

Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル

2022 年 05 月 28 日

1. LAMMPS の入手

- ① <https://packages.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ることがあるが、概ね数日～1 週間程度で復旧する。

※ 復旧しない場合は以下のリンク先からインストーラをダウンロードする。

https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-64bit-20160309.exe

https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-32bit-20160309.exe (32bit の場合)

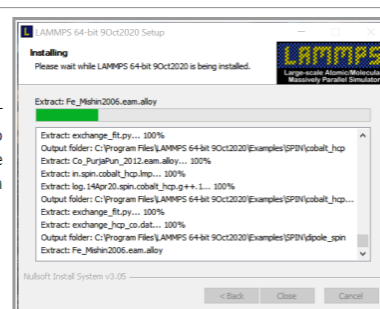
Installing LAMMPS globally on Windows with administrator privilege の [their own download area] をクリックする。

[Back to LAMMPS Packages for Windows Overview](#)

LAMMPS Windows Installer Repository

This repository is hosting pre-compiled Windows installers of the [LAMMPS](#) molecular dynamics simulation software package. The binaries are built with MinGW64 Linux to Windows cross-compilers on Fedora Linux using the standard LAMMPS sources. The LAMMPS binaries contain **all** optional packages included in the source distribution **except**:

- [ADIOS](#) (requires an external library),
- [HSMD](#) (requires an external library),
- [KIM](#) (not fully ported to Windows),
- [MESSAGE](#) (obsolete),
- [ML-PACE](#) (external library, not compatible).



Installing LAMMPS globally on Windows with administrator privilege

The installer packages listed above will install LAMMPS into a user's personal storage area and thus it cannot be used by all users. This behavior was changed with the stable release of LAMMPS in October 2020. Installer packages from previous LAMMPS versions and current versions that require administrator privilege to be installed can be found [their own download area](#). The installation process is otherwise the same, only the packaging is different.

- ② [64bit] または [32bit] のディレクトリから、lammps-64bit-20160309.exe (32bit の場合は lammps-32bit-20160309.exe) を探して保存する。それらが見つからない場合は以下のリンク先からダウンロードする。なお、それ以外のバージョンでも Winmostar である程度の動作が可能な場合があるが、動作保証対象外である。

https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-32bit-20160309.exe

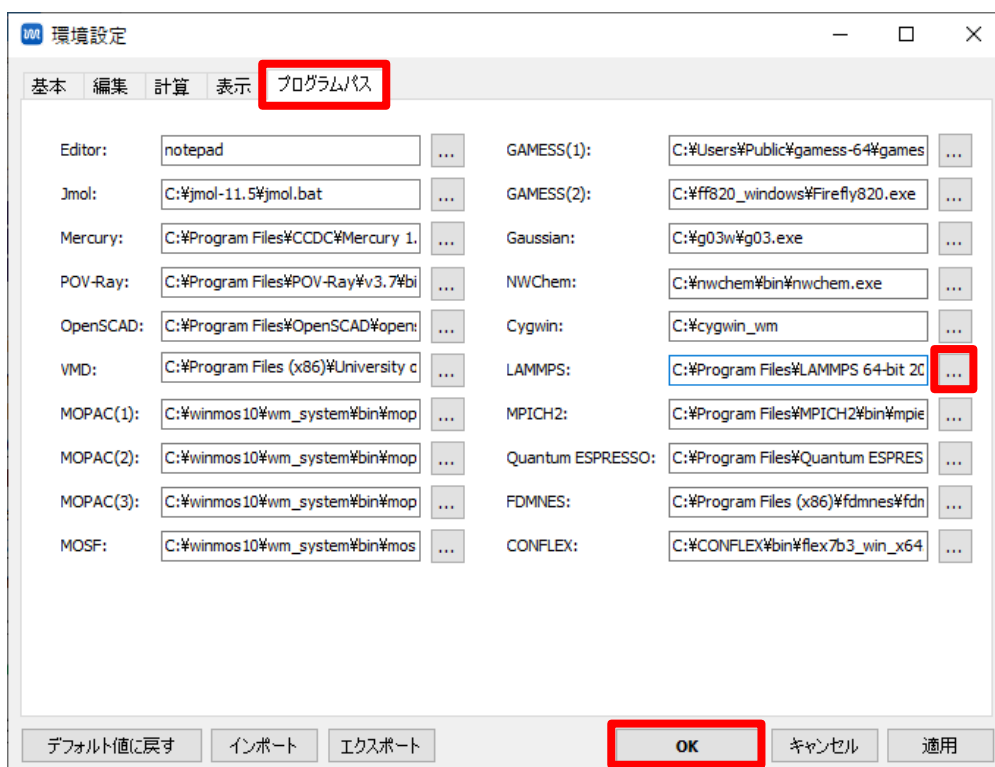
https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-64bit-20160309.exe (32bit の場合)

