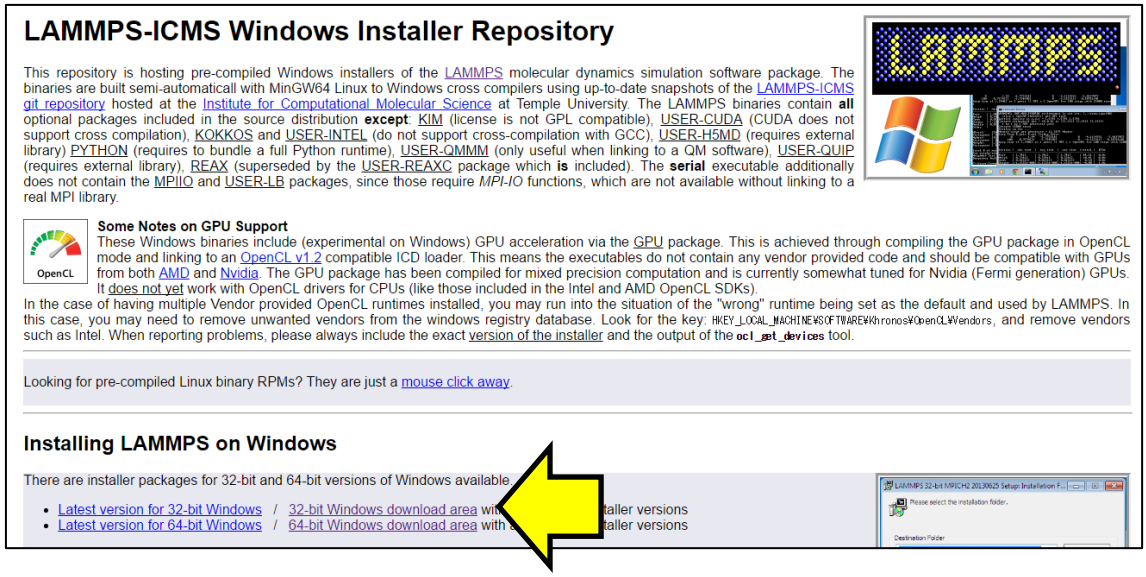
Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル

2019/6/12

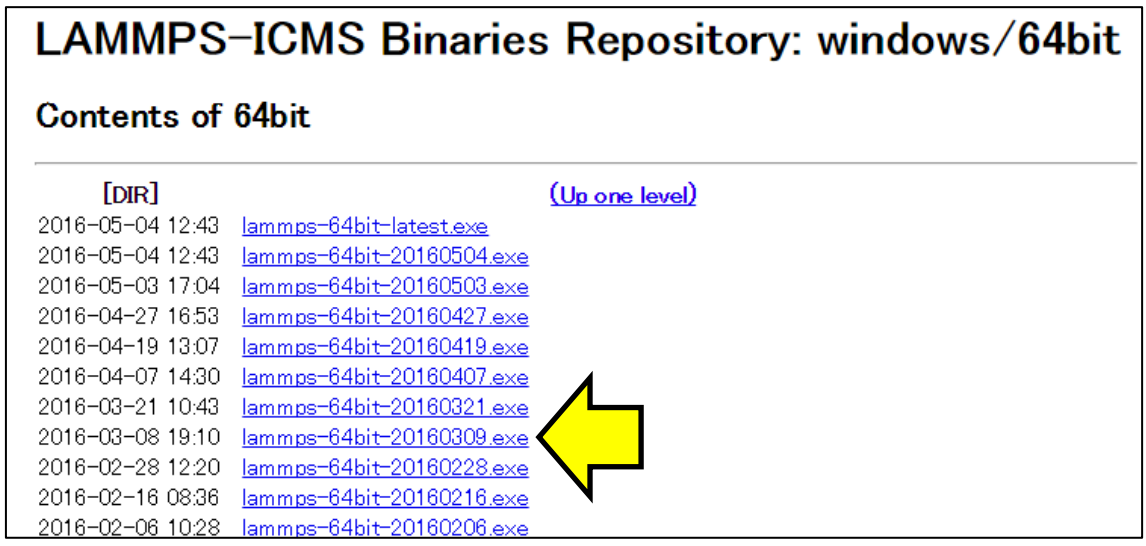
1. LAMMPS の入手

① http://rpm.lammps.org/windows.html にアクセスする。稀にサーバのメンテナンス等でつながらないことがあるが、概ね数日～1 週間程度で復旧する。

