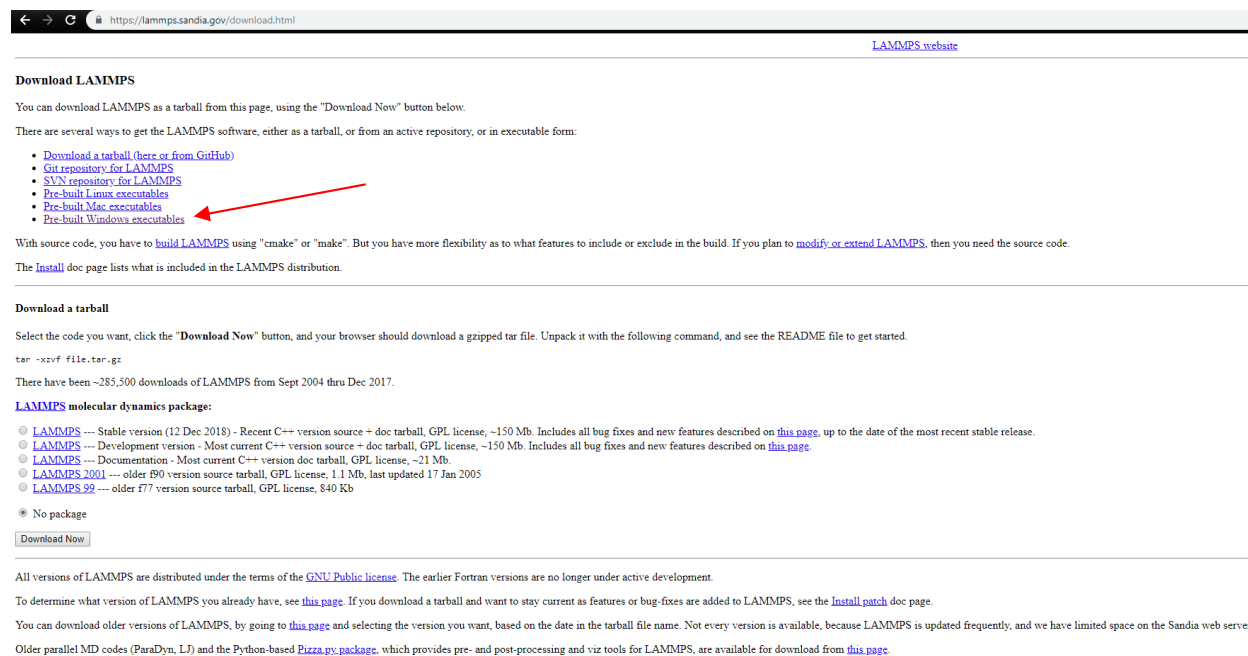


Guide d'installation et d'utilisation de LAMMPS et logiciels utiles

Par Antoine Rincent, 21 janvier 2019

Installation de LAMMPS

Pour débuter, il est important d'installer LAMMPS, leur site web ne paye pas de mine, mais on y trouve tout. Pour l'installer, il suffit d'aller dans la section de téléchargements, puis de sélectionner la distribution la mieux appropriée pour vous.



← → <https://lammps.sandia.gov/download.html> 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 include or exclude in the build. If you plan to [modify or extend LAMMPS](#), then you need the source code.

The [Install](#) doc page lists what is included in the LAMMPS distribution.

Download a tarball

Select the code you want, click the "Download Now" button, and your browser should download a gzipped tar file. Unpack it with the following command, and see the README file to get started.

```
tar -xvzf file.tar.gz
```

There have been ~285,500 downloads of LAMMPS from Sept 2004 thru Dec 2017.

