بخش اول : قواعد کلی کدنویسی لمپس

چند نکته اساسی در مورد کلیه کدهای لمپس :

- هر خط غیر خالی به عنوان یک خط کد با معنا توسط لمپس شناخته می شود .
- دستورهای لمپس Case Sensitive اند ؛ بدین معنی که به بزرگ و کوچکی حروف حساس اند .
- دستورهای پیشفرض و اصلی لمپس به صورت حروف کوچک (Lower-Case) نوشته می شوند .
- حروف بزرگ (Upper-Case) برای نوشتن نام ها و آی دی ها استفاده می شوند .

ساختمان کدهای ورودی : کدهای ورودی لمپس به صورت عمومی (پیشفرض) دارای ۴ قسمت است :

۱) قالب بندی (Initialization)
۲) معرفی اتم ها و مولکول ها (Atom Definition)
۳) تنظیمات و پیکربندی ها (Settings)
۴) کدهای اجرایی (Run a simulation)

دو بخش پایانی (۳ و ۴) می توانند در یک کد به طور مکرر تکرار شوند . یعنی می توان با پیکربندی خاصی یک بار کد را اجرا نمود و سپس در ادامه ی کد پس از تغییرات مورد نظر دوباره کد ها را اجرا نمود و این روند می تواند به طور متوالی تکرار شود و نتایج خروجی را با هم مقایسه نمود . در ادامه به طور خلاصه به تشریح هر کدام از ۴ بخش فوق خواهیم پرداخت .

✓ قالب بندی : در این بخش پارامترهایی تنظیم خواهد شد که نیاز است قبل از تعریف اتم ها و مولکول ها یا خواندن فایل های ورودی ، برای سیستم تعریف شده باشند .

دستورهای مرتبط با این بخش عبارتند از :
Units
Dimension
Newton
Processors
Boundary
Atom_style
Atom_modify

✓ معرفی اتم ها و مولکول ها : برای معرفی اتم ها و مولکول ها در لمپس ۳ روش در دسترس است :

۱. خواندن اطلاعات ورودی از فایل های دیتا و ریستارت با دستورهای read_data و read_restart . در این فایل ها می توان ترکیب های مولکولی و ساختارهای مختلف را در شبیه سازی ها وارد نمود .

WWW.1PAPER.BLOG.IR

۲. تعریف مستقیم اتم ها و شبکه های اتمی (بدون پیوند های بین اتمی پیشفرض) با استفاده از دستورهای lattice ، region ، create_box و create_atom .

۳. ترکیبی از دو روش بالا برای شبیه سازی های بزرگ و پیچیده (به کمک تکرار دستورهای دو شیوه فوق).

✓ تنظیمات و پیکربندی ها : پس از تعریف اتم ها و ساختارهای مولکولی حال سیستم آماده است تا پیکربندی ها مختلفی بر آن اعمال شود ؛ مانند حوزه و ضریب نیروهای بین مولکولی ، پارامترهای اجرایی شبیه سازی ، قواعد خروجی های شبیه سازی و ... .

در ادامه به بخشی از تنظیمات قابل تعریف برای سیستم های شبیه سازی اشاره می کنیم :

- ضریب و حوزه تاثیر نیروهای بین اتمی و مولکولی با دستورهای زیر قابل تنظیم اند (این بخش از کد ها را می توان در فایل های ورودی نیز تنظیم نمود).

Pair_coeff	Bond_coeff
Angle_coeff	Dihedral_coeff
Improper_coeff	Kspace_style
Dielectric	Special_bonds

- پارامترهای مختلف شبیه سازی با دستورهای زیر تنظیم می شوند .

Neighbor	Neigh_modify
Group	Timestep
Reset_timestep	Run_style
Min_style	Min_modify

- استفاده از دستورهای Fix برای اعمال کردن ویژگی های مختلف اعم از حالت ها و شرایط مرزی ، یکپارچگی زمان و ... .
- ویژگی های خروجی نیز با دستورهای زیر قابل تنظیم اند .

Thermo	Dump
Restart	...

✓ کدهای اجرایی : شبیه سازی مولکولی با استفاده از دستور run در لمپس اجرا می شود . و دیگر کدهای مربوط به اجرای موازی (Parallel) در این بخش قرار می گیرند .

✓ نکته مهم : دستورهای ذکر شده ی بالا فقط بخش کوچکی از کل دستورهای قابل اعمال و اجرا در لمپس اند. به همین دلیل نیاز است که برای آشنا شدن کامل با دستورهای لمپس باید به Manual این نرم افزار رجوع شود .

در بخش دوم این آموزش به تحلیل نمونه کد ورودی لمپس خواهیم پرداخت .

WWW.1PAPER.BLOG.IR