インストール先のマシンの OS に応じて[32-bit Windows download area]もしくは[64-bit Windows download area]をクリックする。



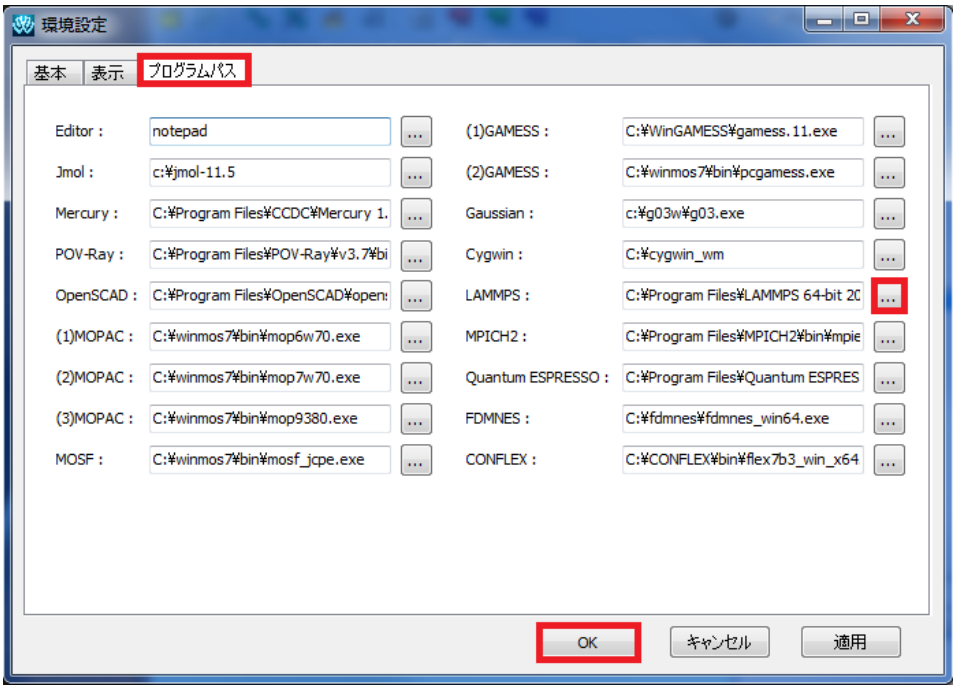
② 64bit の場合は lammps-64bit-20160309.exe、32bit の場合は lammps-32bit-20160309.exe を保存する。



③ 保存した exe ファイルをダブルクリックし指示に従う。

④ Winmostar が LAMMPS を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar の[ツール]→[環境設定]をクリックして環境設定パネルを開く。環境設定パネル[プログラムパス]タブを開き、

