energie des neuen Systems gemäß

$$E := E + 2q_p \cdot \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^N q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}'_p\|} - \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_p\|} \right)$$

exakt in  $\mathcal{O}(N)$  arithmetischen Operationen berechnet werden. Ist die Energie mittels Algorithmus 4.1 berechnet worden, so kann auch der folgende Algorithmus herangezogen werden.

**Algorithmus 4.2.**

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  und die Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, \dots, N$ .  $\tilde{E}$  sei die aus Algorithmus 4.1 mit Splitting-Parameter  $M_1$  und Nahfeld-Parameter  $M_2$  erhaltene Energie. Gegeben sei nun ein eventuell von  $M_2$  abweichender neuer Nahfeld-Parameter  $\tilde{M}_2$  mit  $M_0^* \leq \tilde{M}_2 \leq M_2$  sowie die neue Teilchenposition  $\mathbf{x}'_p$ .

1. Setze  $\tilde{\tilde{E}} := \tilde{E} - E_1$ , berechne dann

$$\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{1}} = \hat{q}_{r,k}^{\mathbf{1}} + q_p \left( e^{\boldsymbol{\omega}_{r,k} \cdot \mathbf{x}'_p} - e^{\boldsymbol{\omega}_{r,k} \cdot \mathbf{x}_p} \right)$$

für alle  $k = 1, \dots, M_0^*$  und  $r = 1, \dots, n_k$ . Setze

$$E_1 = \sum_{k=1}^{M_0^*} \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} |\hat{q}_{r,k}^{\mathbf{1}}|^2$$

und aktualisiere die Energie durch  $\tilde{\tilde{E}} := \tilde{E} + E_1$ .

$$\text{Anzahl arithmetischer Operationen} \sum_{k=1}^{M_0^*} (15n_k + 3n_k) = \sum_{k=1}^{M_0^*} 18n_k$$

2. Für  $\tilde{M} := \min\{\tilde{M}_2, M_1\}$  setze

$$\tilde{\tilde{E}} := \tilde{\tilde{E}} - \sum_{k=M_0^*+1}^{\tilde{M}} \sum_{\mathbf{n} \in Y_k} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2,$$

wobei die auftretende Doppelsumme als Teilsumme von  $E_2$  aus Algorithmus 4.1 als vorberechnet betrachtet wird, und berechne

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} := \hat{q}_{\mathbf{n}} + q_p \left( e^{\boldsymbol{\psi}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'_p} - e^{\boldsymbol{\psi}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_p} \right) \quad \forall \mathbf{n} \in Y_{\tilde{M}}.$$

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx 15p_{\tilde{M}}$ .

3. Berechne dann den neuen mittels periodisierten Gauß-Funktionen approximierten Anteil

$$E_2 := \sum_{\mathbf{n} \in Y_{\tilde{M}}} \left( \sum_{\substack{k=M_0^*+1 \\ \mathbf{n} \in Y_k}}^{\tilde{M}} \gamma_{\mathbf{n},k} \right) |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2$$

und aktualisiere die Energie gemäß  $\tilde{\tilde{E}} := \tilde{\tilde{E}} + E_2$ .

Anzahl arithmetischer Operationen  $\approx 3p_{\tilde{M}}$ .

4. Für  $k = \tilde{M} + 1, \dots, \tilde{M}_2$ :

- Es seien  $\mathbf{x}_p \in I_{s_1,k}$  und  $\mathbf{x}'_p \in I_{s_2,k}$ .

- Für  $r = 1, \dots, n_k$  setze

$$\hat{q}_{r,k}^{s_1} := \hat{q}_{r,k}^{s_1} - q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_p} \quad \text{und} \quad \sigma_{r,k}^t := \sigma_{r,k}^t - q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}_p} \quad \forall t : I_{t,k} \subset J_{s_1,k}$$

sowie

$$\hat{q}_{r,k}^{s_2} := \hat{q}_{r,k}^{s_2} + q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}'_p} \quad \text{und} \quad \sigma_{r,k}^t := \sigma_{r,k}^t + q_p e^{\omega_{r,k} \cdot \mathbf{x}'_p} \quad \forall t : I_{t,k} \subset J_{s_2,k}.$$

$$\text{Anzahl arithmetischer Operationen} \approx \sum_{\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} (2 \cdot 8n_k + 2 \cdot 27n_k) = \sum_{\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} 70n_k.$$

5. Für  $k = \tilde{M} + 1, \dots, \tilde{M}_2$ :

- Ziehe die alten Energiebeiträge ab:

$$\tilde{E} := \tilde{E} - \sum_{t: I_{t,k} \subset (J_{s_1,k} \cup J_{s_2,k})} E_{t,k}$$

- Berechne diese neu:

$$E_{t,k} := \sum_{r=1}^{n_k} \zeta_{r,k} \sigma_{r,k}^t \cdot \overline{\hat{q}_{r,k}^t} \quad \forall t : I_{t,k} \subset (J_{s_1,k} \cup J_{s_2,k})$$

- Addiere die neuen Beiträge:

$$\tilde{E} := \tilde{E} + \sum_{t: I_{t,k} \subset (J_{s_1,k} \cup J_{s_2,k})} E_{t,k}$$

$$\text{Arithmetische Operationen:} \approx \sum_{\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} (2 \cdot 2 \cdot 27 + 3 \cdot 2 \cdot 27n_k) = \sum_{\tilde{M}+1}^{\tilde{M}_2} (108 + 162n_k).$$

6. Nahfeldkorrektur: Es seien

$$R_1 := \{\mathbf{x}_j \neq \mathbf{x}_p : \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_p\| \leq t_{\tilde{M}_2+1}^*\}$$

und

$$R_2 := \{\mathbf{x}_j \neq \mathbf{x}'_p : \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}'_p\| \leq t_{\tilde{M}_2+1}^*\}.$$

Damit ergibt sich die neue Gesamtenergie gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \tilde{E} + 2q_p \sum_{\mathbf{x}_j \in R_1} q_j \left( \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_p\|) - \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_p\|} \right) \\ &\quad + 2q_p \sum_{\mathbf{x}_j \in R_2} q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}'_p\|} - \tilde{F}(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}'_p\|) \right). \end{aligned}$$

## 4.4 Optimale Wahl der Parameter und Tests

In diesem Abschnitt wird wieder die Abhängigkeit der Rechenzeit bezüglich der gewählten Parameter untersucht. Im folgenden Beispiel sind dafür einige Rechenzeiten von Algorithmus 4.1 für verschieden große Teilchensysteme aufgeführt.

**Beispiel 4.3.** *Wir betrachten jeweils ein System von  $N$  Teilchen, die zufällig in  $[-100, 100]^3$  verteilt sind. Dabei haben die Teilchen jeweils die Ladung  $+1$  oder  $-1$ . Einige Rechenzeiten von Algorithmus 4.1 für die Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen sind den Tabellen 4.4, 4.5 und 4.6 zu entnehmen.*

	$M_1 = 4$	$M_1 = 5$	$M_1 = 6$	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$
$M_2 = 5$	0.61s	0.41s			
$M_2 = 6$	0.79s	0.63s	0.37s		
$M_2 = 7$	1.58s	1.45s	1.14s	0.67s	
$M_2 = 8$	3.62s	3.53s	3.25s	2.79s	1.68s

Tabelle 4.4: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 4.1 für ein System mit  $N = 5 \cdot 10^3$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 4$	$M_1 = 5$	$M_1 = 6$	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$
$M_2 = 5$	1.77s	1.44s			
$M_2 = 6$	1.54s	1.21s	0.60s		
$M_2 = 7$	2.58s	2.07s	1.53s	0.86s	
$M_2 = 8$	5.57s	4.78s	4.31s	3.64s	2.27s

Tabelle 4.5: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 4.1 für ein System mit  $N = 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 4$	$M_1 = 5$	$M_1 = 6$	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$
$M_2 = 5$	13.84s	12.68s			
$M_2 = 6$	6.62s	5.28s	3.54s		
$M_2 = 7$	6.29s	4.99s	3.46s	1.74s	
$M_2 = 8$	10.13s	8.95s	7.19s	5.42s	3.27s

Tabelle 4.6: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 4.1 für ein System mit  $N = 3 \cdot 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 14$  Gauß-Funktionen

Wird die Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen verwendet, so erhalten wir die in den Tabellen 4.7, 4.8 und 4.9 aufgeführten Rechenzeiten.

	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$	$M_1 = 9$	$M_1 = 10$	$M_1 = 11$
$M_2 = 8$	1.23s	0.68s			
$M_2 = 9$	2.12s	1.49s	0.60s		
$M_2 = 10$	3.38s	2.97s	1.93s	0.83s	
$M_2 = 11$	6.05s	5.53s	4.61s	3.52s	1.26s

Tabelle 4.7: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 4.1 für ein System mit  $N = 5 \cdot 10^3$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$	$M_1 = 9$	$M_1 = 10$	$M_1 = 11$
$M_2 = 8$	2.87s	1.63s			
$M_2 = 9$	3.80s	2.72s	1.17s		
$M_2 = 10$	5.81s	4.58s	3.11s	1.43s	
$M_2 = 11$	8.99s	7.87s	6.76s	4.68s	1.75s

Tabelle 4.8: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 4.1 für ein System mit  $N = 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen

	$M_1 = 7$	$M_1 = 8$	$M_1 = 9$	$M_1 = 10$	$M_1 = 11$
$M_2 = 8$	16.08s	12.84s			
$M_2 = 9$	14.74s	11.03s	6.10s		
$M_2 = 10$	17.32s	13.92s	9.19s	3.87s	
$M_2 = 11$	24.15s	20.20s	15.45s	10.29s	3.78s

Tabelle 4.9: Erhaltene Laufzeiten von Algorithmus 4.1 für ein System mit  $N = 3 \cdot 10^4$  Teilchen für verschiedene Parameter  $M_1$  und  $M_2$  bei Verwendung der Approximation (4.2) mit  $l = 2 \cdot 10^5$  und  $M = 20$  Gauß-Funktionen

Analog zum periodischen Fall gibt es also wieder eine bezüglich der Rechenzeit optimale Kombination der Parameter  $M_1$  und  $M_2$  für Algorithmus 4.1, die von der Teilchenzahl  $N$  abhängig ist. Bei unserer Implementierung ist dabei wieder die Verwendung der periodisierten Gauß-Funktionen günstiger als die lokale Approximation durch anharmonische Fourier-Reihen, sodass Schritt 3 in Algorithmus 4.1 entfällt.

