

connection.py

概要

粒子間結合データの生成とクラスターのラベリングを行うスクリプトである。KAPSELでは、粒子間の距離に応じて、結合を取り扱うことができるが、どの粒子間で結合が生じているのかの情報は保持していない。本スクリプトでは、出力された粒子座標データを読み込み、粒子間距離を計算し、生じた結合を hdf5 形式で出力する。

また、粒子が結合して生じたクラスターのサイズ分布を計算するために、クラスターごとに固有の値をラベリングする。本スクリプトでは、さらに、クラスターの数平均サイズと重量平均サイズを計算し、出力する。

入力

particle_data_*.h5 (粒子座標データ)

出力

connection/cluster_size.txt (クラスター平均サイズの出力、count 数平均 重量平均)

connection/link.xmf (粒子間結合情報の xdmf ファイル)

connection/link_p.xmf (クラスターラベリング情報用の xdmf ファイル)

connection/link_data_*.h5 (結合データ)

設定項目

- l. 266-268 シミュレーションボックスサイズ
- l. 271 粒子間結合のカットオフ距離
- l. 274 最大タイムステップ数(例えば、400 ステップまで調べたい場合は 400 を設定する)
- l. 277 出力のインターバルタイムステップ数
- l. 280 並列スレッド数