

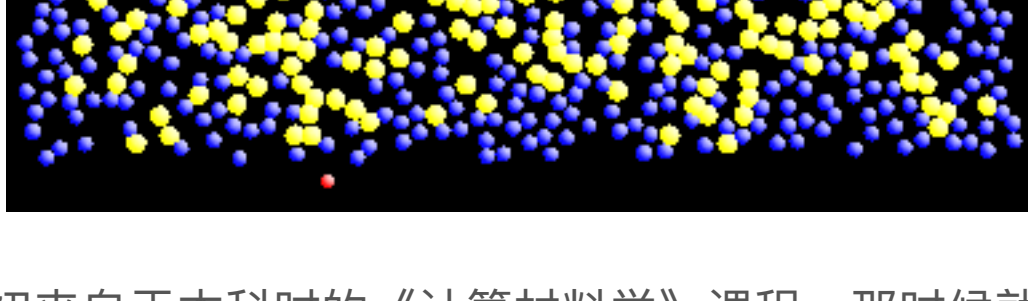
## Mo's Notebook | 摸着羊的笔记本

设计 / 思考 / 材料 / 信息

首页
 归档
 分类
 标签
 关于
 项目
 搜索

## LAMMPS学习札记（一）——安装篇

发表于 2020-04-04 | 更新于 2020-04-19 | Valine: 0



对“分子动力学”的认识最初来自于本科时的《计算材料学》课程。那时候就听说有个叫做LAMMPS的开源软件，可以实现分子动力学模拟。但是苦于安装困难，并没有继续深究。作为一个热爱折腾的人，没有深究这件事一直让我过意不去。

好在，时过境迁。今天的LAMMPS早已不是过去的LAMMPS，行云流水的安装进度让人止不住地鼓掌叫好。那么，究竟有多简单？

### Windows 10系统上安装

在Windows上的安装，可以直接访问美国Sandia国家实验室地官网：<https://lammps.sandia.gov/>。进入Download界面，找到你所需要的Windows版本。说时候，网站导航不是一般的迷惑，很容易迷路，所以在这我给大家一个参考：关键词是Pre-built Windows executables，含义是已经编译好的Windows可运行程序（exe文件）。如果你是开发者的话，也可以选源代码，自己编译代码运行，灵活度更高。

[LAMMPS website](#)

#### Download LAMMPS

You can download LAMMPS as a tarball from this page, using the "Download Now" button below.

