

# ペア・ボンド・長距離相互作用による 原子別ポテンシャルエネルギーの数式解説 (compute\_pe\_atom.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本ドキュメントでは LIGGGHTS/LAMMPS における `compute pe/atom` が実装する原子別ポテンシャルエネルギー  $E_i$  の計算手続きを数式として整理する。コード変数の逐次説明は行わず、計算対象となる物理量とその分配規則のみを記述する。

系を構成する原子を  $i = 1, \dots, N$  とし、各原子に割り当てられるポテンシャルエネルギーを

$$E_i = E_i^{\text{pair}} + E_i^{\text{bond}} + E_i^{\text{angle}} + E_i^{\text{dihedral}} + E_i^{\text{improper}} + E_i^{\text{kpace}} \quad (1)$$

と定義する。以下では右辺各項の一般的な分配規則を示す。

## ■(1) ペア相互作用

$$E_i^{\text{pair}} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} U_{\text{pair}}(r_{ij}), \quad (2)$$

ただし  $\mathcal{N}(i)$  は原子  $i$  と対を成す原子集合であり、 $U_{\text{pair}}$  はペアポテンシャル、 $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  は粒子間距離である。有限距離カットオフを用いる場合、和は近接ペアに限定される。係数  $1/2$  は相互作用エネルギーを二原子へ等分配することを意味する。

## ■(2) ボンド相互作用

ボンド  $b$  を構成する原子集合を  $\mathcal{B}(b)$ 、ボンドエネルギーを  $U_{\text{bond}}(b)$  とすると

$$E_i^{\text{bond}} = \sum_{b: i \in \mathcal{B}(b)} \frac{1}{|\mathcal{B}(b)|} U_{\text{bond}}(b), \quad (3)$$

ここで  $|\mathcal{B}(b)| = 2$  であり、各原子へ等分配される。

## ■(3) 角度 (Angle) 相互作用

三体角  $a$  を  $\mathcal{A}(a)$  ( $|\mathcal{A}(a)| = 3$ ) とすると

$$E_i^{\text{angle}} = \sum_{a: i \in \mathcal{A}(a)} \frac{1}{3} U_{\text{angle}}(a). \quad (4)$$

## ■(4) ジヘドラル (Dihedral) 相互作用

四体ジヘドラル  $d$  を  $\mathcal{D}(d)$  ( $|\mathcal{D}(d)| = 4$ ) とすると

$$E_i^{\text{dihedral}} = \sum_{d: i \in \mathcal{D}(d)} \frac{1}{4} U_{\text{dihedral}}(d). \quad (5)$$

■(5) インプロパー (Improper) 相互作用

$$E_i^{\text{improper}} = \sum_{p: i \in \mathcal{P}(p)} \frac{1}{4} U_{\text{improper}}(p), \quad (6)$$

$|\mathcal{P}(p)| = 4$  とし、同様に 4 分割する。

■(6) 長距離 (KSpace) 相互作用 クーロン相互作用など長距離項は、実空間寄与  $U_{\text{real}}$  と逆格子空間寄与  $U_{\text{recip}}$  に分割されるが、`eatom` 配列には総和した値が格納される。

$$E_i^{\text{kpace}} = E_{i,\text{real}}^{\text{kpace}} + E_{i,\text{recip}}^{\text{kpace}}. \quad (7)$$

TIP4P モデル使用時は擬電荷をもつゴースト原子にも分配される。

■(7) 並列分散メモリ環境における分配 MPI 並列計算では式 (??) に基づく  $E_i$  はドメイン境界上のゴースト原子へも一旦足し込まれ、Newton 計算フラグが有効な場合には

$$E_i \leftarrow E_i + \sum_{k \in \Gamma(i)} E_k^{\text{ghost}}, \quad (8)$$

のように `reverse_comm` で隣接プロセスから和が返送される。ここで  $\Gamma(i)$  は原子  $i$  と同一 ID を共有するゴースト集合である。

■(8) グループ演算子 ユーザが `group` コマンドで指定したビットマスク  $\text{mask}_i$  と比較し、

$$E_i \leftarrow \begin{cases} E_i & (\text{mask}_i \wedge \text{groupbit} \neq 0), \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (9)$$

により不要な原子のエネルギーを消去する。

■まとめ 以上より、`compute pe/atom` が出力する配列は (??)-(??) に従って各原子へエネルギーを帰属させたものであり、ペアから長距離項までのポテンシャルを規定の分配係数で等分割し、並列通信およびグループ操作を経たのちに最終的な原子別ポテンシャルエネルギー  $E_i$  が得られる。