

”CFG 出力ルーチン”の数式解説 (dump_cfg.cpp)

Open DEM Japan

2025年7月2日

本ファイルは LAMMPS (およびその派生である LIGGGHTS) が AtomEye/CFG 形式でスナップショットを出力する際に、粒子半径・ボックス形状・座標を数値変換する過程を実装している。以下では、コードに現れるアルゴリズムを数式でまとめる。

スケール係数の決定

粒子が peri スタイル (周辺体積有限要素法) である場合、各粒子体積 V_i (コード中では vfrac) の系内平均

$$\bar{V} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_i \quad (1)$$

を求め、粒径をダイヤモンド格子の炭素原子半径 1.44 \AA に合わせる目的で

$$S = \frac{1.44}{\bar{V}^{1/3}} \quad (2)$$

と定義する。

一方、unwrap フラグが立っているときは、範囲外に広がった座標を視覚化のために縮小する目的で

$$S = 10.0 \quad (3)$$

に固定される。それ以外の場合は $S = 1$ である。

格子行列の書き出し

シミュレーションボックスの一次元長さ L_x, L_y, L_z と傾斜量 xy, xz, yz を用いて格子行列

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} L_x & 0 & 0 \\ xy & L_y & 0 \\ xz & yz & L_z \end{pmatrix} \quad (4)$$

が CFG ヘッダに直接出力される (コード中では H0(1,1) などとして書式出力)。

座標変換規則

粒子 i のスケール済み座標 $\mathbf{s}_i = (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz})^T$ から実座標 \mathbf{r}_i への変換は

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{H}_0 \mathbf{s}_i. \quad (5)$$

ただし unwrap 時には

$$s'_{i\alpha} = \frac{s_{i\alpha} - 0.5}{S} + 0.5, \quad \alpha \in \{x, y, z\}, \quad (6)$$

を用いていったん $[0, 1]$ 区間へ再マッピングした s'_i を (5) に代入する。

ファイル出力の順序

質量 m_i ・型名 `typei`, および変換後座標 s_i または s'_i を粒子ごとに列挙し, 続いて必要に応じて補助量 `auxiliary[k]` を追加する。速度ベクトルは `.NO_VELOCITY.` フラグで省略される。

これらの数式により, `dump_cfg.cpp` の全ての数値操作が再現できる。