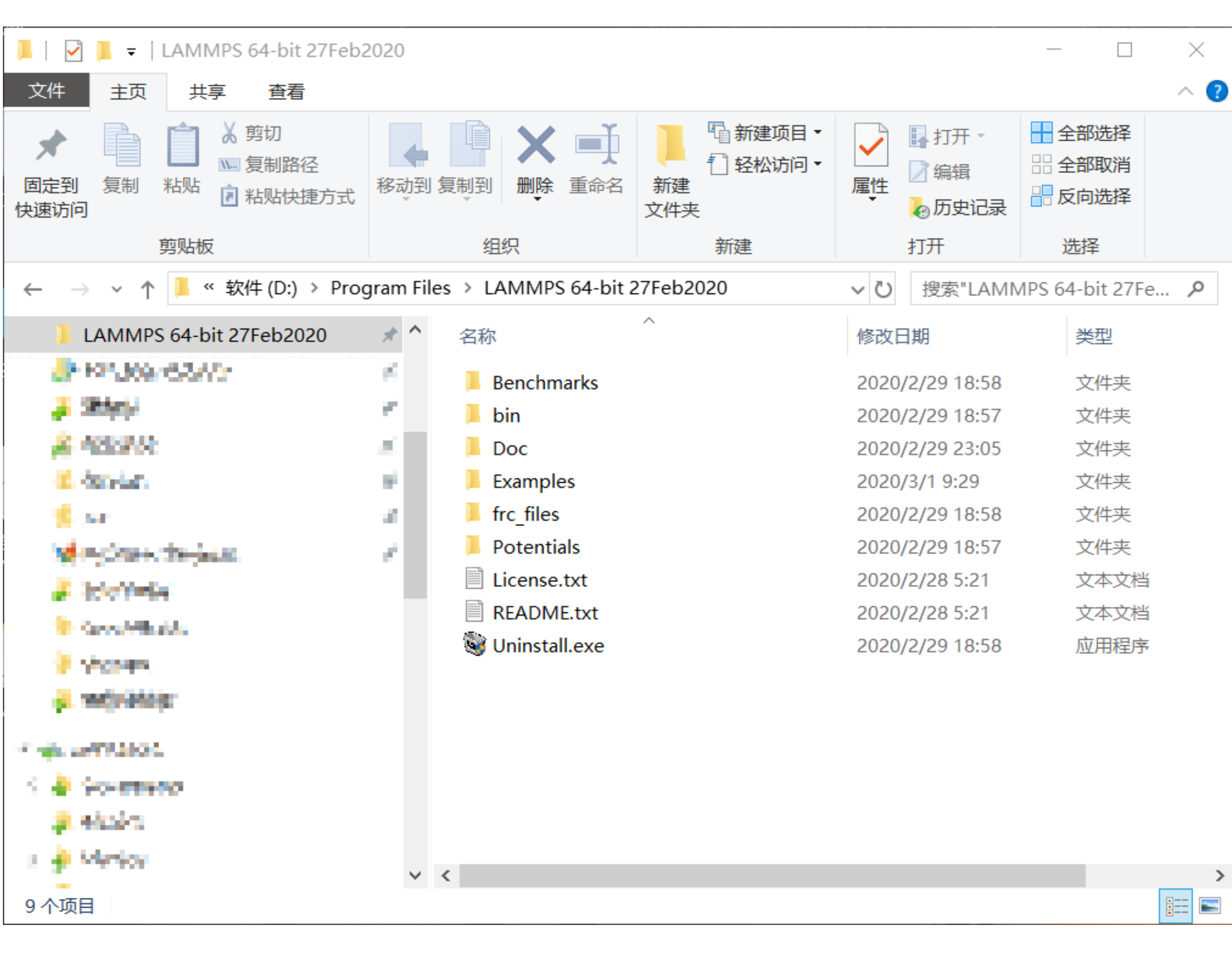
There are several ways to get the LAMMPS software, either as a tarball, or from an active repository, or in executable form:

- Download a tarball ([here or from GitHub](#))
- Git repository for LAMMPS
- SVN repository for LAMMPS
- Pre-built Linux executables
- Pre-built Mac executables
- Pre-built Windows executables

With source code, you have to [build LAMMPS](#) using "cmake" or "make". But you have more flexibility as to what features to include [LAMMPS](#), then you need the source code.

The [Install](#) doc page lists what is included in the LAMMPS distribution.

下载下来一步步安装就好了。然后我们会收获一个文件夹。



好了，你没看错，我们什么都不需要配置，已经获得了一个可以输出有趣结果的LAMMPS程序了！需要在Linux编译，还有很多奇怪的参数需要配置的日子已经一去不复返了。

