

Подготовка к работе с LAMMPS

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

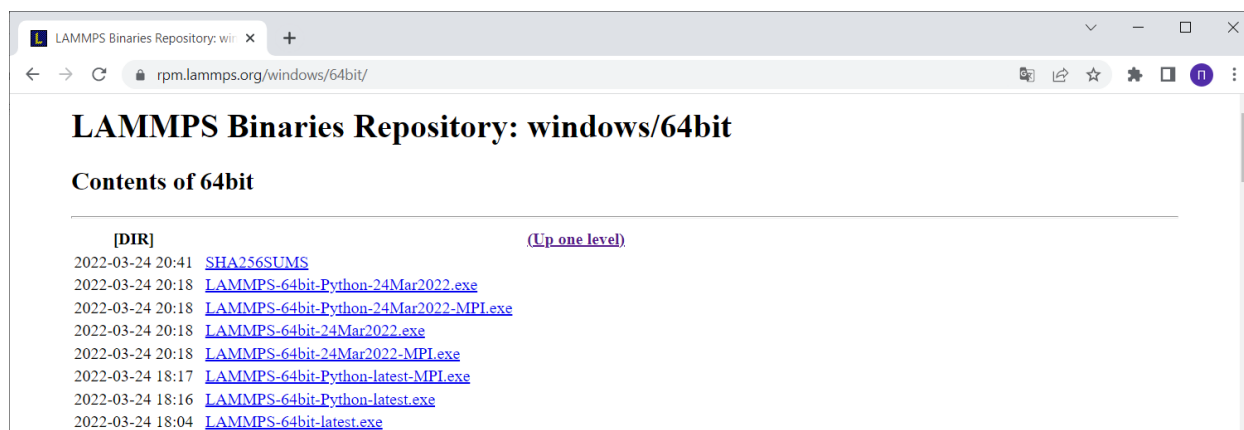
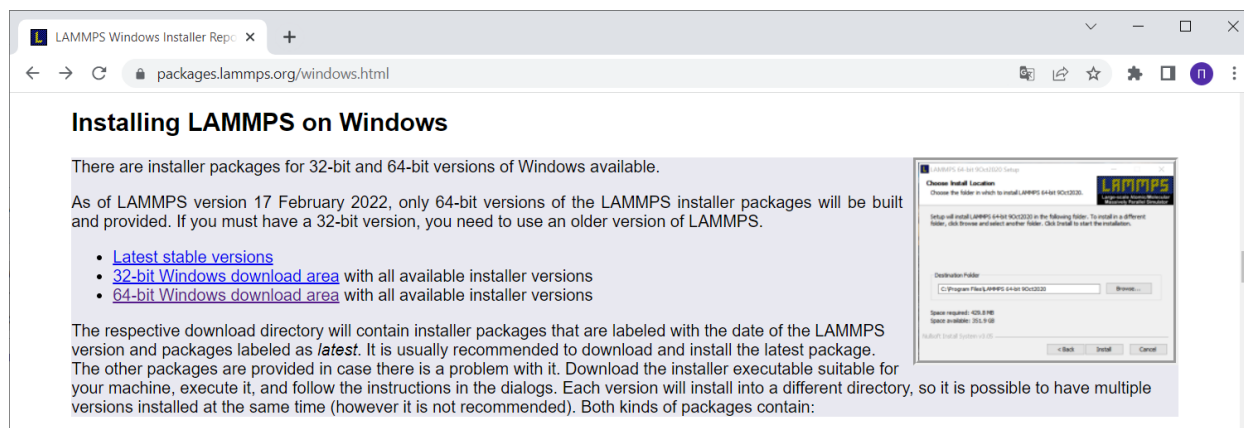
<http://www.kimrt.ru>

Онлайн-курс

[Суперкомпьютерные технологии в задачах моделирования](#)

LAMMPS — свободный пакет для классической молекулярной динамики, написанный группой из Сандийских национальных лабораторий. Пакет может применяться для крупных расчётов (до десятков миллионов атомов). Для работы на многопроцессорных системах используется интерфейс MPI. Пакет распространяется по лицензии GPL и доступен в виде исходных кодов, а также в виде скомпилированных пакетов для Microsoft Windows и различных дистрибутивов Linux [1].

