

”AMBER 変換概要モデル” の数式解説 (“converters/amber/”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本ディレクトリは AMBER 形式と LAMMPS 形式を橋渡しするユーティリティ群を収録する。含まれる主なスクリプト集合は

$$\mathcal{U}_{\text{amber}} = \{\text{amber2lammmps.py}, \text{dump2trj.py}, \text{dump2trj99.py}\} \quad (1)$$

であり、それぞれが構造変換写像

$$\Phi_k : \mathcal{D}_{\text{AMBER}} \rightarrow \mathcal{D}_{\text{LAMMPS}} \quad (2)$$

を担う。README に記載されたパラメータ検証則

$$\chi = \prod_i \mathbf{1}_{\{p_i^{\text{in}} = p_i^{\text{out}}\}} \quad (3)$$

を満たすことで、変換結果の整合が保証される。