



[博客园](#)
[首页](#)
[新随笔](#)
[联系](#)
[订阅](#)
[管理](#)

搭建高性能计算环境（七）、应用软件的安装之MS

- 1, 上传软件包MaterialsStudio70.tgz、msi_7.lic到服务器上。
- 2, 安装ms一般会创建一个普通用户msi，软件安装在msi账号下。

```

创建用户msi:      useradd msi
切换到msi用户:    su - msi

tar xvf /opt/MaterialsStudio70.tgz
cd MaterialsStudio70/

[msi@hpc MaterialsStudio70]$ ./install
Performing per-user installation of Materials Studio 7.0. Restart this
installation as root if you wish to perform an RPM-based installation.

Please enter the location in which to install Materials Studio 7.0
The location where Materials Studio will be installed is <install location>/MaterialsStudio
7.0

[/home/msi/Accelrys] 默认回车
The Accelrys License Pack is required in order to run Materials Studio 7.0.
Please enter the location of a License Pack installation, or an empty directory
into which the License Pack will be installed.
[/home/msi/Accelrys] 默认回车
/home/msi/Accelrys does not appear to contain a supported License Pack installation. Would
you like to
install it to that location? [Y/n]
[Y] 默认回车
Do you wish to start the Gateway service after installation? Answer no here if
you wish to configure security settings before starting. (Y/n)
[Y] 默认回车

Running LicensePack installation...

-----
Accelrys License Pack 7.6.9 - InstallShield Wizard

Welcome to the InstallShield Wizard for Accelrys License Pack 7.6.9

The InstallShield Wizard will install Accelrys License Pack 7.6.9 on your
computer.
To continue, choose Next.

Accelrys License Pack 7.6.9
Accelrys Software Inc.
http://www.accelrys.com

Press 1 for Next, 3 to Cancel or 5 to Redisplay [1] 默认回车

-----
Accelrys License Pack 7.6.9 - InstallShield Wizard

Accelrys License Pack 7.6.9 Install Location

```

公告

昵称: iDove
 园龄: 1年9个月
 粉丝: 5
 关注: 1
[+加关注](#)

< 2016年9月 >						
日	一	二	三	四	五	六
28	29	30	31	1	2	3
4	5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16	17
18	19	20	21	22	23	24
25	26	27	28	29	30	1
2	3	4	5	6	7	8

搜索

常用链接

- 我的随笔
- 我的评论
- 我的参与
- 最新评论
- 我的标签

我的标签

- HPC(6)
- md(3)
- linux(2)
- lammps(1)
- mpi(1)
- MS(1)
- ssh(1)
- vasp(1)
- 分子动力学(1)
- 量化计算(1)
- 更多

随笔分类

- Hadoop
- HPC(9)
- Linux(5)

```
Please specify a directory or press Enter to accept the default directory.

Destination Directory [/home/msi/Accelrys] 默认回车

Press 1 for Next, 2 for Previous, 3 to Cancel or 5 to Redisplay [1] 默认回车

Accelrys License Pack 7.6.9 - InstallShield Wizard

Select the features for "Accelrys License Pack 7.6.9" you would like to
install:

Accelrys License Pack 7.6.9

To select/deselect a feature or to view its children, type its number:

1.  [x] LicensePack
2.  [ ] Compatibility LicensePack

The Compatibility LicensePack is required for supporting Accelrys software
shipped with License Packs 6.x or lower and to support IRIX and Solaris
platforms. See License Pack documentation for complete list of Accelrys
software supported by this License Pack.

Other options:

0. Continue installing

Enter command [0] 默认回车

Press 1 for Next, 2 for Previous, 3 to Cancel or 5 to Redisplay [1] 默认回车

Accelrys License Pack 7.6.9 - InstallShield Wizard

Accelrys License Pack 7.6.9 will be installed in the following location:

/home/msi/Accelrys/LicensePack

with the following features:

LicensePack

for a total size:

157.7 MB

Press 1 for Next, 2 for Previous, 3 to Cancel or 5 to Redisplay [1] 默认回车

Accelrys License Pack 7.6.9 - InstallShield Wizard

Installing Accelrys License Pack 7.6.9. Please wait...

|-----|-----|-----|-----|
0%      25%      50%      75%      100%
|||||

Creating uninstaller...

Finalizing the Vital Product Data Registry. Please wait...

Configuring License Pack
```

随笔档案

2014年11月 (10)

