

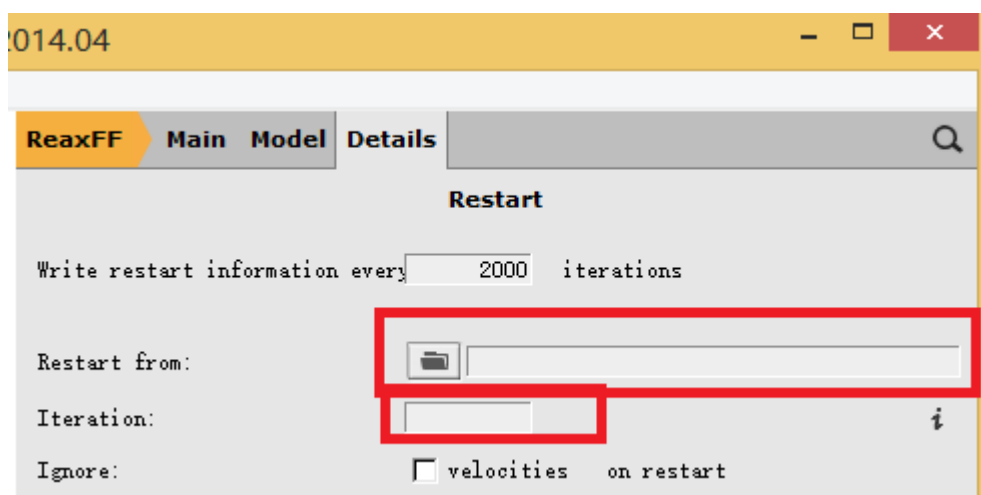
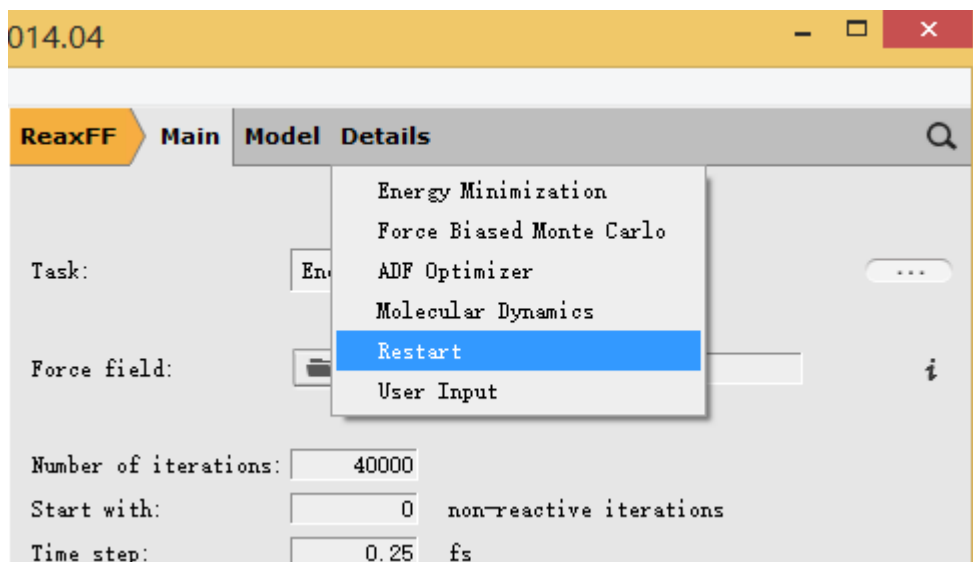
Table of Contents

如何暂停restart重启reaxff计算 1

如何暂停restart重启reaxff计算

可以暂停。直接结束任务就可以。

如果要再次运行，就在adinput的右边设置窗口中details里面有restart选项，



选入前次执行生成的rxkf文件即可自动读取上次最近的一次数据，继续计算。

注意：第二个红色标记区域内Iteration如果不填任何东西，则自动从上次计算的最后一个保存的Step读取信息。如果填写具体数字，则从数字设定的step（如果是每50步保存一次，则这个数字必须是50的整数倍）读取信息，例如设置为300000，则从前面的30万步的地方接着重新算。

From:

<http://www.fermitech.com.cn/wiki/> - 费米维基

Permanent link:

<http://www.fermitech.com.cn/wiki/doku.php?id=adf:restartofreaxff>

Last update: **2017/04/19 18:08**