

Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル

2023年4月27日

Winmostar V11.5.0 以降を利用、64bit 環境を利用、CygwinWM 2023/04/23 バージョン以降を利用、推奨バージョンの LAMMPS を利用予定、の全てに該当する方は本書手順の実行が全て不要です。

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らないことがあるが、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)

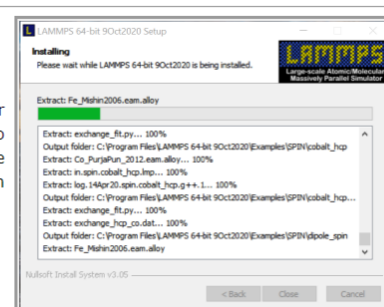
Installing LAMMPS globally on Windows with administrator privilege の [their own download area] をクリックする。

[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 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

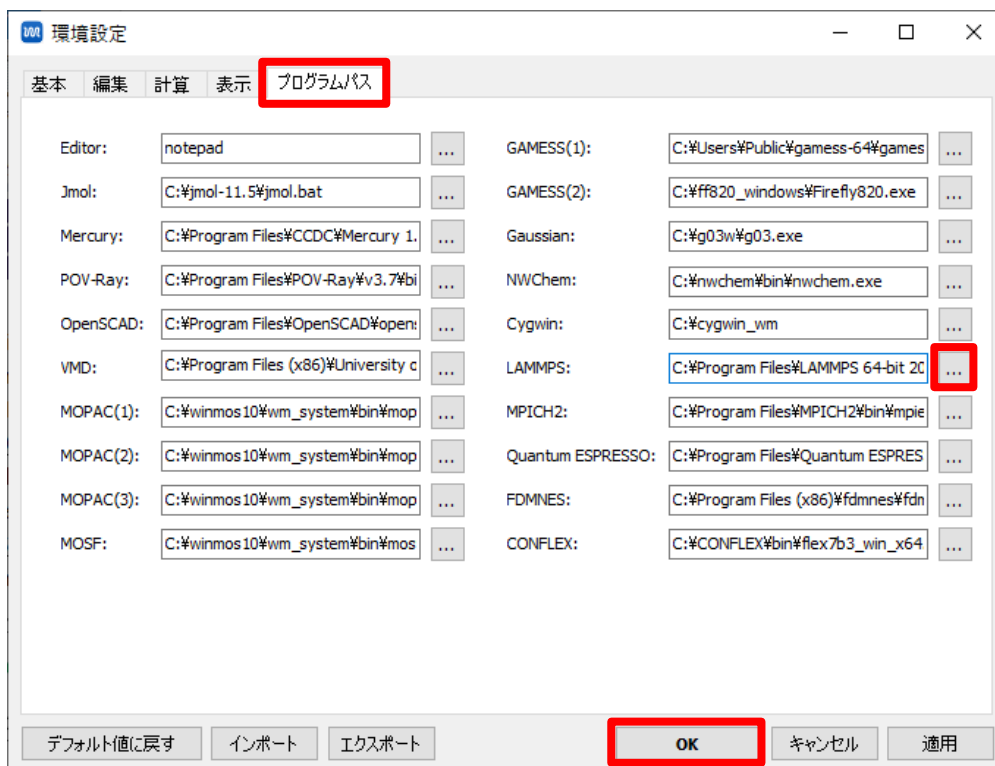
https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-64bit-20160309.exe (32bit の場合)

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、推奨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

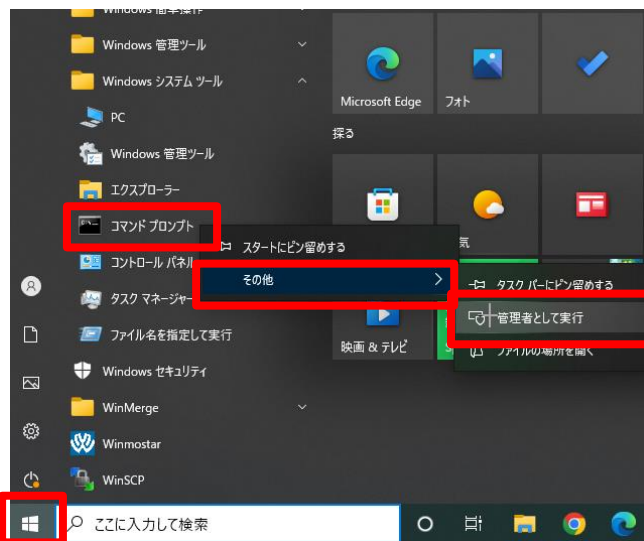
3. MPICH の入手とインストール (LAMMPS の並列実行を行う場合のみ必要)