LAMMPS-ICMS Binaries Repository: windows/64bit

Contents of 64bit

[DIR]	(Up one level)
2016-05-04 12:43	lammmps-64bit-latest.exe
2016-05-04 12:43	lammmps-64bit-20160504.exe
2016-05-03 17:04	lammmps-64bit-20160503.exe
2016-04-27 16:53	lammmps-64bit-20160427.exe
2016-04-19 13:07	lammmps-64bit-20160419.exe
2016-04-07 14:30	lammmps-64bit-20160407.exe
2016-03-21 10:43	lammmps-64bit-20160321.exe
2016-03-08 19:10	lammmps-64bit-20160309.exe
2016-02-28 12:20	lammmps-64bit-20160228.exe
2016-02-16 08:36	lammmps-64bit-20160216.exe
2016-02-06 10:28	lammmps-64bit-20160206.exe

- ③ ダウンロードした exe ファイルをダブルクリックし、指示に従って LAMMPS をインストールする。
- ④ 上記の lammmps-64bit-20160309.exe 以外をインストールした場合、またはデフォルトのインストールパス (C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160309) 以外にインストールした場合は、Winmostar を起動し、ツール | 環境設定をクリックする。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。



※ インストールした LAMMPS に lmp_serial.exe または lmp_mpi.exe が含まれておら

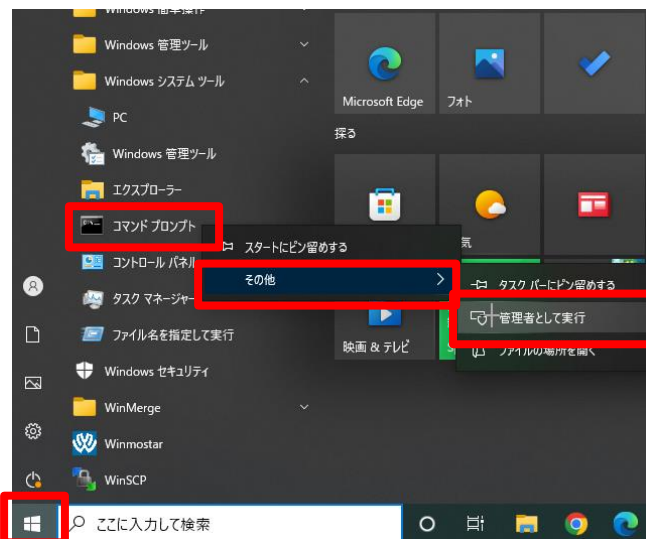
ず代わりに `lmp.exe` が含まれている場合は、`lmp.exe` の名前を、MPI 非対応版の場合は `lmp_serial.exe`、MPI 対応版の場合は `lmp_mpi.exe` に変更してから Winmostar のプログラムパスに設定する。(ただし、20160309 バージョン以外は弊社での動作検証対象外)

2. CygwinWM の入手とセットアップ (既に CygwinWM 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 [\[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi\]](#) (32bit の場合は [\[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi\]](#)) をダウンロードする。ダウンロードしたファイルの拡張子を変更された場合は「.msi」に戻す。なお、LAMMPS が 64-bit であれば MPICH も 64-bit、32-bit であれば MPICH も 32-bit を選択する。
- ② ダウンロードした 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に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)
- ③ コマンドプロンプト (Windows PowerShell ではない) を**管理者権限**で立ち上げる。(Windows 10 Pro 21H1 ではスタートメニュー | Windows システムツール | コマンドプロンプトで右クリック→その他 | 管理者として実行)



