



# 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
4	既知の問題点 .....	6
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先 .....	7

# 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 2020 年 10 月 29 日にリリースされた stable 版は 29Oct20 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 20Oct20 の場合、標準のパッケージで 33、USER パッケージが 42 となっています。このパッケージは、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。当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、当社での検証によって、安定動作したものとなっています。

本マニュアルでは、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

本項では当社が行いました 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 pizza と、LAMMPS と連動可能な Kinetic Monte Carlo Simulator の SPPARKS を合わせて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 29Oct20	/usr/local/LAMMPS/lammps-29Oct20
pizza 90oct15	/usr/local/LAMMPS/pizza-90Oct15
SPPARKS 20Oct20	/usr/local/LAMMPS/spparks-20Oct20
バイナリ	/usr/local/LAMMPS/bin
ライブラリ	/usr/local/LAMMPS/lib

以下のパッケージを組み込んでビルドしてあります。

ASPHERE, BODY, CLASS2, COLLOID, COMPRESS, CORESHELL, DIPOLE, GRANULAR, KSPACE, MANYBODY, MC, MISC, MLIAP, MOLECULE, OPT, PERI, POEMS, PYTHON, QEQ, REPLICa, RIGID, SHOCK, SNAP, SPIN, SRD

USER-ATC, USER-AWPMD, USER-BOCS, USER-CGDNA, USER-CGSDK, USER-COLVARS, USER-DIFFRACTION, USER-DPD, USER-DRUDE, USER-EFF, USER-FEP, USER-H5MD, USER-INTEL, USER-LB, USER-MANIFOLD, USER-MEAMC, USER-MESONT, USER-MGPT, USER-MISC, USER-MOFFF, USER-MOLFILE, USER-NETCDF, USER-PHONON, USER-PTM, USER-QTB, USER-REACTION, USER-REAXC, USER-SMTBQ, USER-SPDP, USER-SPH, USER-TALLY, USER-UEF, USER-YAFF

LAMMPS はソースコードで配布されています。以下のコンパイラを使用してビルドしています。

パッケージ	ディレクトリ
Intel Parallel Studio XE 2019 Composer Edition (19.0.5)	/opt/intel/psxe2019/ parallel_studio_xe_2019.5.281
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/psxe2019/mkl
Intel MPI 2018 update 4	/opt/intel/psxe2018/impi/2018.4.274

LAMMPS を使用するための環境設定では、LAMMPS と pizza 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、pizza を使用する為で、動作検証の結果から、OS に標準に用意されているものに加えて、LAMMPS と pizza に必要な python のパッケージを追加してあります。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 pizza 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。

LAMMPS の環境設定はインストールの際に、設定してあります。各ユーザーのホームディレクトリのファイルで行われています。tcsh をご使用の場合は `~/.cshrc`、bash をご使用の場合は `~/.bashrc` ファイル内で `/home/.common` 以下に用意した LAMMPS の環境設定スクリプトを実行します。

## 3 LAMMPS 実行例

---

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

### シリアル(1CPU)での実行例

```
$ lmp_linux_intelmpi -in inputfile
```

### mdrun\_mpi の実行例

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

使用方法の詳細は以下をご確認下さい。

- 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 USER 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
elastic	in.barld_thermo_elastic
fluids	in.barld_fluids、in.concentration、 in.conducting_interface、in.dielectric_interface、 in.double_layer、in.liquid_electrostatic、 in.shear_flow
hardy	in.nvt、mesh の全てのインプットファイル
molecule	全てのインプットファイル
thermal	in.no_atoms 以外の全てのインプットファイル
two_temperature	in.no_atoms 以外の全てのインプットファイル

- 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
tad	in.tad
USER パッケージの 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
USER パッケージの manifold	vir.in
USER パッケージの COUPLE	C++のコードで書かれたもの

# 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](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](mailto:hpcs_support@hpc.co.jp)