Установка. Загрузите файл установки последней версии по ссылке, *LAMMPS-64bit-latest.exe* [2].

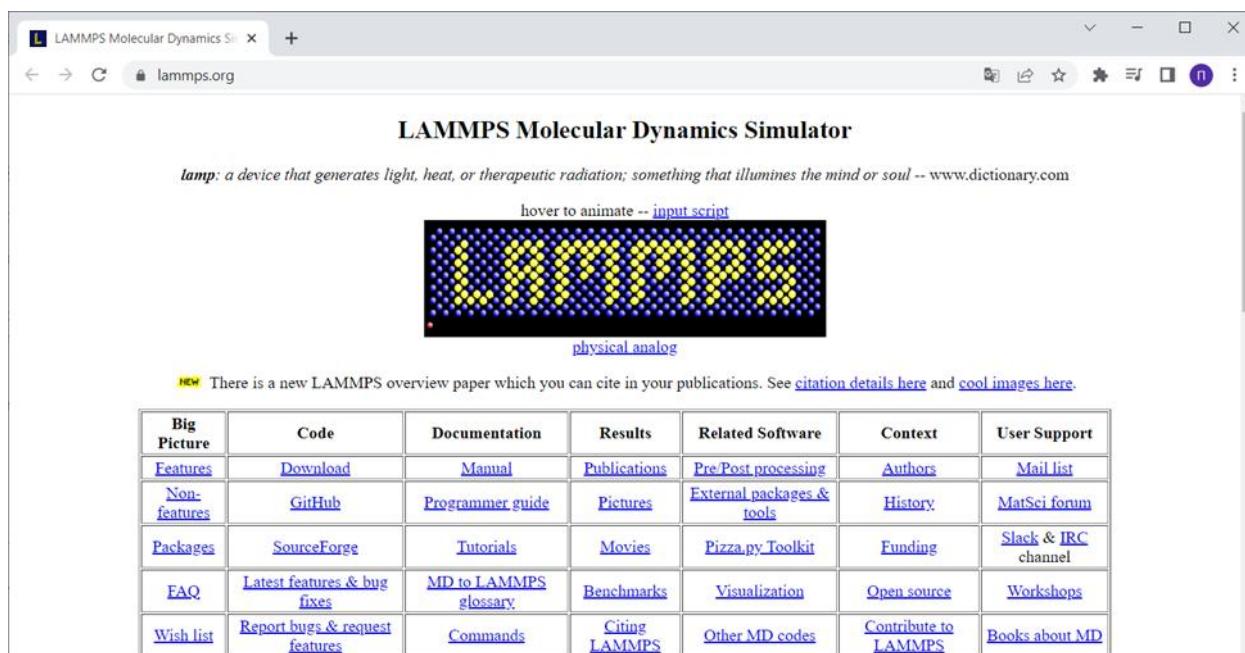


<http://www.kimrt.ru>

© Золотарев П.А., Колегов К.С. 2022

Запустите файл и следуйте инструкциям мастера установки.

Запуск. Загрузите файл [3]. Анимация этого скрипта расположена на главной странице LAMMPS [4].



Для запуска расчета откройте командную строку, с помощью команды `cd` перейдите в нужный раздел и выполните `lmp -in in.logo.txt` [5, 6]. С помощью флага `-in` LAMMPS читает команды из входного файла. LAMMPS выполняет вычисления, считывая команды из входного скрипта (текстового файла) по одной строке за раз. Когда входной сценарий завершается, LAMMPS завершает работу. Этим LAMMPS отличается от программ, которые считывают и обрабатывают весь ввод перед началом вычисления.

Каждая команда заставляет LAMMPS предпринять какое-то немедленное действие, не принимая во внимание какие-либо команды, которые могут быть обработаны позже. Команды могут устанавливать внутреннюю переменную, читать файл или запускать симуляцию [7].

