

”msi2lmp 概要モデル” の数式解説 (“converters/msi2lmp/”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本ディレクトリは MSI/Discover 形式のデータを LAMMPS 入力へ変換するユーティリティ群を収録する。
アプリケーションの構造は写像集合

$$\mathcal{U}_{\text{msi2lmp}} = \{\text{msi2lmp.c}, \text{GetParameters.c}, \text{WriteDataFile.c}, \dots\} \quad (1)$$

で表され、各写像が段階的に

$$\mathcal{D}_{\text{LAMMPS}} = \Phi_n \circ \dots \circ \Phi_1(\mathcal{D}_{\text{MSI}}) \quad (2)$$

を生成する。力場ファイル整合性は指標

$$\rho = \mathbf{1}_{\{\text{required} \subseteq \text{available}\}} \quad (3)$$

を用いて確認される。