LAMMPS molecular dynamics package:

- [LAMMPS](#) --- Stable version (12 Dec 2018) - Recent C++ version source + doc tarball, GPL license, ~150 Mb. Includes all bug fixes and new features described on [this page](#), up to the date of the most recent stable release.
- [LAMMPS](#) --- Development version - Most current C++ version source + doc tarball, GPL license, ~150 Mb. Includes all bug fixes and new features described on [this page](#).
- [LAMMPS](#) --- Documentation - Most current C++ version doc tarball, GPL license, ~21 Mb.
- [LAMMPS 2001](#) --- older f90 version source tarball, GPL license, 1.1 Mb, last updated 17 Jan 2005
- [LAMMPS 92](#) --- older f77 version source tarball, GPL license, 840 Kb

No package

[Download Now](#)

All versions of LAMMPS are distributed under the terms of the [GNU Public license](#). The earlier Fortran versions are no longer under active development.

To determine what version of LAMMPS you already have, see [this page](#). If you download a tarball and want to stay current as features or bug-fixes are added to LAMMPS, see the [Install patch](#) doc page.

You can download older versions of LAMMPS, by going to [this page](#) and selecting the version you want, based on the date in the tarball file name. Not every version is available, because LAMMPS is updated frequently, and we have limited space on the Sandia web server.

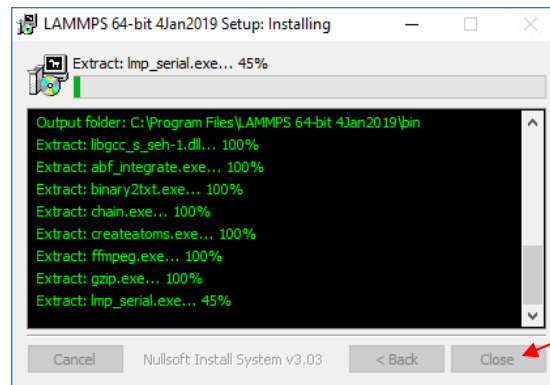
Older parallel MD codes (ParaDyn, LJ) and the Python-based [Pizza.py package](#), which provides pre- and post-processing and viz tools for LAMMPS, are available for download from [this page](#).

Puisque ce guide s'adresse plutôt à un usage dans Windows, c'est la distribution que je prendrai. En suivant ce lien vous serez redirigé vers leur site de téléchargement, c'est-à-dire [celui-ci au moment de la composition de ce guide](#). Il vous suffit de prendre la version (32 ou 64 bit) qui vous convient.

Choisissez celui le plus récent qui ne contient pas le string « MPI » dans sa nomenclature, à moins que vous vouliez utiliser des calculs en parallèle. Auquel cas, des installations plus complexes, exclues de ce guide, seront nécessaire. Pour se faire, je recommande de loin l'utilisation d'une machine Ubuntu.

Puisque ce n'est pas produit par un éditeur réputé, il est possible que vous ayez un message de Windows, vous avertissant que vous tentez probablement de lancer un virus et que « Windows a protégé votre ordinateur », ignorez ce message et exécutez quand même.

Comme le site web, l'installateur ne paye pas de mine, mais il est rapide et efficace!



Une fois terminé, vous pourrez cliquer sur « Close », et voilà, LAMMPS est installé!

Puisque LAMMPS a tendance à légèrement éparpiller ses fichiers, un autre logiciel très utile (et léger sur votre disque et processeur!) se joint bien à ce dernier, il n'est pas obligatoire de l'installer aussi, mais je le recommande fortement, autant aux fins de LAMMPS qu'à des fins quotidiennes. C'est Everything!

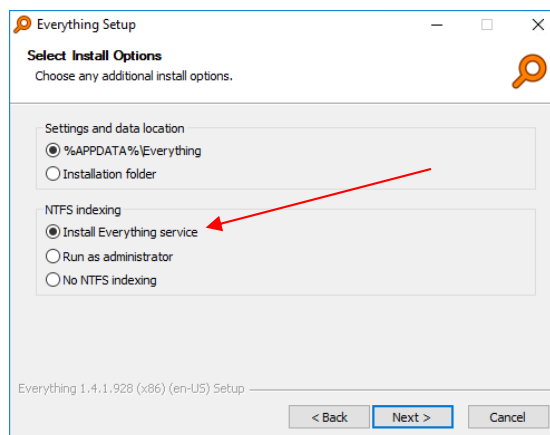
Installation d'Everything

Everything est un logiciel qui permet de très efficacement indexer les fichiers et répertoires présents sur tous vos disques, permettant de très rapidement et facilement retrouver des fichiers sur votre ordinateur, chose pour laquelle la recherche intégrée de Windows est incroyablement incompétente.