- ④ 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"`
- ⑤ 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`

```

CAL 管理者: コマンド プロンプト
Microsoft Windows [Version 10.0.17763.503]
(c) 2018 Microsoft Corporation. All rights reserved.

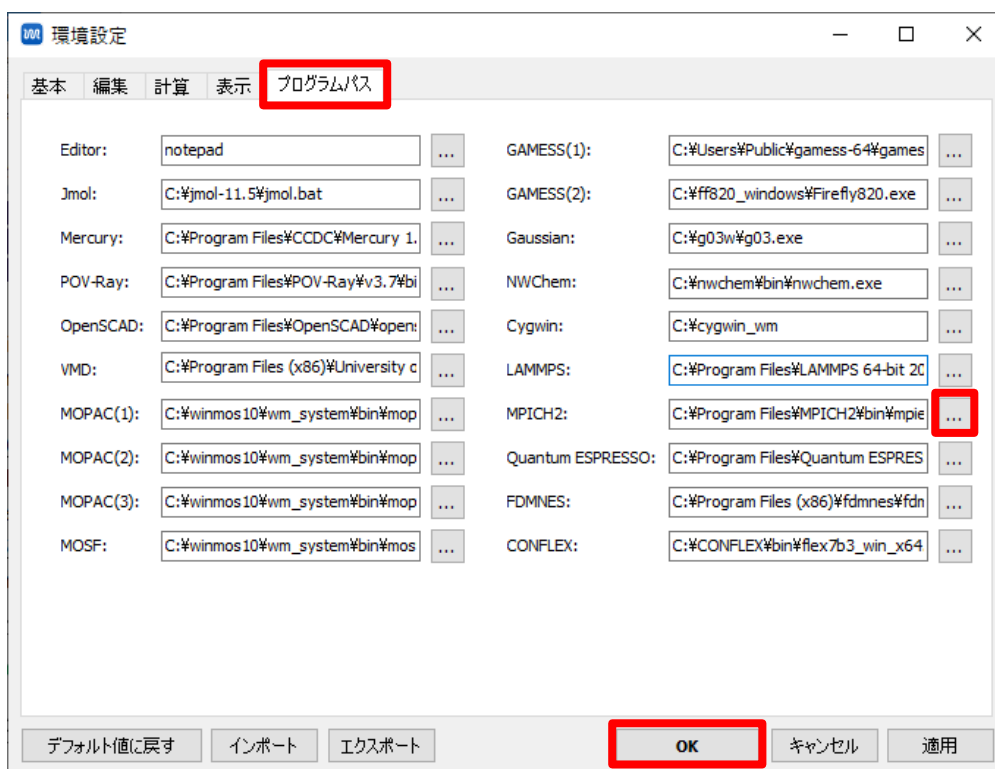
C:\Windows\system32> cd "c:\Program Files\MPICH2\bin"

c:\Program Files\MPICH2\bin> smpd.exe -install
MPICH2 Process Manager, Argonne National Lab installed.

c:\Program Files\MPICH2\bin>

```

- ⑥ デフォルトのインストールパス (C:\Program Files\MPICH2) 以外にインストールした場合は、Winmostar を起動し、**ツール | 環境設定** をクリックする。**プログラムパス** 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. 無機物向けポテンシャルファイルの入手とインストール

有機物の計算しかしない方、無機物の計算をするが、デフォルトでインストールされるファイルで十分な方はスキップする。

- ① [NIST Interatomic Potentials Repository](https://www.nist.gov/patents/interatomic-potentials-repository) の HP に進み、計算したい物質が含む元素をクリックする。

Interatomic Potentials (Force Fields)

Elements

- ② 計算したい物質の組成が全て含まれる項目を探す。

Al-Ni

2015--Kumar-A-Chernatynskiy-A-Liang-K-Choudhary-M-J-Noordhoek-Y-T-Cheng-S-R-Philpot-and-S-B-Sinnott (2015), "Charge optimized many-body (COMB) potential for dynamical simulation of Ni-Al phases", *Journal of Physics: Condensed Matter*, **27(33)**, 336302. DOI: 10.1088/0953-8984/27/33/336302.

