



LAMMPS ユーザーマニュアル



目次

1	LAMMPS について.....	2
2	LAMMPS インストール概要	3
3	LAMMPS 実行例	5
3.1	LAMMPS 実行環境の設定.....	5
3.2	LAMMPS の実行コマンド例	8
4	既知の問題点	9
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先	10

1 LAMMPS について

LAMMPS はサンディア国立研究所で開発された古典的分子動力学シミュレーションのソフトウェアパッケージです。

LAMMPS は GPL で配布されているフリーソフトウェアです。以下サイトからパッケージをダウンロードできます。

<https://lammps.sandia.gov/>

LAMMPS は大変、活発にパッチなどが提供されています。パッチには全ての環境で動作を意図したものではない一時的なものもあり、変化が激しい為、パッチのリリース状況や構成の変更などから、定期的に stable 版がリリースされています。こうした頻繁な変更に対応する為、LAMMPS ではバージョンを、番号ではなく、stable やパッチのリリースの日付、例えば 2023 年 8 月 2 日にリリースされた stable 版は 2Aug23 といった形で、管理しています。

LAMMPS は、古典的分子動力学シミュレーションプログラムである LAMMPS 本体と、そこに組込む豊富なパッケージによって構成されています。例えば 2Aug23 の場合、パッケージ数は 92 となっています。このパッケージ群は、機能的に衝突するものや、連動する他アプリのソースが必要なものなどがあり、全てのパッケージを組み込んだバイナリを作成する事は原理的に出来ません。弊社がインストールしたものは、LAMMPS 以外のアプリのソースが必須なパッケージを除外し、かつ、弊社での検証によって、安定動作したものとなっています。

本書では、計算機にインストールされている LAMMPS の概要と、LAMMPS での計算の実行方法をご案内します。

2 LAMMPS インストール概要

本章では弊社が行いました LAMMPS のインストールについて概説します。以下の表で示したディレクトリにインストールしています。

LAMMPS の可視化の為に tools と、LAMMPS と連動可能な Kinetic Monte Carlo Simulator の SPPARKS もインストールしてあります。実行バイナリは LAMMPS に含まれる豊富なツール群も含めて bin/以下にシンボリックリンクさせてあります。また、外部アプリや python などから使用する為の LAMMPS のライブラリ化したものは lib/以下にインストールしてあります。

パッケージ	ディレクトリ
LAMMPS 2Aug23	/usr/local/LAMMPS/lammps-stable_2Aug2023_update1
SPPARKS 6Sep23	/usr/local/LAMMPS/spparks-6Sep23
バイナリ	/usr/local/LAMMPS/bin
ライブラリ	/usr/local/LAMMPS/lib:/usr/local/LAMMPS/lib64

以下のパッケージを組み込んでビルドしてあります。

```

AMOEBA, ASPHERE, ATC, AWPMD, BOCS, BODY, BPM, BROWNIAN, CG-DNA,
CGSPICA, CLASS2, COLLOID, COLVARS, COMPRESS, CORESHELL, DIELECTRIC,
DIFFRACTION, DIPOLE, DPD-BASIC, DPD-MESO, DPD-REACT, DPD-SMOOTH,
DRUDE, EFF, ELECTRODE, EXTRA-COMPUTE, EXTRA-DUMP, EXTRA-FIX,
EXTRA-MOLECULE, EXTRA-PAIR, FEP, GRANULAR, H5MD, INTERLAYER, KIM,
KSPACE, LATBOLTZ, LEPTON, MACHDYN, MANIFOLD, MANYBODY, MC, MDI,
MEAM, MESONT, MGPT, MISC, ML-HDNNP, ML-IAP, ML-PAGE, ML-POD, ML-QUIP1,
ML-RANN, ML-SNAP, MOFFF, MOLECULE, MOLFILE, MSCG, NETCDF, OPT,
ORIENT, PERI, PHONON, PLUGIN, PLUMED, POEMS, PTM, PYTHON, QEQ,
QTB, REACTION, REAXFF, REPLICA, RIGID, SCAFACOS, SHOCK, SMTBQ,
SPH, SPIN, SRD, TALLY, UEF, VORONOI, VTK, YAFF

```

¹ ML-QUIP については、ライセンスの関係上、非アカデミックのお客様向けにインストールを行う場合には含めておりません。予めご了承ください。

LAMMPS はソースコードで配布されています。以下の開発環境を使用してビルドしています。

パッケージ	ディレクトリ
oneAPI 2023.2.0	/opt/intel/oneapi/compiler/2023.2.1
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/oneapi/mkl/2023.2.0
Intel MPI 2021.10.0	/opt/intel/oneapi/mpi/2021.10.0

3 LAMMPS 実行例

3.1 LAMMPS 実行環境の設定

弊社出荷の RHEL/AlmaLinux 8 系 OS においては、LAMMPS の実行環境の設定を、LAMMPS を実行したいタイミングで、[Environment Module](#) と呼ばれる環境設定ユーティリティを用いて実施ください。Environment Module ではアプリケーション等のソフトウェア部品の環境設定を「モジュール」と呼び、`module load`・`module unload` というコマンドによりモジュールの有効化・無効化を実施できます。モジュールが有効化されているとき、そのアプリケーション等は、PATH 等の環境設定が済んで実行可能な状態になっています。

Environment Module で LAMMPS を使用可能とするモジュール定義ファイルは次の場所に設置してあります。

```
/home/.common/modulefiles/oneAPI/oneAPI バージョン/lammps/LAMMPS バージョン
```