[LAMMPS]の[...]ボタンをクリックする。LAMMPS の実行ファイル（lmp_serial.exe）を登録し[OK]をクリックする。

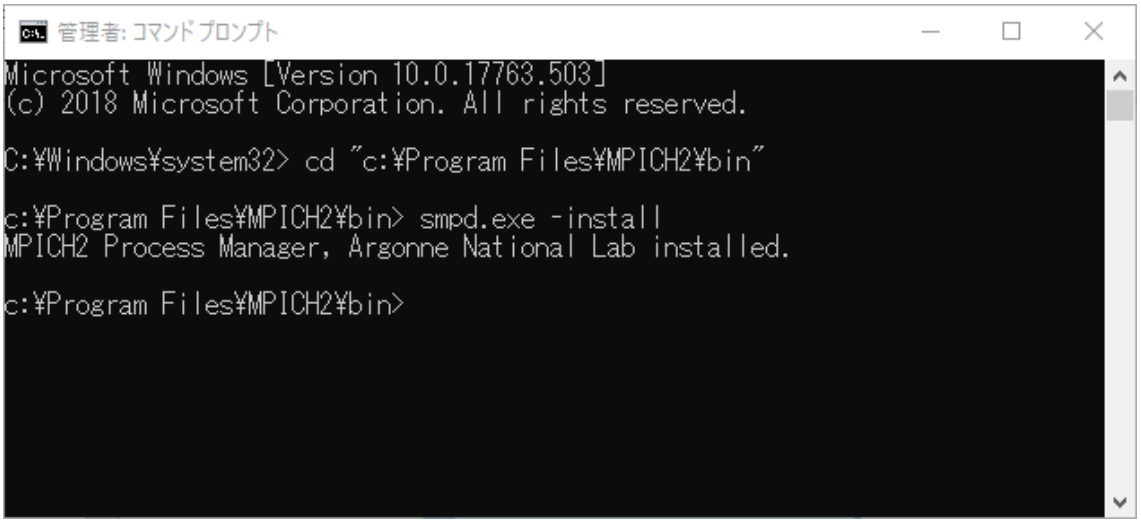


※　デフォルトでは、C:¥Program Files¥LAMMPS 64-bit 20160309¥bin¥lmp_serial.exe と表示されるため、32bit の場合は

C:¥Program Files¥LAMMPS 32-bit 20160309¥bin¥lmp_serial.exe などに変更する。

2. cygwin_wm の入手とセットアップ（既に cygwin_wm がセットアップ済の場合は不要）
コンパイル済みパッケージを下記のリンクからダウンロードしセットアップを行う。
https://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp.html

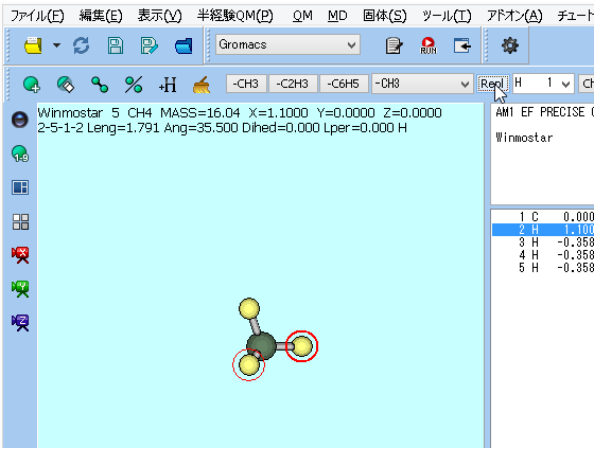
3. MPICH の入手とインストール（LAMMPS の並列実行を行う場合のみ必要）
① サイトにアクセスする。http://rpm.lammps.org/windows.html
② OS に応じて[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi]もしくは[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi]をクリックし msi ファイルをダウンロードする（拡張子が変更された場合は .msi に戻す）。なお、LAMMPS が 32-bit であれば、MPICH も 32-bit を選択する（64-bit の場合は 64-bit を選択する）。
③ 保存した msi ファイルをダブルクリックし指示に従う。(.NET Framework がインストールされていないためインストールに失敗した場合は、https://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=21 から.NET Framework 3.5 をダウンロードしてインストールする。Windows 8.1/10 には標準で.NET Framework 4.5 がインストールされているが、3.5 を別途インストールする必要がある)
④ スタートメニューなどから**コマンドプロンプト**を**管理者権限**で立ち上げる。
⑤ MPICH をインストールしたフォルダに移動する。
C:¥> cd “C:¥Program Files¥MPICH2¥bin”
⑥ MPICH のセットアップコマンド(smpd.exe)を実行する。
C:¥Program Files¥MPICH2¥bin> smpd.exe -install