Vergleichen wir die jeweiligen optimalen Rechenzeiten unter Verwendung der Approximation (4.2) mit  $M = 14$  mit denen in [19], so können wir feststellen, dass durch



die Verwendung der  $L^*$ -periodischen Fourier-Reihen eine deutliche Verbesserung der Rechenzeiten erzielt werden konnte.

Für die Wahl der Parameter in Algorithmus 4.2 betrachten wir zunächst wieder den von der Teilchenanzahl  $N$  unabhängigen Teil. Wir definieren wieder

$$Z_k := 18 \cdot p_k$$

als die Anzahl benötigter Rechenoperationen für die Berechnung der Energie  $E_2$  basierend auf periodisierten Gauß-Funktionen. Für  $k > M_0^*$  kann der Wert  $Z_k - Z_{k-1}$  also als die Anzahl benötigter Operationen für die Berechnungen bezüglich der  $k$ -ten Gauß-Funktion bei Verwendung der Periodisierung angesehen werden, wobei  $Z_{M_0^*} := 0$  gesetzt wird. Desweiteren ist

$$\tilde{Z}_k := 232 \cdot n_k + 108$$

eine Abschätzung der Anzahl benötigter arithmetischer Operationen im Falle einer lokalen Approximation durch anharmonische Fourier-Reihen.

$k$	$Z_k - Z_{k-1}$	$\tilde{Z}_k$	$k$	$Z_k - Z_{k-1}$	$\tilde{Z}_k$
5	5.35e+04	3.46e+05	8	2.97e+05	1.19e+06
6	2.40e+05	4.11e+05	9	1.14e+06	1.26e+06
7	1.17e+06	4.82e+05	10	2.33e+06	1.37e+06
8	5.30e+06	5.36e+05	11	8.03e+06	1.45e+06
9	2.25e+07	6.13e+05	12	2.22e+07	1.57e+06
10	9.43e+07	6.78e+05	13	5.69e+07	1.65e+06

Tabelle 4.10: Abschätzung der benötigten arithmetischen Operationen in Algorithmus 4.2 für die Approximation (4.2) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  (links) und für  $M = 20$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  (rechts)

Tabelle 4.10 kann entnommen werden, dass theoretisch im Fall  $k > 6$  bzw.  $k > 9$  die Verwendung der lokalen Approximation durch anharmonische Fourier-Reihen günstiger ist, d.h. es ist  $M_1 = 6$  bzw.  $M_1 = 9$  zu wählen. Das folgende Beispiel soll klären inwieweit die tatsächlichen Rechenzeiten dieses Ergebnis bestätigen.

**Beispiel 4.4.** *Tabelle 4.10 zeigt durchschnittliche Rechenzeiten für die Bewegung eines Teilchens, wobei wieder  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  bzw.  $M = 20$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  gewählt sind. Dabei ist jeweils  $\vartheta_k$  die durchschnittliche Rechenzeit für die Neuberechnung von  $E_2$  im Fall  $M_1 = k$ , wobei  $\vartheta_{M_0^*} := 0$  gesetzt ist, und  $\tilde{\vartheta}_k$  die entsprechende durchschnittliche Rechenzeit zur Neuberechnung der Energiebeiträge für die  $k$ -te Gauß-Funktion im anharmonischen Fall. Der Durchschnitt wird über 100 Testläufe*

gebildet, wobei die Positionen  $\mathbf{x}_p$  und  $\mathbf{x}'_p$  jeweils zufällig in  $[-100, 100]^3$  gewählt wurden. Die Ladung wurde jeweils auf  $q_p = 1$  festgelegt.

$k$	$\vartheta_k - \vartheta_{k-1}$	$\tilde{\vartheta}_k$	$k$	$\vartheta_k - \vartheta_{k-1}$	$\tilde{\vartheta}_k$
5	6.3790e-04s	3.4684e-03s	8	1.1414e-03s	1.3122e-02s
6	8.9210e-04s	5.0806e-03s	9	4.5428e-03s	1.8600e-02s
7	4.5099e-03s	7.6433e-03s	10	1.1304e-02s	2.0313e-02s
8	2.6691e-02s	8.9542e-03s	11	4.1152e-02s	2.5170e-02s
9	1.2664e-01s	1.1547e-02s	12	1.1470e-01s	2.9379e-02s
10	4.7026e-01s	1.5401e-02s	13	2.8836e-01s	3.3216e-02s

Tabelle 4.11: Durchschnittliche Rechenzeiten für den von der Teilchenanzahl  $N$  unabhängigen Teil von Algorithmus 4.2, wobei  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  (links) bzw.  $M = 20$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  (rechts)

Offenbar wurde also experimentell eine optimale Wahl von  $M_1 = 7$  bzw.  $M_1 = 10$  ermittelt, was wieder gut mit den theoretischen Überlegungen übereinstimmt.

Im Folgenden soll nun auf die optimale Wahl des Nahfeld-Parameters  $\tilde{M}_2$  eingegangen werden. Der optimale Wert für diesen Parameter wird dabei wieder von der Teilchenanzahl  $N$  abhängig sein. Der Splitting-Parameter  $M_1$  kann gemäß Beispiel 4.4 unabhängig von  $N$  optimal gewählt werden.

**Beispiel 4.5.** Im Folgenden sei ein System von  $N$  Teilchen gegeben, deren Positionen  $\mathbf{x}_j$  zufällig in  $[-100, 100]^3$  verteilt seien. Die Ladungen  $q_i$  seien zufällig aus dem Intervall  $[-1, 1]$  gewählt. Die Energie  $\tilde{E}$  werde zunächst mit Algorithmus 4.1 und gewissen Parametern  $M_1$  und  $M_2$  berechnet, wobei der Splitting-Parameter schon optimal hinsichtlich des Updates gewählt sei.

Für den folgenden Test werden nun 100 der  $N$  Teilchen zufällig gewählt und nacheinander an eine ebenso zufällig gewählte neue Position verschoben, wobei die neue Energie jeweils mit Algorithmus 4.2 berechnet wird. In den nachstehenden Tabellen sind durchschnittliche Rechenzeiten für verschiedene Teilchenanzahlen  $N$  und Nahfeld-Parameter  $\tilde{M}_2$  angegeben. Dabei ist mit  $t_{\text{ind}}$  die durchschnittliche Rechenzeit für den von  $N$  unabhängigen Teil bezeichnet und  $t_{\text{sum}}$  gibt die durchschnittliche Gesamtlaufzeit an.

Für die in Tabelle 4.12 aufgeführten Ergebnisse wurde die Approximation (4.2) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  verwendet. Entsprechende Ergebnisse für  $M = 20$  finden sich in Tabelle 4.13. Die optimale Rechenzeit ist jeweils grau hinterlegt.

Auch hinsichtlich dieser Rechenzeiten können wir gegenüber [19] eine deutliche Verbesserung feststellen.

$\tilde{M}_2 =$	4	5	6	7
$N = 10^4, M_1 = M_2 = 7$				
$t_{\text{ind}}$ in s	1.73e-04	7.06e-04	1.58e-03	7.14e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	2.32e-03	2.28e-03	2.85e-03	8.58e-03
$N = 2 \cdot 10^4, M_1 = M_2 = 7$				
$t_{\text{ind}}$ in s	1.81e-04	7.24e-04	1.54e-03	7.01e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	3.34e-03	2.65e-03	2.98e-03	8.52e-03
$N = 5 \cdot 10^4, M_1 = M_2 = 7$				
$t_{\text{ind}}$ in s	1.88e-04	7.37e-04	1.56e-03	7.12e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	6.99e-03	3.52e-03	3.31e-03	8.83e-03
$N = 10^5, M_1 = M_2 = 7$				
$t_{\text{ind}}$ in s	2.04e-04	7.65e-04	1.62e-03	7.27e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	1.34e-02	5.82e-03	3.90e-03	9.23e-03

Tabelle 4.12: Durchschnittliche Laufzeiten von Algorithmus 4.2, wobei die Approximation (4.2) mit  $M = 14$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  zugrunde liegt

$\tilde{M}_2 =$	6	7	8	9
$N = 10^4, M_1 = M_2 = 9$				
$t_{\text{ind}}$ in s	6.03e-04	1.23e-03	2.28e-03	7.28e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	3.12e-03	3.11e-03	3.89e-03	8.95e-03
$N = 2 \cdot 10^4, M_1 = M_2 = 9$				
$t_{\text{ind}}$ in s	4.85e-04	1.26e-03	2.30e-03	8.11e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	5.05e-03	3.73e-03	4.22e-03	1.00e-02
$N = 5 \cdot 10^4, M_1 = M_2 = 9$				
$t_{\text{ind}}$ in s	5.52e-04	1.34e-03	2.47e-03	8.27e-03
$t_{\text{sum}}$ in s	7.75e-03	5.87e-03	5.27e-03	1.07e-02

Tabelle 4.13: Durchschnittliche Laufzeiten von Algorithmus 4.2, wobei die Approximation (4.2) mit  $M = 20$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  zugrunde liegt

Im Folgenden werden die aus den Algorithmen 4.1 bzw. 4.2 erhaltenen Ergebnisse noch mit den exakten Werten für die Energie  $E$  verglichen.