- 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 保存した msi ファイルをダブルクリックし、インストールする。設定は基本的にデフォルトで問題ない。

なお、.NET Framework 3.5 がインストールされていないと先に進めないため、その場合は、<https://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=21> から .NET Framework 3.5 のインストーラ (dotNetFx35setup.exe) をダウンロードしてインストールする。dotNetFx35setup.exe を起動して反応がない場合でも処理が完了しているので先に進む。

- 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)



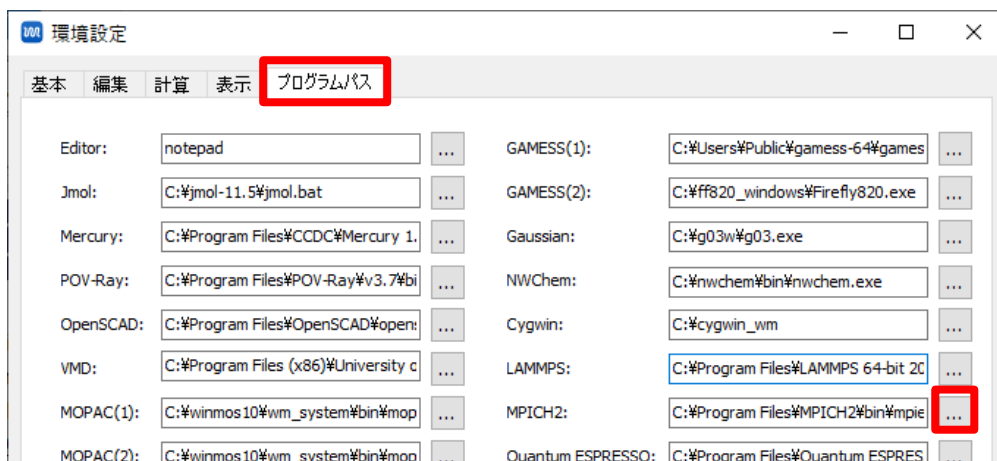
- ④ 以下のコマンドを実行し、MPICH をインストールしたフォルダに移動する。

```
C:¥> cd "C:¥Program Files¥MPICH2¥bin"
```

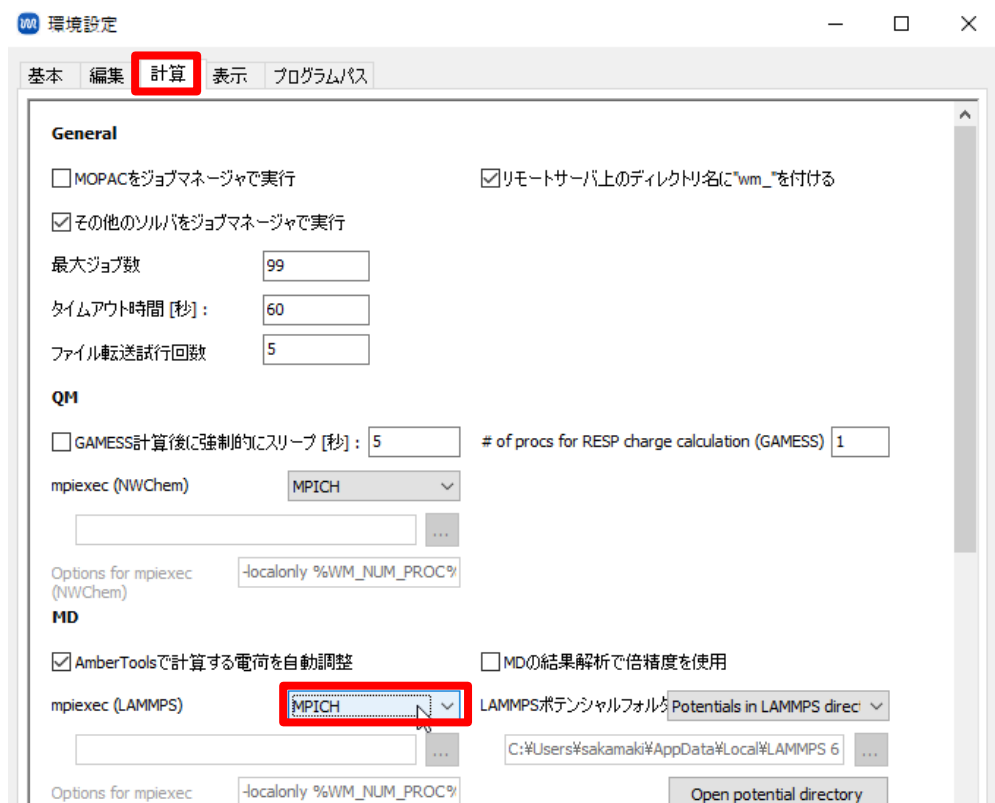
- ⑤ 以下のコマンドを実行し、「MPICH2 Process Manager, Argonne National Lab installed.」と表示されることを確認する。失敗する場合、OS を再起動すると成功することがある。

```
bin> smpd.exe -install
```

