

# 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-64bit-20160309.exe)

[https://winmostar.com/wm/cygwin\\_wm/packages/lammps-32bit-20160309.exe](https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-32bit-20160309.exe) (32bit の場合)

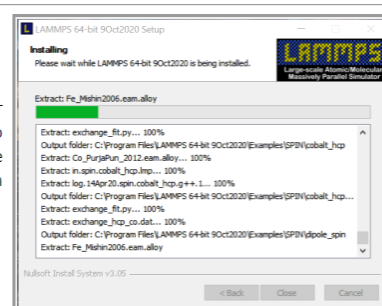
**Installing LAMMPS on Windows** の[64-bit Windows download area] (32bit の場合は[32-bit Windows download area]) をクリックする。

[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).



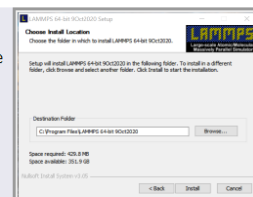
## Installing LAMMPS on Windows

There are installer packages for 32-bit and 64-bit versions of Windows available.

As of LAMMPS version 17 February 2022, only 64-bit versions of the LAMMPS installer packages will be built and provided. If you must have a 32-bit version, you need to use an older version of LAMMPS.

- [Latest stable versions](#)
- [32-bit Windows download area](#) with older installer versions
- [64-bit Windows download area](#) with latest installer versions

The respective download directory will contain installer packages that are labeled with the date of the LAMMPS version and packages labeled as *latest*. It is usually recommended to download and install the latest package. The other packages are provided in case there is a problem with it. Download the installer executable suitable for your machine, execute it, and follow the instructions in the dialogs. Each version will install into a different directory, so it is possible to have multiple versions installed at the same time (however it is not recommended). Both kinds of packages contain:



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

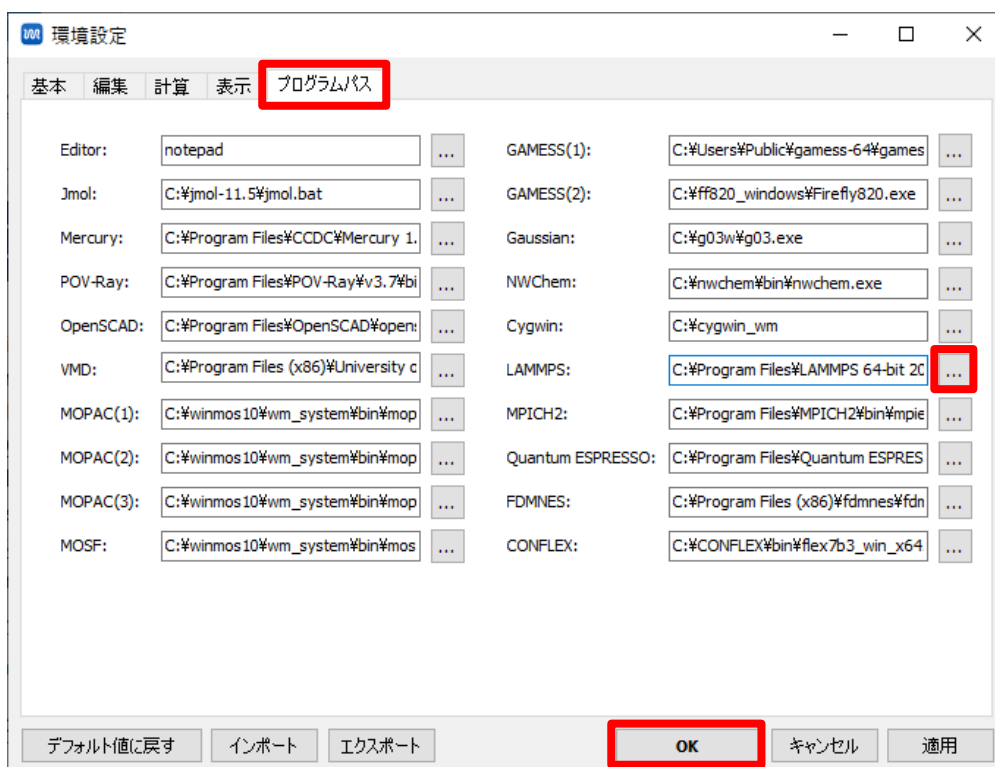
[https://winmostar.com/wm/cygwin\\_wm/packages/lammps-64bit-20160309.exe](https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/lammps-64bit-20160309.exe) (32bit の場合)

## LAMMPS-ICMS Binaries Repository: windows/64bit

### Contents of 64bit

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

- 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

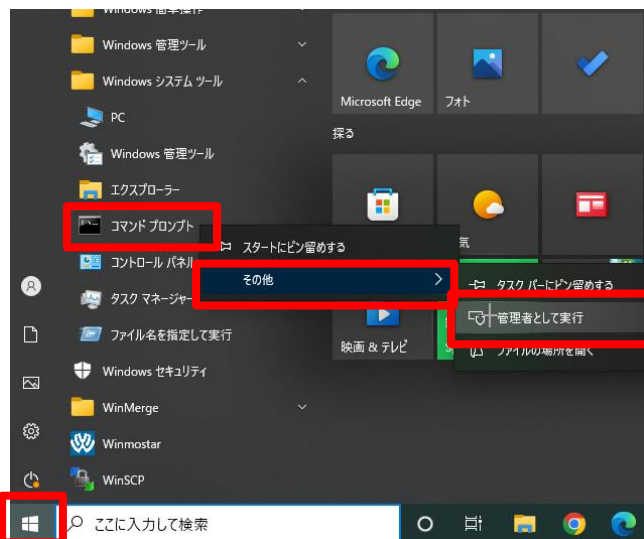
ず代わりに `lmp.exe` が含まれている場合は、`lmp.exe` の名前を、MPI 非対応版の場合は `lmp_serial.exe`、MPI 対応版の場合は `lmp_mpi.exe` に変更してから Winmostar のプログラムパスに設定する。(ただし、20160309 バージョン以外は弊社での動作検証対象外)

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](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が変更された場合は「.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.