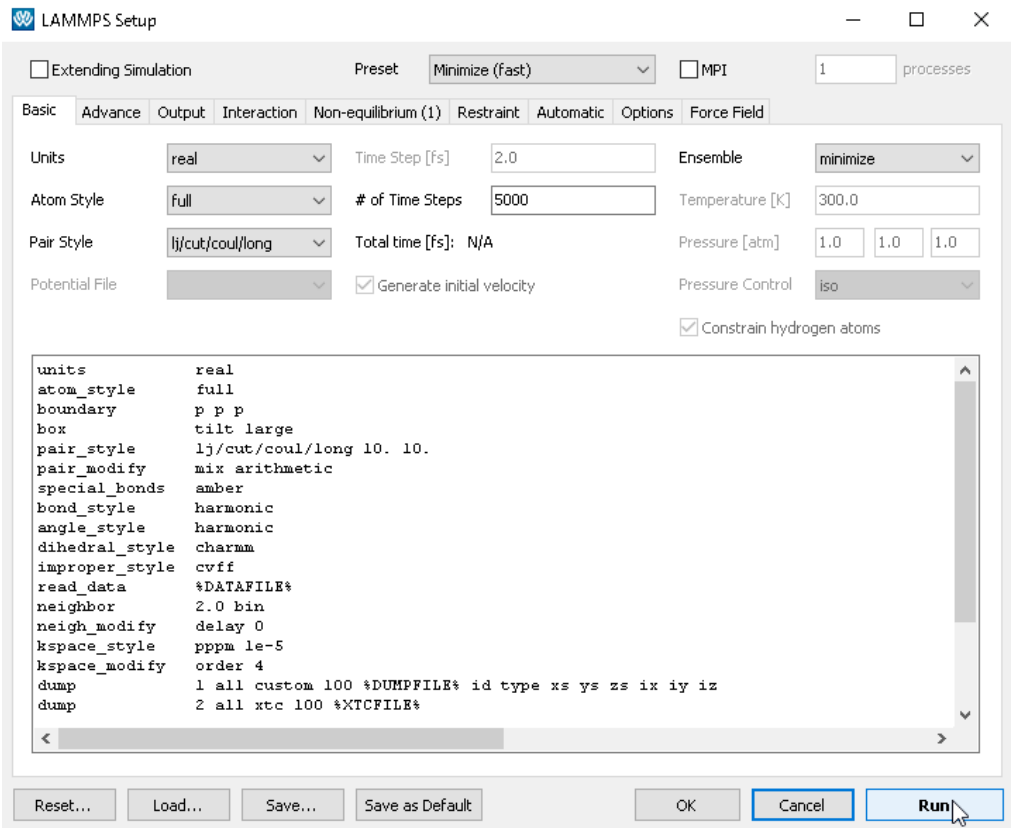
⑦ Winmostar の[ツール]→[環境設定]をクリックして環境設定パネルを開く。環境設定パネル[プログラムパス]タブを開き、[MPICH2]の[...]ボタンをクリックする。MPICH の実行ファイル（mpiexec.exe）を登録し[OK]をクリックする。

4. 簡易的な動作確認

① Winmostar のメインメニューの [ファイル]-[新規]をクリックし、メインウインドウ上部の[Repl]ボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



② [MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、LAMMPS Setup ウインドウ右下の[Run]ボタンをクリックする。



③　「シミュレーションセルを作成しますか？」とダイアログで聞かれるので、[はい]ボタンを押す。

④　「距離を入力」と書かれたダイアログが出現するので、デフォルトの値のまま[OK]ボタンを押す。

⑤　保存ダイアログが開き、適当な名前で保存すると黒いターミナルウインドウが開き、大量のメッセージが流れる。暫くすると処理が終わりターミナルウィンドウが閉じる。

⑥　[MD]-[LAMMPS]-[ログを表示]をクリックし、ダイアログにてデフォルトで選択されたファイルを開く。LAMMPS が流れたようであれば、開かれたテキストファイルの最後の方に、計算の統計が表示される。

```
Loop time of 0 on 1 procs for 9 steps with 5 atoms

0.0% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

Minimization stats:
  Stopping criterion = energy tolerance
  Energy initial, next-to-last, final =
       0.189620421404    0.0905826305656    0.0905782098341
  Force two-norm initial, final = 11.354 0.0902141
  Force max component initial, final = 5.41018 0.0478592
  Final line search alpha, max atom move = 0.03125 0.0014956
  Iterations, force evaluations = 9 36

MPI task timing breakdown:
Section |  min time  |  avg time  |  max time  |%varavg| %total
---------------------------------------------------------------
Pair    | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Bond    | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Kspace  | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Neigh   | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Comm    | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Output  | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Modify  | 0          | 0          | 0          |   0.0 |  0.00
Other   |            | 0          |            |       |  0.00

Nlocal:    5 ave 5 max 5 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost:    11 ave 11 max 11 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs:    10 ave 10 max 10 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 10
Ave neighs/atom = 2
Ave special neighs/atom = 4
Neighbor list builds = 0
Dangerous builds = 0
System init for write_restart ...
PPPM initialization ...
  G vector (1/distance) = 0.130614
  grid = 3 3 3
  stencil order = 4
  estimated absolute RMS force accuracy = 0.00265415
  estimated relative force accuracy = 7.99291e-006
  using double precision FFTs
  3d grid and FFT values/proc = 512 27
Total wall time: 0:00:00
```

以上