

Centos7. x 安装 vasp6.1 教程

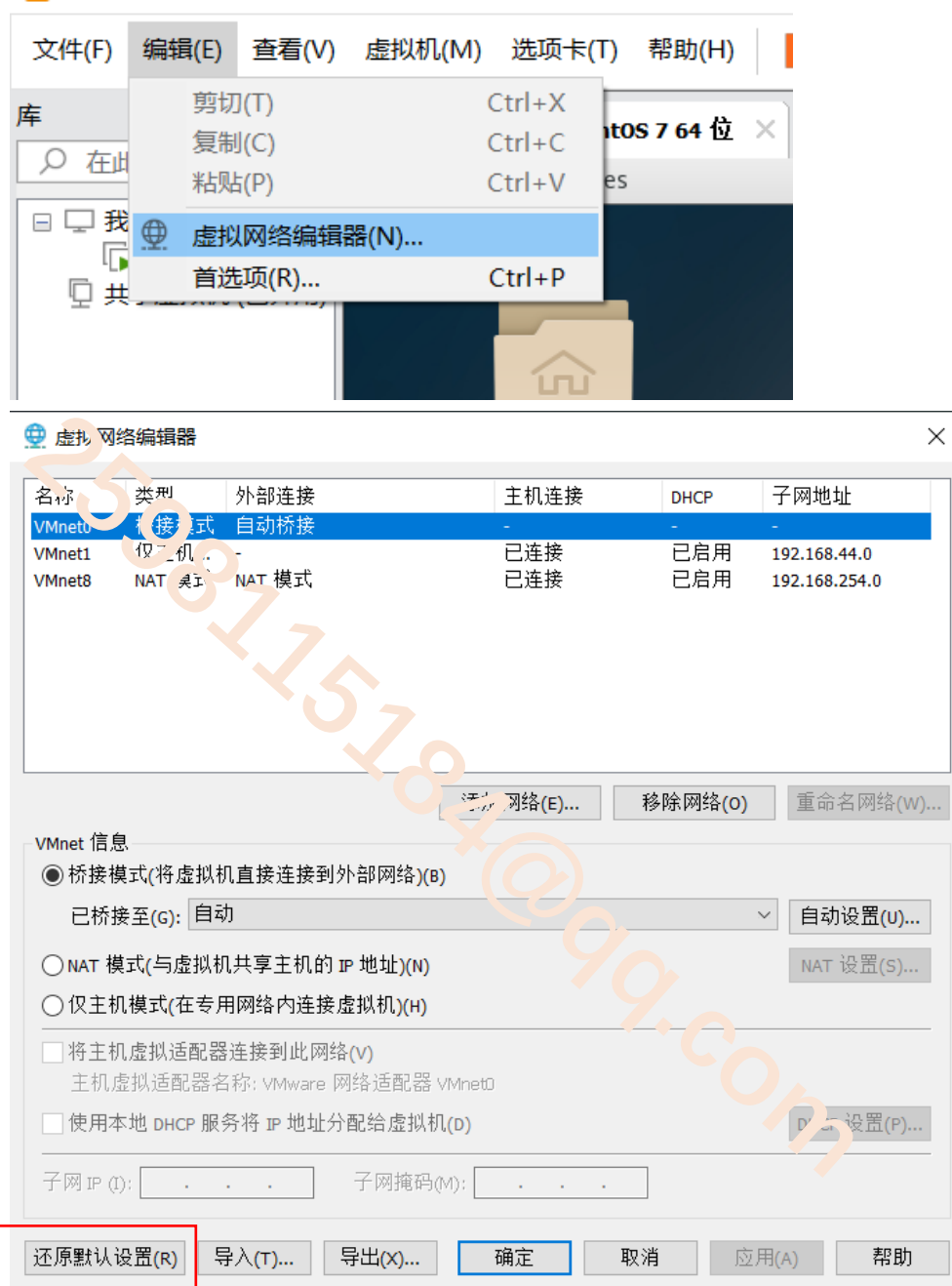
前言: 网上的相关教程已经很多已经过时了, 这是最新的教程, 结合自己经验, 写的很详细, 非常简单。但是 linux 一些基本知识比如如何再 terminal 进入某一目录就不赘述了。