**Beispiel 4.6.** *Wir betrachten ein System von  $N$  Teilchen, die zufällig in  $[-100, 100]^3$  verteilt sind. Es sei  $\tilde{E}$  die mittels Algorithmus 3.3 erhaltene Approximation der Energie  $E$ . Im Folgenden betrachten wir den absoluten Fehler*

$$e_{\text{abs}} = |\tilde{E} - E|$$

sowie den relativen Fehler

$$e_{\text{rel}} = \frac{|\tilde{E} - E|}{|E|}.$$

Werden die Ladungen  $q_j$  der Teilchen zufällig aus dem Intervall  $[-1, 1]$  gewählt, so werden die in Tabelle 4.14 aufgeführten mittleren Fehler über 100 Testläufe erhalten. Haben  $\frac{N}{2}$  Teilchen die Ladung  $+1$  und die restlichen Teilchen die Ladung  $-1$ , so erhalten wir die mittleren Fehler aus Tabelle 4.15. Für die Tests wurde stets eine Parameterwahl mit  $M_1 = M_2$  verwendet.

$N$	$10^4$	$3 \cdot 10^4$
$M = 14, l = 2 \cdot 10^5$		
$M_2$	6	7
$e_{\text{abs}}$	2.47e-01	8.89e-01
$e_{\text{rel}}$	3.00e-02	1.83e-02
$M = 20, l = 2 \cdot 10^5$		
$M_2$	9	10
$e_{\text{abs}}$	5.74e-03	1.53e-02
$e_{\text{rel}}$	7.08e-04	3.13e-04

Tabelle 4.14: Mittlere absolute und relative Fehler bei der Approximation der Energie mit Algorithmus 4.1, wobei  $q_i \in [-1, 1]$  für  $j = 1, \dots, N$

$N$	$10^4$	$3 \cdot 10^4$
$M = 14, l = 2 \cdot 10^5$		
$M_2$	6	7
$e_{\text{abs}}$	7.06e-01	2.59e+00
$e_{\text{rel}}$	4.49e-02	1.99e-02
$M = 20, l = 2 \cdot 10^5$		
$M_2$	9	10
$e_{\text{abs}}$	1.66e-02	4.60e-02
$e_{\text{rel}}$	1.02e-03	3.44e-04

Tabelle 4.15: Mittlere absolute und relative Fehler bei der Approximation der Energie elektrisch neutraler Teilchensysteme mit Algorithmus 4.1, wobei  $q_i \in \{-1, 1\}$  für  $j = 1, \dots, N$

**Beispiel 4.7.** Wir betrachten jeweils ein elektrisch neutrales System mit  $N$  Teilchen und Ladungen  $q_j \in \{-1, 1\}$ . Die Energie  $\tilde{E}$  werde zunächst mit Parametern  $M_1 = M_2$  berechnet. Danach werden  $n$  der Teilchen zufällig gewählt und nacheinander an eine zufällig gewählte neue Position in  $[-100, 100]^3$  verschoben. Die Energie  $\tilde{E}$  werde dabei

mit Algorithmus 4.2 zu  $\tilde{E}^{\text{update}}$  aktualisiert. Im Weiteren sei  $E^{\text{res}}$  die exakte Energie des veränderten Teilchensystems. Wir betrachten nun den relativen Fehler

$$e_{\text{rel}} = \frac{|\tilde{E}^{\text{update}} - E^{\text{res}}|}{|E^{\text{res}}|}.$$

In Tabelle 4.16 sind einige durchschnittliche relative Fehler aufgeführt. Dabei sind für zwei verschiedene Teilchenzahlen Fehler für verschiedene Werte von  $n$  und des Nahfeldparameters  $\tilde{M}_2$  angegeben. Dabei liegt jeweils die Approximation (4.2) mit  $M = 20$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  zugrunde.

$N = 10^4, M_1 = M_2 = 9$			
$\tilde{M}_2 =$	7	8	9
$n = 200$	6.28e-04	6.29e-04	6.30e-04
$n = 500$	4.10e-04	4.08e-04	4.06e-04
$n = 1000$	3.99e-04	3.98e-04	3.97e-04
$N = 3 \cdot 10^4, M_1 = M_2 = 10$			
$\tilde{M}_2 =$	8	9	10
$n = 200$	2.98e-04	2.98e-04	2.99e-04
$n = 500$	6.99e-04	6.98e-04	6.99e-04
$n = 1000$	4.08e-04	4.09e-04	4.09e-04

Tabelle 4.16: Mittlere relative Fehler über je 100 Testläufe für die Neuberechnung der Energie mit Algorithmus 4.2, wobei die Approximation (4.2) mit  $M = 20$  und  $l = 2 \cdot 10^5$  zugrunde liegt



## 5 Partikelsysteme mit gemischten Randbedingungen

Im Folgenden seien wieder  $N$  Teilchen  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3$  und deren Ladungen  $q_j \in \mathbb{R}$ , welche die Neutralitätsbedingung (3.3) erfüllen, gegeben. In vielen Anwendungen werden anstelle der Periodizität in alle drei Raumrichtungen periodische Randbedingungen in nur eine oder zwei Koordinatenrichtungen angenommen. In diesem Kapitel wollen wir vorallem auf den Fall der Periodizität in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene eingehen. Dafür setzen wir im Folgenden

$$\mathbb{Z}^2 \times \{0\} := \{\mathbf{n} = (n_1, n_2, 0) : n_1, n_2 \in \mathbb{Z}\}$$

und betrachten die Energie

$$E := \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \prime \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}, \quad (5.1)$$

deren Wert wieder von der Summationsreihenfolge abhängt.

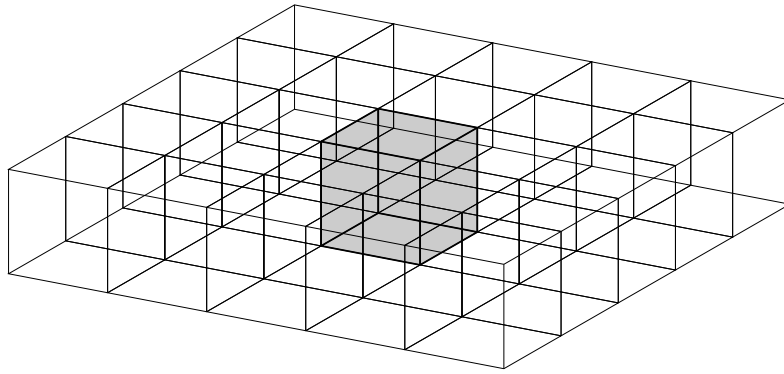


Abbildung 5.1: Periodische Randbedingungen in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene

Wird nur in der  $x_1$ -Komponente Periodizität angenommen, so nimmt die zu berechnende Energie die Form

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z} \times \{0\}^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \prime \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} \quad (5.2)$$

an. Im folgenden Abschnitt werden wir die Ewald-Methode für zweidimensionale periodische Randbedingungen betrachten.

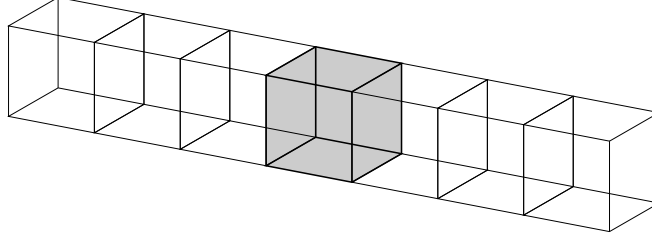


Abbildung 5.2: Periodische Randbedingungen in  $x_1$ -Richtung

## 5.1 Ewald-Summation unter zweidimensionalen periodischen Randbedingungen

Wie beispielsweise in [17] aufgeführt, kann die Energie (5.1) als Summe

$$E = E^S + E^L + E^{L,0} - E^{\text{self}}$$

dargestellt werden, wobei

$$\begin{aligned} E^S &= \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} \\ E^L &= \frac{1}{2L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L}}{\|\mathbf{k}\|} \cdot \Theta(\mathbf{k}, x_{i,3} - x_{j,3}) \\ E^{L,0} &= -\frac{2\sqrt{\pi}}{L^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \left( \frac{e^{-\alpha^2 (x_{i,3} - x_{j,3})^2}}{\alpha} + \sqrt{\pi} (x_{i,3} - x_{j,3}) \text{erf}(\alpha (x_{i,3} - x_{j,3})) \right) \\ E^{\text{self}} &= \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N q_j^2. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Dabei ist für  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2$  und  $x \in \mathbb{R}$  die Größe  $\Theta(\mathbf{k}, x)$  definiert durch

$$\Theta(\mathbf{k}, x) := e^{2\pi \|\mathbf{k}\| x/L} \text{erfc} \left( \frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{\alpha L} + \alpha x \right) + e^{-2\pi \|\mathbf{k}\| x/L} \text{erfc} \left( \frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{\alpha L} - \alpha x \right).$$

Desweiteren verwenden wir dabei die Notation  $\mathbf{x}_j = (\tilde{\mathbf{x}}_j, x_{j,3})$  mit  $\tilde{\mathbf{x}}_j \in \mathbb{R}^2$  für alle  $j = 1, \dots, N$ . Im Folgenden werden wir diese Formeln unter Verwendung des Konvergenzfaktors

$$e^{-s \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2}$$



herleiten. Wir berechnen also die Energie über den Grenzwert

$$E := \lim_{s \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{e^{-s \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2}}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}.$$

Wie in [1, Anhang A] bewiesen, fällt dieser Grenzwert im Zweidimensionalen mit dem der sphärischen Summationsreihenfolge zusammen.