Abstract: An interatomic potential for the Ni-Al system is presented within the third-generation charge optimized many-body (COMB3) formalism. The potential has been optimized for Ni₃Al, or the γ phase in Ni-based superalloys. The formation energies predicted for other Ni-Al phases are in reasonable agreement with first-principles results. The potential further predicts good mechanical properties for Ni₃Al, which includes the values of the complex stacking fault (CSF) and the anti-phase boundary (APB) energies for the (1 1 1) and (1 0 0) planes. It is also used to investigate dislocation propagation across the Ni₃Al (1 1 0)-Ni (1 1 0) interface, and the results are consistent with simulation results reported in the literature. The potential is further used in combination with a recent COMB3 potential for Al₂O₃ to investigate the Ni₃Al (1 1 1)-Al₂O₃ (0 0 1) interface, which has not been modeled previously at the classical atomistic level due to the lack of a reactive potential to describe both Ni₃Al and Al₂O₃ as well as interactions between them. The calculated work of adhesion for this interface is predicted to be 1.85 J m⁻², which is in agreement with available experimental data. The predicted interlayer distance is further consistent with the available first-principles results for Ni (1 1 1)-Al₂O₃ (0 0 1).

LAMMPS pair_style comb3 (2015--Kumar-A--Al-Ni--LAMMPS--ipr1)
See Computed Properties
Notes: This file was obtained from Jarvis-FF (<https://www.ctcms.nist.gov/~knc6/periodic.html>) on 9 Nov. 2018 and posted at Kamal Choudhary's (NIST) request.
File(s):
ffield.comb3.NiAlO

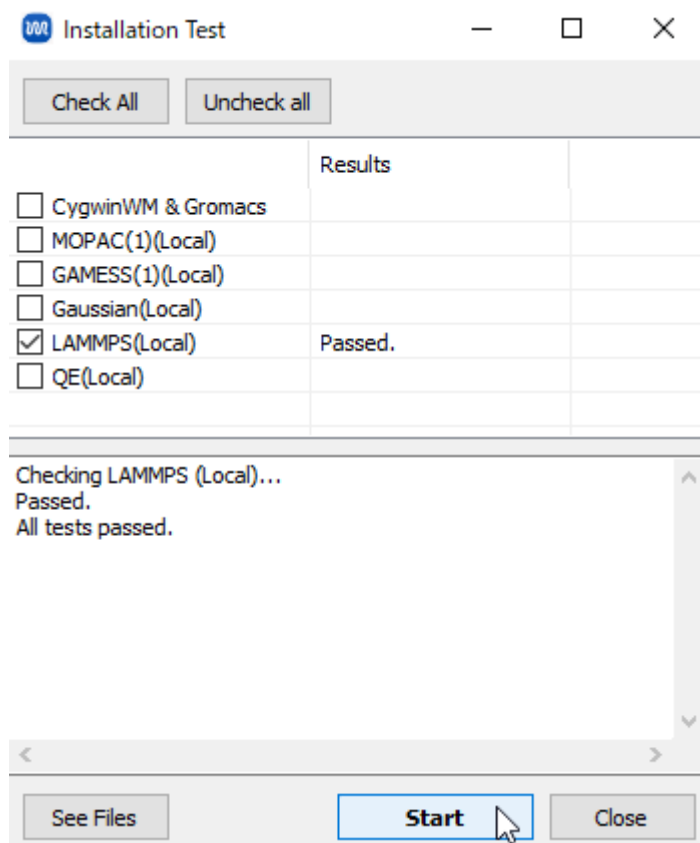
- ③ 「File(s):」のところに並ぶリンクを右クリックし、名前を付けてリンク先を保存する。

- ④ LAMMPS のインストールフォルダの下にある Potentials フォルダ (デフォルトでは

C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160309\Potentials) の中に、③でダウンロードしたファイルをコピーする。

5. 簡易的な動作確認

- ① Winmostar のメインメニューのヘルプ | インストールテストをクリックする。
- ② 「LAMMPS (Local)」にチェックを入れ **Start** をクリックする。Windows Defender などのセキュリティ警告が出た場合は **アクセスを許可** や **無視** をクリックする。
- ③ 20~30 秒程度待ち「All tests passed.」と表示されることを確認する。



以上