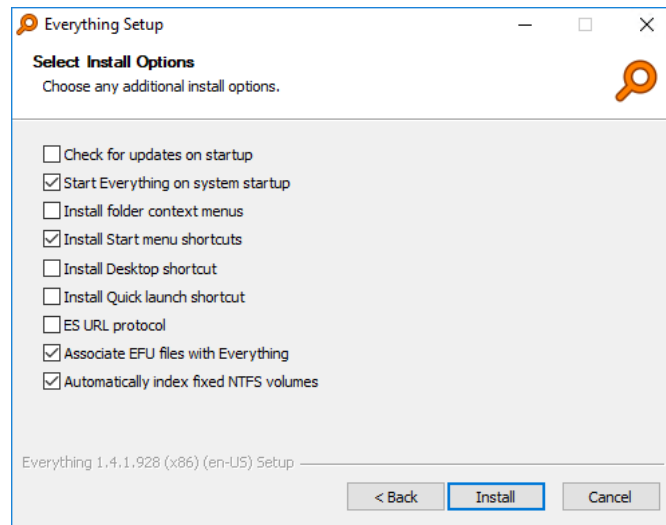
Comme dans le cas de LAMMPS, [leur site web](#) ne paye pas de mine, mais il est au moins plus clair! Rendez-vous dans l'onglet « [Downloads](#) » afin de trouver la version d'installation qui convient le mieux pour vous. Je recommande de simplement descendre un peu dans la page et sélectionner la version la plus récente compatible avec votre ordinateur.

Encore une fois, il est possible que Windows pense qu'il s'agisse d'un virus et « protège votre ordinateur », il vous suffit d'ignorer cet avertissement et exécuter quand même le logiciel d'installation!

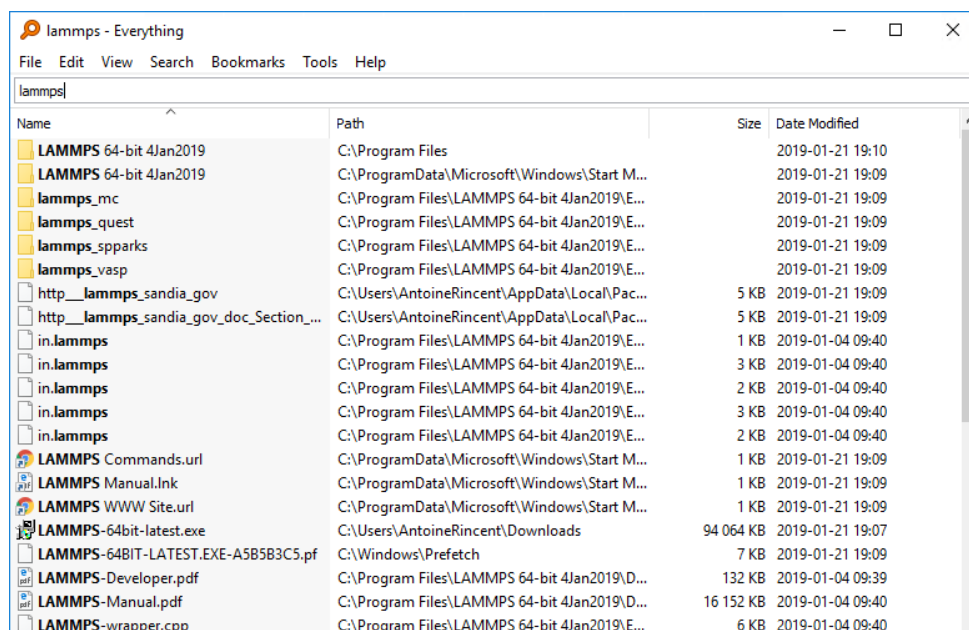
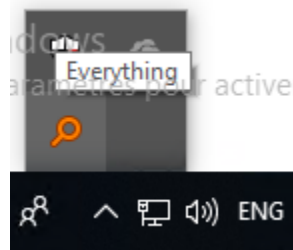
Lors de l'installation, je recommande de sélectionner « Install Everything service » puisque ceci permettra à Everything d'indexer les fichiers de votre ordinateur protégés par des droits d'administrateur sans vous envoyer un message d'avertissement quotidiennement.



