

# 卷积位势的快速算法<sup>\*1)</sup>

张 勇<sup>2)</sup>

(天津大学应用数学中心, 天津 300072)

## 摘 要

卷积位势广泛存在于科学和工程领域, 它的高效高精度计算往往是数值仿真的瓶颈. 卷积位势是典型的非局部积分, 卷积核函数通常在原点或者无穷远处具有奇异性, 密度函数是光滑速降函数并可能具有较强的各向异性. 无论是从卷积还是从傅里叶积分出发, 我们首先将全空间截断到有界矩形区域并将其等距离散, 再应用傅里叶谱方法来高精度逼近密度函数. 理想的求解器需要在保证高精度的同时, 尽可能提高计算效率, 并妥善处理各向异性密度函数的情形. 本文详细回顾了目前流行的三类基于积分方程的高精度快速算法, 包括基于非均匀快速傅里叶变换的算法、基于高斯和的算法与核截断算法. 它们都能达到谱精度, 计算效率都类似于离散快速傅里叶变换 (FFT), 并都能处理各向异性的密度函数. 这三类算法具有离散卷积结构; 一旦生成了离散变量, 位势的计算将转化为两倍长度向量的傅里叶变换, 计算效率达到了近似最优, 且与各向异性强度无关. 最后我们介绍了误差估计的已有结果, 并用实例从精度、效率和各向异性等方面展示了算法能力.

**关键词:** 卷积型位势; 奇异积分; 各向异性; 光滑速降密度; 离散卷积; 傅里叶谱方法.

**MR (2010) 主题分类:** 68Q25, 68R10, 68U05.

## 1. 引 言

卷积位势广泛存在于科学和工程领域, 例如天体力学中的万有引力位势、电磁学中的库仑位势、量子物理和量子化学中的偶极位势<sup>[28, 48, 49]</sup>, 以及半导体物理中的电场等. 本文所关注的卷积型位势是由如下公式给出

$$\Phi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y})\rho(\mathbf{y})d\mathbf{y} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{U}(\mathbf{k})\widehat{\rho}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}d\mathbf{k}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (1.1)$$

其中  $d$  是空间维数, 核函数  $U(\mathbf{x})$  代表基本相互作用, 它通常在原点有奇异性; 密度函数  $\rho(\mathbf{x})$  是光滑速降函数,  $\widehat{f}(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}d\mathbf{x}$  表示函数  $f(\mathbf{x})$  的傅里叶变换. 常见的泊松位势对

\* 2023 年 9 月 30 日收到.

<sup>1)</sup> 基金项目: 国家自然科学基金 (12271400) 和天津市科技局 (22ZYJJJC00020) 资助.

<sup>2)</sup> 作者简介: 张勇教授 2007 年本科毕业于天津大学, 2012 年在清华大学获得博士学位. 他先后在奥地利维也纳大学的 Wolfgang Pauli 研究所, 法国雷恩一大和美国纽约大学克朗所从事博士后研究工作. 2015 年 7 月获得奥地利自然科学基金委支持的薛定谔基金, 2018 年入选国家海外高层次人才计划. 研究兴趣主要是偏微分方程的数值计算和分析工作, 尤其是快速算法的设计和应用. 迄今发表多篇学术论文, 主要发表在包括 SIAM Journal on Scientific Computing, SIAM Journal on Applied Mathematics, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, Journal of Computational Physics, Mathematics of Computation, Computer Physics Communication 等杂志.

应于如下的核函数

$$U(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{x}|, & d = 2, \\ \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x}|}, & d = 3. \end{cases} \quad (1.2)$$

它们的傅里叶变换相同且均为  $\hat{U}(\mathbf{k}) = |\mathbf{k}|^{-2}$ . 不难发现, 核函数的奇性并没有在傅里叶空间消失, 某些情况下奇性反倒变得更强, 以至于其傅里叶积分都无法定义. 这就是卷积位势的第一个挑战: 奇异性. 无论是卷积还是傅里叶积分, 对奇异点的直接忽略或者“有限化”处理都会导致严重的精度损失<sup>[16]</sup>, 因此需要充分考虑奇异点的处理才能保证高精度.

位势计算的第二个挑战是: 非局部性, 即位势在一点的值依赖于密度函数的全局信息. 如卷积公式 (1.1) 所示, 位势在  $\mathbf{x}$  处的值  $\Phi(\mathbf{x})$  是一个定义在全空间上的积分且被积函数涉及到密度函数  $\rho(\mathbf{x})$  和卷积核函数  $U(\mathbf{x})$  的所有非零值 (即全局信息). 所谓的非局部性是指位势的计算至少需要遍历目标点的某个邻域, 甚至是全部区域, 而非仅涉及目标点处的信息. 我们知道, 直接离散积分得到的数值格式, 其计算复杂度过高, 往往无法有效应用到高维卷积问题中, 因此迫切需要设计快速算法.

第三个挑战来自于密度函数的强各向异性. 在某些问题中, 密度函数的紧致支撑集在一个或两个空间方向的延展长度远小于其他方向, 但卷积位势基本上是各向同性的衰减, 或者说卷积的各向异性强度远不及密度函数<sup>[28]</sup>. 如何在类似“雪茄状”和“盘饼状”的区域上计算卷积是第三个挑战.

**注 1.1.** 实际上, 非局部性质广泛存在于科学和工程领域, 比如杜强<sup>[11]</sup>、张继伟等<sup>[45]</sup>所专注的非局部问题和蒋世东<sup>[18, 25]</sup>在处理边界积分时所涉及到的单层、双层势等. 需要特别说明的是, 本文所关注的非局部位势是由卷积给出, 其核函数非零且位势计算需要遍历密度函数的所有信息 (即全局信息).

由于密度函数具有快速衰减性质, 我们首先将全空间截断为有界区域并记为  $\Omega$ , 此区域也是位势的求解区域. 鉴于密度是光滑速降函数, 我们选择在矩形区域上应用傅里叶谱方法, 可在均匀离散格点上实现对密度函数的谱精度逼近, 使用双精度进行计算时, 数值解可以达到  $10^{-16}$ – $10^{-15}$  量级的相对误差<sup>[38]</sup>. 本文不再展开叙述傅里叶谱方法, 详情请读者参考 [38].

卷积位势计算的目标是: 保证高精度的同时尽可能提高计算效率, 并妥善处理具有强各向异性密度函数的情形. 傅里叶谱方法是逼近光滑速降函数的最佳选择, 卷积位势计算的最佳期待是在同样的均匀网格上高效达到谱精度. 截止目前, 主要有两类处理方式, 分别是基于微分方程和积分方程的算法. 在介绍数值方法之前, 我们先陈述下面的重要事实: 位势函数在无穷远处的行为与卷积核函数相似, 即

$$\Phi(\mathbf{x}) \sim \|\rho\|_{L^1} U(\mathbf{x}), \quad |\mathbf{x}| \rightarrow \infty, \quad (1.3)$$

其中  $\|\rho\|_{L^1}$  是密度函数的零阶矩且通常情况非零. 常见的三维库仑位势在无穷远是以多项式速度衰减到零, 即  $\Phi(\mathbf{x}) \sim C\|\rho\|_{L^1} |\mathbf{x}|^{-1}$ ,  $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ .

本文将主要介绍基于积分方程的快速算法. 在此之前, 我们先简要介绍一下基于微分方程算法的研究进展. 当核函数恰好是某类微分方程的格林函数时, 可以考虑从微分方程入手, 通过施加合适的边界条件, 例如人工边界条件<sup>[34]</sup>, 利用差分、有限元或者谱方法求解. 一般来说, 此类方法的主要挑战在于高精度的边界条件不易得到, 而常见的狄利克雷条件或周期边界条件逼近精度有限, 数值解的精度将受制于边界条件的精度. 仍以三维库仑位势为例, 我们可

通过求解三维泊松方程的边值问题来实现, 而通常施加齐次狄利克雷条件, 即  $\Phi(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega$ . 边界条件的精度有限从而导致位势求解也仅有 1-3 位精度<sup>[7, 8, 39]</sup>, 这就是所谓的“精度闭锁”现象<sup>[8]</sup>. 实际上, 进一步观察位势函数在无穷远处的渐近行为 (1.3), 我们会发现对零阶矩为 0 的密度函数来说, 位势在无穷远处衰减速度比核函数要快, 因此有可能通过修正密度函数获得更高的收敛精度, 详细内容请参见 [32]. 需要特别说明的是, 囿于高精度的要求, 针对此类问题的微分方程解法相对较少, 相关研究发展尚不充分. 更重要的是, 并不是所有的卷积位势都可以等价写成微分方程的解, 因此本文将聚焦原始的积分形式, 主要介绍基于积分的快速算法.

为方便后文展开, 我们选取矩形区域  $\mathbf{R}_L := \prod_{j=1}^d [-L, L]$ , 并将其等距离散生成网格  $\mathcal{T}_h := \{(x_1, x_2, \dots, x_d) \mid x_j \in (-N_j/2, \dots, N_j/2 - 1) \Delta \mathbf{x}_j, \Delta \mathbf{x}_j = 2L/N_j\}$ , 网格点总数为  $N = \prod_{j=1}^d N_j$ . 对偶的傅里叶网格为  $\mathcal{T}_k := \{(k_1, k_2, \dots, k_d) \mid k_j \in (-N_j/2, \dots, N_j/2 - 1) \pi/L\}$ . 当密度函数具有较强各向异性时, 我们选取各向异性矩形区域  $\mathbf{R}_{L\gamma} := \prod_{j=1}^d [-L\gamma_j, L\gamma_j]$ , 其中  $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_d)$ ,  $0 < \gamma_j \leq 1$  是各向异性向量. 在实际应用中, 我们通常假设  $\gamma_1 = 1$ , 并定义各向异性强度为  $\gamma_f := \prod_{j=2}^d \gamma_j^{-1}$ .

## 2. 快速算法

本节将回顾性介绍当前较为流行的几种基于积分的快速算法, 主要包括基于非均匀快速傅里叶变换的算法、高斯和算法与核截断算法. 从卷积或者傅里叶积分形式不难看出, 只要对密度函数有高精度的逼近, 位势函数的计算也不会丢失任何有效信息, 我们是有可能实现高精度求解. 主要的难点集中在奇异性的处理, 如何设计出高精度的快速算法是非常有挑战的问题.

### 2.1. 基于非均匀快速傅里叶变换的算法

基于非均匀快速傅里叶变换的算法是第一个高精度的快速卷积算法, 它是由蒋世东、Greengard 和包维柱在 2014 年提出的快速积分算法<sup>[26]</sup>. 该方法从如下傅里叶积分形式出发,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{U}(\mathbf{k}) \hat{\rho}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{k}, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (2.1)$$

我们以三维的库仑位势为例来阐述奇性的处理和高阶格式的构造. 首先, 我们注意到, 在傅里叶空间中, 将笛卡尔坐标系切换到球坐标系  $(|\mathbf{k}|, \phi, \theta)$ , 由坐标变换带来的雅可比行列式绝对值函数, 即  $|\mathbf{k}|^2 \sin(\theta)$ , 刚好可以消去核函数傅里叶变换的奇性, 即  $|\mathbf{k}|^{-2}$ , 此时被积函数  $\hat{\rho}(\mathbf{k}) \sin(\theta) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$  是光滑速降函数, 不再具有奇异性, 具体公式如下:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{k}| \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \hat{\rho}(\mathbf{k}) \sin \theta e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad (2.2)$$

其中  $(|\mathbf{k}|, \theta, \phi)$  分别是半径、立体角和方位角. 由于被积函数具有光滑速降性质, 我们首先将积分区域截断为以原点为球心半径为  $P$  的球形区域, 再将半径、方位角和立体角方向的一维积分格式, 例如半径方向选取高斯公式, 方位角和立体角方向均选择等距的梯形公式, 通过张

量积方式耦合得到如下公式

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{x}_j) &\approx \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^P \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \hat{\rho}(\mathbf{k}) \sin \theta e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_j} d|\mathbf{k}|d\theta d\phi, \\ &\approx \sum_{\mathbf{n}} W_{\mathbf{n}} \hat{\rho}(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}) e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}_j},\end{aligned}\quad (2.3)$$

其中,  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$ ,  $\mathbf{x}_j$  是原欧式空间中矩形区域等距离散的目标点,  $W_{\mathbf{n}}$  为积分权重,  $\mathbf{k}_{\mathbf{n}} = k_{n_1}(\sin \theta_{n_2} \cos \phi_{n_3}, \sin \theta_{n_2} \sin \phi_{n_3}, \cos \theta_{n_2})$  是通过张量积的方式生成的非均匀积分源点, 源点总数与目标点数  $N = N_1 N_2 N_3$  相当.

不难发现, 通过上述公式计算给定目标点的位势需要至少  $N$  个乘法和加法; 遍历指标  $j$  求得所有格点上的位势值需要至少  $N^2$  的计算复杂度, 这就是直接加和算法的计算效率. 很显然, 直接算法是无法适用于高维位势问题的. 实际上, 上述离散加和可以利用非均匀快速傅里叶变换算法, 即 NonUniform Fast Fourier Transform (NUFFT) [12, 17] 来进行快速求解, 计算复杂度可降低至  $O(N \log N)$ , 这就是基于非均匀快速傅里叶变换算法的基本思想. 需要说明的是, 此算法的计算复杂度在渐近意义下类似于离散快速傅里叶变换, 即 discrete Fast Fourier Transform (FFT), 但由于 NUFFT 作为逼近算法其复杂度  $O(N \log N)$  中的系数依赖于空间维数并且可能会比较大, 从而导致高维卷积的计算效率并不十分理想.

此方法目前已经成功应用到多种常见的卷积位势, 例如二维和三维的库仑位势和偶极位势 [7]、低维量子模型中的卷积位势 [8] 和描述浅水波物理的 Davey-Stewartson 中的卷积位势 [39]. 此方法使用范围相对较广, 仅要求卷积核函数傅里叶变换的奇性或低正则性可被雅克比行列式绝对值函数抵消掉.

另一种常见的位势是二维泊松位势, 它的卷积形式对任意密度函数都是良好定义的, 因为核函数  $\ln(|\mathbf{x}|)$  在原点处的奇性是可去的. 但核函数的傅里叶变换  $|\mathbf{k}|^{-2}$  的奇性过强, 以至于傅里叶积分形式 (2.1) 对于一般的密度函数是无法定义, 因此无法直接应用此算法. 一种可行方案是, 对密度进行改造得到修正密度  $\tilde{\rho}(\mathbf{x}) := \rho(\mathbf{x}) - G_1(\mathbf{x})$ , 使得  $\tilde{\rho}(\mathbf{x})$  生成的泊松位势可用良好定义的傅里叶积分来刻画, 再应用 NUFFT 算法; 而辅助函数  $G_1(\mathbf{x})$  所产生的位势可以解析算出来. 当然, 辅助函数有多种选取方式, 这里仅要求它与密度函数具有相同的零阶和一阶矩. 下面我们给出一种选取方式

$$G_1(\mathbf{x}) = \hat{\rho}(\mathbf{0}) G(\mathbf{x}) - (\widehat{\mathbf{x}\rho})(\mathbf{0}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}), \quad G(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{|\mathbf{x}|^2}{2\sigma^2}}. \quad (2.4)$$

修正密度  $\tilde{\rho}(\mathbf{x})$  对应的位势为

$$\Phi_2(\mathbf{x}) = [U * (\rho - G_1)](\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\hat{\rho}(\mathbf{k}) - \widehat{G_1}(\mathbf{k})}{|\mathbf{k}|^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}, \quad (2.5)$$

此时被积函数的奇性是可去的, 可以利用 NUFFT 算法计算, 具体内容请参考 [8].