一、VMware 虚拟机安装 Centos7. x

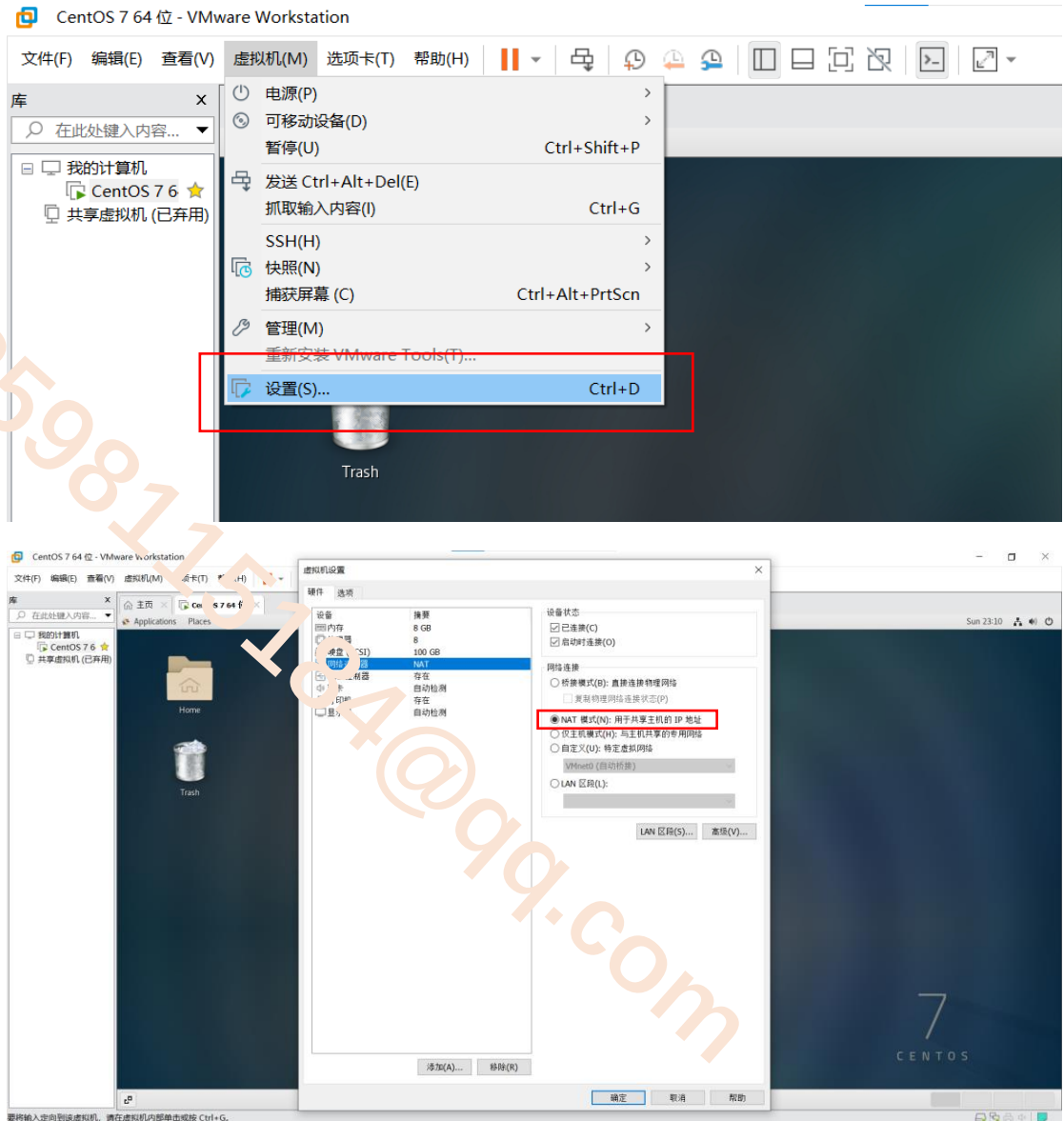
1、下载并安装 VMware pro 16, 网上搜一个激活码。然后在 centos 官网下载系统镜像, 选择 7. x 的 mini 版本, 安装时硬盘尽量大一点, 80G 以上, 安装时选择默认配置即可, 不用新建用户。

安装完成后, 退出虚拟机, 按下图操作, 还原默认设置。

CentOS 7 64 位 - VMware Workstation



然后在虚拟机设置中将网络改为 NAT 模式, 如下图所示:



2、开启虚拟机，输入“root”和密码，就能以 root 用户登录，此时一般不能连接到网络。输入

```
/etc/sysconfig/network-scripts
```

进入此目录，再输入

```
ls
```

查看该目录下的文件，记下第一个文件名（如 ifcfg-ens33）。再输入

```
vi /etc/sysconfig/network-scripts/ifcfg-ens33
```

输入“i”即可编辑该文件，将 ONBOOT 选项改为 yes，然后输入“:”退出编辑，最后输入“wq”保存并退出，这时应该可以连接到网络了，如果不成功，可以在网上找更多 centos 虚拟机联网教程。

