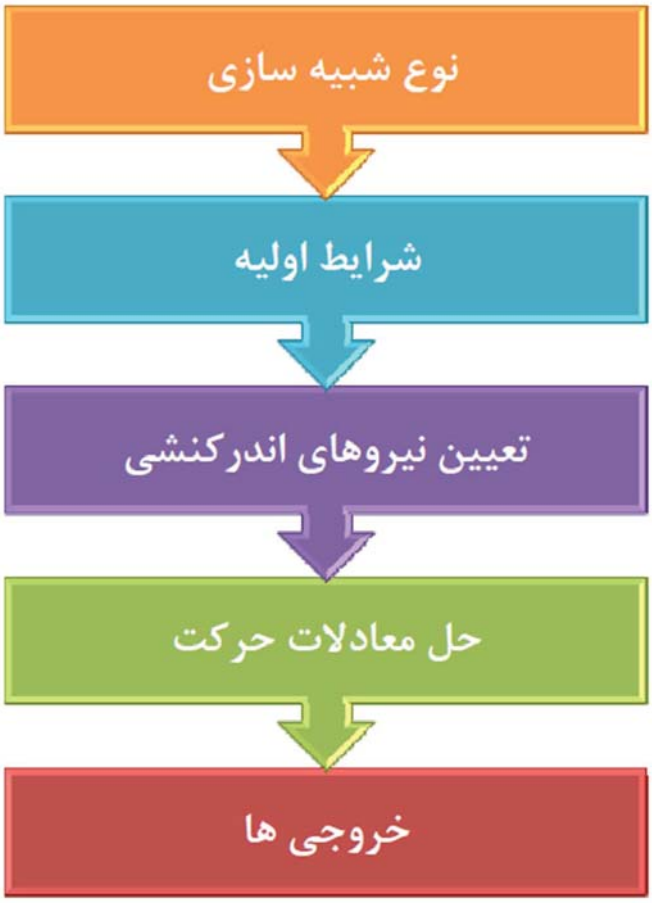
استراتژی استفاده از LAMMPS

1. دانلود LAMMPS
2. نوشتن فایل ورودی
3. اجرای شبیه سازی

نحوه نوشتن یک فایل ورودی



- Atomic, molecules,...
- Boundary conditions

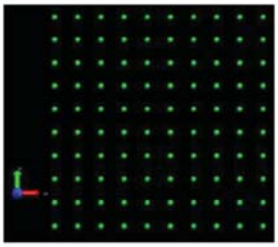
- Initial positions
- Initial velocities
- Mass

- Potential functions

- nve, nvt, npt,...
- timestep

- Energy, temperature, pressure,...

نحوه نوشتن یک فایل ورودی (ادامه)



نوع شبیه سازی

```
# Example 1
boundary    p  p  p
atom_style  atomic
units  lj
```

شرایط اولیه

```
lattice  fcc  0.2
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5   units   lattice
create_box        1              mybox
create_atoms     1   region   mybox
mass  1   1.0
velocity  all   create   1.00  123456
```

تعیین نیروها و توابع پتانسیل

```
pair_style     lj/cut   2.5
pair_coeff     *   *    1.00  1.00
```

حل معادلات حرکت (تعیین هنگرد)

```
fix            myfix1  all   nve
timestep       0.001
```

خروجی ها

```
thermo      10
thermo_style   custom   step   etotal   ke   pe  temp  press  vol
dump  mydump    all   xyz   50    dump_LJ.xyz
run          1000
```

استراتژی استفاده از LAMMPS

1. دانلود LAMMPS
2. نوشتن فایل ورودی
3. اجرای شبیه سازی

اجرای نرم‌افزار

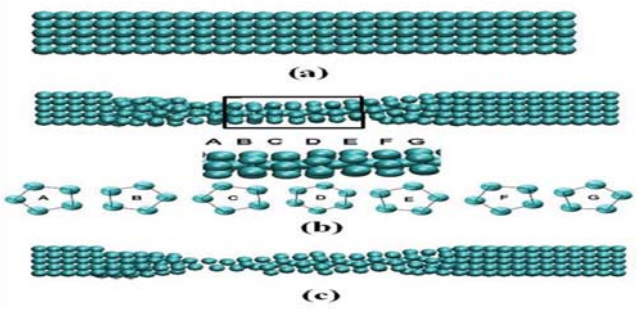
چگونگی اجرای فایل متنی به کمک LAMMPS در ویندوز