## 2.2. 基于高斯和的快速算法

为进一步提升计算效率, 我们借鉴了计算物理、化学领域中库仑位势的处理方法 [16], 使用核函数的光滑逼近来避免使用 NUFFT 算法, 并通过引入一个简单的奇异修正积分来达到高精度. 我们仍以三维库仑位势为例说明. 我们首先引入一个简单的坐标变换  $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}L$ , 将密

度函数的计算区域  $\mathbf{R}_L$  放缩为单位矩形  $\mathbf{R}_1$ , 即

$$\tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}) = \rho(\mathbf{x}) \implies \text{supp}(\tilde{\rho}) \subset \mathbf{R}_1. \quad (2.6)$$

此时, 计算区域和位势求解区域都是  $\mathbf{R}_1$ . 为叙述方便起见, 我们在本节中将不再区分  $\tilde{\cdot}$  符号. 在单位矩形  $\mathbf{R}_1$  上, 位势函数可以等价写成如下形式

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{R}^d} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})d\mathbf{y} = \int_{\mathbf{x}+\mathbf{R}_1} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})d\mathbf{y} = \int_{\mathbf{R}_2} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})d\mathbf{y} \\ &= \int_{\mathbf{R}_2} U_{GS}(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})d\mathbf{y} + \int_{\mathbf{R}_2} [U(\mathbf{y}) - U_{GS}(\mathbf{y})]\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})d\mathbf{y}, \\ &:= I_1(\mathbf{x}) + I_2(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}_1, \end{aligned}$$

其中  $I_1(\mathbf{x}) := \int_{\mathbf{R}_2} U_{GS}(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})d\mathbf{y}$  是正则积分,  $I_2(\mathbf{x})$  是奇异修正积分. 径向对称的高斯和函数  $U_{GS}(\mathbf{x}) = U_{GS}(|\mathbf{x}|)$  被用来逼近核函数  $U(\mathbf{x})$ , 它的具体形式如下

$$U_{GS}(\mathbf{y}) = \sum_{q=1}^Q w_q e^{-\tau_q |\mathbf{y}|^2}, \quad (2.7)$$

其中,  $w_q, \tau_q \in \mathbb{C}$  且要求  $\tau_q$  的实部非负以保证高斯函数  $e^{-\tau_q |\mathbf{y}|^2}$  在无穷远处衰减. 高斯和函数在不包含奇异点的区间  $[\delta, 2\sqrt{d}]$  内具有如下性质

$$|U_{GS}(r) - U(r)| \leq \varepsilon, \quad \delta \leq r \leq 2\sqrt{d}, \quad (2.8)$$

其中  $0 < \varepsilon \ll 1$  是逼近精度, 可以取到接近机器精度; 小参数  $\delta \ll 1$  的取值介于  $10^{-4} - 10^{-3}$  之间.

**注 2.1.** 高斯和函数通常用来逼近相对光滑非快速振荡的函数, 也可用来逼近具有奇性或者弱奇性的函数, 例如  $r^{-\alpha}$ , 此时逼近区间不包含奇异点. 由于高斯函数的解析性、可分性等特点, 高斯和函数在快速算法中有很多重要应用 [16, 24, 29], 尤其值得一提的是 Greengard 和蒋世东 [19] 的对偶空间多层核分裂快速算法, 他们充分利用了改进的高斯和算法将计算效率进一步提升. 相关理论分析和具体数值实现, 请参考 [14, 22, 47].

**注 2.2.** 高斯和函数逼近问题也可以等价描述成指数和逼近问题, 后者可以用来加速包括分数阶导数 [27]、空间卷积 [52] 的计算.

在正则积分  $I_1(\mathbf{x})$  中, 看起来我们好像需要在三倍区域  $\mathbf{R}_3 = [-3, 3]^3$  上对密度函数进行傅里叶级数逼近. 实际上, 利用傅里叶级数的可分性和周期性, 我们仅需在两倍区域  $\mathbf{R}_2 = [-2, 2]^3$  上应用傅里叶谱方法 [13], 其具体表达式如下所示

$$\rho(\mathbf{z}) \approx \sum_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \prod_{j=1}^d e^{\frac{i 2\pi k_j}{4}(z_j+2)}, \quad \mathbf{z} \in \mathbf{R}_2. \quad (2.9)$$

我们将上式代入到  $I_1(\mathbf{x})$  中, 可得到

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \left( \sum_{q=1}^Q w_q G_{\mathbf{k}}^q \right) \prod_{j=1}^d e^{\frac{i 2\pi k_j}{4}(x_j+2)}, \\ &:= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}} \prod_{j=1}^d e^{\frac{i 2\pi k_j}{4}(x_j+2)}, \end{aligned}$$

其中,  $G_{\mathbf{k}}^q$  是高斯函数在矩形区域  $\mathbf{R}_2$  上的傅里叶变换

$$G_{\mathbf{k}}^q = \prod_{j=1}^d \int_{-2}^2 e^{-\tau_q y^2} e^{-\frac{i2\pi k_j y}{4}} dy. \quad (2.10)$$

需要指出的是, 上式可用 Faddeeva 函数表示, 具体细节请参考 [15, 21]. 由于高斯函数的可分性, 原来  $d$  维张量 (2.10) 可以被分解为  $d$  个一维向量, 计算效率因此获得了大幅提升. 在实际数值计算时, 计算网格通常固定不变,  $G_{\mathbf{k}}$  也不发生变化; 一旦能预先计算得到张量  $G_{\mathbf{k}}$ , 正则积分  $I_1(\mathbf{x})$  在  $\mathcal{T}_h$  上的数值可在三步内得到: (i) 计算  $\hat{\rho}(\mathbf{k})$ ; (ii) 计算  $\hat{\rho}(\mathbf{k})$  和  $G_{\mathbf{k}}$  的乘积; (iii) 计算  $\hat{\rho}(\mathbf{k}) G_{\mathbf{k}}$  的逆傅里叶变换. 注意到, 正则积分的计算过程中仅需要调用 FFT 并不涉及 NUFFT.

利用高斯和函数的逼近性质 (2.8), 不难证明奇异修正积分  $I_2(\mathbf{x})$  的有效积分区域将限制在  $\mathcal{B}_\delta := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \mid |\mathbf{x}| < \delta\}$  上, 具体原因如下

$$I_2(\mathbf{x}) = \left( \int_{\mathcal{B}_\delta} + \int_{\mathbf{R}_2 \setminus \mathcal{B}_\delta} \right) [U(\mathbf{y}) - U_{GS}(\mathbf{y})] \rho(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2.11)$$

$$:= I_{2,1}(\mathbf{x}) + I_{2,2}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}_1. \quad (2.12)$$

从公式 (2.8) 可知  $|I_{2,2}| \leq C \varepsilon \|\rho\|_\infty$ . 逼近精度  $\varepsilon$  充分小, 所以  $I_{2,2}$  足够小以至于可以忽略不计. 为计算  $I_{2,1}(\mathbf{x})$ , 我们需要在  $\mathbf{x} + \mathcal{B}_\delta$  上逼近密度函数. 因为半径  $\delta$  足够小, 我们选择利用泰勒公式对  $\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  在  $\mathbf{x}$  处进行二阶多项式展开, 再将此多项式回代到积分  $I_{2,1}(\mathbf{x})$  中. 在经过一系列简化后, 可将  $I_{2,1}(\mathbf{x})$  的计算划归为密度的函数值及其拉普拉斯的线性组合, 即  $C_1\rho + C_2\Delta\rho$ , 其中组合系数  $C_1, C_2$  仅依赖于半径  $\delta$  及高斯和逼近 (2.8); 而  $\Delta\rho$  可以通过傅里叶方法在谱空间高效计算得到, 更多的细节请参考文章 [13]. 同样需要指出的是, 奇异修正积分的计算也仅需要调用 FFT.

