



# 详细安装说明

王晶晶

四川大学物理研究所  
二〇一五年五月

## 第一步 准备 VASP 相关安装包

- intel fortran xe 2013 for linux(parallel\_studio\_xe\_2013\_update2.tgz 及授权文件)
- openmpi-1.8.5.tar.gz
- fftw-3.3.4.tar.gz
- GotoBlas2-1.13.tar.gz
- Vasp5.3.5.tar.gz

## 第二步 系统环境包安装

以 ubuntu 为例，下述软件自行安装

- `sudo apt-get install build-essential`
- `sudo apt-get install gcc-multilib`
- `sudo apt-get install libstdc++5`
- `sudo apt-get install openjdk-6-jre-headless`

以下为 12.04 系统默认自带，建议检查，使用 `g++ -v` 之类的代码；注意 gcc 和 g++ 的版本应一致

- `sudo apt-get install g++`

参考：

[http://blog.163.com/fj\\_tits/blog/static/138027111201063184339602/](http://blog.163.com/fj_tits/blog/static/138027111201063184339602/)

<http://www.linuxidc.com/Linux/2012-07/65070.htm>

[http://blog.sina.com.cn/s/blog\\_6dd65c6f0100y793.html](http://blog.sina.com.cn/s/blog_6dd65c6f0100y793.html)

以下视情况安装。

#安装 amd64 版本的编译器也需要一些 32 位库支持，使用命令安装：

- `sudo apt-get install ia32-libs`
- `sudo apt-get install lib32stdc++6`
- `sudo apt-get install libc6-dev-i386`
- `sudo apt-get install g++-multilib`

### 第三步 安装 **inter fortran compiler 2013**

1. 默认解压所有安装包到用户目录 `cd ~/software`
2. 解压：`tar -zxvf parallel_studio_xe_2013_update2.tgz`
3. `cd parallel_studio_xe_2013_update2/`
4. 执行`./install.sh`，出现安装信息，根据以下几步操作
5. Press "Enter" key to continue or "q" to quit: <回车>
6. Do you agree to be bound by the terms and conditions of this license agreement?  
Type "accept" to continue or "decline" to back to the previous menu: accept
7. Please type a selection or press "Enter" to accept default choice [1]: 3
8. Please type a selection or press "Enter" to accept default choice [1]: 2
9. Please type the full path to your license file(s): /home/wjj/software/parallel\_studio\_xe\_2013\_update2/授权文件名.lic
10. Press "Enter" key to continue: 回车
11. Please type a selection or press "Enter" to accept default choice [1]: 回车
12. 这一步说要覆盖原有的/opt/intel，直接 enter
13. Press "Enter" key to continue <回车> 继续
14. Please type a selection or press "Enter" to accept default choice [q]: 回车

安装完毕

ifort 安装在`/opt/intel/composer_xe_2013.2.146` 目录下

- 设置环境变量

1、vi `~/bashrc` 在最后插入

```
source /opt/intel/bin/ifortvars.sh intel64
source /opt/intel/composer_xe_2013.2.146/mkl/bin/mklvars.sh intel64
```

(如果是 32 位机，intel64 替换为 ia32)

2、source `~/bashrc`[验证：输入 `which ifort` 显示路径则为成功]

## 第四步 安装 fftw

(奔腾 4 以上机子可以提速，具体请自行测试；这里提供安装方法，也可不用，vasp 中已包含 fft)

1. 下载 <http://www.fftw.org/>
2. 解压：tar -zxvf fftw-3.3.4.tar.gz
3. cd fftw-3.3.4/
4. ./configure --prefix=~/.software/fftw (fftw 目录需要提前建立)
5. make
6. make install

参考：

[http://wangzongguo122.blog.163.c ... 122012111393011404/](http://wangzongguo122.blog.163.c...122012111393011404/)  
<http://www.linuxidc.com/Linux/2007-04/3529p2.htm>

## 第五步 安装 openmpi

1. 下载 <http://www.open-mpi.org/software/ompi/v1.8/>
2. 解压 `tar -zxvf openmpi-1.8.5.tar.gz`
3. `cd openmpi-1.8.5/`
4. `./configure --prefix=/home/wjj/software/openmpi CC=icc CXX=icpc F77=ifort FC=ifort`

( 若不加 `CC=icc CXX=icpc F77=ifort FC=ifort` , 则用 `gcc` 编译 )

( `openmpi` 目录需要提前创建 )