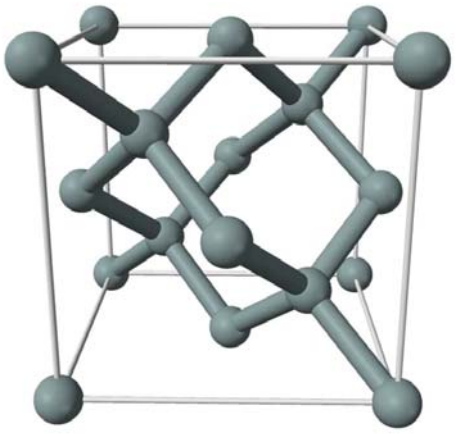
- دستور **cmd** را در قسمت **run** ویندوز اجرا کنید.
- به مسیر مورد نظر که فایل متنی به همراه فایل اجرایی در آن قرار داده شده است بروید.
- دستور زیر را اجرا کنید:

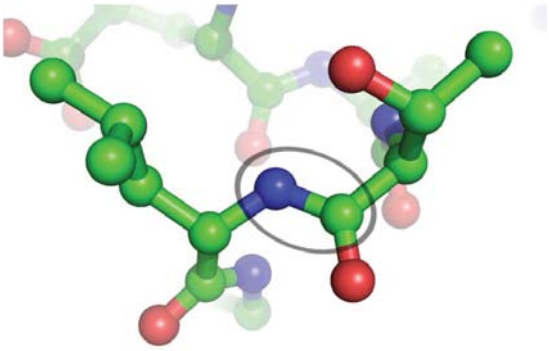
  lmp_win_no-mpi -in Example1.txt

- خروجی ها در فایلی به نام **log.lammps** ذخیره می شوند.

دستورات بیشتر برای شبیه سازیهای پیشرفته تر







دستورات بیشتر

```
# Example 1

boundary    p  p  p
atom_style  atomic
units  lj


lattice  fcc  0.2
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5
create_box        1              mybox
create_atoms    1   region   mybox
mass  1   1.0
velocity  all create  0.5   123456


pair_style     lj/cut   2.5
pair_coeff     1   1      1.00  1.00


fix              myfix1  all   nve
timestep       0.001


thermo       10
thermo_style   custom   s tep   etotal   temp   press  vol
dump   mydump   1   all   xyz    50 dump.xyz
run            1000
```

```
boundary    p  f  p
boundary     s  p  p
```

تغییر شرط مرزی
مثلا وجود یک سطح

```
atom_style   molecular
atom_style   charge
atom_style   hybrid  atomic molecular charge
```

تغییر نوع ذرات
به مثلا مولکول یا ذرات
باردار

```
units   metal
units   real
```

سیستم واحدها برای مواد دیگر
نظیر سیلیکون و یا پروتئین

دستورات بیشتر(ادامه)

نوع شبکه برای ساختارهای
نظیر سیلیکون دیگر

```
# Example 1

boundary    p  p  p
atom_style  atomic
units  lj


lattice   fcc  0.2
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5
create_box        1              mybox
create_atoms    1   region   mybox
mass  1   1.0
velocity  all create  0.5   123456


pair_style     lj/cut   2.5
pair_coeff     1   1      1.00  1.00


fix              myfix1  all   nve
timestep       0.001


thermo       10
thermo_style   custom   s tep   etotal   temp   press  vol
dump   mydump   1   all   xyz    50 dump.xyz
run           1000
```

```
lattice     diamond
lattice     hex
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5 units box
region  myshpere  sphere  0  0  0  1
region  reg12  union        2   reg1      reg2
region  reg1    intersect   2   reg12    reg13

create_box        4        mybox

create_atoms     1  region   mybox
create_atoms     4  single    0  0  0
create_atoms     5  random   5  123 4   mybox

velocity  all create  0.5   123456    dist  gaussian     rot  yes    mom  yes
```

دستورات بیشتر(ادامه)

```
# Example 1
boundary    p  p  p
atom_style  atomic
units  lj


lattice  fcc  0.2
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5
create_box        1              mybox
create_atoms    1  region  mybox
mass  1   1.0
velocity  all create  0.5   123456


pair_style     lj/cut  2.5
pair_coeff     1  1      1.00  1.00


fix              myfix1  all   nve
timestep       0.001


thermo       10
thermo_style   custom  s tep  etotal   temp   press  vol
dump  mydump  1  all  xyz   50 dump.xyz
run           1000
```