不同于基于 NUFFT 的算法, 高斯和算法的实现仅需要使用 FFT, 通过引入高斯和逼近和奇异修正积分巧妙地避开了 NUFFT, 将高维卷积的计算效率大幅提升. 在处理各向异性密度函数的情形时, 要求高斯和函数的逼近区间左端点  $\delta$  取得更小一些, 即  $\delta \leq \min_j \{\gamma_j\}_{j=1}^d$ , 由此会带来高斯数目  $Q$  有些许增多; 但考虑到高斯和逼近的利用和处理完全可以放在预计算中进行, 算法的精度和效率实际上并没有任何损失.

### 2.3. 核截断方法

如前所述, 我们是在有界区域  $\Omega$  上计算位势函数, 该区域会包含密度函数的近似紧致支撑, 因此它包含了密度的几乎全部信息. 通过观察卷积公式 (1.1), 我们不难发现, 积分过程仅涉及核函数在有限区域上的信息. 换句话说, 核函数在更远处的值并不影响位势的计算, 因此不妨将核函数进行截断, 例如将其零截断到有界区域. 下面我们仍以三维库仑位势为例说明. 卷积位势可以等价写成如下方式

$$\Phi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.13)$$

$$\approx \int_{\Omega} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int_{\mathbb{R}^d} U_G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (2.14)$$

截断核函数  $U_G(\mathbf{x})$  是原核函数在三维球  $B_G := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid |\mathbf{x}| < G\}$  上的截断, 即

$$U_G(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} \chi_{B_G}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (2.15)$$

其中,  $\chi_{B_G}(\mathbf{x})$  是三维球  $B_G$  上的示性函数, 球半径取为计算区域的直径

$$G = \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega} |\mathbf{x} - \mathbf{y}| = 2\sqrt{d}L.$$

由 Paley-Wiener 定理<sup>[37]</sup> 可知, 截断核函数的傅里叶变换是光滑函数不再奇异, 即  $\widehat{U}_G \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ . 简单计算可知, 三维库仑截断核函数的傅里叶变换为

$$\widehat{U}_G(\mathbf{k}) = \frac{1 - \cos(|\mathbf{k}|G)}{|\mathbf{k}|^2}, \quad \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3. \quad (2.16)$$

此时, 位势可等价写成截断核与密度的卷积, 即

$$\Phi(\mathbf{x}) = [U_G * \rho](\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \widehat{U}_G(\mathbf{k}) \widehat{\rho}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{k}, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (2.17)$$

虽然被积函数不再奇异, 但因零截断会引入额外的空间振荡, 例如公式 (2.16) 中余弦函数  $\cos(|\mathbf{k}|G)$  会随着参数  $G$  的变大而快速振荡, 需要采用较小的步长才能实现高精度. 我们在数值实验中发现, 直接在对偶网格  $\mathcal{T}_k$  上进行梯形公式离散会导致严重的精度丢失, 需要减小对偶网格步长才能实现高精度, 这等价于放大物理空间的计算区域, 最简单的策略是以零延拓方式增大计算区域. 我们将放大倍数称为零延拓因子并记作  $S$ , 它的具体数值 (通常取为整数) 直接影响着算法的精度和效率.

关于最优零延拓因子的讨论最早见于 [23]. 最近, F. Vico 等在 2016 年<sup>[42]</sup> 指出, 采用核截断方法计算三维库仑位势时, 零延拓因子取为  $S = 4$  可保证谱精度, 然而在数值计算中发现三倍零延拓也能保证  $10^{-16}$ - $10^{-15}$  的精度. 实际上, 可以证明最优零延拓因子为  $S_{\text{opt}} = \sqrt{d} + 1$ <sup>[30]</sup>, 即当  $S$  小于  $S_{\text{opt}}$  时会导致精度丢失, 而取大时会降低计算效率. 在实际算法应用中, 我们建议向上取整, 即

$$S_{\text{opt}} = \lceil \sqrt{d} + 1 \rceil. \quad (2.18)$$

具体来说, 对于二维和三维卷积, 最优整数倍延拓因子为  $S_{\text{opt}} = 3$ ; 若考虑半整数倍延拓因子, 二维的最优零延拓因子可取为  $S_{\text{opt}} = 2.5$ . 关于零延拓因子的具体推导过程此文不再展开, 详情可参阅<sup>[30]</sup>.

需要指出的是, 公式 (2.17) 是在均匀网格上用梯形公式离散的, 全部计算过程都可以使用 FFT 加速, 相应的计算复杂度为  $O(N \log N)$ , 效率可以达到近似最优. 核截断方法非常简单, 容易编程实现且可以推广至更一般的卷积. F. Vico 等人<sup>[42]</sup> 给出了常见卷积的核截断方法, 包括泊松、库仑、双调和等位势. 值得一提的是, Wigner-Coulomb 方程中描述非局部量子作用的扭曲卷积<sup>[46]</sup> 也可以用核截断方法处理, 位势函数的谱精度能在相当程度上延缓甚至避免非物理解 (例如非正解) 的出现, 展示了高精度卷积算法的巨大潜在应用价值.

当密度函数具有较强的各向异性时, 我们会很自然地选取各向异性矩形区域  $\Omega = \mathbf{R}_{L\gamma}$  并进行等距离散, 并应用傅里叶方法进行逼近. 此时可以考虑用前述的核截断方法来计算  $\Omega = \mathbf{R}_{L\gamma}$  上的位势, 但研究发现, 为克服截断核函数中的振荡和各向异性带来的挑战, 要求  $j$  方向的最优零延拓因子  $S_j$  取为

$$S_j = 1 + \gamma_j^{-1} \sqrt{1 + \gamma_2^2 + \cdots + \gamma_d^2}, \quad j = 1, \cdots, d, \quad (2.19)$$

而总延拓因子  $\prod_{j=1}^d S_j$  会近似线性地依赖于各向异性强度  $\gamma_f$  [30], 这意味着巨量的内存开销将会导致计算效率低下. 实际上, 2018 年由 Greengard 等提出的各向异性核截断方法 [21] 中, 零延拓因子取成  $S = 2$  即可保证位势的谱精度, 并且此因子跟各向异性强度无关. 相比经典核截断方法, 在计算由各向同性密度产生的三维卷积时, 内存开支降低至经典算法的  $\frac{8}{27} \approx 30\%$ ; 如果考虑各向异性密度情形, 内存开支将降至原来的  $\frac{8}{27} \frac{1}{\gamma_f}$ . 通过观察下式,

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{R}^d} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = \int_{\mathbf{x}+\mathbf{R}_{L\gamma}} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}, \\ &= \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}_{L\gamma}.\end{aligned}\quad (2.20)$$

不难发现, 只要能够得到密度函数在  $\mathbf{R}_{3L\gamma}$  上的傅里叶级数逼近就可以保证位势的精度, 因为对任意的目标点  $\mathbf{x} \in \mathbf{R}_{L\gamma}$  和源项点  $\mathbf{y} \in \mathbf{R}_{2L\gamma}$  来说,  $\mathbf{x}-\mathbf{y} \in \mathbf{R}_{3L\gamma}$  都成立. 乍看起来, 好像需要将密度函数零延拓到三倍大小的区域  $\mathbf{R}_{3L\gamma}$ , 实际上, 利用高维傅里叶级数的可分性和周期延拓性质, 我们完全可以在两倍区域上使用傅里叶谱方法, 即

$$\rho(\mathbf{z}) \approx \sum_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}}, \quad \mathbf{z} \in \mathbf{R}_{2L\gamma}, \quad (2.21)$$

其中  $\mathbf{k} = \frac{\pi}{2L}(\frac{k_1}{\gamma_1}, \dots, \frac{k_d}{\gamma_d})$ ,  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$  是密度函数的傅里叶变换

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{|\mathbf{R}_{2L\gamma}|} \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} \rho(\mathbf{z}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \, d\mathbf{z}, \quad (2.22)$$

其中  $|\mathbf{R}_{2L\gamma}| = (4L)^d \prod_{j=1}^d \gamma_j$  是体积. 傅里叶变换 (2.22) 可以使用梯形公式离散并利用 FFT 加速. 不同于经典核截断方法对核函数的各向同性球形区域截断, 此处零延拓方式充分尊重了密度函数的各向异性几何结构, 所以才有可能做到只需要两倍零延拓, 且延拓倍数与各向异性强度无关.