### 运行LAMMPS

#### 正确的文件夹

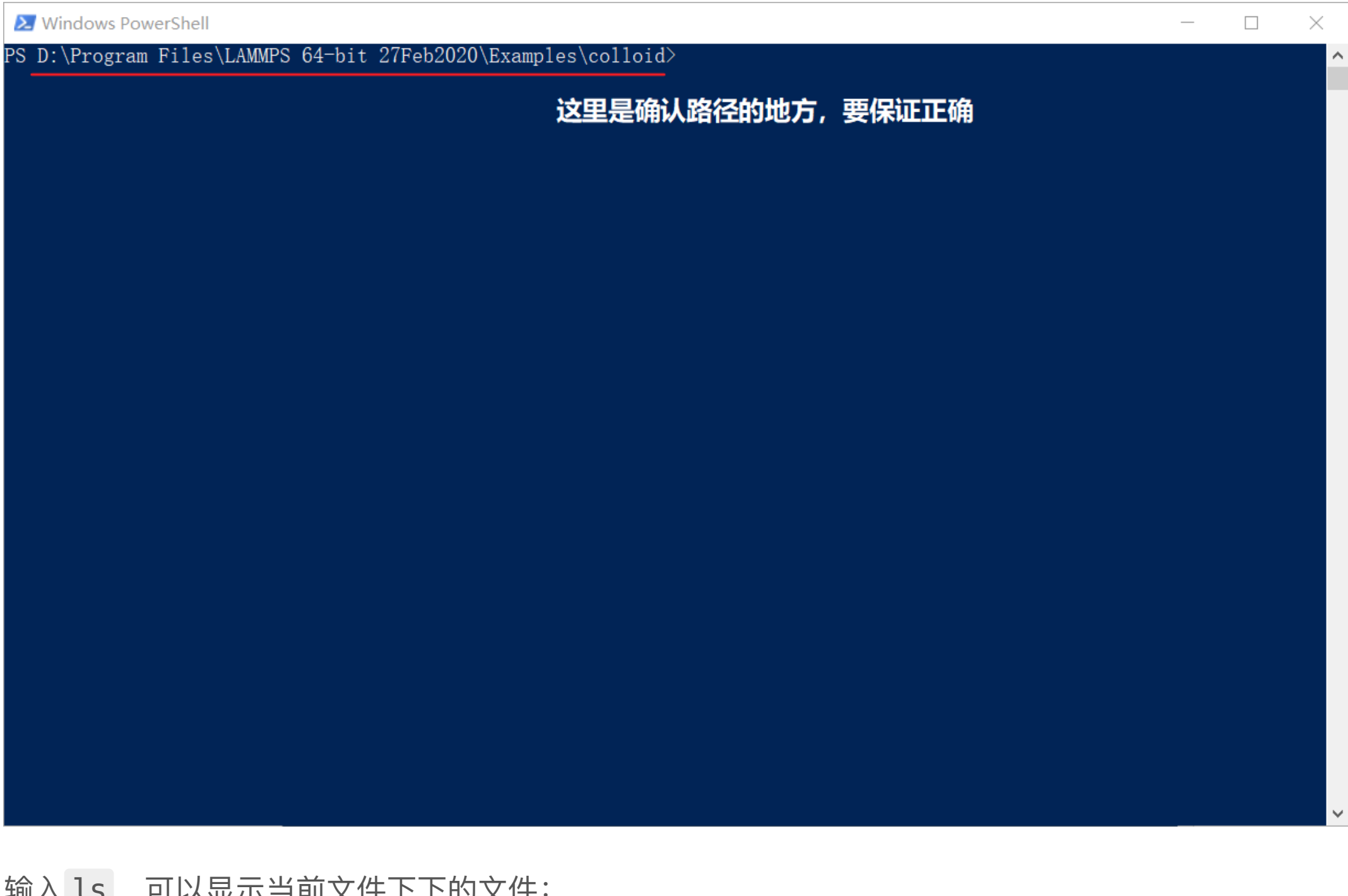
我们可以跑个demo（示例）试试。记住以下路径：

```

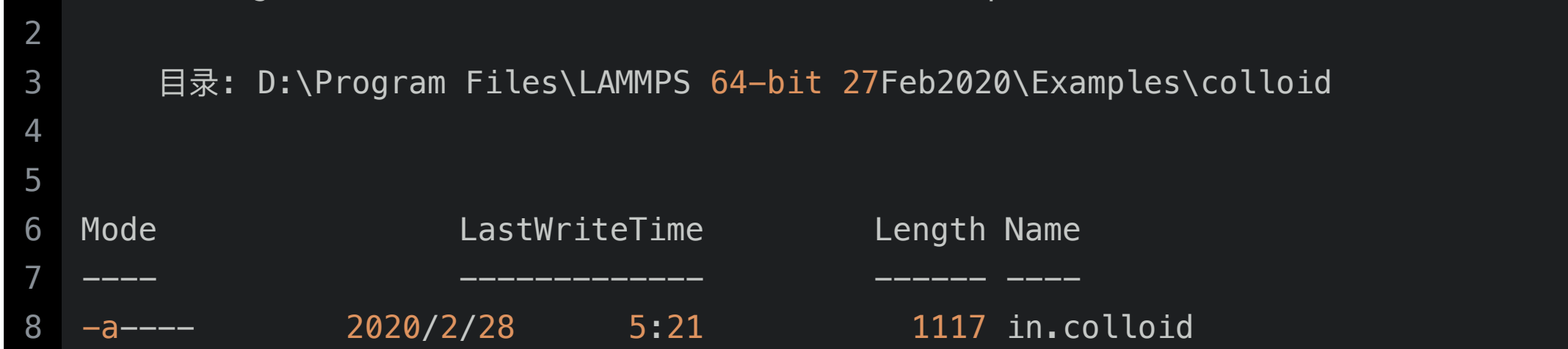
1  当前目录（即LAMMPS根目录）/Examples/colloid