انوع توابع مختلف پتانسیل

```
pair_style  eam/alloy
pair_tyle   tersoff
pair_style  coul/cut
pari_style  hybrid  tersof  lj/cut
```

نحوه تعیین ضرایب تابع پتانسیل

```
pair_coeff   1   1    1.00   1.00
pair_coeff   1   2    1.00   1.00
pair_coeff   *   *    1.00   1.00
Pair_coeff   *   *    SiC.tersoff   Si  C  Si
```

دستورات بیشتر(ادامه)

```
# Example 1

boundary    p  p  p
atom_style  atomic
units  lj


lattice  fcc  0.2
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5
create_box        1              mybox
create_atoms    1  region   mybox
mass  1   1.0
velocity  all create  0.5   123456


pair_style     lj/cut   2.5
pair_coeff     1  1      1.00  1.00


fix              myfix1  all   nve
timestep         0.001


thermo      10
thermo_style   custom   s tep   etotal   temp   press  vol
dump  mydump  1  all  xyz   50 dump.xyz
run          1000
```

هنگردهای دیگر
نظیر دما ثابت
یا فشار ثابت

```
fix  mynvt   all  nvt   temp  1   2    0.1
fix  mynpt   all  npt   temp  1   2    0.1   iso  1   1    0.2

fix  fixedlayers      mygroup1  setforce  0   0   0
fix  movinglayers  mygroup2  move   linear   1  1  1
```

حرکت یا ثابت کردن برخی اتمها
برای مثلا اعمال کشش یا ایجاد
شرط مرزی دما ثابت

دستورات بیشتر(ادامه)

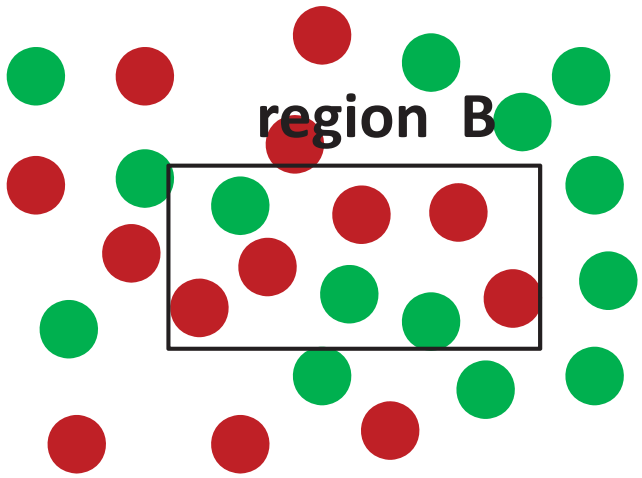
```
# Example 1

boundary    p  p  p
atom_style  atomic
units  lj


lattice  fcc  0.2
region  mybox  block  0  5   0  5   0  5
create_box       1            mybox
create_atoms    1  region  mybox
mass  1   1.0
velocity  all create  0.5   123456


pair_style    lj/cut  2.5
pair_coeff    1  1     1.00  1.00


fix              myfix1  all  nve
timestep      0.001


thermo      10
thermo_style   custom  s tep  etotal   temp  press  vol
dump  mydump    all  xyz   50  dump.xyz
run          1000
```

ریختن دیگر خروجی ها مثل
ذره در هر موقعیت یک تعداد
گام زمانی

```
dump  mydump  mygroup  custom 10  dump.txt  id  type  x  y  z  vx  vy  vz
```

مثال : 1نوشتن یک فایل متنی ورودی

تفاوت میان region و group.



group red

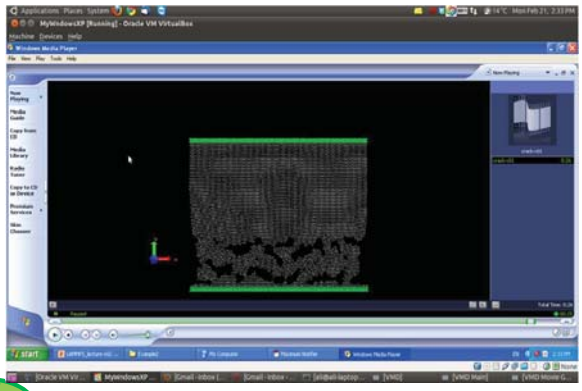
group green

```
#How to define a group
group mygroup region mybox
group mygroup type 2
```