3、安装 C/C++环境：

```
yum install gcc  
yum install gcc-c++
```

4、最后安装 GNOME 图形界面，网上有很多教程，非常简单。

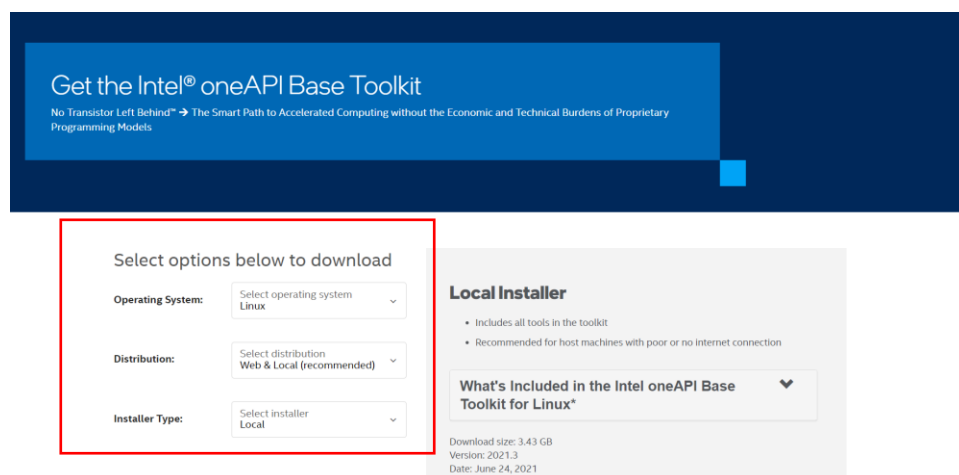
二、安装英特尔 OneApi

1、提前打开虚拟机，然后去下载页面：[Free Intel® Software Development Tools](https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/articles/free-intel-software-developer-tools.html)
(<https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/articles/free-intel-software-developer-tools.html>)

网站页面如下，依次点击 Base Kit 和 HPC Kit。



按照下图红框所示选择三个选项。



下拉网页，右侧会出现如图所示的两句代码，先将第一句代码复制到 centos 的终端中运行，待下载完成后，再复制并运行第二行代码，进行 OneApi 的安装。先安装 BaseKit，再安装 HPCKit，两个安装过程是完全一样的，按照图形界面提示就行。安装时尽量默认，因为不知道编译 vasp 需要哪个功能，所以最好默认。



2、安装好之后，还需要将其添加到路径中。在终端中输入（二者的区别不赘述，推荐后者）

```
gedit ~/.bashrc 或 gedit ~/.profile
```

进入文件编辑，在最后一行加上

```
source /opt/intel/oneapi/setvars.sh intel64
```

保存并退出。这样就配置好了 OneApi。

可在终端中输入

```
icc -version 或 ifort -V
```

检验是否成功，若成功就会显示版本号。

三、编译 vasp. 6. 1. 2

1、以 vasp. 6. 1. 2 为例，相关软件包可以在网上下载，比如 CSDN 就可以下载，如果下载积分不够可以在淘宝几毛钱买代下载。附带的资源包中有，所以不用自己再下载了。

2、将 vasp 的 zip 文件解压，会出现 tar. gz 文件，再将此文件解压至/root/opt 目录中，得到 vasp. 6. 1. 2 文件（原文件名字不是这个，自己可以改一改，方便），将 vasp. 6. 1. 2/arch/makefile.include.linux_intel 这个文件复制到 vasp. 6. 1. 2 目录下，并重新命名为 makefile.include。

3、在终端中进入 vasp. 6. 1. 2 目录，输入 make all，这时会开始编译，大概十几分钟，最后在 vasp. 6. 1. 2/bin 中会得到几个文件。

4、再在终端中输入

```
gedit ~/.bashrc 或 gedit ~/.profile
```

在最后添加

```
export PATH=/opt/vasp. 6. 1. 2/bin/:$PATH
```

这样 vasp 就算安装成功了。

四、通过一个计算来验证 vasp

下载测试任务包: <http://sobereva.com/attach/455/benchmark.Hg.tar.gz>

将文件解压, 会看到 IN-short 和 IN-long, 分别是一个耗时较短和一个耗时较长任务的 INCAR 文件。这里将 IN-short 改名为 INCAR, 在终端中进入此目录, 输入 `mpirun -np 4 vasp_std` (vasp_std 就是/opt/vasp.6.1.2/bin 中编译好的几个文件之一) 测试调用 4 个核心执行此任务, 然后检查得到的 OUTCAR 看是否内容正常, 没异常的话就说明完全装好了!

2598115184@qq.com