

معرفی ندیم افشار LAMMPS

WWW.1PAPER.BLOG.IR

Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

شبیه‌ساز اتمی/مولکولی بزرگ‌مقیاس به‌شدت موازی

- ✓ **شبیه‌ساز:** فراهم کننده بستری برای شبیه‌سازی سیستم‌های مختلف.
- ✓ **اتم‌ی / مولکولی:** نشان از توانایی نرم افزار در شبیه‌سازی سیستم‌های اتمی و مولکولی (پیوندها) است.
- ✓ **بزرگ‌مقیاس:** به معنی توان شبیه‌سازی سیستم‌های پر ذره است.
- ✓ **به‌شدت موازی:** به معنی توانایی نرم افزار در موازی‌سازی شبیه‌سازی‌های سنگین.

LAMMPS یعنی چی ؟

✓ توسعه دهنده نرم افزار: Sandia National Laboratories.

✓ زبان برنامه نویسی: C++ (برای دوستانی که قصد دارن نرم افزار رو

گسترش بدن !!!)

✓ سیستم عامل اجرایی: Cross-platform ← (به معنی اینکه بر

روی تمام سیستم عامل های موجود قابل اجرا شده فقط باید توسط کامپایلر مخصوص خودش کدهاش آماده اجرا شدن بشن).

✓ لایسنس: تحت پروانه GPL که از زیر مجموعه پروانه های فرهنگ

گنو/لینوکس منتشر شده به این معنی که دسترسی به کدهاش رایگانه و میتونید کدهاشو تغییر بدین و دوباره منتشرش کنید .

ویژگی های پایه ای نرم افزار

1- قابلیت اجرا شدن به صورت موازی و سریال (روش معمولی).

2- قابلیت محاسبات بر روی GPUها : GPU به معنی هسته پردازشی گرافیکی سیستم هستش که محاسبات گرافیکی رو انجام میده و باعث میشه که بار محاسباتی وارده بر CPU کم بشه و محاسبات سریع تر انجام بشه .

3- اجرای شبیه سازی با فایل های Input : این قابلیت به گونه ای موجب کارآمدی و انعطاف نرم افزار شده. البته این ویژگی ظاهرا از فرهنگ لینوکس به امانت گرفته شده که همه فرایندها در قالب فایل انجام میشه .

4- قابلیت توسعه پذیری بالا .

5- پیش بینی حالت های مختلف شبیه سازی و پختگی کتابخانه های ویژه : این ویژگی باعث راحتی کار محقق شبیه ساز میشه و به نوعی اونو از پیچیدگی های برنامه نویسی خلاص می کنه .

6- مستندات آموزشی و توسعه نرم افزاری کامل و به روز (به طور مداوم).

7- کاربرد پذیری بالا و خروجی های قابل قبول در جایگاه های مختلف .

نقاط مثبت نرم افزار

1- **نداشتن واسط کاربری گرافیکی (GUI):** یعنی برای اجرای نرم افزار نیازه به محیط های متنی و دستوره های متنی سفر کنیم که برای بعضی ها ترسناکه ولی برای ماجراجو هایی مثل شما چیزی نیست .

