

## ”エwald係数モデル”の数式解説 (“ewald\_coeff.f”)

Open DEM Japan

2025年10月12日

本プログラムはエwald和法に用いる分割係数を算出する。クーロン相互作用を実空間と逆格子空間に分割するため、減衰係数  $\alpha$  を用いた分割

$$\frac{1}{r} = \frac{\operatorname{erfc}(\alpha r)}{r} + \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\exp(-k^2/4\alpha^2)}{k^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (1)$$

を採用する。誤差評価は

$$\epsilon = \max(\epsilon_{\text{real}}, \epsilon_{\text{recip}}) \quad (2)$$

で定義され、各項は切断距離と格子幅から見積もられる。所望の精度を満たす  $\alpha$  が反復計算によって求められ、以後のエネルギー評価に供される。