

ポテンシャルエネルギー計算の数式解説 (compute_pe.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本ファイルは LIGGGHTS / LAMMPS において系の総ポテンシャルエネルギー U を評価する機能を実装している。コードが参照する各サブモデルの理論式を以下にまとめる。

まず、全エネルギーは

$$U = U_{\text{pair}} + U_{\text{mol}} + U_{\text{kpace}} + U_{\text{tail}} + U_{\text{thermo}}, \quad (1)$$

で与えられる。ここで

■(i) 粒子間ポテンシャルエネルギー

$$U_{\text{pair}} = \sum_{i < j} [U^{\text{vdW}}(r_{ij}) + U^{\text{Coul}}(r_{ij})], \quad (2)$$

は粒子対 (i, j) の van der Waals (あるいは LJ 型) およびクーロン相互作用の和である。

■(ii) 分子内ポテンシャルエネルギー

$$U_{\text{mol}} = U_{\text{bond}} + U_{\text{angle}} + U_{\text{dihedral}} + U_{\text{improper}}, \quad (3)$$

は分子系に固有の拘束項で構成される。たとえば結合伸縮について

$$U_{\text{bond}} = \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} k_b (r - r_0)^2, \quad (4)$$

といった調和型が典型である。角度・ジヒドラス・インプロバ項も同様に、対応する変位変数と力定数の関数として定義される。

■(iii) 長距離静電場 (k - space) エネルギー

$$U_{\text{kpace}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{4\pi}{k^2} |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 e^{-k^2/4\alpha^2}, \quad (5)$$

は Ewald / PPPM スキームで評価される逆格子寄与である。 V は系体積、 $\tilde{\rho}(\mathbf{k})$ は電荷密度のフーリエ係数、 α は分割パラメータである。

■(iv) テイル補正エネルギー カットオフ r_c を導入した van der Waals ポテンシャルでは、体積平均のテイル補正

$$U_{\text{tail}} = \frac{1}{V} \int_{r_c}^{\infty} 4\pi r^2 \rho^2 U^{\text{vdW}}(r) dr \quad (6)$$

を加えることで無限系極限を近似する。コード上では事前計算された `etail` を V^{-1} 倍して加算している。

■(v) 追加熱力学ポテンシャル

$$U_{\text{thermo}} = \sum_m \mathcal{E}_{\text{ext}}^{(m)}, \quad (7)$$

は外部 Fix などが付与するエネルギー補正の総和である.

以上の式 (1)–(7) により, `compute_pe` は各サブモデルから返されたスカラー値を収集し, 並列実行環境では $U = \sum_{\text{proc}} U^{(\text{local})}$ となるよう MPI で集約する. これがシミュレーション時刻に対する系の総ポテンシャルエネルギーとして出力される.