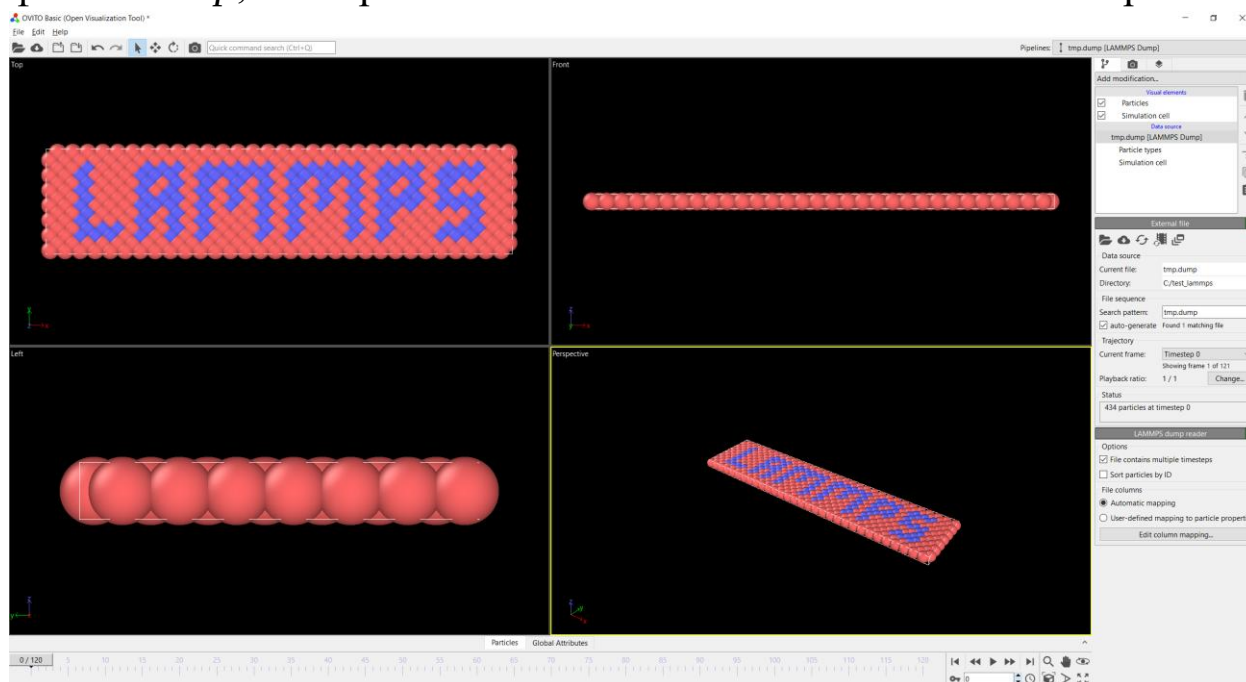
```
Командная строка
Microsoft Windows [Version 10.0.18363.418]
(c) Корпорация Майкрософт (Microsoft Corporation), 2019. Все права защищены.

C:\Users\zolotarev.p>cd C:\test_lammps

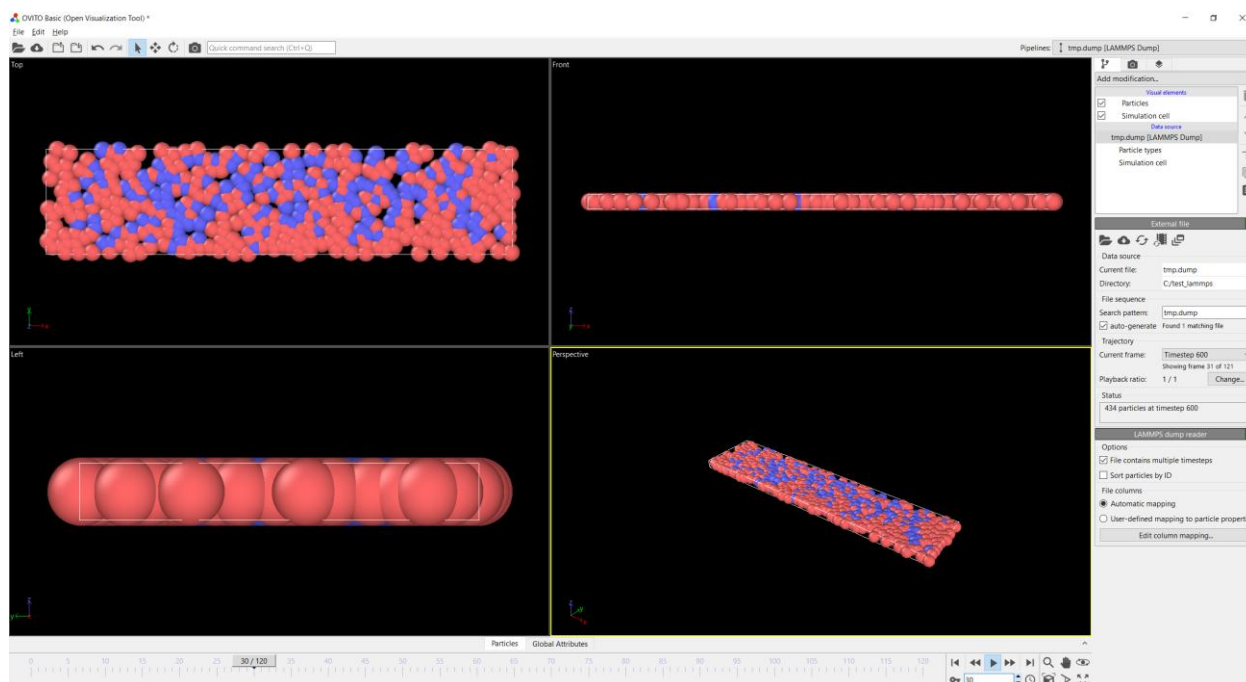
C:\test_lammps>lmp -in in.logo.txt
LAMMPS (29 Sep 2021 - Update 1)
OMP_NUM_THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread. (src/comm.cpp:98)
using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
```