- ⑥ 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 のインストールフォルダの下にある bin フォルダの下の mpiexec.exe を開く。



- ⑦ (Winmostar V11.4.0 以降のみ) **計算** タブを開き **mpiexec (LAMMPS)** を「MPICH」に変更する (項目が出現しない場合は下までスクロールする)。



- ⑧ 最後に**環境設定** ウィンドウ右下の **OK** ボタンをクリックする。

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](#) 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

A periodic table of elements where each element is represented by its atomic number, symbol, and name. The elements are color-coded into groups: Group 1 (H) is light blue; Groups 2-10 (Li-Ne) are light green; Groups 11-18 (Na-Ar) are light yellow; Groups 19-36 (K-Kr) are light orange; Groups 37-54 (Rb-Xe) are light red; Groups 55-86 (Cs-Rn) are light purple; Groups 87-118 (Fr-Og) are light pink; and the lanthanide and actinide series (57-71 and 89-103) are light blue.

- 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-T-et-al--Al-Ni

Citation: A. Kumar, A. Chernatynskiy, T. Liang, K. Choudhary, M.J. Noordhoek, Y.-T. Cheng, S.R. Phillpot, 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。

(NIST) request.

File(s):
[ffield.comb3.NiAlO](#)

2009--Purja-Pu

Citation: G.P. Pu

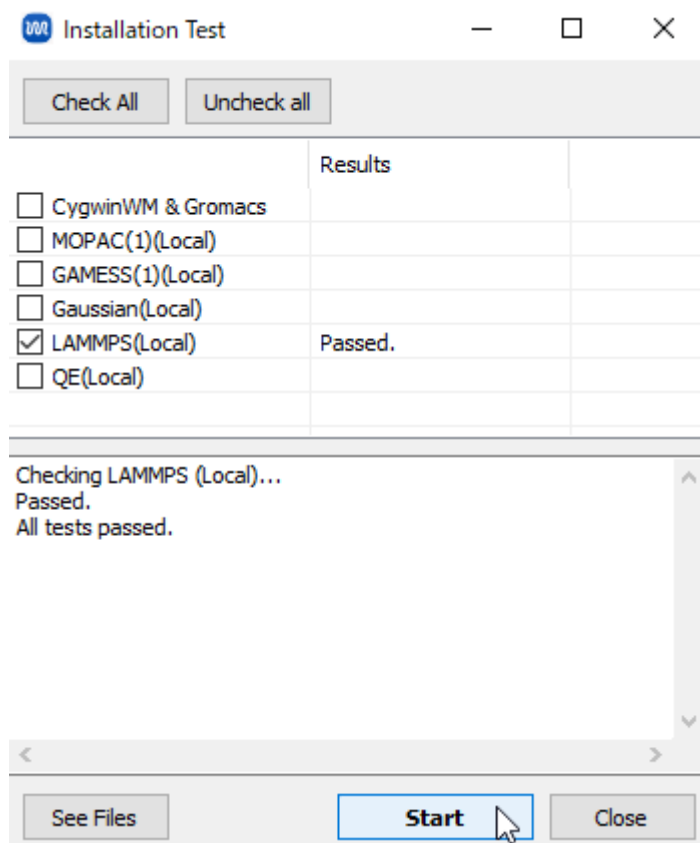
361. 3245-3267.

A screenshot showing a right-click context menu over the file link 'ffield.comb3.NiAlO'. The menu options are: '新しいタブで開く(O)', '新しいウィンドウで開く(W)', 'シークレット ウィンドウで開く(G)', 'リンクをデバイスに送信', and '名前を付けてリンク先を保存(K)...'. The '名前を付けてリンク先を保存(K)...' option is highlighted by the mouse cursor.

- 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