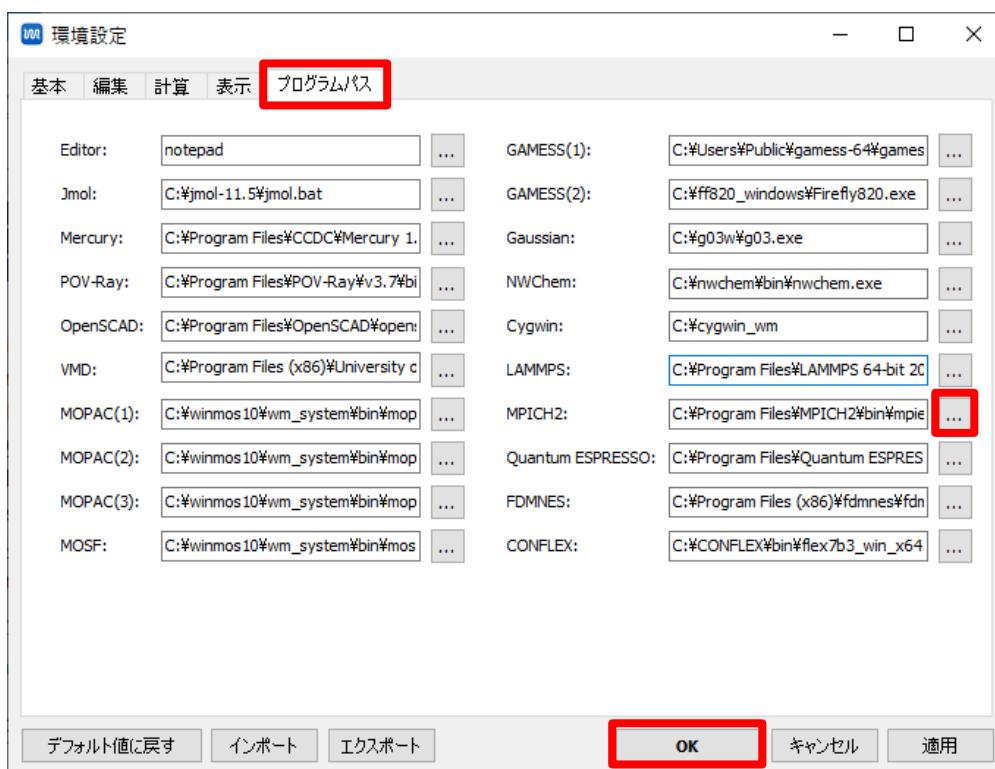
C:\Windows\system32> cd "c:\Program Files\MPICH2\bin"

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](#) 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 Ni<sub>3</sub>Al, 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 Ni<sub>3</sub>Al, 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 Ni<sub>3</sub>Al (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 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> to investigate the Ni<sub>3</sub>Al (1 1 1)-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (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 Ni<sub>3</sub>Al and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> as well as interactions between them. The calculated work of adhesion for this interface is predicted to be 1.85 J m<sup>-2</sup>, 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)-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (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

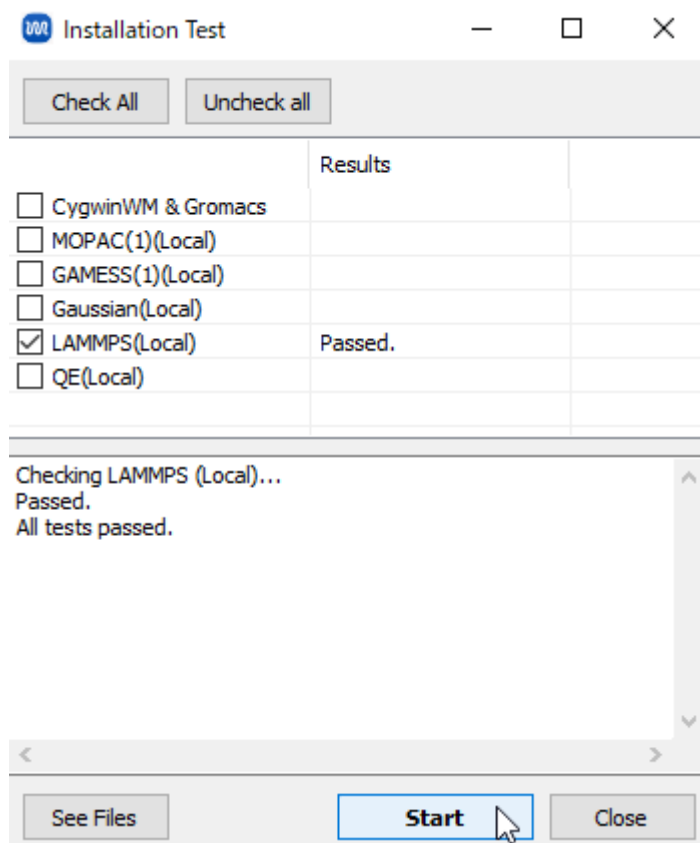
- ③ 「File(s):」のところに並ぶリンクを右クリックし、名前を付けてリンク先を保存する。

- 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