

”PPPM 係数モデル” の数式解説 (“pppm_coeff.f”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは PPPM 法に必要な補間係数を算出する。粒子電荷はメッシュ点へスプライン補間され、その重みは

$$W(\xi) = \sum_{m=0}^p a_m \xi^m \quad (1)$$

の多項式で与えられる。補間誤差は

$$\epsilon_{\text{interp}} = \left| \rho(\mathbf{r}) - \sum_{\mathbf{G}} W(\mathbf{r} - \mathbf{G}) \rho_{\mathbf{G}} \right| \quad (2)$$

で評価され、次数 p と格子幅の調整によって所望の精度が得られる。