### 5.1.1 Herleitung

Für ein  $\alpha > 0$  schreiben wir die Energie (5.1) analog zur Herleitung in Abschnitt 3.2 in der Form

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\operatorname{erfc}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} \\ &+ \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\operatorname{erf}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|} - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N q_j^2. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die erste Summe in (5.4) ist aufgrund des schnellen Abfalls der komplementären Error-Funktion absolut konvergent. Für die Berechnung der zweiten unendlichen Summe definieren wir

$$E(s) := \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-s \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2} \frac{\operatorname{erf}(\alpha \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|}$$

und betrachten dann den Grenzwert  $\lim_{s \rightarrow 0} E(s)$ . In  $E(s)$  schreiben wir die Error-Funktion als Integral aus und substituieren  $z := \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^{-1}t$ . Dann können wir wieder Summation und Integration vertauschen und die Poissonsche Summenformel (2.10) für  $d = 2$  anwenden. Im Folgenden setzen wir dabei  $x_{ij} := x_{i,3} - x_{j,3}$  und verwenden für  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}$  die Notation  $\mathbf{n} = (\tilde{\mathbf{n}}, 0)$ . Wir erhalten

$$\begin{aligned} E(s) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-s \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2} \int_0^\alpha e^{-x_{ij}^2 z^2} e^{-\|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2 z^2} dz \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-(s+z^2)x_{ij}^2} \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \mathbb{Z}^2} e^{-(s+z^2)\|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2} dz \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-(s+z^2)x_{ij}^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2} \frac{\pi}{L^2(s+z^2)} e^{\frac{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2(s+z^2)}} e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L} d\mathbf{k} dz \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\pi}{L^2} e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L} e^{-s x_{ij}^2} \int_0^\alpha \frac{1}{s+z^2} e^{\frac{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2(s+z^2)}} e^{-x_{ij}^2 z^2} dz. \end{aligned}$$

### Berechnung von $E^L$

Nun berechnen wir zunächst wieder die Summe

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\pi}{L^2} e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L} e^{-s x_{ij}^2} \int_0^\alpha \frac{1}{s+z^2} e^{\frac{-\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2(s+z^2)}} e^{-x_{ij}^2 z^2} dz.$$

Dabei können wir wieder zuerst den Grenzwert für  $s \rightarrow 0$  bilden und dann die Integrale ausrechnen. Setzen wir  $s = 0$ , so bleibt die Berechnung der Integrale

$$\int_0^\alpha \frac{1}{z^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2 z^2} - x_{ij}^2 z^2\right) dz.$$

Wir substituieren nun  $y := \frac{1}{z}$  und erhalten mit quadratischer Ergänzung

$$\begin{aligned} & \int_0^\alpha \frac{1}{z^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2 z^2} - x_{ij}^2 z^2\right) dz \\ &= \int_{\frac{1}{\alpha}}^\infty \exp\left(-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 y^2}{L^2} - \frac{x_{ij}^2}{y^2}\right) dy \\ &= \int_{\frac{1}{\alpha}}^\infty \exp\left[-\left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\| y}{L} + \frac{x_{ij}}{y}\right)^2 + \frac{2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}}{L}\right] dy \\ &= \int_{\frac{1}{\alpha}}^\infty \exp\left[-\left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\| y}{L} - \frac{x_{ij}}{y}\right)^2 - \frac{2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}}{L}\right] dy. \end{aligned}$$

Wir schreiben nun

$$1 = \frac{L}{2\pi \|\mathbf{k}\|} \cdot \frac{2\pi \|\mathbf{k}\|}{L} = \frac{L}{2\pi \|\mathbf{k}\|} \cdot \left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{L} - \frac{x_{ij}}{y^2}\right) + \frac{L}{2\pi \|\mathbf{k}\|} \cdot \left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{L} + \frac{x_{ij}}{y^2}\right)$$

und erhalten damit

$$\begin{aligned} & \int_{\frac{1}{\alpha}}^\infty \exp\left(-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2 y^2}{L^2} - \frac{x_{ij}^2}{y^2}\right) dy \\ &= \frac{L}{2\pi \|\mathbf{k}\|} \int_{\frac{1}{\alpha}}^\infty \left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{L} - \frac{x_{ij}}{y^2}\right) \exp\left[-\left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\| y}{L} + \frac{x_{ij}}{y}\right)^2 + \frac{2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}}{L}\right] dy \\ & \quad + \frac{L}{2\pi \|\mathbf{k}\|} \int_{\frac{1}{\alpha}}^\infty \left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{L} + \frac{x_{ij}}{y^2}\right) \exp\left[-\left(\frac{\pi \|\mathbf{k}\| y}{L} - \frac{x_{ij}}{y}\right)^2 - \frac{2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}}{L}\right] dy. \end{aligned}$$

Substituieren wir an dieser Stelle

$$t := \frac{\pi \|\mathbf{k}\| y}{L} + \frac{x_{ij}}{y} \quad \text{bzw.} \quad t := \frac{\pi \|\mathbf{k}\| y}{L} - \frac{x_{ij}}{y},$$

so erhalten wir

$$dt = \left( \frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{L} - \frac{x_{ij}}{y^2} \right) dy \quad \text{bzw.} \quad dt = \left( \frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{L} + \frac{x_{ij}}{y^2} \right) dy.$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^\alpha \frac{1}{z^2} \exp \left( -\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2 z^2} - x_{ij}^2 z^2 \right) dz \\ &= \frac{L}{2\pi \|\mathbf{k}\|} \left( e^{2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}/L} \int_{\frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{\alpha L} + \alpha x_{ij}}^\infty e^{-t^2} dt + e^{-2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}/L} \int_{\frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{\alpha L} - \alpha x_{ij}}^\infty e^{-t^2} dt \right) \\ &= \frac{L\sqrt{\pi}}{4\pi \|\mathbf{k}\|} \left( e^{2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}/L} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{\alpha L} + \alpha x_{ij} \right) + e^{-2\pi \|\mathbf{k}\| x_{ij}/L} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi \|\mathbf{k}\|}{\alpha L} - \alpha x_{ij} \right) \right) \\ &= \frac{L\sqrt{\pi}}{4\pi \|\mathbf{k}\|} \Theta(\mathbf{k}, x_{ij}). \end{aligned}$$

Für den langreichweitigen Anteil

$$E^L := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\pi}{L^2} e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L} \int_0^\alpha \frac{1}{z^2} e^{-\frac{\pi^2 \|\mathbf{k}\|^2}{L^2 z^2}} e^{-x_{ij}^2 z^2} dz$$

erhalten wir damit

$$\begin{aligned} E^L &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{\pi}{L^2} e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L} \frac{L\sqrt{\pi}}{4\pi \|\mathbf{k}\|} \Theta(\mathbf{k}, x_{ij}) \\ &= \frac{1}{2L} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \frac{e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j)/L}}{\|\mathbf{k}\|} \Theta(\mathbf{k}, x_{ij}). \end{aligned}$$

Es bleibt, den Term

$$E^{L,0} := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{2\sqrt{\pi}}{L^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-s x_{ij}^2} \int_0^\alpha \frac{e^{-x_{ij}^2 z^2}}{s + z^2} dz$$

für  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  zu berechnen.

### Berechnung von $E^{L,0}$

Für die Berechnung der Energie  $E^{L,0}$  betrachten wir das Integral

$$\int_0^\alpha \frac{e^{-x_{ij}^2 y^2}}{s + y^2} dy$$

und überführen dieses unter Verwendung der Substitution  $z := \frac{y}{\sqrt{s}}$  in das Integral

$$\int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{e^{-sx_{ij}^2 z^2}}{\sqrt{s}(1+z^2)} dz.$$

Die Funktion  $f(s) := e^{-sx_{ij}^2 z^2}$  entwickeln wir nun in eine Taylor-Reihe um  $s_0 = 0$ , d.h. wir schreiben

$$e^{-sx_{ij}^2 z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (x_{ij} z)^{2n} \frac{s^n}{n!}.$$

Diese können wir nun gliedweise integrieren, also erhalten wir

$$\int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{e^{-sx_{ij}^2 z^2}}{\sqrt{s}(1+z^2)} dz = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x_{ij}^{2n} s^n}{n! \sqrt{s}} \int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{z^{2n}}{1+z^2} dz. \quad (5.5)$$

**Lemma 5.1.** Für  $\beta > 0$  und  $n \in \mathbb{N}_0$  gilt

$$\int_0^{\beta} \frac{z^{2n}}{1+z^2} dz = (-1)^n \arctan \beta + (-1)^{n+1} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{\beta^{2k+1}}{2k+1}. \quad (5.6)$$

**Beweis:** Die Behauptung ist offenbar für  $n = 0$  erfüllt, denn

$$\int_0^{\beta} \frac{1}{1+z^2} dz = \arctan z \Big|_0^{\beta} = \arctan \beta.$$

Für  $n = 1$  erhalten wir

$$\int_0^{\beta} \frac{z^2}{1+z^2} dz = \int_0^{\beta} \frac{1+z^2}{1+z^2} dz - \int_0^{\beta} \frac{1}{1+z^2} dz = \beta - \arctan \beta.$$