以下では Environment Module を用いた LAMMPS 実行環境設定の方法を示します。



LAMMPS を使用するための環境設定では、LAMMPS と LAMMPS の tools の為に環境変数 PYTHONPATH を設定してあります。これは python から LAMMPS を使用する為と、可視化ツールなどを使用する為で、動作検証の結果から、LAMMPS と tools に必要な python のパッケージを追加した python を OS の python とは別にインストールしてあります。また、この python には、LAMMPS 2Aug23 もサイトパッケージとしてインストールしてあります。その為、異なるバージョンなどの別の python を使用する為に設定を変更した場合、LAMMPS や tools の一部の機能が正しく動作しない場合がある事にご注意下さい。

(1) 使用できるモジュールの一覧表示 : `module avail`

`module avail` コマンドにより、使用可能なモジュールの一覧を表示します。次は LAMMPS 2Aug2023 の場合の例です。

```
$ module_ avail
----- /home/.common/modulefiles/oneAPI/2023.2.0 -----
lammps/2Aug23
(後略)
```

赤字で示したように、使用可能なモジュール（ソフトウェア名/バージョン）が表示されます。

(2) モジュールの有効化・無効化 : `module load` ・ `module unload`

モジュールを有効にするコマンドは `module load` です。その後ろにモジュール名を付けて実行します。例えば LAMMPS 2Aug2023 のモジュールを有効化する場合、具体的なコマンドは次となります。

```
$ module load lammers/2Aug23
```

逆に、有効化したモジュールを無効化するコマンドは `module unload` です。同様に、後ろにモジュール名を付けて実行します。

```
$ module unload lammers/2Aug23
```

`module unload` は、有効化したモジュールによる環境設定が別の作業に悪影響を及ぼす際などに使用ください。有効化したモジュールによる環境設定が特に悪影響を及ぼしていない場合には、わざわざ無効化する必要はありません。

正常にモジュールを読み込めたかどうかについては、次の `module list` コマンドで確認できます。

(3) 有効になっているモジュールの表示 : `module list`

`module list` により、Environment Module で有効化されているモジュールの一覧を表示します。

```
$ module list
```

例えば `lammers/2Aug23` のモジュールが有効になっている場合、次のように `Currently Loaded Modulefiles:` 行より下に表示されます。

```
# module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) tbb/2021.10.0          4) mk1/2023.2.0
 2) compiler-rt/2023.2.1 5) mpi/2021.10.0
 3) compiler/2023.2.1    6) lammers/2Aug23
```

(4) ユーザーシェルログイン時にモジュールを自動的に有効化する方法

ユーザーログイン時に、自動的にモジュールの有効化を行いたい場合、ユーザーのシェル環境設定ファイルに `module load` コマンドを追記してください。

LAMMPS 2Aug2023 の場合の具体的な修正例を次に示します。

- ☞ Bash をお使いの場合
ホームディレクトリの `.bashrc` の最終行に以下の追記を行います。

- ☞ Tcsh をお使いの場合
ホームディレクトリの `.cshrc` の最終行に以下の追記を行います。

```
# ----- 任意のコメント -----  
# module load lammps/2Aug23
```

モジュールの有効化が他のアプリケーションに悪影響を及ぼすようなケースも存在いたしますので、ログイン時のシェル環境における自動有効化については、有効時の影響に十分注意した上で行うようお願いいたします。

3.2 LAMMPS の実行コマンド例

LAMMPS の実行ファイルは `Imp_linux_intelmpi` です。

シリアル (1CPU コア) で実行するには次のようにします。

```
$ Imp_linux_intelmpi -in inputfile
```

並列実行するには次のようにします。-np に続く数字が並列数です。

```
$ mpirun -np 4 /usr/local/LAMMPS/bin/Imp_linux_intelmpi -in inputfile
```

※`mpirun` 以降のプログラム名は絶対パスで指定する必要があります。プログラムが置かれているディレクトリに `PATH` が通っていても同様です。

その他、LAMMPS の使用方法の詳細については以下をご参照下さい。

- LAMMPS のディレクトリの `doc/` に `Manual.pdf` があります。
- LAMMPS のディレクトリの `doc/html/index.html` が Web ブラウザで確認できるマニュアルです。

4 既知の問題点

- ファイルの欠落

example において、配布ソースに付属のパッケージの atc で、インプットファイルの動作に必要なデータファイル等の欠落がありました。

example	欠落のあるファイル
atc	mesh

- 仕様変更への未対応

以下の example に、LAMMPS の仕様変更に対応しないインプットファイルがありました。

example	仕様変更に対応しないインプットファイル
ASPHERE	in. line、in. line.srd、in. tri.srd
SPIN	setforce_spin
gneb	skymion
read_restart	in. spin.read_data
kim	in. kim-pm-qyery.melt
tracker	in. tracker
atc の cauchy_born	in. cb_unistrain
atc の drift_diffusion	in. ddm_schrodinger、in. finite_well、 in. poisson2d_noatoms、 in. schrodinger-poisson2d_Jconstraint、 in. schrodinger-poisson2d_convective、 in. schrodinger-poisson2d_noatoms
atc の elastic	in. bar1d_thermo_elastic
atc の fluids	in. bar1d_fluids、in. concentration、 in. conducting_interface、in. dielectric_interface
interlayer の ilp_graphene_hbn	in. bilayer-graphene、n. grhBN
kolmogorov_crespi_full	in. bilayer-graphene
manifold	vir. in
python/example	simple.py

A 付録

A.1 HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ http://www.hpc.co.jp/support_index.html

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。
是非ご活用ください。

HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531 【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 hpcs_support@hpc.co.jp