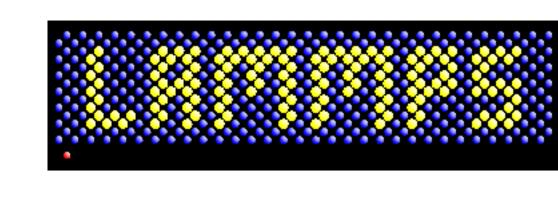
2. 输入命令read_data

3. 下期预告

LAMMPS学习札记(二)——输出与输入篇



上回我们说到,如何实现LAMMPS的安装和(利用串行程序)运行一次LAMMPS。

本文的题目是输出与输入,而不是常见顺序(输入与输出),目的是强调将**输出**命令的学习顺序放在 前面,有利于我们调试程序,从而更好地理解LAMMPS中各命令的作用。

输出命令——dump

本文还是先以 Example/colloid/in colloid 为例。

```
1 all atom 1000 dump.colloid
 #dump
                2 all image 1000 image.*.jpg type type &
 #dump
               zoom 1.5 center d 0.5 0.5 0.5
               2 pad 5 adiam 1 5.0 adiam 2 1.5
 #dump_modify
               3 all movie 1000 movie.mpg type type &
 #dump
               zoom 1.5 center d 0.5 0.5 0.5
               3 pad 5 adiam 1 5.0 adiam 2 1.5
 #dump_modify
"#"是注释的意思。 in colloid 默认把输出都注释掉了,所以没有输出文件。
```

我们只要把"#"删除,就可以执行对应的命令。 以上命令中出现了三种类型的数据: dump数据文件、jpg格式图片以及mpg格式视频。

最简单的是 dump 数据文件,也是我们最常用的。通过dump文件我们可以利用其它软件,例如

是: dump 1 all atom 1000 dump.colloid

OVITO,很方便的进行数据可视化。效果要比LAMMPS内置的图片和视频输出效果更好。对应的命令

```
他的意思其实是:
```

[ID] [group ID] [style] [timestep] [filename] [args] 1 dump • ID: 为一个 dump 命令起一个唯一的代号,一般就是1、2、3

● group ID: 之前定义的一组对象的组(group)唯一代号,比如所有原子(all),后者氧原子

- 氢原子。除了默认的 group ID 外, 其它 group ID 需要在使用之前通过 group 命令定义。
- style:数据类型,比如原子三维坐标(atom)。 • timestep:记录的时间步长,每隔一个timestep就会记录一行数据。
- filename: 输出文件名。这里面的"*"指的是每一个 timestep 记录一个 dump 文件, "*"处

×

- 利用当时的时间步进行替代。
- args: 对应于不同 style 的一些其它参数,在 dump 命令有更详细的介绍。 输出文件的格式如下所示:

 \triangleleft dump.colloid ITEM: TIMESTEP



时间 时间步 1 TIMESTEP 1 原子数目 时间步 1

空间尺寸

输出数据

时间步 = 时间 (间隔) 步长×当前步数

生未知的符号(编码和文件头问题)。同类竞品有 VS Code 或 Atom, 随便下载一个顺手的即

时间步 2

OVITO

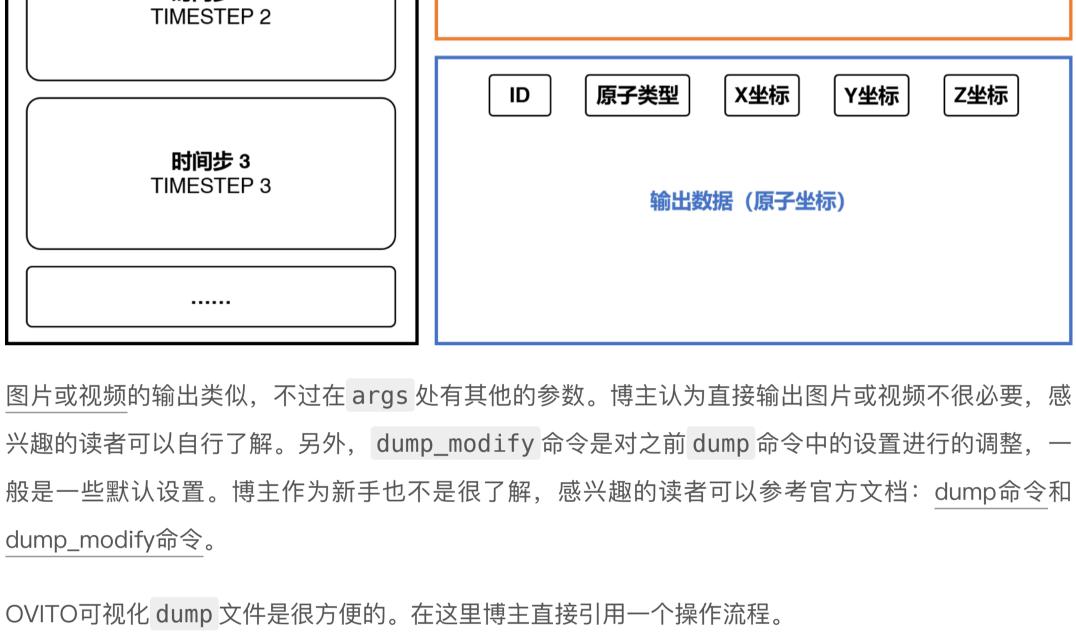
•\$ •\$•

60 G

Open Visualization Tool http://ovito.org/

可以分析LAMMPS输出的dump文件格式为:

可。



5. Save picture 4. Add modification 1. Open file **© Ovito** File Edit Help Add modification.. Ovito (Open Visualization Tool) Atomic strain Render Active Viewport ▲ Load Remote File ± 0 Cluster analysis **★** Export File Coordination analysis o Correlation function Load Program State Dislocation analysis (DXA) Save Program State Single frame Displacement vectors Add modification.. ■ Save Program State As 企業S Complete animation Elastic strain calculation Histogram Run Python script.. Scatter plot **Particles** Spatial binning Every Nth frame: Voronoi analysis

Create bonds

Simulation cell

Particle types

a100.dump [LAMMPS Dump]

File number base:

Height: 480

0

a200.dump [LAMMPS Dump]

Animation settings..

Presets...

Wigner-Seitz defect analysis

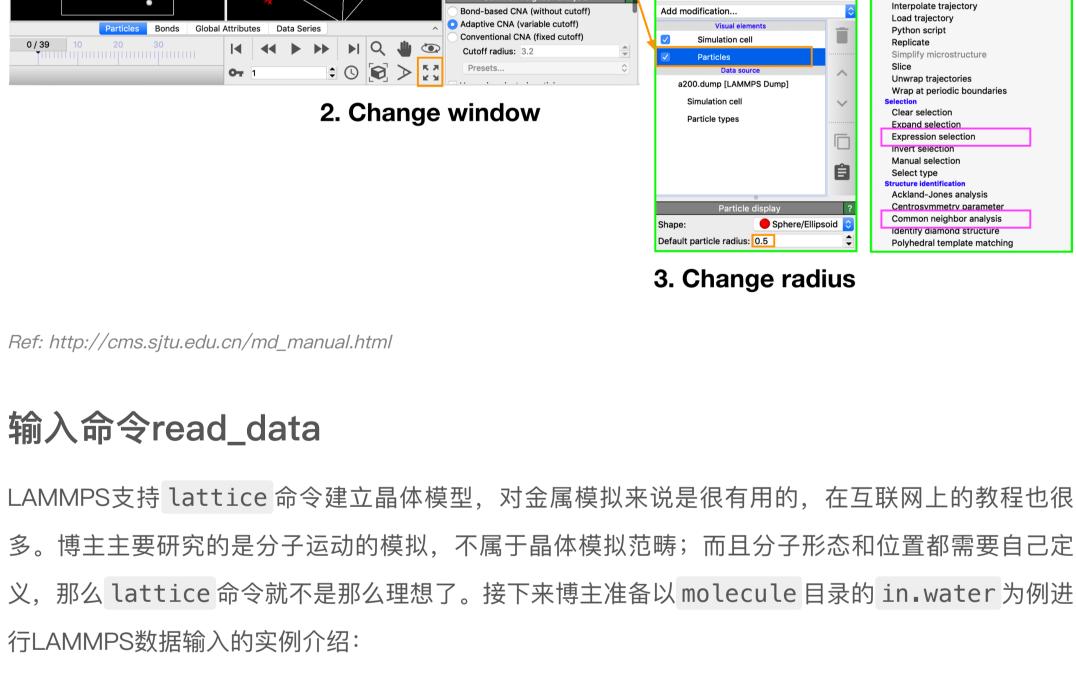
Ambient occlusion Assign color Color coding

Affine transformation

Combine datasets Compute property

Delete selected

Freeze property



LAMMPS根目录\Examples\USER\atc\molecule

在这个例子中, in water 读取了一个文件 water init 。

-1.50000000000000000e+01 1.5000000000000000e+01 xlo xhi -1.50000000000000000e+01 1.5000000000000000e+01 ylo yhi -1.50000000000000000e+01 1.5000000000000000e+01 zlo zhi

read_data water.init

2 atom types 1 bond types 1 angle types

Masses

1 1.008

2 15.9994

本文作者: Geon Mo

〈 LAMMPS学习札记(一)──安装篇

14

16

17

water init 文件的格式。此格式即LAMMPS输入文件的格式。 water.init LAMMPS data file from restart file: timestep = 1000000, procs = 16 2709 atoms 1806 bonds 903 angles

通过LAMMPS运行文件,只要是 utf-8 编码的文本文件,那么后缀或前缀的不同不会产生太大影

响。但一般均按照习惯进行命名。 * init 文件也可命名为 * data 。我们可以来看看



博主会挑一些自己用过的命令进行实践和介绍。Love and peace。

版权声明: 本博客所有文章除特别声明外,均采用 @BY-NC-SA 许可协议。转载请注明出处! 联系方式: mozheyang@outlook.com

● Information Science & Technology 信息科学与技术 ● Material 材料

本文链接: https://www.mozheyang.top/2020/04/10/lammps2/

```
邮箱
                                  网址(http://)
```



桂ICP备17010030号

© 2017 — 2022 ♥ Geon Mo

由 Hexo 强力驱动 | 主题 - NexT.Muse

交流阻抗谱学与能源电化学 >

X