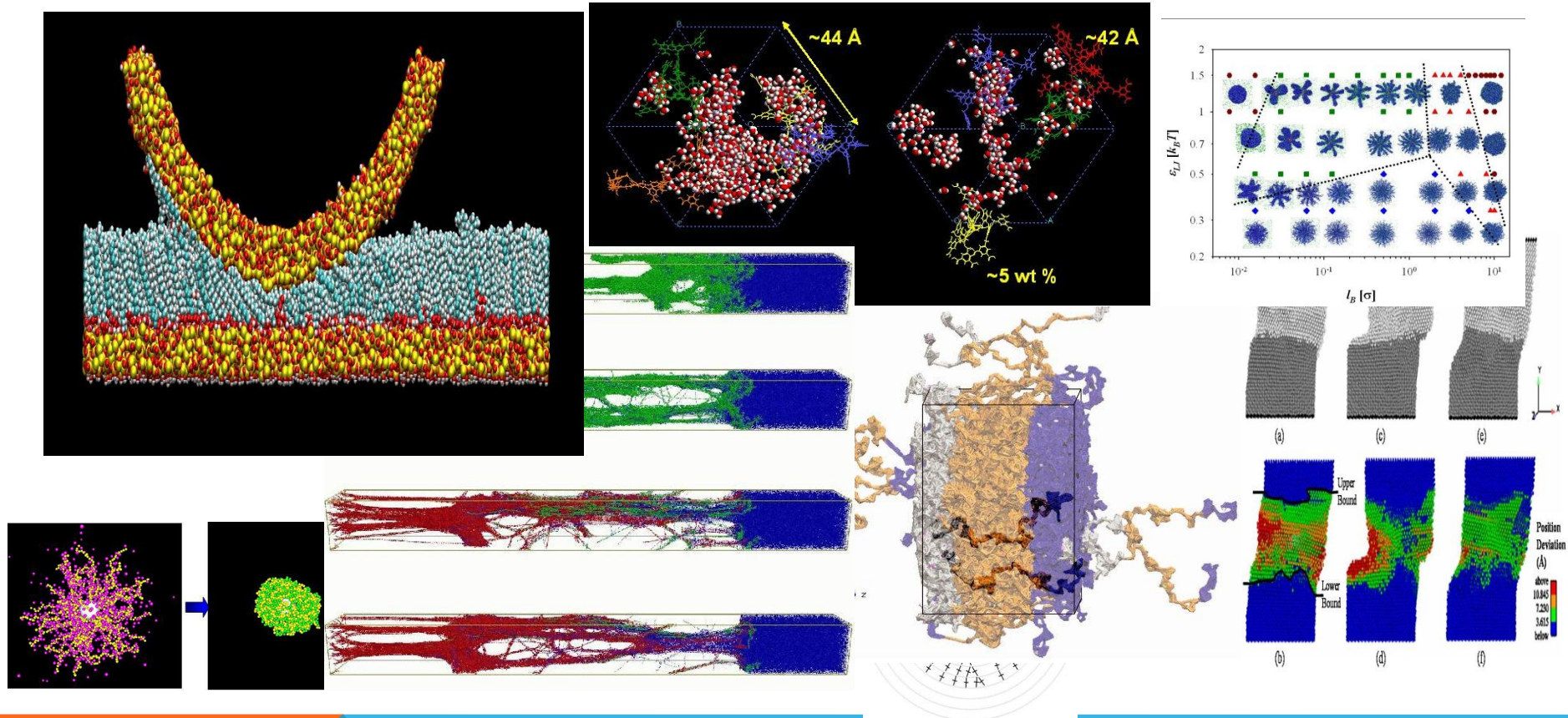
2- **ناتوانی در تولید تصاویر گرافیکی متحرک در شبیه سازی های دینامیک مولکولی:** نرم افزار لمپس در حقیقت فقط فایل های مختصات و اطلاعات خروجی رو تولید می کنه ولی برای تولید تصاویر گرافیکی متحرک به نرم افزار های دیگه ای نیازه که در آموزش گام به گام به اون اشاره می کنم .

