

力の出力ファイルフォーマット

(1) 力の出力ファイルとは

Materials Explorer のシミュレーション結果のうち、各原子に働く力の X, Y, Z 方向成分は、「力の出力ファイル (拡張子: .frc)」に出力されています。出力先は、MD出力ファイル (拡張子: .sim) が出力されるフォルダと同じフォルダです。力の出力ファイルは、書式なしFORTRAN記録です。力の出力ファイル中、整数値、および実数値を表すビット列は、ビッグエンディアンに従っています。エンディアン方式については、「(3) エンディアン方式について」を参照してください。

(2) 力の出力ファイルをテキスト化する方法について

力の出力ファイルは、書式なし FORTRAN 記録であるため、そのままでは内容を見ることができません。内容を数値として見る場合や、他の可視化ソフトなどで利用する場合には、テキストファイルに変換すると便利です。

力の出力ファイルをテキスト化するユーティリティとして、frc2asc.exe があります。frc2asc.exe は、Materials Explorer をインストールしたフォルダ内にあります。

(3) エンディアン方式について

最下位のビットが、最下位のアドレス指定をしたバイトに置かれるか、最上位のアドレス指定をしたバイトに置かれるかによって、コンピュータを各々、ビッグ・エンディアンとリトル・エンディアンとに分けます。

例えば、4バイト整数の1のビット列は、それぞれ以下のように表現されます。

- ビッグ・エンディアン

```
byte 0 byte 1 byte 2 byte 3
00000000 00000000 00000000 00000001
```

- リトル・エンディアン

```
byte 3 byte 2 byte 1 byte 0
00000001 00000000 00000000 00000000
```

MD出力ファイル中、整数値、および実数値を表すビット列は、ビッグエンディアンに従っています。

(4) 力の出力ファイルの内容と、ファイルフォーマットについて

以下のファイルフォーマットでは、ファイルに出力されている内容について、レコードを単位として説明しています。

「型」にはデータ型が記号で示されています。記号の意味は次の通りです。

Aw : w バイト文字型

I : 4 バイト整数型

R : 4 バイト実数型

「引数値」には引数の値の範囲が示されています。引数の値の範囲が複数示されている場合には、上に書かれている変数が先に繰り返されます。

以下のレコードは、シミュレーションの結果として得られる時系列データです。

1~2 レコード

1~2 レコード

:

1~2 レコード

のようにして、NSTEP 回繰り返し出力されています。

変数 NSTEP, NATOM は、MD 出力ファイルに出力されています。

1. ポテンシャル関数による力

内容	X 成分	Y 成分	Z 成分
単位	$g \text{ \AA} / fs^2$	$g \text{ \AA} / fs^2$	$g \text{ \AA} / fs^2$
変数名	FPX(I)	FPY(I)	FPZ(I)
引数値	I=1, NATOM	I=1, NATOM	I=1, NATOM
型	R	R	R

2. SHAKEの拘束力

内容	X 成分	Y 成分	Z 成分
単位	$g \text{ \AA} / fs^2$	$g \text{ \AA} / fs^2$	$g \text{ \AA} / fs^2$
変数名	FSX(I)	FSY(I)	FSZ(I)
引数値	I=1, NATOM	I=1, NATOM	I=1, NATOM
型	R	R	R

注 1) 原子・分子の発生を使用した場合は、このレコードは出力されません。

注 2) 結合長の拘束をかけた分子がなければ、すべて 0.0 が出力されます。