```

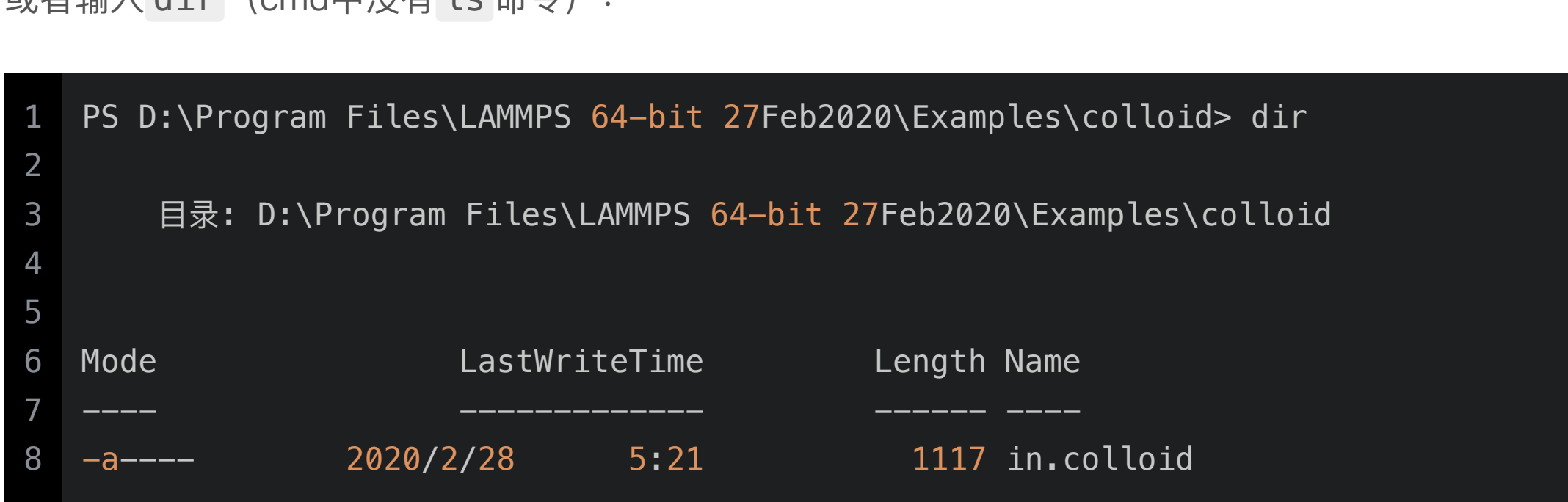
这就是一个简单的colloid示例所在的项目位置。LAMMPS启动的方式很GEEK：先进入以上文件夹（colloid），右键单击后，选择在此处打开 Powershell（cmd也可以，俗称小黑框）：



输入 `ls`，可以显示当前文件下下的文件：



或者输入 `dir`（cmd中没有 `ls` 命令）：

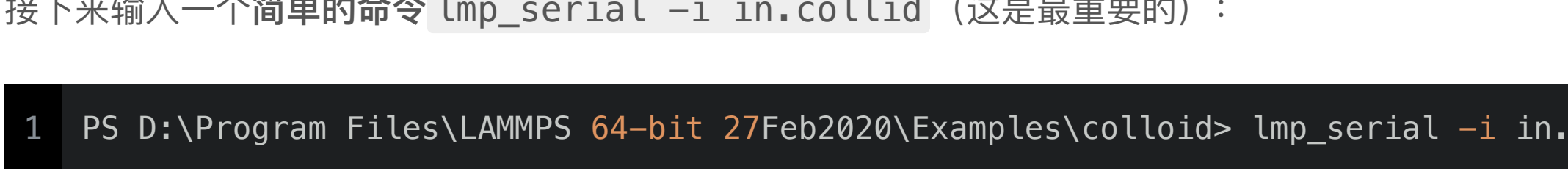


可以看到文件夹里有一个叫做 `in.collide` 的文件。这便是LAMMPS的输入文件了。更改输入文件，我们可以实现不同模型的计算。对原子/分子结构和坐标还可以用 `data` 文件定义，我们之后再进行讨论。