Es sei die Gleichung (5.6) für  $n \in \mathbb{N}_0$  erfüllt, dann gilt

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} \frac{z^{2n+2}}{z^2+1} dz &= \int_0^{\beta} \frac{z^{2n}(z^2+1-1)}{z^2+1} dz \\ &= \int_0^{\beta} z^{2n} dz - \int_0^{\beta} \frac{z^{2n}}{z^2+1} dz \\ &= \frac{\beta^{2n+1}}{2n+1} - (-1)^n \arctan \beta - (-1)^{n+1} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{\beta^{2k+1}}{2k+1} \\ &= (-1)^{n+1} \arctan \beta + (-1)^{n+2} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{\beta^{2k+1}}{2k+1} + (-1)^{2n+2} \frac{\beta^{2n+1}}{2n+1} \\ &= (-1)^{n+1} \arctan \beta + (-1)^{n+2} \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{\beta^{2k+1}}{2k+1}. \end{aligned}$$

Somit folgt die Behauptung durch vollständige Induktion.  $\square$

Damit folgt für  $\beta = \frac{\alpha}{\sqrt{s}}$  in Formel (5.6) und  $n > 0$

$$\begin{aligned} \frac{s^n}{\sqrt{s}} \int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{z^{2n}}{1+z^2} dz &= \frac{(-1)^n s^n}{\sqrt{s}} \arctan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{s}}\right) + (-1)^{n+1} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{\alpha^{2k+1} s^n}{(2k+1)s^{k+1}} \\ &= \mathcal{O}(\sqrt{s}) + \frac{\alpha^{2n-1}}{(2n-1)} + \mathcal{O}(s) \end{aligned}$$

für  $s \rightarrow 0$ . Für  $n = 0$  haben wir

$$\frac{1}{\sqrt{s}} \int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{dz}{1+z^2} = \frac{1}{\sqrt{s}} \arctan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{s}}\right).$$

Setzen wir dies in Formel (5.5) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{e^{-sx_{ij}^2 z^2}}{\sqrt{s}(1+z^2)} dz &= \frac{1}{\sqrt{s}} \arctan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{s}}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n x_{ij}^{2n} \alpha^{2n-1}}{n!(2n-1)} + \mathcal{O}(\sqrt{s}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{s}} \arctan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{s}}\right) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} x_{ij}^{2n+2} \alpha^{2n+1}}{(n+1)!(2n+1)} + \mathcal{O}(\sqrt{s}). \end{aligned}$$

**Lemma 5.2.** Für  $z \in \mathbb{R}$  und  $\alpha > 0$  gilt

$$\sqrt{\pi} z \cdot \operatorname{erf}(\alpha z) + \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha^2 z^2} = \frac{1}{\alpha} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n+2} \alpha^{2n+1}}{(n+1)!(2n+1)}. \quad (5.7)$$

**Beweis:** Wir nutzen die Taylor-Reihen

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}(z) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n+1}}{n!(2n+1)} \\ e^{-z^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n}}{n!} = 1 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} z^{2n+2}}{(n+1)!} \end{aligned}$$

der Funktionen  $\operatorname{erf}(z)$  und  $e^{-z^2}$ , die für alle  $z \in \mathbb{R}$  gelten. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \sqrt{\pi} z \cdot \operatorname{erf}(\alpha z) + \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha^2 z^2} &= \frac{1}{\alpha} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left( \frac{2}{2n+1} - \frac{1}{n+1} \right) z^{2n+2} \alpha^{2n+1} \\ &= \frac{1}{\alpha} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left( \frac{1}{(2n+1)(n+1)} \right) z^{2n+2} \alpha^{2n+1} \\ &= \frac{1}{\alpha} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n+2} \alpha^{2n+1}}{(n+1)!(2n+1)}. \quad \square \end{aligned}$$

Mit Gleichung (5.7) folgt nun unmittelbar

$$\int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{s}}} \frac{e^{-sx_{ij}^2 z^2}}{\sqrt{s}(1+z^2)} dz = \frac{1}{\sqrt{s}} \arctan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{s}}\right) - \sqrt{\pi} x_{ij} \operatorname{erf}(\alpha x_{ij}) - \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha^2 x_{ij}^2} + \frac{1}{\alpha} + \mathcal{O}(\sqrt{s}).$$

Für die Energie  $E^{\text{L},0}$  ergibt sich damit unter Gültigkeit der Neutralitätsbedingung (3.3)

$$\begin{aligned} E^{\text{L},0} &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{2\sqrt{\pi}}{L^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{-sx_{ij}^2} \int_0^{\alpha} \frac{e^{-x_{ij}^2 z^2}}{s+z^2} dz \\ &= -\frac{2\sqrt{\pi}}{L^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \left( \frac{e^{-\alpha^2 x_{ij}^2}}{\alpha} + \sqrt{\pi} x_{ij} \cdot \operatorname{erf}(\alpha x_{ij}) \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

### 5.1.2 Bekannte Verfahren

Aus der nun bewiesenen Darstellung der Energie

$$E = E^{\text{S}} + E^{\text{L}} + E^{\text{L},0} - E^{\text{self}}$$

lässt sich ein effizienter Algorithmus deutlich schwerer als im Fall für dreidimensionale periodische Randbedingungen ableiten. Besonders die Berechnung des langreichweitigen Anteils (5.3) ist kompliziert. Wohingegen wir die effiziente Berechnung von  $E^{\text{L}}$  in Abschnitt 3.2 durch die schnelle Berechnung der Summen  $S(\mathbf{k})$  mittels der NFFT umsetzen konnten, ist dieser Ansatz hier nicht möglich, da die Terme  $\Theta(\mathbf{k}, x)$  nicht in den Dimensionen separieren.

Dennoch gibt es bereits einige schnelle Algorithmen für die Berechnung der Energie unter zweidimensionalen periodischen Randbedingungen. In der Arbeit [17] wird beispielsweise die Identität

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(k^2+\kappa^2)/4\alpha^2}}{k^2+\kappa^2} e^{i\kappa x} d\kappa = \frac{\pi}{2k} \left[ e^{kx} \operatorname{erfc}\left(\frac{k}{2\alpha} + \alpha x\right) + e^{-kx} \operatorname{erfc}\left(\frac{k}{2\alpha} - \alpha x\right) \right]$$

genutzt, um ein Partikel-Mesh-Verfahren der Komplexität  $\mathcal{O}(N \log N)$  abzuleiten.

Beispiel für einen Algorithmus, der nicht auf der hier hergeleiteten Darstellung der Energie beruht, ist das MMM2D-Verfahren [1]. Dies ist aber aufgrund der Komplexität von  $\mathcal{O}(N^{5/3})$  nur für die Anwendung auf kleine Partikelsysteme vorteilhaft.

Auch mit der in der Einleitung erwähnten schnellen Multipole-Methode ist die Behandlung dieser Problemstellung möglich, vgl. beispielsweise [12].

## 5.2 Approximation mittels Fourier-Summen von Gauß-Funktionen

In diesem Abschnitt setzen wir wieder  $L := 200$ . In Abschnitt 3.3 und Kapitel 4 wurde jeweils auf Basis einer Approximation

$$\left| \frac{1}{x} - \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k x^2} \right| \leq \varepsilon \quad \forall x \in [1, \sqrt{l}] \quad (5.9)$$

eine Methode zur Berechnung der Energie mit dreidimensionalen periodischen Randbedingungen sowie ein entsprechender Algorithmus für die Energieberechnung unter offenen Randbedingungen vorgestellt. Aus beiden Methoden soll im Folgenden eine Mischform abgeleitet werden, mit der die Energie aus (5.1) berechnet werden kann.

Analog dazu lässt sich dann auch ein entsprechendes Verfahren zur Berechnung der Energie (5.2) unter eindimensionalen periodischen Randbedingungen angeben.

### 5.2.1 Approximation der Gauß-Funktionen

Für die Berechnungen bezüglich der  $x_1$ - und  $x_2$ -Koordinate verwenden wir für jede Gauß-Funktion eine Approximation der Form

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL)^2} \approx \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x / L},$$

wie in Abschnitt 3.3 angegeben. In  $x_3$ -Richtung kommen die Approximationen

$$e^{f_k x^2} \approx \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \tilde{\rho}_{r,k}^* e^{\omega_{r,k}^* x} \quad \forall x \in [-b_k^*, b_k^*]$$

bzw. im Fall  $k > M_0^*$  auch

$$e^{f_k x^2} \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{f_k(x+nL^*)^2} \approx \sum_{n=-\tilde{P}_k^*}^{\tilde{P}_k^*} \tilde{d}_{n,k}^* e^{2\pi i n x / L^*}$$

aus Kapitel 4 zur Anwendung.

### Dreidimensionale Approximationen

Im Folgenden sei stets  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}$ . Mithilfe der eindimensionalen Approximationen erhalten wir für alle  $k = 1, \dots, M$  die Näherung

$$\begin{aligned} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} &= e^{f_k(x_1 + n_1L)^2} \cdot e^{f_k(x_2 + n_2L)^2} \cdot e^{f_k x_3^2} \\ &\approx \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_1 / L} \cdot \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_2 / L} \cdot \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \tilde{\rho}_{r,k}^* e^{\omega_{r,k}^* x_3} \end{aligned}$$

für alle  $x_3 \in [-b_k^*, b_k^*]$  bzw. für  $k > M_0^*$  alternativ

$$e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} \approx \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_1 / L} \cdot \sum_{n=-\tilde{P}_k}^{\tilde{P}_k} \tilde{d}_{n,k} e^{2\pi i n x_2 / L} \cdot \sum_{n=-\tilde{P}_k^*}^{\tilde{P}_k^*} \tilde{d}_{n,k}^* e^{2\pi i n x_3 / L^*}.$$