将两倍区域上的傅里叶级数 (2.21) 代入到卷积公式 (2.20) 中, 我们会得到如下公式

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \approx \sum_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \left( \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} U(\mathbf{y}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \, d\mathbf{y} \right), \\ &:= \sum_{\mathbf{k}} \hat{U}_R(\mathbf{k}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}},\end{aligned}\quad (2.23)$$

其中,  $\hat{U}_R(\mathbf{k})$  是核函数在有界区域上的傅里叶变换, 具体定义如下:

$$\hat{U}_R(\mathbf{k}) := \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} U(\mathbf{y}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \, d\mathbf{y}. \quad (2.24)$$

不同于经典核截断算法, 上述傅里叶变换通常情况下无法得到解析解. 虽然逐点计算 (2.24) 在理论上是有可能的, 但在实际应用中并不十分可行, 原因在于未知量个数通常非常巨大, 以至于我们几乎无法在允许的有限时间内完成计算, 因此公式 (2.24) 的高效高精度计算是本算法最大的挑战. 实际上, 我们可以通过高斯和方法实现高精度快速计算, 具体如下

$$\hat{U}_R(\mathbf{k}) = \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} [U(\mathbf{y}) - U_{GS}(\mathbf{y})] e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \, d\mathbf{y} + \int_{\mathbf{R}_{2L\gamma}} U_{GS}(\mathbf{y}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \, d\mathbf{y}, \quad (2.25)$$

更多细节请读者参考文章 [21].



一旦我们得到了  $\widehat{U}_R(\mathbf{k})$ , 位势的计算只需三步即可完成, 即 (i) 计算密度函数的傅里叶变换  $\widehat{\rho}(\mathbf{k})$ ; (ii) 计算  $\widehat{U}_R(\mathbf{k})$  与  $\widehat{\rho}(\mathbf{k})$  的乘积; (iii) 计算  $\widehat{U}_R(\mathbf{k})\widehat{\rho}(\mathbf{k})$  的逆傅里叶变换得到位势  $\Phi$ .

### 3. 离散卷积

在前文描述的各种卷积快速算法中, 密度函数都是定义在均匀网格  $\mathcal{T}_h$  上, 卷积函数也是在同样的网格上进行求解. 实际上, 我们可将位势看成是离散密度的线性映射. 最早在 2016 年, F. Vico 等在文章 [42] 中指出, 应用核截断方法进行离散, 位势计算可等价地看成是离散密度和某个  $d$  维张量的离散卷积, 此卷积的快速计算可通过两倍长度向量的 FFT 实现 [21, 30, 42], 计算复杂度为  $O(2^d N \log(2^d N))$  且跟各向异性强度无关. 对比核截断算法的  $O(S^d N \log(S^d N))$  ( $S$  是  $d$  维空间中的最优零延拓因子), 计算效率有了大幅提升.

最新研究发现, 对任意的实值核函数来说, 如果在均匀网格离散, 卷积位势均可写成离散密度和实值张量  $T$  的离散卷积 [33], 其中包括有限元等距离散得到的卷积位势函数 [51]. 不同算法间的差别集中体现在张量上, 它的生成方式和过程直接决定了算法的精度和效率.

我们以二维位势举例说明张量的生成和计算, 此处我们考虑用核截断方法计算各向同性密度函数所产生的二维卷积位势. 密度函数的傅里叶变换用梯形公式来近似, 具体如下:

$$\widehat{\rho}(\mathbf{k}_{pq}) \approx \frac{1}{(SN)^2} \sum_{(n', m') \in \mathcal{I}_N} \rho_{n', m'} e^{-\frac{i2\pi}{SN}(pn' + qm')}, \quad (p, q) \in \mathcal{I}_{SN}, \quad (3.1)$$

其中  $\rho_{n', m'} = \rho(x_{n'}, y_{m'})$ , 零延拓因子在空间各个方向都是相同的, 此处的指标集定义如下

$$\mathcal{I}_N := \{(n_1, \dots, n_d) \mid -N_j/2 \leq n_j \leq N_j/2 - 1, j = 1, \dots, d\}. \quad (3.2)$$

将式 (3.1) 代入到卷积公式 (2.23) 中, 在交换求和顺序后, 我们得到

$$\Phi_{n, m} := \sum_{(n', m') \in \mathcal{I}_N} T_{n-n', m-m'} \rho_{n', m'}, \quad (n, m) \in \mathcal{I}_N, \quad (3.3)$$

其中  $T_{n, m}$  是如下定义的二维张量

$$T_{n, m} = \frac{1}{(SN)^2} \sum_{(p, q) \in \mathcal{I}_{SN}} \widehat{U}_G\left(\frac{\pi p}{SL}, \frac{\pi q}{SL}\right) e^{\frac{i2\pi}{SN}(pn + qm)}, \quad (n, m) \in \mathcal{I}_{2N}, \quad (3.4)$$

可以通过对向量  $\{\widehat{U}_G(\mathbf{k})\}$  进行傅里叶逆变换得到. 针对各向异性密度函数的情形, 卷积位势也可写成离散卷积, 对应的张量可用如下公式生成

$$T_{n, m} = \frac{1}{S_1 S_2 N^2} \sum_{p=-S_1 N/2}^{S_1 N/2-1} \sum_{q=-S_2 N/2}^{S_2 N/2-1} \widehat{U}_G\left(\frac{\pi p}{S_1 L \gamma_1}, \frac{\pi q}{S_2 L \gamma_2}\right) e^{i \frac{2\pi}{N} \left( \frac{pn}{S_1} + \frac{qm}{S_2} \right)}. \quad (3.5)$$

不难发现, 张量的指标长度不超过密度函数指标长度的两倍. 在实际计算中, 我们需要显式存储一个长度为  $S^d N$  的长向量并对其进行傅里叶逆变换. 在网格给定的情况下, 张量不再变化, 因此我们可以选择将其留在内存或写入到文件中, 以方便后续的反复调用. 一般情况下, 卷积核是实值对称函数, 其对应的离散张量也是实值对称张量, 即  $T_{n, m} = T_{-n, m}, T_{n, -m} = T_{n, m}$ . 利用此对称性, 我们可以将张量的存储需求进一步降低至原来的 1/4.

前面介绍的 NUFFT 方法、高斯方法和各向异性核截断方法都可以将位势函数写成离散卷积; 在离散张量已经生成的前提下, 所有算法的计算效率都是相同的. 差别在于张量生成

方式是否高效, 内存占用是否巨大, 以及计算过程是否与各向异性强度相关. 详细的算法比较还在总结整理中, 将在后续研究中报告.