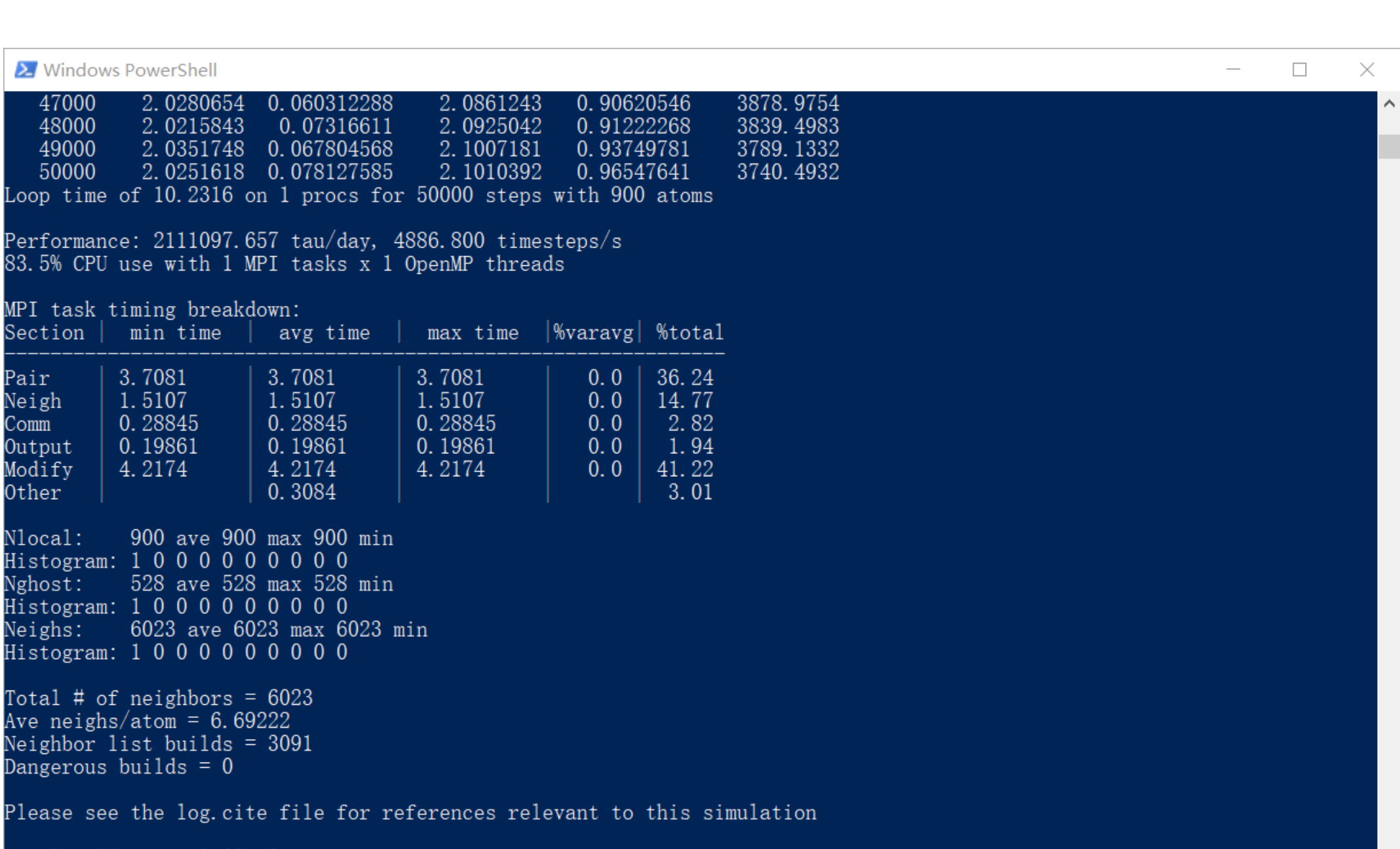
一定要进入有 `in.collide` 文件的文件夹，要不然下一步操作是无效的。