Wir betrachten die Index-Mengen

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{k,1} &:= \left\{ \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) : n_1, n_2 = -\tilde{P}_k, \dots, \tilde{P}_k, n_3 = -\tilde{P}_k^*, \dots, \tilde{P}_k^* \right\} \\ \tilde{Y}_{k,2} &:= \left\{ (\tilde{\mathbf{n}}, r) = (n_1, n_2, r) : n_1, n_2 = -\tilde{P}_k, \dots, \tilde{P}_k, r = 1, \dots, \tilde{N}_k^* \right\} \end{aligned}$$

und definieren für  $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$  die Koeffizienten

$$\psi_{\mathbf{n}} := \left( \frac{2\pi i n_1}{L}, \frac{2\pi i n_2}{L}, \frac{2\pi i n_3}{L^*} \right) \quad \text{sowie} \quad \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} := \tilde{d}_{n_1,k} \cdot \tilde{d}_{n_2,k} \cdot \tilde{d}_{n_3,k}^*$$

und analog für  $(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in \mathbb{Z}^2 \times \{1, \dots, \tilde{N}_k^*\}$  die Koeffizienten

$$\omega_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} := \left( \frac{2\pi i n_1}{L}, \frac{2\pi i n_2}{L}, \omega_{r,k}^* \right) \quad \text{sowie} \quad \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} := \tilde{d}_{n_1,k} \cdot \tilde{d}_{n_2,k} \cdot \tilde{\rho}_{r,k}^*.$$

Damit können wir mittels Fourier-Reihen

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} \approx \sum_{\mathbf{n} \in \tilde{Y}_{k,1}} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}}$$

bzw. für  $x_3 \in [-b_k^*, b_k^*]$  mittels anharmonischen Fourier-Reihen

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} \approx \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in \tilde{Y}_{k,2}} \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} \cdot \mathbf{x}}$$

schreiben. Da viele der Faktoren  $\tilde{\gamma}_{\mathbf{n}}$  und  $\tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}$  betragsmäßig sehr klein sind, wollen wir wieder Teilmengen  $Y_{k,1} \subset \tilde{Y}_{k,1}$  und  $Y_{k,2} \subset \tilde{Y}_{k,2}$  der betragsmäßig größten Koeffizienten bestimmen, sodass immernoch

$$\left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2 + f_k(x_3 + n_3L^*)^2} - \sum_{\mathbf{n} \in Y_{k,1}} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n},k} e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad (5.10)$$



für alle  $\mathbf{x} = (\tilde{\mathbf{x}}, x_3) \in [-200, 200]^3$  bzw.

$$\left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} - \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} \cdot \mathbf{x}} \right| \leq \frac{\delta_k}{|c_k|} \quad (5.11)$$

für alle  $\mathbf{x} \in [-200, 200]^2 \times [-b_k^*, b_k^*]$  gilt. Dies beruht wieder auf der Fehlerabschätzung (3.33), die auch hier gültig ist. Auch hier ist entsprechend zu Bemerkung 4.1 zu beachten, dass im Fall der Verwendung von Fourier-Reihen im nichtperiodischen Fall der Fehler bezüglich der periodisierten Gauß-Funktion ausgewertet wird.

Ungleichung (5.10) kann analog zu (3.36) durch die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2 + f_k (x_3 + n_3 L^*)^2} - \sum_{\mathbf{n} \in Y_{k,1}} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n}, k} e^{\psi_{\mathbf{n}, k} \cdot \mathbf{x}} \right| \\ & \leq \left( \tilde{d}_{0, k} + 2 \cdot \sum_{n=1}^{R_1} \tilde{d}_{n, k} + \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \frac{e^{\pi^2 R_1 / (L^2 f_k)}}{1 - e^{\pi^2 / (L^2 f_k)}} \right)^2 \times \\ & \quad \left( \tilde{d}_{0, k}^* + 2 \cdot \sum_{n=1}^{R_2} \tilde{d}_{n, k}^* + \frac{2}{L^*} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \frac{e^{\pi^2 R_2 / (L^{*2} f_k)}}{1 - e^{\pi^2 / (L^{*2} f_k)}} \right) - \sum_{\mathbf{n} \in Y_{k,1}} \tilde{\gamma}_{\mathbf{n}, k} \stackrel{!}{\leq} \frac{\delta_k}{|c_k|}, \end{aligned}$$

wobei  $R_1 \in \mathbb{N}$  und  $R_2 \in \mathbb{N}$  entsprechend groß gewählt sind, garantiert werden. Um (5.11) zu sichern, betrachten wir für  $\mathbf{x} = (\tilde{\mathbf{x}}, x_3) \in [-200, 200]^2 \times [-b_k^*, b_k^*]$  zunächst den Fehler

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \mathbb{Z}^2} e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2 + f_k x_3^2} - \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \mathbb{Z}^2} e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r, k}^* e^{\omega_{r, k}^* x_3} \right| \\ & = \left| \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \mathbb{Z}^2} e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2} \right| \cdot \left| e^{f_k x_3^2} - \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k} \tilde{\rho}_{r, k}^* e^{\omega_{r, k}^* x_3} \right| \\ & \leq \left( \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{d}_{n, k} \right)^2 \cdot \frac{\varepsilon}{|c_k|} \\ & \leq \left( \tilde{d}_{0, k} + 2 \cdot \sum_{n=1}^R \tilde{d}_{n, k} + \frac{2}{L} \sqrt{\frac{\pi}{|f_k|}} \cdot \frac{e^{\pi^2 R / (L^2 f_k)}}{1 - e^{\pi^2 / (L^2 f_k)}} \right)^2 \cdot \frac{\varepsilon}{|c_k|} =: \frac{\varepsilon_1^2 \cdot \varepsilon}{|c_k|}, \end{aligned}$$

wobei wieder  $R \in \mathbb{N}$  hinreichend groß gewählt sei. Für große Indizes  $k$  gilt dabei

$\varepsilon_1 \approx 1$ . Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
 & \left| \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} e^{f_k \|\mathbf{x} + \mathbf{n}L\|^2} - \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} \cdot \mathbf{x}} \right| \\
 & \leq \frac{\varepsilon_1^2 \cdot \varepsilon}{|c_k|} + \left| \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \mathbb{Z}^2} \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \tilde{d}_{n_1, k} \tilde{d}_{n_2, k} \tilde{\rho}_{r, k}^* e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} \cdot \mathbf{x}} - \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} \cdot \mathbf{x}} \right| \\
 & \leq \frac{\varepsilon_1^2 \cdot \varepsilon}{|c_k|} + \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \notin Y_{k,2}} \tilde{d}_{n_1, k} \tilde{d}_{n_2, k} \tilde{\rho}_{r, k}^* \\
 & = \frac{\varepsilon_1^2 \cdot \varepsilon}{|c_k|} + \left( \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{d}_{n, k} \right)^2 \left( \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \tilde{\rho}_{r, k}^* \right) - \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} \\
 & \leq \frac{\varepsilon_1^2 \cdot \varepsilon}{|c_k|} + \underbrace{\varepsilon_1^2 \left( \sum_{r=1}^{\tilde{N}_k^*} \tilde{\rho}_{r, k}^* \right)}_{\approx 1} - \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \tilde{\zeta}_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k} \stackrel{!}{\leq} \frac{\delta_k}{|c_k|}.
 \end{aligned}$$

Dabei wird ausgenutzt, dass  $i\omega_{\tilde{\mathbf{n}}, r, k}^* \in \mathbb{R}^3$  und  $\tilde{d}_{n, k}, \tilde{\rho}_{r, k}^* \in \mathbb{R}_+$  gilt.

### 5.2.2 Berechnung der Energie

Definieren wir die Energie aus Gleichung (5.1) als den Grenzwert

$$E := \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{\substack{i, j=1 \\ 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\| \leq m}}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|},$$

so gilt, falls dieser Grenzwert existiert und die Approximation (5.9) gut genug ist, dass

$$\begin{aligned}
 E & \approx \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2} \\
 & = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=1}^M c_k e^{f_k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j + \mathbf{n}L\|^2} - \sum_{j=1}^N q_j^2 \sum_{k=1}^M c_k,
 \end{aligned}$$

falls alle Abstände größer oder gleich 1 sind. Für die Approximation der Energie sei nun wieder ein Splitting-Parameter  $M_1 \geq M_0^*$  sowie ein Nahfeld-Parameter  $M_2 \geq M_1$  gegeben. Wir unterteilen nun für ein  $k$  das Gebiet  $[-100, 100]^3$  in Quader der Größe

$200 \times 200 \times t_k^*$ . Für  $k = 1, \dots, M_0^*$  ist keine derartige Unterteilung nötig, da  $b_k^* = 200$ . Wir bezeichnen die Quader mit  $I_{s,k}$ , wobei  $s = 1, \dots, A_k^*$ . Damit ist für ein  $\mathbf{x}_j \in I_{s,k}$

$$\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N q_i e^{f_k \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i + \mathbf{n}L\|^2} \approx \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{\mathbf{x}_i \in J_{s,k}} q_i e^{f_k \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i + \mathbf{n}L\|^2},$$

wobei wieder die Nachbarschaft der Box  $I_{s,k}$  durch  $J_{s,k} := I_{s-1,k} \cup I_{s,k} \cup I_{s+1,k}$  gegeben ist und  $I_{0,k} = I_{A_k^*+1,k} := \emptyset$  gesetzt wird.

