

Guide setup:

Host: win10 pro 1909 18363.720

Vm suite: oracle vm virtualbox 6.1

VirtualboxOS: win10 pro 1809 17763.107

Ubuntu version: 20190521 18.04 LTS

LAMMPS stable 7Aug19

q.e-6.5


Xlauncher-64.1.20.6.0.

Ovito-pro-3.0.0x64

Начало установки QE и библиотек, необходимых для функционирования QE и LAMMPS.

Переместиться в папку, где находится архив QE:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:~$ cd /mnt/c
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$ ls
ls: cannot read symbolic link 'Documents and Settings': Permission denied
ls: cannot access 'pagefile.sys': Permission denied
ls: cannot access 'swapfile.sys': Permission denied
$Recycle.Bin      'Program Files'      'System Volume Information'  ovito-pro-3.0.0-dev733-win64.exe  swapfile.sys
                  'Program Files (x86)'  Users                        pagefile.sys                    vcxsrv-64.1.20.6.0.installer.exe
Documents and Settings' ProgramData             Windows
PerfLogs          Recovery              lammps-stable.tar.gz         qe-6.5
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$
```



Разархивировать:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$ tar xvzf qe-6.5-ReleasePack.tgz
```

Запустить обновление репозитория:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$ sudo apt-get upgrade
```

Установить требуемые пакеты в формате, одинаковом для всех нижеперечисленных библиотек и пакетов:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$ sudo apt install -y build-essential;
```

```
sudo apt install ccache  
sudo apt install gfortran  
sudo apt install openmpi-bin  
sudo apt install libopenmpi-dev  
sudo apt install libfftw3-dev  
sudo apt install libjpeg-dev  
sudo apt install libpng-dev  
sudo apt install python-dev  
sudo apt install python-virtualenv  
sudo apt install liblapack-dev  
sudo apt install libhdf5-serial-dev  
sudo apt install v hdf5-tools  
sudo apt install tcl  
sudo apt install iwidgets4
```

Находясь в корневой папке QE запустить процедуру конфигурации:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5$ ./configure_
```

После окончания конфигурирования терминал должен вернуть «configure:success»

Находясь в корневой папке, собрать QE:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5$ make pw_
```

Также собрать графический интерфейс:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5$ make gui
```

Терминал может вернуть сообщение :

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5$ make gui
make: 'gui' is up to date.
```

которое свидетельствует о том, что графический интерфейс уже был собран

Установить Xlaunch, ничего не меняя в настройках, также, как и при запуске, результатом правильной установки является значок в области уведомлений Windows:




Исправить ссылки в папке Lib:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI$ cd PWgui/
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui$ cd lib
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib$ ls -la
total 0
drwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling 512 Dec  7 16:07 .
drwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling 512 Dec  6 20:58 ..
-rwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling  32 Dec  6 20:58 .dont-delete
lrwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling  38 Dec  7 16:07 Guib-0.6 -> /home/pietro/Downloads/qe-6.5/GUI/Guib
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib$ rm -rf Guib-0.6
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib$ la -la
total 0
drwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling 512 Apr 11 10:59 .
drwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling 512 Dec  6 20:58 ..
-rwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling  32 Dec  6 20:58 .dont-delete
```

Удаление ссылки производится командой ***rm -rf Guib-0.6***. После удаления следует прописать новую ссылку с помощью команды ***ln -s***:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib$ ln -s /mnt/c/qe-6.5/GUI/Guib/ Guib-0.6
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib$ ls -la
total 0
drwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling 512 Apr 11 11:02 .
drwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling 512 Dec  6 20:58 ..
-rwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling  32 Dec  6 20:58 .dont-delete
lrwxrwxrwx 1 vm_modeling vm_modeling  23 Apr 11 11:02 Guib-0.6 -> /mnt/c/qe-6.5/GUI/Guib/
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib$ cd ../
```



Обозначить сеанс Xming(команда должна выполняться при запуске Xlaunch) :

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5$ export DISPLAY=localhost:0
```

Запустить графический интерфейс:

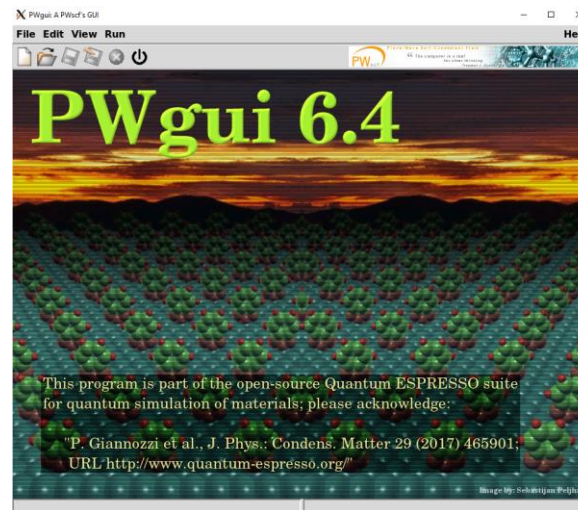
```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5$ cd GUI
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI$ cd PWgui/
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui$ ./pwgui
```

```
=====
This is PWgui version: 6.4
-----
```

```
PWgui: using the system default "tclsh" interpreter
```

```
PWGUI      : /mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui
GUIB engine : /mnt/c/qe-6.5/GUI/PWgui/lib/Guib-0.6
```

Результатом запуска должно быть окно Xlaunch:



Установка LAMMPS

Распаковать архив:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$ tar vxzf lammps-stable.tar.gz
```