#### 4. 误差分析

本文介绍的快速算法基本都可以实现谱精度逼近, 本章我们将以核截断方法为例, 介绍傅里叶谱方法计算位势函数的误差估计. 研究发现, 位势函数的数值解误差主要来源于密度函数的傅里叶谱方法逼近. 本章只陈述定理而不加证明, 具体细节请参考文章 [30]. 为刻画误差, 我们引入如下范数

$$\begin{aligned} \|\Phi - \Phi_N\|_{\infty, \mathbf{R}_L} &:= \|\Phi - \Phi_N\|_{L^\infty(\mathbf{R}_L)} = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}_L} |(\Phi - \Phi_N)(\mathbf{x})|, \\ \|\Phi - \Phi_N\|_{2, \mathbf{R}_L} &:= \|\Phi - \Phi_N\|_{L^2(\mathbf{R}_L)} = \left( \int_{\mathbf{R}_L} |(\Phi - \Phi_N)(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2}, \end{aligned}$$

其中  $\Phi_N(\mathbf{x})$  是对位势函数  $\Phi(\mathbf{x})$  的傅里叶方法逼近,  $N$  是空间各个方向离散点的数目. 需要说明的是, 此处的  $N$  并不是空间离散点的总数目, 而是每个空间方向的离散点个数. 定义如下半范数

$$|\rho|_{m, \mathbf{R}_L} := \left( \sum_{|\alpha|=m} \|\partial^\alpha \rho\|_{2, \mathbf{R}_L}^2 \right)^{1/2},$$

其中多重指标  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{Z}^d$ ,  $|\alpha| = \sum_{i=1}^d \alpha_i$ ,  $\partial^\alpha = \partial_{x_1}^{\alpha_1} \cdots \partial_{x_d}^{\alpha_d}$ . 下文中我们用  $A \lesssim B$  来表示  $A \leq cB$ , 其中常数  $c > 0$  且不依赖于  $N$ .

应用核截断方法计算卷积位势函数, 我们有如下定理刻画误差估计.

**定理 4.1.** 对具有紧致支撑的光滑密度函数  $\rho(\mathbf{x})$ , 假设其紧致支撑包含在计算区域内, 即  $\text{supp}\{\rho\} \subseteq \mathbf{R}_L$ , 则我们可得到关于位势函数的误差估计

$$\begin{aligned} \|\partial^\alpha \Phi - (\partial^\alpha \Phi)_N\|_{\infty, \mathbf{R}_L} &\lesssim N^{-(m-\frac{d}{2}-|\alpha|)} |\rho|_{m, \mathbf{R}_L}, \\ \|\partial^\alpha \Phi - (\partial^\alpha \Phi)_N\|_{2, \mathbf{R}_L} &\lesssim N^{-(m-|\alpha|)} |\rho|_{m, \mathbf{R}_L}, \end{aligned}$$

其中  $m > \frac{d}{2}$ ,  $(\partial^\alpha \Phi)_N = [U * (\partial^\alpha \rho_N)]$  是对位势函数导数  $\partial^\alpha \Phi$  的数值逼近. 当  $\alpha = \mathbf{0}$  时, 我们有如下估计

$$\|\Phi - \Phi_N\|_{\infty, \mathbf{R}_L} \lesssim N^{-(m-\frac{d}{2})} |\rho|_{m, \mathbf{R}_L}, \quad \|\Phi - \Phi_N\|_{2, \mathbf{R}_L} \lesssim N^{-m} |\rho|_{m, \mathbf{R}_L}.$$

**注 4.1.** 当密度是光滑速降函数时, 我们认为它在数值上具有紧致支撑, 仍然可以应用上述定理; 正则性指标  $m$  可以取到任意确定的整数, 所以数值解具有谱精度. 当密度函数具有紧致支撑但仅是有限阶正则性时, 位势数值解仅具有代数阶精度.

为证明定理 4.1, 我们需要用到高维空间中傅里叶谱方法的误差估计, 具体内容请见如下引理.

**引理 4.1.** 周期函数  $u(\mathbf{x}) \in H_p^m(\Omega)$ , 其中  $m > d/2$ , 应用傅里叶谱方法得到的  $u_N(\mathbf{x})$ , 对

原函数有如下的逼近性质

$$\begin{aligned}\|\partial^\alpha(u - u_N)\|_{\infty, \Omega} &\lesssim N^{-(m-\frac{d}{2}-|\alpha|)}|u|_{m, \Omega}, & 0 \leq |\alpha| \leq m, \\ \|\partial^\alpha(u - u_N)\|_{2, \Omega} &\lesssim N^{-(m-|\alpha|)}|u|_{m, \Omega}, & 0 \leq |\alpha| \leq m,\end{aligned}$$

此处  $H_p^m(\Omega)$  是具有  $m$  阶正则性的周期函数空间.

## 5. 数值结果

本章将以核截断方法为例, 分别从精度、效率和各向异性密度情形进行讨论, 此处所展示的数值结果都是在 Matlab (2016a) 中实现的, 操作系统是 Ubuntu GNU/Linux, CPU 型号是 3.00GH Intel(R)Xeon(R)Gold 6248R. 我们统计的是最大值范数意义下的相对误差, 即

$$\mathcal{E} := \frac{\|\Phi - \Phi_h\|_{l^\infty}}{\|\Phi\|_{l^\infty}} = \frac{\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{T}_h} |\Phi(\mathbf{x}) - \Phi_h(\mathbf{x})|}{\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{T}_h} |\Phi(\mathbf{x})|}, \quad (5.1)$$

其中  $\Phi_h$  是定义在均匀网格  $\mathcal{T}_h$  上的数值解,  $\Phi(\mathbf{x})$  是准确解. 下面我们以三维库仑位势为例展示计算结果.

**例 5.1.** 三维库仑位势中的核函数是  $U(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|}$ . 对各向异性的密度函数  $\rho_0(\mathbf{x}) = e^{-(x^2+y^2+z^2/\gamma_3^2)/\sigma^2}$ ,  $\sigma > 0, \gamma_3 \leq 1$ , 我们可以得到三维库仑位势的解析表达式为<sup>[13]</sup>

$$\Phi_0(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{\sigma^3 \sqrt{\pi}}{4|\mathbf{x}|} \text{Erf} \left( \frac{|\mathbf{x}|}{\sigma} \right), & \gamma_3 = 1, \\ \frac{\gamma_3 \sigma^2}{4} \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{x^2+y^2}{\sigma^2(t+1)}} e^{-\frac{z^2}{\sigma^2(t+\gamma_3^2)}}}{(t+1) \sqrt{t+\gamma_3^2}} dt, & \gamma_3 \neq 1, \end{cases} \quad (5.2)$$

其中  $\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$  是误差函数<sup>[2]</sup>. 我们考察下面两种情形

- **情形 I:** 各向异性的密度函数  $\rho(\mathbf{x}) = \rho_0(\mathbf{x})$ , 库仑位势为  $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_0(\mathbf{x})$ .
- **情形 II:** 平移的密度函数  $\rho(\mathbf{x}) = \rho_0(\mathbf{x}) + \rho_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ , 位势为  $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_0(\mathbf{x}) + \Phi_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ .

表 1 的上表中展示了计算情形 I 中各向同性密度函数的结果, 此时  $\gamma_3 = 1, \sigma = \sqrt{1.2}$ ,  $L = 8$ . 下表中展示的是各向异性密度函数的情形, 其中情形 I 中的参数为  $L = 12, \sigma = 2, \mathbf{h} = \frac{1}{2}\gamma$ , 情形 II 的参数为  $L = 16, \sigma = 2, \mathbf{x}_0 = (2, 2, 0), \mathbf{h} = \frac{1}{4}\gamma$ , 此算例中允许将最优零延拓因子取成  $1/2$  的整数倍. 从中我们可以得到如下结论: (i) 两倍零延拓不足以保证计算精度, 四倍零延拓是冗余的, 而三倍零延拓是最优的. (ii) 最优零延拓倍数随着各向异性强度增大而线性增长.

为考察算法效率, 我们在表 2 中展示了核截断算法在带/不带张量加速时的内存开销和计算耗时, 针对的是情形 I 中的各向同性密度函数, 具体的数值参数是  $L = 8, \sigma = \sqrt{1.2}$  和空间步长  $h = 1/16$ . 计算时间分成两部分: 预计算时间, 即生成张量  $T$  或者截断核傅里叶变换  $\hat{U}_G(\mathbf{k})$  的时间, 和算法执行时间, 即后续调用 FFT/iFFT 再加上向量点乘的时间. 我们同时也展示了图 1 中预计算和算法执行的时间随着各向异性强度的变化.