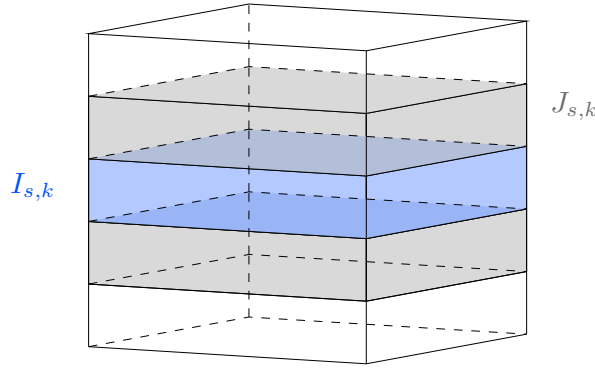


Abbildung 5.3: Beispiel für eine Unterteilung des Würfels  $[-100, 100]^3$ , wobei für eine Box  $I_{s,k}$  (blau) auch  $J_{s,k}$  (grau) gekennzeichnet ist

Definieren wir für jede Box  $I_{s,k}$  die Summe

$$\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s := \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{s,k}} q_j e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} \cdot \mathbf{x}_j}$$

und den Energiebeitrag

$$E_{s,k} := c_k \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{s,k}} q_j \left( \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2 \times \{0\}} \sum_{i=1}^N q_i e^{f_k \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i + \mathbf{n}L\|^2} \right),$$

so erhalten wir

$$E_{s,k} \approx \sum_{(\tilde{\mathbf{n}},r) \in Y_{k,2}} \zeta_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} \sigma_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s \cdot \overline{\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s},$$

wobei  $\sigma_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s := \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^{s-1} + \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s + \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^{s+1}$ .

Wir setzen wieder

$$E_1 := \sum_{k=1}^{M_0^*} \sum_{s=1}^{A_k^*} E_{s,k} = \sum_{k=1}^{M_0^*} E_{1,k}$$

und verwenden dann für  $k = M_0^* + 1, \dots, M_1$  die  $L^*$ -Periodisierungen der Gauß-Funktionen in  $x_3$ -Richtung zur Approximation der Energiebeiträge, d.h. wir setzen

$$\begin{aligned} E_2 &:= \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \mathbb{Z}^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} c_k e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2 + f_k(\mathbf{x}_{i,3} - \mathbf{x}_{j,3})^2} \\ &\approx \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} c_k e^{f_k \|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j + \tilde{\mathbf{n}}L\|^2 + f_k(\mathbf{x}_{i,3} - \mathbf{x}_{j,3} + n_3 L^*)^2} \\ &\approx \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_{k,1}} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2, \end{aligned}$$

wobei jeweils  $\hat{q}_{\mathbf{n}} := \sum_{j=1}^N q_j e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_j}$  gesetzt wird. Diese Summen können wieder mit der adjungierten NFFT 2.2 für  $d = 3$  berechnet werden. Für  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  verwenden wir wieder die anharmonischen Approximationen und setzen dementsprechend

$$E_3 := \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s=1}^{A_k^*} E_{s,k}.$$

Bei der Berechnung der Energien  $E_1$  und  $E_3$  müssen die Summen  $\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s$  ausgewertet werden. Diese können nicht mit der adjungierten NFFT für  $d = 3$  berechnet werden. Mit der Umformung

$$\begin{aligned} \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s &= \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{s,k}} q_j e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} \cdot \mathbf{x}_j} \\ &= \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{s,k}} q_j e^{\omega_{r,k}^* \cdot \mathbf{x}_{j,3}} e^{2\pi i \tilde{\mathbf{n}} \cdot \tilde{\mathbf{x}}/L} \\ &=: \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{s,k}} \tilde{q}_{j,r,k} e^{2\pi i \tilde{\mathbf{n}} \cdot \tilde{\mathbf{x}}/L} \end{aligned}$$

wird jedoch deutlich, dass für deren Berechnung die adjungierte NFFT für  $d = 2$  verwendet werden kann. Dafür müssen für festes  $k$  nur die Koeffizienten  $\tilde{q}_{j,r,k} := q_j e^{\omega_{r,k}^* \cdot \mathbf{x}_{j,3}}$  für alle  $j = 1, \dots, N$  und  $r = 1, \dots, \tilde{N}_k^*$  (klein) vorberechnet werden.

Die Nahfeldkorrektur wird wie in Kapitel 4 mithilfe von stückweise linearer Approximationen der Summen von Gauß-Funktionen durchgeführt. Die Approximation der Energie  $E$  kann also mit dem nachstehenden Algorithmus erfolgen.

**Algorithmus 5.1.**

Gegeben seien die Teilchenpositionen  $\mathbf{x}_j \in [-100, 100]^3$  und die zugehörigen Ladungen  $q_j, j = 1, \dots, N$ , der Splitting-Parameter  $M_1 \geq M_0^*$  sowie der Nahfeld-Parameter  $M_2 \geq M_1$ , wobei die Approximation (5.9) mit gewissen Größen  $l$  und  $M$  zugrunde liegt. Sowohl die benötigten Koeffizienten für die Fourier-Reihen ( $\psi_{\mathbf{n}}, \gamma_{\mathbf{n},k}, \omega_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}$  und  $\zeta_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}$ ) als auch die Interpolationsdaten seien vorberechnet.

- Vorberechnungen: Im Vorfeld wird für jedes  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  die Einteilung der Teilchen in die Boxen  $I_{s,k}$  abgespeichert.

1. Approximation mittels anharmonischen Fourier-Reihen (global):

Für  $k = 1, \dots, M_0^*$  berechne

$$\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^1 = \sum_{j=1}^N \tilde{q}_{j,r,k} e^{2\pi i \tilde{\mathbf{n}} \cdot \tilde{\mathbf{x}}/L} \quad \text{für alle } (\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}$$

mit der adjungierten NFFT (vgl. Algorithmus 2.2 für  $d = 2$ ) und setze

$$E_1 = \sum_{k=1}^{M_0^*} \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \zeta_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} |\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^1|^2.$$

2. Approximation mittels Fourier-Reihen: Berechne

$$\hat{q}_{\mathbf{n}} = \sum_{j=1}^N q_j e^{\psi_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{für alle } \mathbf{n} \in Y_{M_1,1}$$

mit der adjungierten NFFT (vgl. Algorithmus 2.2 für die Punkte  $\tilde{\mathbf{x}}_j = (\frac{x_{j,1}}{L}, \frac{x_{j,2}}{L}, \frac{x_{j,3}}{L^*})$ ) und berechne

$$E_2 = \sum_{k=M_0^*+1}^{M_1} \sum_{\mathbf{n} \in Y_{k,1}} \gamma_{\mathbf{n},k} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{n} \in Y_{M_1,1}} \underbrace{\left( \sum_{\substack{k=M_0^*+1 \\ \mathbf{n} \in Y_{k,1}}}^{\tilde{M}} \gamma_{\mathbf{n},k} \right)}_{\text{vorberechnet}} |\hat{q}_{\mathbf{n}}|^2.$$

3. Approximation mittels anharmonischen Fourier-Reihen (lokal):

Für  $k = M_1 + 1, \dots, M_2$  berechne

$$\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s = \sum_{\mathbf{x}_j \in I_{s,k}} q_j e^{\omega_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} \cdot \mathbf{x}_j} \quad \text{und} \quad E_{s,k} = \sum_{(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}} \zeta_{\tilde{\mathbf{n}},r,k} \sigma_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s \cdot \overline{\hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s},$$

wobei  $\sigma_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s = \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^{s-1} + \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^s + \hat{q}_{\tilde{\mathbf{n}},r,k}^{s+1}$  für alle  $(\tilde{\mathbf{n}}, r) \in Y_{k,2}$  und  $s = 1, \dots, A_k^*$ .  
Setze

$$E_3 = \sum_{k=M_1+1}^{M_2} \sum_{s=1}^{A_k^*} E_{s,k}.$$

4. Setze

$$\tilde{E} = E_1 + E_2 + E_3 - \sum_{j=1}^N q_j^2 \sum_{k=1}^{M_2} c_k.$$

5. Nahfeldkorrektur: Bestimme die Menge

$$R_{M_2} = \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) : 0 < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq t_{M_2+1}^*\},$$

wobei  $\mathbf{x}_i \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^3$  und  $\mathbf{x}_j \in [-\frac{L}{2} - t_{M_2+1}^*, \frac{L}{2} + t_{M_2+1}^*]^2 \times [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$  und berechne die Gesamtenergie durch

$$E \approx \tilde{E} := \tilde{E} + \sum_{(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in R_{M_2}} q_i q_j \left( \frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} - \tilde{F}(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) \right),$$

wobei die stückweise lineare Interpolation  $\tilde{F}$  wie in (3.38) definiert ist.

Ausgehend von diesem Verfahren zur Berechnung der Energie kann analog zu den Algorithmen 3.4 und 4.2 auch hier eine Methode zur schnellen Neuberechnung der Energie bei Änderung einer Teilchenposition abgeleitet werden.

## 6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir uns mit der Berechnung der potentiellen elektrostatischen Energie von geladenen Partikelsystemen beschäftigt. Dabei haben wir für den Fall mit dreidimensionalen periodischen Randbedingungen zunächst die bekannte Ewald-Methode unter Verwendung zweier verschiedener Konvergenzfaktoren hergeleitet. Die zu berechnenden Fourier-Summen können dabei schnell mithilfe der adjungierten NFFT (Algorithmus 2.2) ausgewertet werden.

In Abschnitt 3.3 haben wir dann ein alternatives Verfahren zur Berechnung dieser Energie hergeleitet. Dabei wird wie in [19] eine Approximation der Funktion  $\frac{1}{x}$  durch eine Summe von Gauß-Funktionen genutzt. Durch die Periodisierung der Gauß-Funktionen haben wir dabei die Einhaltung der periodischen Randbedingungen realisiert. Für die Berechnung der Teilchenwechselwirkungen werden die Fourier-Reihen der periodisierten Gauß-Funktionen sowie die adjungierte NFFT verwendet. Für die schmalen Gauß-Funktionen haben wir alternativ an der Verwendung von anharmonischen Fourier-Reihen wie in [19] festgehalten.

Vorteil der anharmonischen Approximationen ist, dass die entsprechenden auszuwertenden Summen deutlich kürzer sind. Nachteil ist hingegen die erforderliche Aufteilung der Teilchen in Boxen, womit der rechnerische Aufwand nicht mehr nur von der Länge der zu berechnenden Summen, sondern auch von der schnell anwachsenden Anzahl der Boxen, abhängig ist.