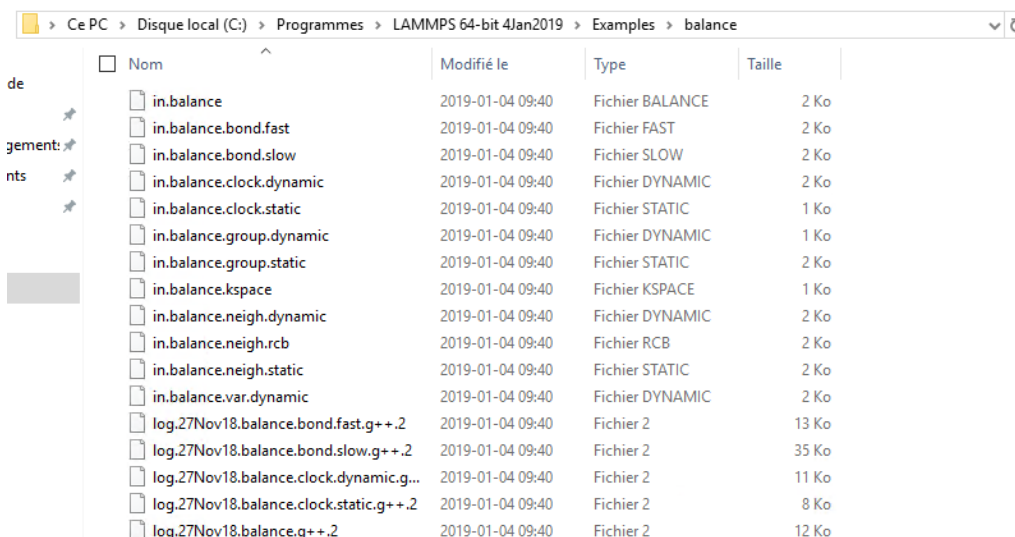
Je recommande ces paramètres d'installation une fois ce choix fait :



En quelques temps trois mouvements Everything sera installé sur votre machine et se lancera, indexant pour la première fois votre ordinateur (en fonction de l'espace occupé de vos disques durs et de la puissance de votre processeur, cette étape peut prendre quelques secondes). Vous trouverez par après Everything dans vos services, un simple double-clic sur la loupe orange vous permet de retrouver tout et n'importe quoi en quelques secondes.



Si vous avez la curiosité d'aller explorer dans le dossier « Exemples » du dossier d'installation de LAMMPS, vous remarquerez qu'il y a une quantité phénoménale de fichiers ayant une extension plus qu'unique.



Nom	Modifié le	Type	Taille
in.balance	2019-01-04 09:40	Fichier BALANCE	2 Ko
in.balance.bond.fast	2019-01-04 09:40	Fichier FAST	2 Ko
in.balance.bond.slow	2019-01-04 09:40	Fichier SLOW	2 Ko
in.balance.clock.dynamic	2019-01-04 09:40	Fichier DYNAMIC	2 Ko
in.balance.clock.static	2019-01-04 09:40	Fichier STATIC	1 Ko
in.balance.group.dynamic	2019-01-04 09:40	Fichier DYNAMIC	1 Ko
in.balance.group.static	2019-01-04 09:40	Fichier STATIC	2 Ko
in.balance.kspace	2019-01-04 09:40	Fichier KSPACE	1 Ko
in.balance.neigh.dynamic	2019-01-04 09:40	Fichier DYNAMIC	2 Ko
in.balance.neigh.rcb	2019-01-04 09:40	Fichier RCB	2 Ko
in.balance.neigh.static	2019-01-04 09:40	Fichier STATIC	2 Ko
in.balance.var.dynamic	2019-01-04 09:40	Fichier DYNAMIC	2 Ko
log.27Nov18.balance.bond.fast.g++.2	2019-01-04 09:40	Fichier 2	13 Ko
log.27Nov18.balance.bond.slow.g++.2	2019-01-04 09:40	Fichier 2	35 Ko
log.27Nov18.balance.clock.dynamic.g...	2019-01-04 09:40	Fichier 2	11 Ko
log.27Nov18.balance.clock.static.g++.2	2019-01-04 09:40	Fichier 2	8 Ko
log.27Nov18.balance.g++.2	2019-01-04 09:40	Fichier 2	12 Ko