从表 2 可以看出, 对比经典核截断方法中的四倍零延拓, 最优零延拓因子  $S$  的使用大大降低了核截断方法的内存需求和计算开销, 这就意味着, 我们可以考虑在个人笔记本电脑上进

行较大规模的位势求解. 同时也注意到, 一旦在预计算中生成了离散张量, 算法执行部分的耗时与各向异性强度无关, 计算耗时主要集中在两倍长度向量的 FFT/iFFT, 计算效率近乎达到了最优. 当然, 张量生成过程无论如何都需要较大的内存和计算开销, 这也是核截断方法的局限性; 而在高斯和方法和各向异性核截断方法中, 张量的生成过程也可以做到与各向异性强度无关, 内存需求和计算开销相对比较稳定.

表 1 三维库仑位势数值解的误差: 各向同性密度 (上表) 和各向异性密度 (下表)

$h$	2	1	1/2	1/4
$S = 2$	4.2908E-01	1.0283E-01	1.0276E-01	1.0276E-01
$S = 3$	4.2117E-01	2.9848E-03	1.8552E-08	3.7007E-16
$S = 4$	4.2046E-01	2.9596E-03	2.0106E-08	3.7007E-16
$\gamma_3$	1	1/2	1/4	1/8
Case I	3.3307E-16	5.4171E-15	4.8932E-15	3.8102E-15
Case II	5.1902E-16	5.6243E-15	5.3014E-15	4.1688E-15
$S$	(3, 3, 3)	(2.5, 2.5, 4)	(2.5, 2.5, 7)	(2.5, 2.5, 12.5)

表 2 核截断方法在求解各向同性密度产生的三维库仑位势时的数值表现

张量	$S$	预计算		算法执行	
		内存 (Gb)	时间 (秒)	内存 (Gb)	时间 (秒)
使用	3	4.4	59.80	2.3	19.31
	4	9.0	158.58	2.3	19.32
未用	3	3.4	12.53	7.0	61.18
	4	8.0	32.96	16.3	167.00

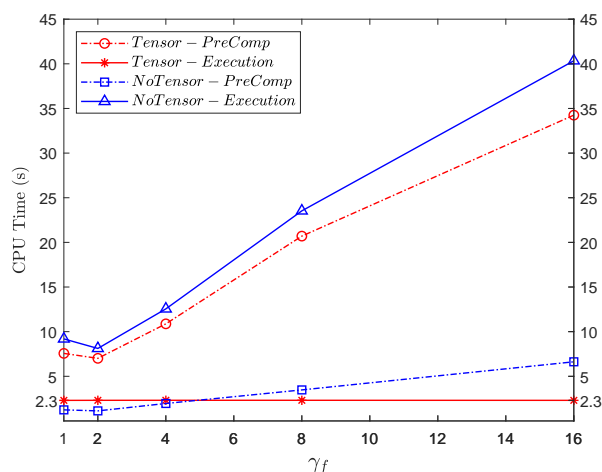


图 1 核截断方法计算耗时与各向异性强度  $\gamma_f$  的关系

值得指出的是, 图 1 中的“张量 - 预计算”曲线在  $\gamma_f = 2$  时达到最小值似乎不太合理, 但考虑到我们在数值算例中允许将零延拓因子取成  $1/2$  的整数倍, 计算耗时在  $\gamma_f = 2$  达到最低也就不奇怪了. 实际上, 总的零延拓因子在  $\gamma_f = 2$  是 25 而在  $\gamma_f = 1$  取值为 27.

## 6. 结论及展望

卷积位势的计算需要克服奇异性、非局部和各向异性密度的困难. 我们选择用傅里叶谱方法来逼近光滑速降的密度函数, 选取各向异性的矩形区域并等距离散为均匀网格. 本文回顾了目前主流的积分求解器, 包括基于非均匀快速傅里叶变换的算法、基于高斯和算法和核截断算法, 并分别从精度、效率和处理各向异性密度的方面分别进行了详细讨论.

此类算法具有离散卷积结构, 利用此结构可以在两倍长度的向量上使用傅里叶变换, 在保持精度的同时计算效率达到最优, 且与各向异性强度无关. 尤其值得一提的是, 核截断算法简单, 容易编程实现, 再配合上最优零延拓因子和离散卷积结构的使用, 此方法将具有极大的应用潜力, 例如在计算偶极玻色 - 爱因斯坦凝聚态的基态解扰动稳定性方程 Bogoliubov-de Gennes 问题中涉及到非局部算子的处理<sup>[40]</sup>等. 考虑到离散张量生成的内存需求和计算开销问题, 核截断方法远非最佳选择, 此时高斯和方法、各向异性核截断方法都有较大的优势. 如何设计原理简单、易编程实现的高精度快速算法是我们一直追寻的目标.

## 参 考 文 献

- [1] Advanpix multiprecision computing toolbox. <https://www.advanpix.com>
- [2] Abramowitz M and Stegun I A. Handbook of Mathematical Functions, Dover, 1965.
- [3] Antoine X, Tang Q and Zhang Y. A Preconditioned Conjugated Gradient Method for computing ground states of rotating dipolar Bose-Einstein condensates via Kernel Truncation Method for Dipole-Dipole Interaction evaluation[J]. Commun. Comput. Phys., 2018, 24(4): 966–988.
- [4] Bao W and Cai Y. Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensations[J]. Kinet. Relat. Mod., 2013, 6: 1–135.
- [5] Bao W, Cai Y and Wang H. Efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates[J]. J. Comput. Phys., 2010, 229: 7874–7892.
- [6] Bao W, Jian H, Mauser N J and Zhang Y. Dimension reduction of the Schrödinger equation with Coulomb and anisotropic confining potentials[J]. SIAM J. Appl. Math., 2013, 73: 2100–2123.
- [7] Bao W, Tang Q and Zhang Y. Accurate and efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates via the nonuniform FFT[J]. Commun. Comput. Phys., 2016, 19(5): 1141–1166.
- [8] Bao W, Jiang S, Tang Q and Zhang Y. Computing the ground state and dynamics of the nonlinear Schrödinger equation with nonlocal interactions via the nonuniform FFT[J]. J. Comput. Phys., 2015, 296: 72–89.
- [9] Beylkin G, Kurcz C and Monzón L. Fast convolution with the free space Helmholtz Green's function[J]. J. Comput. Phys., 2009, 228: 2770–2791.
- [10] Cai Y, Rosenkranz M, Lei Z and Bao W. Mean-field regime of trapped dipolar Bose-Einstein condensates in one and two dimensions[J]. Phys. Rev. A, 2010, 82(4): artical 043623.

