# 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

文件(F)

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。

帮助(H)

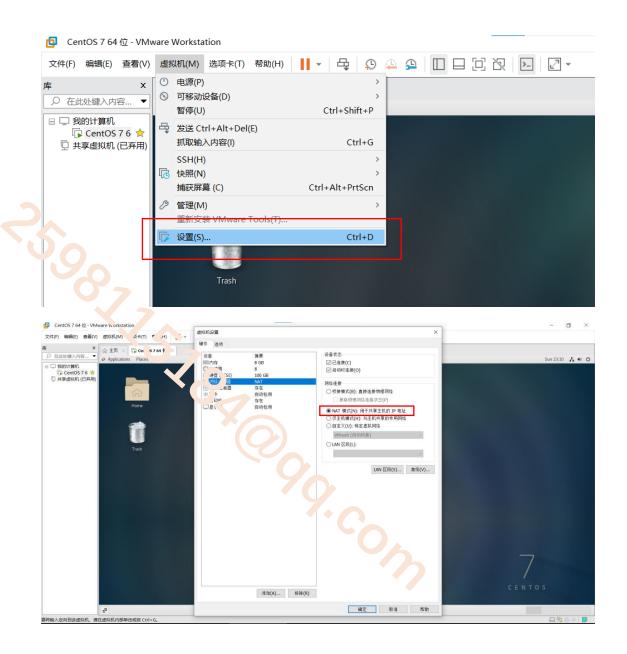
安装完成后,退出虚拟机,按下图操作,还原默认设置。

编辑(E) 查看(V) 虚拟机(M) 选项卡(T)

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

1s

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-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)

网站页面如下,依次点击 Base Kit 和 HPC Kit。

Free Intel® Software Development Tools

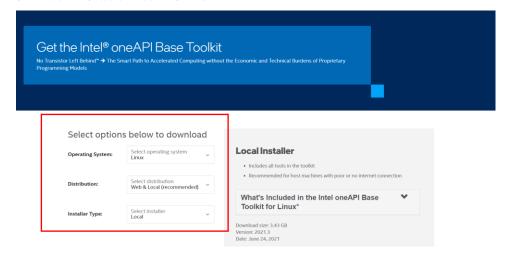
## Intel® cneAPI Toolkits - Free for All Developers

Intel® or. The Intel® or. The Intel® of Software Development Tools for building ap, "icatio... across diverse architectures. All Intel® oneAPI Toolkits products are available at no cost. The Intel oneAPI Toolkits do not equiral licrossistic files and the terms of use are based on the End User License Agreement. Support is available via Intel Developer. Lone omrunity forums.

# Native Code To((k):s

Intel® oneAPI Base Toolkit  Get started with this foundational kit that anable developers of all types to build, test, and deploy performance-driven, data-centric applications across CPUs, GPUs, and Fill SAs For specialized workloads, use the Base Kit with one or more add-on toolkits.
Get the Base Kit + Add a Domain-Specific Toolkit
Add Domain-Specific Toolkits for Specialized Workloads
Intel® oneAPI HPC Toolkit Deliver fast DPC++, C++, Fortran, OpenMP, and MPI applications that sc le
Get the Base Kit + Get the HPC Kit
Intel® oneAPI IoT Toolkit Build high-performing, efficient, reliable solutions that run at the network's edge.
Get the Base Kit + Get the IoT Kit
Intel® oneAPI Rendering Toolkit Accelerate High-Fidelity Rendering and Visualization Applications with Powerful Libraries.
Get the Base Kit + Get the Render 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。

25 Command Line Download

Lower and Line I Istalla ion Parametr's

1 | wget https://registrationcenter-download.intel.com/akdlm/irc\_nas/17977/l\_BaseKit\_p\_2021.3.0.32

2 | sudo bash l\_BaseKit\_p\_2021.3.0.3219\_offline.sh

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ifork -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: <a href="http://sobereva.com/attach/455/benchmark.Hg.tar.gz">http://sobereva.com/attach/455/benchmark.Hg.tar.gz</a> 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!