Afin de les modifier, il est possible d'utiliser le Bloc-notes/Notepad intégré de Windows. Cependant, l'interface (ainsi que l'application entière pour être très franc) est plutôt désuète et ancestrale, raison pour laquelle, si vous ne l'avez pas encore fait, je recommande d'installer Notepad++.

Installation de Notepad++

Notepad++ est un logiciel qui permet d'ouvrir à peu près tous les types de documents, les éditer, et offre une fonctionnalité d'ouvrir de nombreux onglets à la fois, le tout dans une interface beaucoup plus utile, moderne et conviviale que celui de Notepad. En gros, c'est la version dopée de son petit frère intégré à Windows.

Pour une fois, [le site web](#) ressemble à quelque chose! Rendez-vous dans [la section de téléchargement](#) et sélectionnez l'installateur 32 ou 64 bits, en fonction de votre ordinateur. Comme ils le disent si bien « Take this one if you have no idea which one you should take »!

L'installation est vraiment simple et se fait très rapidement, les paramètres de base sont très bien comme ils sont, pas besoin de jouer avec ces derniers pour de bons résultats!

Si vous aimez bien l'éditeur Notepad intégré à Windows et hésitez à installer Notepad++, voici un avant après assez parlant :

Notepad :

```
in.balance - Bloc-notes
Fichier Edition Format Affichage ?
# 2d circle of particles inside a box with LJ walls

variable      b index 0

variable      x index 50
variable      y index 20
variable      d index 20
variable      v index 5
variable      w index 2

units         lj
dimension     2
atom_style    atomic
boundary      f f p

lattice       hex 0.85
region        box block 0 $x 0 $y -0.5 0.5
create_box    1 box
region        circle sphere $(v_d/2+1) $(v_d/2/sqrt(3.0)+1) 0.0 $(v_d/2)
create_atoms  1 region circle
mass          1 1.0

velocity      all create 0.5 87287 loop geom
velocity      all set $v $w 0 sum yes

pair_style    lj/cut 2.5
pair_coeff    1 1 10.0 1.0 2.5

neighbor      0.3 bin
neigh_modify  delay 0 every 1 check yes

fix           1 all nve

fix           2 all wall/lj93 xlo 0.0 1 1 2.5 xhi $x 1 1 2.5
fix           3 all wall/lj93 ylo 0.0 1 1 2.5 yhi $y 1 1 2.5

comm_style    tiled
```

Notepad++ :