مثال پیشرفته تر : 2مثال

```
#2d  LJ crack simulation

dimension   2
boundary    s  s  p
atom_style  atomic

lattice     hex  0.93
region      mybox  block  0  100  0  40  -0.25  0.25  units  lattice
create_box      3   mybox
create_atoms    1  region  mybox

mass        1   1.0
mass        2   1.0
mass        3   1.0

# define  groups
region      1  block  INF  INF   INF  1.25   INF  INF
group       lower   region  1
region      2  block  INF INF  38.75  INF  INF  INF
group       upper   region  2
group       boundary  union   lower  upper
group       mobile     subtract  all  boundary

set         group  lower   type   2
set         group  upper   type   3
```

مساله دوبعدی است



سه نوع اتم تعریف کرده ایم برای تفاوت سه ناحیه

INFیعنی منفی بی نهایت و یا مثبت بی نهایت

مثال : 2مثال پیشرفته تر

```
# LJ potentials
pair_style    lj/cut   2.5
pair_coeff    * *    1.0   1.0    2.5

# initial velocities
velocity      mobile create   0.01   887723
velocity      upper   set   0.0    0.3    0.0
velocity      lower   set   0.0    0.0    0.0

# fixes
fix           myfix1  all  nve
fix           myfix2  boundary   setforce    NULL   0.0    0.0
timestep      0.003


thermo        100
thermo_style  custom   step   etotal   ke   pe   temp   press   vol

dump          mydump   all   xyz    10    dump_crack.xyz
run           8000
```

سرعت اولیه مرز بالا در راستای yرا
0.3قرار می دهیم و برای مرز پایین را
صفر می گذاریم

نیروی وارد بر مرزها را در راستای y
و zصفر می کنیم. (در راستای xرا
تغییری نمی دهیم.)

توضیح دستور compute

.برای محاسبه کمیتهای مورد انتظار نظیر دما، فشار ، تنش و ... از دستور computeاستفاده می شود.

.تعداد زیادی computeدر لمپس وجود دارد.

.ساختار کلی یک : compute

برای هر compute باید یک IDمشخص کنیم.

Groupمورد نظر برای اعمال compute

انچه که می خواهیم محاسبه شود

compute ID mygroup temp

thermo_style custom step etotal temp press vol c_ID

نحوه فراخوانی compute برای چاپ در خروجی

c_ID
c_ID[1]
c_ID[1][2]

توضیح دستور variable

برای تعریف متغیرهای مورد نیاز استفاده می شود:

اسم متغیر

keyword

ورودی

variable a equal 2

variable b equal c_ID

variable c atom x*y

اگر کمیت به صورت per/atom و آرایه ای باشد)مثل موقعیت اتمها (می باید از keyword atom به جای equalاستفاده کرد که حاصل هم یک آرایه خواهد شد.

متغیرهای فوق در جاهای دیگر برنامه می بایست به صورت زیر استفاده شوند:

${a}
v_b
v_c

اضافه کردن دستور compute به مثال 2

```
# LJ potentials
pair_style    lj/cut   2.5
pair_coeff    * *    1.0   1.0    2.5

# initial velocities
velocity      mobile create   0.01   887723
velocity      upper   set   0.0    0.3    0.0
velocity      lower   set    0.0    0.0    0.0

# fixes
fix           myfix1  all  nve
fix           myfix2  boundary   setforce    NULL   0.0    0.0
timestep      0.003

compute     Tmobile   mobile   temp

thermo        100
thermo_style  custom   step   etotal   ke   pe   temp   press   vol   c_Tmobile

dump          mydump   all   xyz   10   dump_crack.xyz
run           8000
```

اضافه کردن دستور variable به مثال 2

```
# LJ potentials
pair_style    lj/cut  2.5
pair_coeff    * *    1.0   1.0    2.5

# initial velocities
velocity        mobile    create   0.01   887723
variable        VyUpper    equal   0.3
variable        VyLower    equal   0
velocity        upper   set    0.0    ${VyUpper}    0.0
velocity        lower   set    0.0    ${VyLower}    0.0

# fixes
fix             myfix1  all  nve
fix             myfix2  boundary   setforce    NULL   0.0    0.0
timestep        0.003


thermo          100
thermo_style  custom   step    etotal    ke   pe   temp   press   vol

dump            mydump   all   xyz    10    dump_crack.xyz
run             8000
```