Находясь в папке src:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c$ cd lammps-7Aug19/src
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ make serial
make[1]: Entering directory '/mnt/c/lammps-7Aug19/src/STUBS'
```

Окончанием билда будет:

```
text      data      bss      dec      hex filename
4425042  125480      912 4551434  45730a ../lmp_serial
make[1]: Leaving directory '/mnt/c/lammps-7Aug19/src/Obj_serial'
```

В этой же папке выполнить команду :

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ make
```

Окончанием билда будет:

```
text      data      bss      dec      hex filename
4428457  125872     17040 4571369  45c0e9 ../lmp_mpi
make[1]: Leaving directory '/mnt/c/lammps-7Aug19/src/Obj_mpi'
```

В этой же папке:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ make
```

Оставаясь в папке src, для удобства работы скопировать файл lmp_serial в папку с примерами, перейти в папку с примером melt и запустить расчет:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ cp lmp_serial /mnt/c/lammps-7Aug19/examples/melt/
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ cd ../examples/melt/
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/examples/melt$ ./lmp_serial < in.melt
```

Результаты расчета:

```

Nlocal:    4000 ave 4000 max 4000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost:    5499 ave 5499 max 5499 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs:    151513 ave 151513 max 151513 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 151513
Ave neighs/atom = 37.8783
Neighbor list builds = 12
Dangerous builds not checked
Total wall time: 0:00:00

```

Tips'n'tricks

1.Внимание! Так как данный билд делался на монтируемом диске, а не в корневой папке home, то следует понимать, что некоторые файлы придется скопировать в home вручную, например файлы псевдопотенциала. Примерный путь к папке Ubuntu/home:

C:\Users\имя_пользователя\AppData\Local\Packages\CanonicalGroupLimited.UbuntuonWindows_79rhkp1fndgsc\Local State\rootfs\home.

2. in файл в исходном состоянии не предусматривает сохранения dmp файлов, необходимых для загрузки в OVITO, поэтому, в самом in файле требуется корректировка, так же, если пользователю требуется вывод изображений и терминал возвращает подобное:

```

vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/examples/melt$ ./lmp_serial < in.melt
LAMMPS (7 Aug 2019)
Lattice spacing in x,y,z = 1.6796 1.6796 1.6796
Created orthogonal box = (0 0 0) to (16.796 16.796 16.796)
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
Created 4000 atoms
  create_atoms CPU = 0.00115395 secs
ERROR: Support for writing images in JPEG format not included (../dump_image.cpp:85)
Last command: dump                2 all image 25 image.*.jpg type type          axes yes 0.8 0.02 view 60 -30

```

Для пересборки serial требуется изменить конфигурацию Makefile:

```

vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src/MAKE$ nano Makefile.serial

```

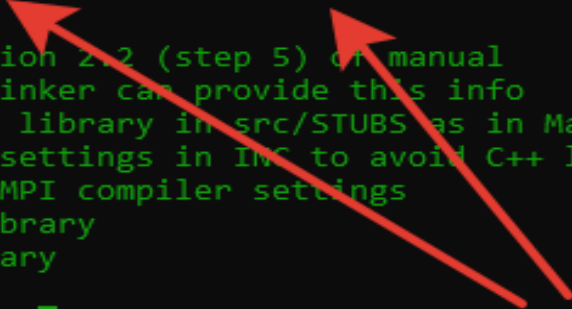
Дописать использование библиотек изображений:

```
# see possible settings in Section 2.2 (step 4) of manual

LMP_INC =      -DLAMMPS_JPEG -DLAMMPS_FFMPEG -DLAMMPS_GZIP -DLAMMPS_MEMALIGN=64

# MPI library
# see discussion in Section 2.2 (step 5) of manual
# MPI wrapper compiler/linker can provide this info
# can point to dummy MPI library in src/STUBS as in Makefile.serial
# use -D MPICH and OMPI settings in INC to avoid C++ lib conflicts
# INC = path for mpi.h, MPI compiler settings
# PATH = path for MPI library
# LIB = name of MPI library

MPI_INC =      -I../STUBS
MPI_PATH =     ../STUBS
```

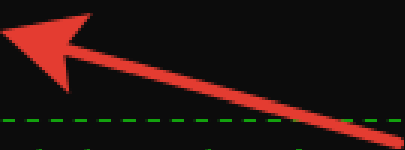


После изменений файл сохранить.

```
# PATH = path(s) for JPEG library and/or PNG library
# LIB = name(s) of JPEG library and/or PNG library

JPG_INC = 
JPG_PATH = 
JPG_LIB = -ljpeg

# -----
# build rules and dependencies
```



В папке src очистить старую конфигурацию и пересобрать Serial:

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src/MAKE$ cd ../
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ make clean-all_
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/src$ make serial
```


После окончания процедуры скопировать новый `lmp_serial` в папку с примерами. После запуска раскомментированного `in` файла в папке появится `dmp` файл и картинки.

```
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/examples/melt$ ls
dump.melt      image.025.jpg  image.075.jpg  image.125.jpg  image.175.jpg  image.225.jpg
image.000.jpg  image.050.jpg  image.100.jpg  image.150.jpg  image.200.jpg  image.250.jpg
vm_modeling@DESKTOP-Q9NR4T8:/mnt/c/lammps-7Aug19/examples/melt$ _
```