5. `make all install`

- 设置环境变量

1. `vi ~/.bashrc`
2. 在最后加入以下内容

```
export PATH=$PATH:/home/wjj/software/openmpi/bin
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:/home/wjj/software/openmpi/lib
export MANPATH=$MANPATH:/home/wjj/software/openmpi/share/man
```

3. `source ~/.bashrc`

检验 :

1. `$echo $PATH`  
`$echo $LD_LIBRARY_PATH`

结果中显示有刚才的 `bin` 和 `lib` 路径则为配置成功

2. `which mpirun` 显示路径则成功
3. 切换到普通账户 , 以免提示 `root` 账户会修改系统文件的问题  
`cd /home/wjj/software/ openmpi-1.8.5/examples`  
`make`  
`mpirun -np 2 hello_c` ( 2 为双核 )

应出现 :

```
Hello, world, I am 0 of 2
Hello, world, I am 1 of 2
```

参考 : [http://blog.sina.com.cn/s/blog\\_8f86de6b0101ayav.html](http://blog.sina.com.cn/s/blog_8f86de6b0101ayav.html)

## 第六步 安装 GotoBLAS2

1. 解压：tar -zxvf GotoBLAS2-1.13.tar.gz

2. 进入目录执行：./quickbuild.64bit

3. 若出现如下：

```
../kernel/x86_64/gemm_ncopy_4.S:192: Error: undefined symbol  
`RPFETCHSIZE' in operation
```

```
../kernel/x86_64/gemm_ncopy_4.S:193: Error: undefined symbol  
`RPFETCHSIZE' in operation
```

```
../kernel/x86_64/gemm_ncopy_4.S:194: Error: undefined symbol  
`RPFETCHSIZE' in operation
```

```
../kernel/x86_64/gemm_ncopy_4.S:195: Error: undefined symbol  
`RPFETCHSIZE' in operation
```

则执行：

```
gmake clean
```

```
make BINARY=64 TARGET=NEHALEM
```

出现以上错误的原因，cpu 太新，配置文件不识别，需要重新指定一下 CPU 类型

## 第七步 安装 vasp5.3.5

1. 解压 tar -zxvf vasp5.3.5.tar.gz 得到 vasp5.3.5 和 vasp5.lib 文件夹

2. cd vasp5.lib/

3. 修改 makefile.linux\_ifc\_P4

FC=ifc 改为 FC=ifort

FFLAGS = -O0 -FI 改为 FFLAGS = -O2 -FI

4. cp makefile.linux\_ifc\_P4 makefile

5. make (成功应生成 libdmy.a)

6. cd vasp5.3.5/

7. 修改 makefile.linux\_ifc\_P4

FC=ifort

OFLAG=-O2 -xHost

BLAS= -L/opt/intel/composer\_xe\_2011\_sp1.11.339/mkl/lib/intel64 -  
lmkl\_intel\_lp64 -lmkl\_core -lmkl\_sequential -lpthread

LAPACK= \$(MKL\_PATH)/libmkl\_intel\_lp64.a

FC=mpif90

去掉以下代码的#

CPP = \$(CPP\_) -DMPI -DHOST=\"LinuxIFC\" -DIFC \

-DCACHE\_SIZE=4000 -DPGF90 -Davoidalloc \

-DMPI\_BLOCK=8000 -Duse\_collective -DscalAPACK -DRPROMU\_DGEMV

-DRACCMU\_DGEMV

BLAS= /opt/GotoBLAS2/libgoto2.a

LAPACK= -L/opt/intel/composer\_xe\_2013.2.146/mkl/lib/intel64 -lmkl\_intel\_lp64 -  
lmkl\_core -lmkl\_sequential -lpthread

SCA= /opt/intel/composer\_xe\_2013.2.146/mkl/lib/intel64/libmkl\_scalapack\_lp64.a  
/opt/intel/composer\_xe\_2013.2.146/mkl/lib/intel64/libmkl\_blacs\_openm  
pi\_lp64.a

8. 若用 vasp 自带的 fft: FFT3D = fftmpi.o fftmpi\_map.o fft3dfurth.o fft3dlib.o

若用 fftw:FF3D= fftmpi.o fftmpi\_map.o fftw3d.o fft3dlib.o

/home/wjj/software/fftw/lib/libfftw3.a



9. 把 fftw-3.3.4/api/fftw3.f 拷贝到 VASP.5.3.5 文件夹下
10. 在 vasp5.3.5 目录中, cp makefile.linux\_ifc\_P4 makefile
11. make (成功应生成名为 vasp 的可执行程序)

安装完成...

内部资料