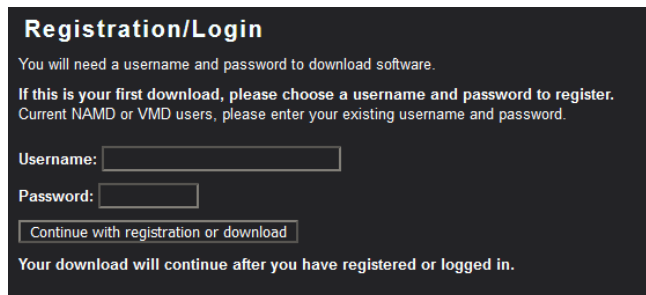
```
C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 4Jan2019\Examples\balance\in.balance - Notepad++
Fichier Edition Recherche Affichage Encodage Langage Paramètres Outils Macro Exécution Modules d'extension Documents ?
change.log in.balance
1 # 2d circle of particles inside a box with LJ walls
2
3 variable      b index 0
4
5 variable      x index 50
6 variable      y index 20
7 variable      d index 20
8 variable      v index 5
9 variable      w index 2
10
11 units         lj
12 dimension     2
13 atom_style    atomic
14 boundary      f f p
15
16 lattice       hex 0.85
17 region        box block 0 $x 0 $y -0.5 0.5
18 create_box    1 box
19 region        circle sphere $(v_d/2+1) $(v_d/2/sqrt(3.0)+1) 0.0 $(v_d/2)
20 create_atoms  1 region circle
21 mass          1 1.0
22
23 velocity      all create 0.5 87287 loop geom
24 velocity      all set $v $w 0 sum yes
25
26 pair_style    lj/cut 2.5
27 pair_coeff    1 1 10.0 1.0 2.5
28
29 neighbor      0.3 bin
30 neigh_modify  delay 0 every 1 check yes
31
32 fix           1 all nve
33
34 fix           2 all wall/lj93 xlo 0.0 1 1 2.5 xhi $x 1 1 2.5
35 fix           3 all wall/lj93 ylo 0.0 1 1 2.5 yhi $y 1 1 2.5
36
37 comm_style    tiled
38 fix           10 all balance 50 0.9 rcb

Normal text file      length: 1429 lines: 55      Ln: 1 Col: 1 Sel: 0|0      Windows (CR LF) UTF-8      INS
```

Vous êtes maintenant fin prêts à utiliser LAMMPS! Bon travail!

Installation et utilisation de VMD 1.9.3

VMD est un outil pratique pour visualiser une simulation effectuée dans LAMMPS. Pour l'installer, il faut d'abord télécharger l'installateur [depuis leur site web](#). Je recommande l'installation Windows OpenGL. Si votre ordinateur possède une carte graphique indépendante de votre processeur (une carte NVIDIA par exemple), alors choisissez le package Windows OpenGL CUDA.



Registration/Login

You will need a username and password to download software.

If this is your first download, please choose a username and password to register.
Current NAMD or VMD users, please enter your existing username and password.

Username:

Password:

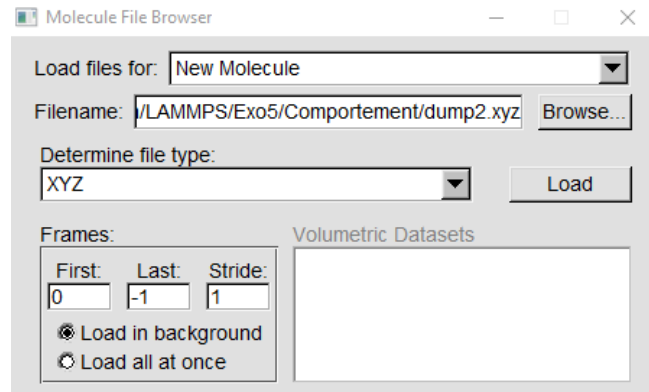
Your download will continue after you have registered or logged in.

Il vous sera demandé de vous créer un compte, ce processus est assez simple, une fois complété le téléchargement s'entamera.

L'installateur est très simple, il suffit de cliquer sur « Next » quelques fois et c'est fini. Rien à sélectionner ou désélectionner! Une fois lancé, laissez la fenêtre qui ressemble à la console Windows s'opérer, une fois complètement lancé vous verrez ces trois fenêtres :



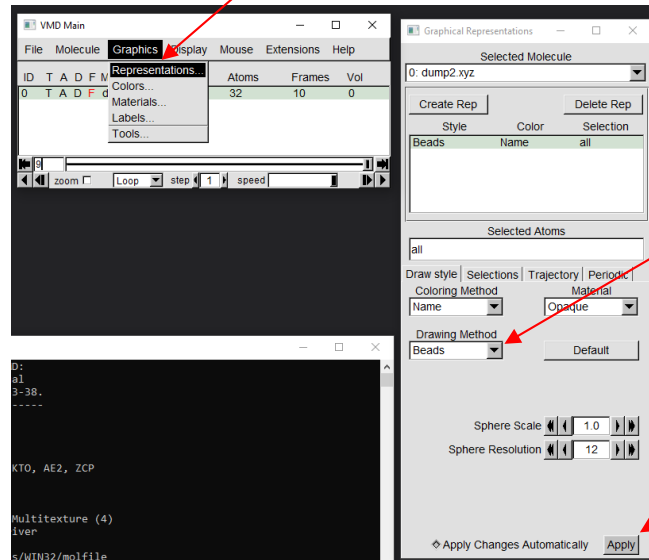
Une fois l'interface ouvert, pour afficher une molécule, sélectionnez File -> New Molecule, dans la fenêtre sélectionnez « Browse », et sélectionnez un fichier pouvant être lu, puis Load.