- 
- [11] Du Q, Han H, Zhang J and Zheng C. Numerical solution of a two-dimensional nonlocal wave equation on unbounded domains[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2018, 40: A1430–A1445.
- [12] Dutt A and Rokhlin V. Fast Fourier transforms for nonequispaced data[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 1993, 14: 1368–1393.
- [13] Exl L, Mauser N J and Zhang Y. Accurate and efficient computation of nonlocal potentials based on Gaussian-sum approximation[J]. *J. Comput. Phys.*, 2016, 327: 629–642.
- [14] Gao Z, Liang J and Xu Z. A kernel-independent sum-of-exponentials method[J]. *J. Sci. Comput.*, 2022, 93: article 40.
- [15] Gautschi W. Efficient computation of the complex error function[J]. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1970, 7: 187–198.
- [16] Genovese L, Deutsch T, Neelov A, Goedecker S and Beylkin G. Efficient solution of Poisson equation with free boundary conditions[J]. *J. Chem. Phys.*, 2006, 125: article 074105.
- [17] Greengard L and Lee J Y. Accelerating the nonuniform fast Fourier transform[J]. *SIAM Rev.*, 2004, 46: 443–454.
- [18] Greengard L and Jiang S. A new mixed potential representation for unsteady, incompressible flow[J]. *SIAM Rev.*, 2019, 61: 733–755.
- [19] Greengard L and Jiang S. A dual-space multilevel kernel-splitting framework for discrete and continuous convolution. arXiv:2308.00292.
- [20] Greengard L, Jiang S, Rachh M and Wang J. A new version of the adaptive fast Gauss transform for discrete and continuous sources, arXiv:2305.07165.
- [21] Greengard L, Jiang S and Zhang Y. The anisotropic truncated kernel method for convolution with free-space Green’s functions[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2018, 38: A3733–A3754.
- [22] Hackbusch W and Khoromskij B. Low-rank Kronecker-product approximation to multi-dimensional nonlocal operators. Part I. Separable approximation of multi-variate functions[J]. *Computing*, 2006, 76(3): 177–202.
- [23] Jarvis M R, White I D, Godby R W and Payne M C. Supercell technique for total-energy calculations of finite charged and polar systems[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, 56: 14972–14978.
- [24] Jiang S and Greengard L. Approximating the Gaussian as a sum of exponentials and its applications to the fast gauss transform[J]. *Commun. Comput. Phys.*, 2022, 31(1): 1–26.
- [25] Jiang S and Greengard L. Efficient representation of nonreflecting boundary conditions for the time-dependent Schrödinger equation in two dimensions[J]. *Comm. Pure Appl. Math.*, 2008, 62(2): 261–288.
- [26] Jiang S, Greengard L and Bao W. Fast and accurate evaluation of nonlocal Coulomb and dipole-dipole interactions via the nonuniform FFT[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2014, 36: 777–794.
- [27] Jiang S, Zhang J, Zhang Q and Zhang Z. Fast evaluation of the Caputo fractional derivative and its applications to fractional diffusion equations[J]. *Commun. Comput. Phys.*, 2017, 21(3): 650–678.
- [28] Lahaye T, Menotti C, Santos L, Lewenstein M and Pfau T. The physics of dipolar bosonic quantum gases[J]. *Rep. Prog. Phys.*, 2009, 72: 126401.
- [29] Liang J, Xu Z and Zhou Q. Random batch Sum-of-Gaussians method for molecular dynamics simulations of particle systems[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2023, 45: B591–B617.
- [30] Liu X, Tang Q, Zhang S and Zhang Y. On optimal zero-padding of kernel truncation method[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, to appear. arXiv:2209.12180.

- [31] Liu X, Tang Q and Zhang Y. Numerical studies of the quasi-2D dipolar Bose-Einstein Condensates[J]. in preparation.
- [32] Liu X, Tang Q and Zhang Y. A simple high-order differential equation based fast solver for convolution with free-space Green's functions. in preparation.
- [33] Liu X and Zhang Y. A simple spectral algorithm for fast convolution based on kernel's direct smooth approximation. in preparation.
- [34] Mauser N J and Zhang Y. Exact artificial boundary condition for the Poisson equation in the simulation of the 2D Schrödinger-Poisson system[J]. *Commun. Comput. Phys.*, 2014, 16(3): 764–780.
- [35] Ronen S, Bortolotti D C and Bohn J. Bogoliubov modes of a dipolar condensate in a cylindrical trap[J]. *Phys. Rev. A*, 2006, 74: article 012623.
- [36] Rozzi C A, Varsano D, Marini A, Gross E K U and Rubio A. Exact Coulomb cutoff technique for supercell calculations[J]. *Phys. Rev. B*, 2006, 73: article 205119.
- [37] Rudin W. *Functional Analysis*[M]. McGraw-Hill, New York, second ed., 1991.
- [38] Shen J, Tang T and Wang L. *Spectral Methods: Algorithms, Analysis and Applications*[M]. Springer, 2011.
- [39] Stimming H, Mauser N and Zhang Y. A novel nonlocal potential solver based on nonuniform FFT for efficient simulation of the Davey-Stewartson equations[J]. *ESAIM: M2AN*, 2017, 51: 1527–1538.
- [40] Tang Q, Xie M, Zhang Y and Zhang Y. A spectrally accurate numerical method for computing the Bogoliubov-de Gennes excitations of dipolar Bose-Einstein condensates[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2022, 44(1): B100–B121.
- [41] Trefethen L. *Spectral Methods in MATLAB*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.
- [42] Vico F, Greengard L and Ferrando M. Fast convolution with free-space Green's functions[J]. *J. Comput. Phys.*, 2016, 323: 191–203.
- [43] Wang A and Yi S. Trapped Bose-Einstein condensates with quadrupole-quadrupole interaction[J]. *Chin. Phys. B*, 2018, 27(12): article 120307.
- [44] Wang H, Wang J, Zhang S and Zhang Y. Chebyshev-Fourier spectral method for the time-dependent rotating nonlocal Schrödinger equation in polar coordinates. in revision. <http://www.frankyongtju.cn/Publications.html>
- [45] Wang J, Yang Z and Zhang J. Stability and convergence analysis of high-order numerical schemes with DtN-type absorbing boundary conditions for nonlocal wave equations. *IMA J. Numer. Anal.*, drad016, <https://doi.org/10.1093/imanum/drad016>
- [46] Xiong Y, Zhang Y and Shao S. A Characteristic-Spectral-Mixed Scheme for six-dimensional Wigner-Coulomb quantum dynamics[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, to appear. arXiv:2205.02380.
- [47] Xu K and Jiang S. A Bootstrap Method for Sum-of-Poles Approximations[J]. *J. Sci. Comput.*, 2013, 55: 16–39.
- [48] Yi S and You L. Trapped atomic condensates with anisotropic interactions[J]. *Phys. Rev. A*, 2000, 61: article 041604.
- [49] Yi S and You L. Trapped condensates of atoms with dipole interactions[J]. *Phys. Rev. A*, 2001, (63): article 053607.
- [50] Zhang Y. Numerical methods and analysis for the Schrödinger-Poisson equations and their applications. PhD thesis.

- [51] Zhang Y, Zhao Y and Zhou Z. A unified structure preserving scheme for a multi-species model with a gradient flow structure and nonlocal interactions via singular kernels[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2022, 44(1): B100–B121.
- [52] Zhang Y, Zhuang C and Jiang S. Fast one-dimensional convolution with general kernels using sum-of-exponentials approximation[J]. *Commun. Comput. Phys.*, 2021, 29: 1570–1582.

## FAST EVALUATION OF CONVOLUTION-TYPE NONLOCAL POTENTIAL

Zhang Yong

(Center for Applied Mathematics, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

### Abstract

Convolution-type nonlocal potentials are quite common and important in many science and engineering fields. Efficient and accurate evaluations of such potentials often bottleneck the real time simulations. The convolution kernel is usually singular or discontinuous at the origin and/or at the far field. The density is a smooth fast-decaying function, and is naturally well approximated by Fourier spectral method on a bounded rectangular domain, which is uniformly discretized in each spatial direction, with a nearly optimal complexity of  $O(N \log N)$  that is inherited from the discrete Fast Fourier Transform. In some cases, there exists a strong spatial anisotropy in the density. Nonlocality, singularity and anisotropy are three challenges in convolution evaluation. The numerical problem is to compute the convolutions accurately and efficiently on such uniform mesh grid.

In this article, we mainly review the state-of-art fast integral algorithms, including the NonUniform-FFT based method (NUFFT), Gaussian-Sum based method and Kernel Truncation method. All these methods achieve spectral accuracy with a FFT-like complexity  $O(N \log N)$ , and can be rewritten as a discrete convolution structure. The discrete convolution structure helps deal with strong anisotropy perfectly using a pair of FFT and inverse FFT(iFFT) on a twofold zero-padded density. Rigorous error estimates and extensive numerical results are shown to confirm the accuracy, efficiency and anisotropy performance.

**Keywords:** Convolution-type nonlocal potential; Singular integral; Smooth and fast-decaying density; Discrete convolution structure; Fourier spectral method.

**2010 Mathematics Subject Classification:** 68Q25, 68R10, 68U05.