3- **ناتوانی در تولید نمودارهای اطلاعات خروجی .**

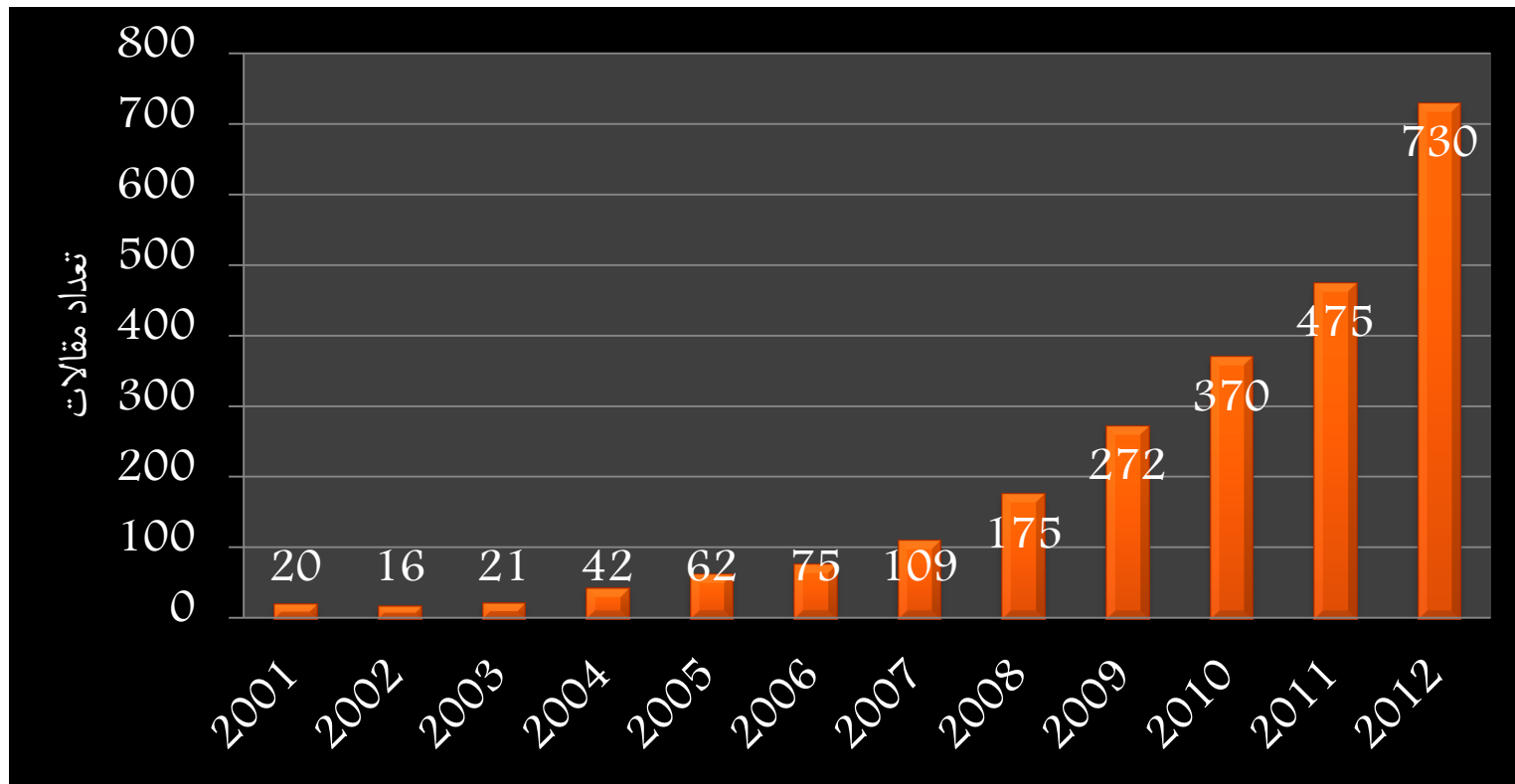
4- **ناتوانی در تعیین خودکار نیروهای اتمی و مولکولی:** به این معنی که نیاز است که نیرو ها توسط کاربر تعیین شوند . البته این مسئله به نوعی موجب انعطاف در شبیه سازی شده و موجب آزاد گذاشتن شبیه ساز در انتخاب نیروها و بررسی اثرگذاری خاص آن نیرو شده است .

نقاط منفی نرم افزار

نمونه های زیر با نرم افزار های Visualization گرافیکی شده اند :



نمونه های شبیه سازی نرم افزار



نمودار بالا تعداد مقالات ثبت شده در شاییت رسمی نرم افزار لمپسه که حتما از تمام مقالات تولید شده به کمک این نرم افزار کمتره ولی همین نمودار اقبال عمومی استفاده از این نرم افزار رو نشون میده و نشان از ارزش یادگیری این نرم افزاره .

مقالات منتشر شده به کمک LAMMPS