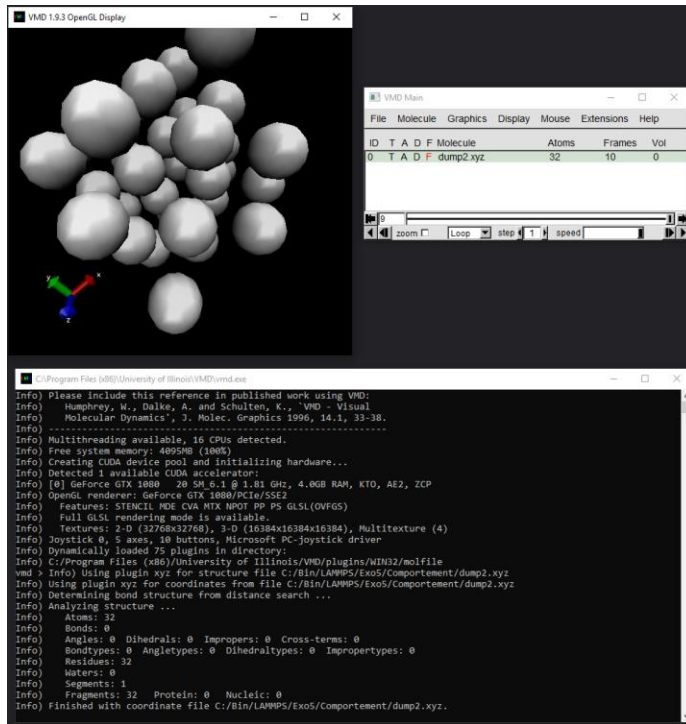


NB : Il est possible que le logiciel retourne une erreur, ceci peut-être causé par un filepath vers ce fichier trop long. Afin de générer et utiliser des fichiers à cette fin je recommande cette ligne dans LAMMPS, qui créera un fichier pouvant être lu dans un répertoire assez court. Dans ce cas-ci, mydump est l'ID du dump dans LAMMPS, qui exporte selon le style xyz tous les atomes (all) simulés à chaque 10000 itérations de ladite simulation, le nommant dump2.xyz .

```
dump mydump all xyz 10000 C:\Bin\LAMMPS\Exo5\dump2.xyz
```

Dans Graphics -> Representation sélectionnez le « Drawing Method » et choisir « Beads », suivi d'Apply.





Le groupement d'atomes sera ainsi visible dans la fenêtre d'affichage! Il est possible de faire bouger ceux-ci en faisant un click and drag, ainsi que zoom/dézoom à l'aide de la molette de la souris. S'il y a plusieurs itérations présentes dans le fichier .xyz il est possible de cliquer sur le petit bouton play pour faire bouger la simulation! Les commandes près de ce dernier permettent de contrôler la vitesse, de l'animation, ou voir étape par étape à l'aide de la flèche à côté de celle pointée ci-haut.

Pour fermer le tout, fermez la fenêtre VMD Main, une boîte de dialogue vous demandera si vous voulez quitter le logiciel, cliquer sur oui et les trois fenêtres se fermeront!

Installation d'Ovito

VMD est un outil pratique pour visualiser une simulation effectuée dans LAMMPS, mais résulte en des images plutôt laides, si votre ordinateur est un peu plus puissant, je recommanderais plutôt [Ovito](#), dont l'installation est très simple, et ne sera donc pas décrite dans le présent document. Dans un autre guide, utilisant des images générées par Ovito pour créer une animation d'une simulation, son utilisation est bien décrite.