

”ペア相互作用エネルギー”の数式解説 (compute_pair.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

粒子系におけるペア相互作用エネルギーは、粒子 i と j ($i \neq j$) の間で定義されるポテンシャル U_{ij} を用いて

$$E_{\text{pair}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N U_{ij}, \quad (1)$$

と表される。

一般的な分子シミュレーションでは、 U_{ij} はファンデルワールス相互作用 U_{ij}^{vdw} とクーロン相互作用 U_{ij}^{coul} に分割できる。したがって

$$U_{ij} = U_{ij}^{\text{vdw}} + U_{ij}^{\text{coul}}, \quad E_{\text{pair}} = E_{\text{vdw}} + E_{\text{coul}}, \quad (2)$$

となる。ここで

$$E_{\text{vdw}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(j \neq i)} U_{ij}^{\text{vdw}}, \quad (3)$$

$$E_{\text{coul}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(j \neq i)} U_{ij}^{\text{coul}}. \quad (4)$$

並列計算とエネルギー集約

プログラムは P 並列プロセスにより計算され、各プロセス p ($p = 1, \dots, P$) は自分の空間分割領域に属する粒子対のみを計算し、ローカルエネルギー

$$E_{\alpha}^{(p)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \in \Omega_p \\ j \neq i}} U_{ij}^{\alpha}, \quad \alpha \in \{\text{vdw}, \text{coul}, \text{pair}\}, \quad (5)$$

を得る。ここで Ω_p はプロセス p が保持する粒子集合である。総エネルギーは `MPIAllreduce` により

$$E_{\alpha} = \sum_{p=1}^P E_{\alpha}^{(p)}, \quad (6)$$

として求められる。

スカラー出力

`compute_scalar()` はユーザ指定に応じて

$$E_{\text{out}} = \begin{cases} E_{\text{pair}}, & \text{epair} \\ E_{\text{vdw}}, & \text{evdwl} \\ E_{\text{coul}}, & \text{ecoul} \end{cases}, \quad (7)$$

を選択し、式(6)に従う総和を返す。

ベクトル出力

ペアスタイルが内部で追加的に計算する量 $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_{n_{\text{extra}}})$ (例えばポテンシャル成分や接触数密度など) がある場合、各成分 $p_k^{(p)}$ について

$$p_k = \sum_{p=1}^P p_k^{(p)}, \quad k = 1, \dots, n_{\text{extra}}, \quad (8)$$

と集約し、`compute_vector()` により \mathbf{p} を返す。

時間整合性の保証

本コードはエネルギーが計算されたタイムステップ t_{ene} と出力を要求するタイムステップ t_{out} が一致していることを

$$t_{\text{ene}} = t_{\text{out}}, \quad (9)$$

で検証し、不一致ならエラーを発生させる。これは離散時間積分の途中で不整合なエネルギーを出力することを防ぐためである。

以上より、`compute_pair.cpp` は (1) 粒子間ポテンシャルエネルギーの分解 (式(2)–(4)), (2) 並列環境におけるローカル計算値の集約 (式(5), (6), (8)), (3) 時間整合性チェック (式(9)), を通じてシミュレーション全体のペア相互作用エネルギーおよび関連量を正確に計算・報告している。