

”lmp2arc 概要モデル” の数式解説 (“converters/lmp2arc/”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本ディレクトリは LAMMPS 出力を Materials Studio 互換の ARC 形式へ変換するツール群をまとめる。
主要構成要素は

$$\mathcal{U}_{\text{lmp2arc}} = \{\text{lmp2arc.c}, \text{ProcessPosFile.c}, \text{WriteArcFrame.c}, \dots\} \quad (1)$$

であり、フレーム変換写像

$$\Psi_m : \mathcal{F}_{\text{LMP}}^{(m)} \rightarrow \mathcal{F}_{\text{ARC}}^{(m)} \quad (2)$$

を実現する。付属のテストデータに対する誤差指標

$$\delta = \max_i \|\mathbf{q}_i^{\text{ref}} - \mathbf{q}_i^{\text{out}}\| \quad (3)$$

を評価することで、変換の正確性が検証できる。