Einige Tests des in MATLAB implementierten Algorithmus' zeigten, dass die Verwendung der periodisierten Gauß-Funktionen hinsichtlich der Rechenzeit günstiger ist als die anharmonische Variante. Diese Aussage trifft jedoch zunächst nur auf unsere derzeitige Implementierung zu. Wohingegen beispielsweise die in C realisierte adjungierte NFFT aus [13] verwendet wird, haben wir für alle anderen Berechnungen einfache Implementierungen in MATLAB genutzt, was einen Vergleich der entsprechenden Rechenzeiten nur eingeschränkt zulässt.

Im Vergleich mit der schnellen Ewald-Methode (Algorithmus 3.1) haben wir gesehen, dass wir mit Algorithmus 3.3 richtige Ergebnisse erhalten. In Beispiel 3.13 haben wir, basierend auf den Fehlerabschätzungen aus [15], die beiden Methoden hinsichtlich ihrer Effizienz verglichen. Dabei haben wir gesehen, dass durch die schnelle Ewald-Methode mit deutlich weniger arithmetischen Operationen Ergebnisse mit vergleichbarem Gesamtfehler erhalten werden.

Eine Erklärung dafür ist die sehr langsame Konvergenz der zu berechnenden un-

endlichen Summe, wodurch das Abschneiden der Reihe im Zeitbereich große Fehler verursachen kann. Wohingegen wir bei der Methode mithilfe der Gauß-Funktionen genau dies tun, wird bei der Ewald-Methode erst im Frequenzbereich abgeschnitten und damit eine genauere Approximation im Bildbereich erzielt.

In Abschnitt 3.3 haben wir weiterhin aus Algorithmus 3.3 ein Verfahren zur Neuberechnung der Energie bei Veränderung einer Teilchenposition hergeleitet. Dabei werden die bei der Approximation der Energie durch Algorithmus 3.3 berechneten Daten wieder verwendet. Der resultierende Algorithmus ist dabei für fest gewählte Splitting- und Nahfeldparameter nur in den Berechnungen im Nahfeld von der Teilchenanzahl  $N$  abhängig.

Analog zu Algorithmus 3.3 sind die hinsichtlich des Rechenaufwandes optimal zu wählenden Parameter von der Anzahl der Partikel abhängig. Mittels einer Abschätzung der benötigten Rechenoperationen haben wir gezeigt, dass hierbei die Verwendung von anharmonischen Fourier-Reihen erst für große Splitting-Parameter  $M_1$  hinsichtlich der benötigten Rechenoperationen besser ist. Dies haben wir durch entsprechende Tests des in MATLAB implementierten Algorithmus' bestätigt.

Die Aufgabe der Energieberechnung unter offenen Randbedingungen haben wir dann in Kapitel 4 aufgegriffen. Analog zum periodischen Fall nutzen wir dabei wieder eine Approximation mit Gauß-Funktionen. In [19] wurden ausschließlich anharmonische Fourier-Reihen für deren Approximation verwendet. In der vorliegenden Arbeit haben wir für die schmalen Gauß-Funktionen alternativ Approximationen durch Fourier-Reihen genutzt, wobei wir dafür die Gauß-Funktionen über einem hinreichend großen Intervall periodisiert haben um die nichtperiodischen Randbedingungen einzuhalten. Für die Berechnung der Fourier-Summen haben wir dabei wieder die adjungierte NF-FT benutzt. Dementsprechend haben wir auch das Verfahren zur Neuberechnung der Energie aus [19] angepasst.

Die Ergebnisse der Tests dieser beiden Algorithmen fallen ähnlich zu denen im periodischen Fall aus. Die Benutzung der periodisierten Gauß-Funktionen liefert im Allgemeinen die besseren Rechenzeiten, bei der Neuberechnung der Energie zumindest bis zu einem bestimmten Splitting-Parameter  $M_1$ . Gegenüber [19] konnten also deutliche Verbesserungen hinsichtlich der erzielten Rechenzeiten festgestellt werden.

In Kapitel 5 haben wir uns mit der Berechnung der Energie unter gemischten Randbedingungen beschäftigt. Für den Fall von periodischen Randbedingungen in zwei Koordinatenrichtungen haben wir zunächst die Ewald-Summation betrachtet und die dafür bekannten Formeln, aus denen sich nicht ohne Weiteres ein schneller Algorithmus ableiten lässt, mithilfe eines Konvergenzfaktors hergeleitet.

Weiterhin haben wir uns davon überzeugt, dass aus den in Abschnitt 3.3 und Kapitel 4 vorgestellten Verfahren für das periodische und das nichtperiodische Problem



---

leicht ein Algorithmus zur Berechnung der Energie unter gemischten Randbedingung abgeleitet werden kann. Dabei haben wir ebenfalls den Fall für periodische Randbedingungen in zwei Koordinatenrichtungen genauer betrachtet und einen entsprechenden Algorithmus formuliert. Für das analoge Problem mit periodischen Randbedingungen in nur eine Koordinatenrichtung kann analog vorgegangen werden.

Ziel zukünftiger Arbeiten könnte es sein, durch eine Implementierung der Algorithmen für gemischte Randbedingungen zu untersuchen, inwiefern diese mit anderen bereits existierenden Verfahren konkurrenzfähig sind. Bei neuen Implementierungen der Algorithmen 3.3 und 4.1 könnte zudem über eine Parallelisierung der Berechnungen im anharmonischen Fall nachgedacht werden. Ebenso ist dabei der Einsatz der NNFFT (schnelle Fourier-Transformation für nichtäquidistante Daten im Zeit- und Frequenzbereich) möglich.



## Literaturverzeichnis

- [1] A. Arnold and C. Holm. MMM2D: A fast and accurate summation method for electrostatic interactions in 2D slab geometries. *Comput. Phys. Commun.*, 148(3):327–348, 2002.
- [2] S. W. de Leeuw, J. W. Perram, and E. R. Smith. Simulation of electrostatic systems in periodic boundary conditions. I. lattice sums and dielectric constants. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 373:27–56, 1980.
- [3] M. Deserno and C. Holm. How to mesh up Ewald sums (I): A theoretical and numerical comparison of various particle mesh routines. *J. Chem. Phys.*, 109:7678–7693, 1998.
- [4] P.P. Ewald. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale. *Ann. Phys.*, 369(3):253–287, 1921.
- [5] D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, second edition, 2002.
- [6] C. Gasquet and P. Witomski. *Fourier Analysis and Applications: Filtering, Numerical Computation, Wavelets*. Texts in Applied Mathematics 30. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [7] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, 73:325–348, 1987.
- [8] L. Greengard and X. Sun. A new version of the fast Gauss transform. *Doc. Math. J. DMV*, 1998.
- [9] W. Hackbusch. Entwicklung nach Exponentialsummen. Technical Report 4, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften Leipzig, 2005.
- [10] R.W. Hockney and J.W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. Taylor & Francis, 1988.
- [11] K.B. Howell. *Principles of Fourier Analysis*. Studies in Advanced Mathematics. Chapman & Hall/CRC, 2001.

- [12] I. Kabadshow and H. Dachsel. The Error-Controlled Fast Multipole Method for Open and Periodic Boundary Conditions. In G. Sutmann, P. Gibbon, and T. Lippert, editors, *Fast Methods for Long-Range Interactions in Complex Systems*, IAS-Series, pages 85 – 113, Jülich, 2011. Forschungszentrum Jülich.
- [13] J. Keiner, S. Kunis, and D. Potts. NFFT 3.0, C subroutine library. <http://www.tu-chemnitz.de/~potts/nfft>.
- [14] J. Keiner, S. Kunis, and D. Potts. Using NFFT 3 - a software library for various nonequispaced fast Fourier transforms. *ACM Trans. Math. Software*, 36(Article 19):1–30, 2009.
- [15] J. Kolafa and J.W. Perram. Cutoff errors in the Ewald summation formulae for point charge systems. *Molecular Simulation*, 9(5):351–368, 1992.
- [16] H. Lee and W.Cai. Ewald Summation for Coulomb Interactions in a Periodic Supercell. *Department of Mechanical Engineering, Stanford University*, 2009.
- [17] D. Lindbo and A.-K. Tornberg. Fast and spectrally accurate Ewald summation for 2-periodic electrostatic systems. *J. Chem. Phys.*, 136(16):164111, 2012.
- [18] D.G. Manolakis, V.K. Ingle, and S.M. Kogon. *Statistical and Adaptive Signal Processing*. McGraw-Hill, 10 January 1973.
- [19] F. Nestler. Approximative Partikelsimulation mittels Gauß-Funktionen basierend auf anharmonischen Fourier-Reihen. Semesterarbeit, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Februar 2012.
- [20] M. Pippig and D. Potts. Particle simulation based on nonequispaced fast Fourier transforms. In G. Sutmann, P. Gibbon, and T. Lippert, editors, *Fast Methods for Long-Range Interactions in Complex Systems*, pages 131–158. 2010.
- [21] R. Roy and T. Kailath. ESPRIT - Estimation of Signal Parameters via Rotational Invariance Techniques. *Acoustics, Speech and Signal Processing, IEEE Transactions*, 37(7):984 – 995, 1989.
- [22] E. Stade. *Fourier Analysis*. Wiley-Interscience, 2005.

## **Selbstständigkeitserklärung**

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, nicht anderweitig zu Prüfungszwecken vorgelegt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Sämtliche wissentlich verwendete Textausschnitte, Zitate oder Inhalte anderer Verfasser wurden ausdrücklich als solche gekennzeichnet.

Chemnitz, den 10. September 2012

---

Franziska Nestler