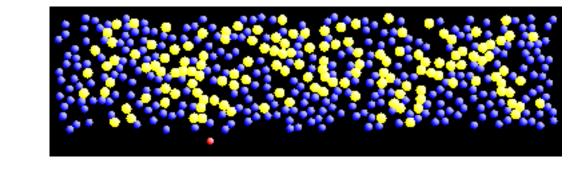
1. Windows 10系统上安装 2. 运行LAMMPS 3. 写在后面



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。

掌叫好。那么,究竟有多简单?

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

## 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 includ LAMMPS, then you need the source code. The <u>Install</u> 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。

✓ | = | LAMMPS 64-bit 27Feb2020  $\times$ 文件 查看 ₩ 全部选择 打开 ₹ 轻松访问 ▼ 🔐 全部取消 기编辑 复制 粘贴 固定到 新建 🔐 反向选择 № 历史记录 文件夹 快速访问 组织 打开 剪贴板 新建 选择 📜 « 软件 (D:) > Program Files > LAMMPS 64-bit 27Feb2020 搜索"LAMMPS 64-bit 27Fe... 👂 LAMMPS 64-bit 27Feb2020 类型 名称 修改日期 \*\* POP 300 (2007) Benchmarks 文件夹 2020/2/29 18:58 J. Shirtle bin 2020/2/29 18:57 文件夹 ACCURAGE Doc 2020/2/29 23:05 文件夹 🐔 dan katu 2020/3/1 9:29 Examples 文件夹 frc\_files 2020/2/29 18:58 文件夹 Potentials 2020/2/29 18:57 文件夹 Mary Cross - Confession -License.txt 2020/2/28 5:21 文本文档 Reference README.txt 2020/2/28 5:21 文本文档 👺 Sarred Medical Uninstall.exe 应用程序 2020/2/29 18:58 🏰 Yhgaspa, A THE PARK OF Application of the property of th S. 🦸 September 1 🚚 Mission ji 🦸 Markovi V ( :--9 个项目 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

运行LAMMPS

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。

正确的文件夹

## 我们可以跑个demo(示例)试试。记住以下路径:

∠ Windows PowerShell

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):

\_ \_



目录: D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\Examples\colloid

```
LastWriteTime
                                           Length Name
   Mode
                2020/2/28
                               5:21
                                             1117 in.colloid
或者输入 dir (cmd中没有 ls 命令):
    PS D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\Examples\colloid> dir
       目录: D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\Examples\colloid
```

1117 in.colloid

\_ \_

5:21

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):

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

PS D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\Examples\colloid> lmp\_serial -i in.

如果出现下列状态, 恭喜你, 运行成功了。

Section | min time | avg time | max time |%varavg| %total

3. 7081

1. 5107

0.28845

0.19861

4. 2174

3. 7081

1. 5107

0. 28845

0.19861

2020/2/28

行讨论。

➢ Windows PowerShell

3. 7081

1. 5107

0. 28845

0.19861

4. 2174

9 -help

写在后面

<del>题。</del>Love and peace。

10 -in filename

Pair

Neigh

Output

Modify

47000 2.0280654 0.060312288 2.0861243 0.90620546 48000 2.0215843 0.07316611 2.0925042 0.91222268 49000 2.0351748 0.067804568 2.1007181 0.93749781 50000 2.0251618 0.078127585 2.1010392 0.96547641 Loop time of 10.2316 on 1 procs for 50000 steps with 900 atoms Performance: 2111097.657 tau/day, 4886.800 timesteps/s 83.5% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads MPI task timing breakdown:

 0. 0
 36. 24

 0. 0
 14. 77

 0. 0
 2. 82

 0. 0
 1. 94

 0. 0
 41. 22

3839. 4983 3789. 1332 3740. 4932

4. 2174 0. 3084 0ther 3.01 Nlocal: 900 ave 900 max 900 min Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 Nghost: 528 ave 528 max 528 min Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 Neighs: 6023 ave 6023 max 6023 min Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 Total # of neighbors = 6023 Ave neighs/atom = 6.69222 Neighbor list builds = 3091 Dangerous builds = 0 Please see the log.cite file for references relevant to this simulation Total wall time: 0:00:10 PS D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\Examples\colloid> 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): PS D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\Examples\colloid> lmp\_serial -h Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator - 27 Feb 2020 3 Usage example: D:\Program Files\LAMMPS 64-bit 27Feb2020\bin\lmp\_serial.exe -va 5 List of command line options supported by this LAMMPS executable:

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。

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

现脚本调试。<del>而怎么让LAMMPS根据物理规律和我们的意图**正确运行**,将是我们下下次的讨论的主</del>

: print this help message (-h)

: read input from file, not stdin (-i)

-echo none/screen/log/both : echoing of input script (-e)

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

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 @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

< 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 M↓ 提交 来发评论吧~

由 Hexo 强力驱动 | 主题 - NexT.Muse

Powered By Valine

v1.5.1

🧶 桂ICP备17010030号 © 2017 — 2022 ♥ Geon Mo