© Золотарев П.А., Колегов К.С. 2022

Визуализация. Для визуализации вместе с LAMMPS могут использоваться следующие программы [8]: VMD, AtomEye, OVITO, ParaView, PyMol, Raster3d, RasMol. Рассмотрим визуализацию с помощью *OVITO*. Для загрузки программы перейдите по ссылке [9]. Запустите файл и следуйте инструкциям мастера установки. Откройте программу и перейдите в меню *File* → *Load file*, после чего выберите файл *.dump*, который был записан после выполнения расчетов.



Воспроизведение анимации запускается с помощью кнопки *Play Animation* или *пробела*.



© Золотарев П.А., Колегов К.С. 2022

Дополнительные материалы: документация [10], Intro to Molecular Dynamics Simulation using LAMMPS [11], Introduction to LAMMPS [12], LAMMPS playlist [13].

http://www.kimrt.ru/index/course_stm/0-24

Проект реализуется победителем Конкурса на предоставление грантов преподавателям магистратуры 2020/2021 благотворительной программы «Стипендиальная программа Владимира Потанина» Благотворительного фонда Владимира Потанина.

Источники

1. LAMMPS wiki. URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/LAMMPS>
2. LAMMPS install. URL: <https://packages.lammps.org/windows.html>
3. Input logo. URL: <https://www.lammps.org/inputs/in.logo.txt>
4. LAMMPS. URL: <https://www.lammps.org/>
5. Run basics. URL: https://docs.lammps.org/Run_basics.html
6. Run windows. URL: https://docs.lammps.org/Run_windows.html
7. Input file. URL: https://docs.lammps.org/Commands_input.html
8. Visualization. URL: <https://www.lammps.org/viz.html>
9. Ovito download. URL: <https://www.ovito.org/windows-downloads/>
10. LAMMPS docs. URL: <https://docs.lammps.org/Manual.html>
11. Intro to Molecular Dynamics Simulation using LAMMPS.
URL: <https://www.youtube.com/watch?v=ZMiveX6n-1w>
12. Introduction to LAMMPS. URL:
<https://www.youtube.com/watch?v=yu-ipxvviO4>
13. LAMMPS. URL:
<https://www.youtube.com/playlist?list=PLEwB0P-kIa7JF9Vy2O-Az5mmeJFmnRExZ>

<http://www.kimrt.ru>