

”鎖状配置生成モデル”の数式解説 (“setup_chain.f”)

Open DEM Japan

2025年10月12日

本プログラムは鎖状の粒子配置を構築し、多体鎖モデルの初期条件を与える。結合長 b を用いると位置は再帰式

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i + b \hat{\mathbf{t}}_i \quad (1)$$

で定義され、方向ベクトルは回転行列

$$\hat{\mathbf{t}}_{i+1} = \mathbf{R}(\theta_i, \phi_i) \hat{\mathbf{t}}_i \quad (2)$$

により更新される。生成された座標列はデータファイルとして書き出され、鎖モデルの計算に利用される。