#### 正确的运行

接下来输入一个简单的命令 `lmp_serial -i in.collid`（这是最重要的）：

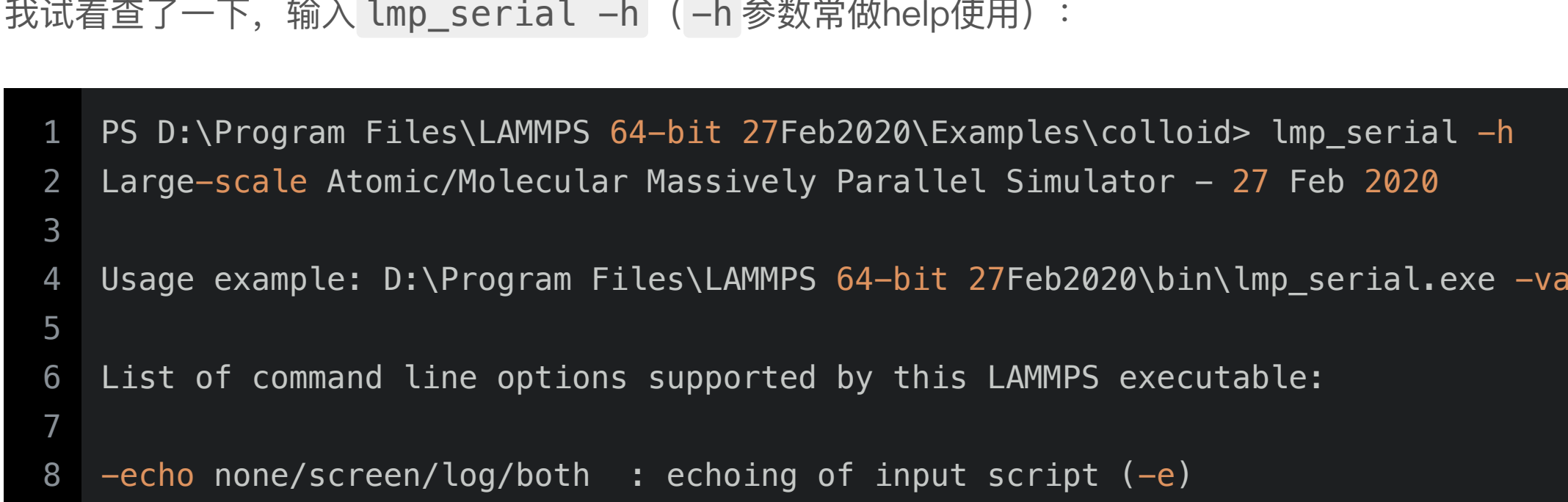


如果出现下列状态，恭喜你，运行成功了。



知其然，还要知其所以然。这命令是什么意思呢？

我试着查了一下，输入 `lmp_serial -h`（`-h` 参数常做help使用）：



OK，我们这里的 `lmp_serial` 是串行（serial）的版本的LAMMPS；`-i` 的意思是“read input from file”，即从 `in` 文件中读取关于LAMMPS运行的一切模型和参数；最后接上 `in` 文件的名字 `in.collid`，就大功告成了。

对应串行运行命令 `lmp_serial` 的是并行运行命令 `lmp_mpi`。如果在计算中心进行模拟，多是并行多核计算。

### 写在后面

博主发现LAMMPS这个软件本身很强大好用，可用于较多现象的模拟，但在国内的应用却并不多，相关资料更是极其缺乏（即使是收费资料）。博主自己琢磨的过程走了很多跟科学无关的弯路，在这里记录下来，希望大家使用的时候都能少走弯路。

到此为止我们已经能够让LAMMPS正常运行了。下次我们的主题将会是如何掌握程序的输入输出，实现脚本调试。而怎么让LAMMPS根据物理规律和我们的意图正确运行，将是我们下次次的讨论的主题。—Love and peace。

本文作者：Geon Mo  
 本文链接：<https://www.mozheyang.top/2020/04/04/lammps1/>  
 版权声明： 本博客所有文章除特别声明外，均采用 [CC BY-NC-SA](#) 许可协议。转载请注明出处！  
 联系方式：[mozheyang@outlook.com](mailto:mozheyang@outlook.com)

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

< 在路上，略感焦虑

LAMMPS学习札记（二）——输出与输入篇 >

昵称
 邮箱
 网址(http://)

请开始你的表演

提交

来发评论吧~

Powered By [Valine](#)  
 v1.5.1

桂ICP备17010030号

© 2017 – 2022 [Geon Mo](#)

由 [Hexo](#) 强力驱动 | 主题 – [NexT.Muse](#)