最新评论

- 1. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP
非常感谢楼主的详细安装信息，按照楼主的方法成功的安装了MS，但是在编译VSAP时报错。报错信息如下： ./preprocess base.f90 - DHOST=\"LinuxIFC\" -DCACHE.....
--安风琴
- 2. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP
非常感谢楼主，我找了好久，没想到楼主这里写的这么详细！一定要顶上去！！
--huoxing487
- 3. Re:搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置
博主，你真辛苦，这里的10篇笔记对我们做计算的人来说，是极大的帮助。
只是第一，二篇的图片不能显示。
--coffeeetan

阅读排行榜

- 1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(989)
- 2. 搭建高性能计算环境 (三)、安装intel编译器和mpi(909)
- 3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(596)
- 4. 搭建高性能计算环境 (八)、应用软件的安装之gromacs(565)
- 5. 搭建高性能计算环境 (五)、应用软件的安装之Amber12(528)

评论排行榜

- 1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(2)
- 2. 搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置(1)

推荐排行榜

- 1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(1)
- 2. 搭建高性能计算环境 (十)、应用软件的安装之Wien2k(1)
- 3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(1)

```
-----
Accelrys License Pack 7.6.9 - InstallShield Wizard

The InstallShield Wizard has successfully installed Accelrys License Pack
7.6.9. Choose Finish to exit the wizard.

Press 3 to Finish or 5 to Redisplay [3] 默认回车

Running ConfigureMaterialsStudio.pl
Gateway configuration...
Port 18888 appears to be available right now...
Starting gateway at:
http://hpc:18888/
/home/msi/Accelrys/MaterialsStudio7.0/etc/Gateway/root_default/httpd/bin/apachectl start: h
ttpd started
Gateway start succeeded - running as process 8792.
Testing gateway installation for script u/dsd_test.pl
Running GET for url http://hpc:18888/dsd/commands/u/dsd_test.pl

It works! ...

This is the simple cgi test output ...
Test succeeded, it appears!

1) Enter temporary license password
2) Set connection to license server
3) List command line license administration tools
99) Finished with license configuration

Choose one of the above options: 99 完成退出
Exiting program
```

3, 激活

使用yum安装缺少的软件包

```
yum install libstdc++-4.4.6-3.el6.i686
```

将license文件复制到当前目录, 如msi_7.lic

修改msi_7.lic中第一行的this_host为主机名, 如:

SERVER hpc ANY 27000

使用下面命令激活:

```
~/Accelrys/LicensePack/linux/bin/lp_install msi_7.lic
```

4, 设置GateWay开机自动启动(如果使用windows下的ms客户端连接到linux上使用需要开启Gateway, 如果使用命令行则不需要启动)

切换到root用户:

```
复制gateway启动文件
cp ~msi/Accelrys/MaterialsStudio7.0/etc/Gateway/msgateway_control_18888 /etc/init.d/
设置开机启动
chkconfig msgateway_control_18888 on
重启服务
service msgateway_control_18888 restart
```

5, 验证gateway

打开浏览器, 输入<http://服务器IP地址:18888>, 如果能打开界面则成功。

6, 使用Windows客户端连接到Linux计算

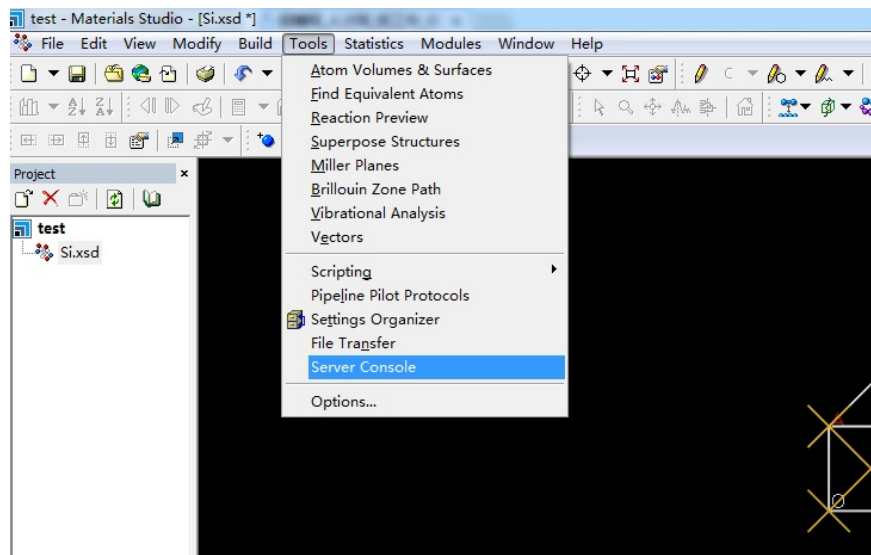
在MS软件windows下的客户端中添加服务器的Gateway, 计算的时候选择Linux的Gateway就可以从windows直接调用!

linux计算，

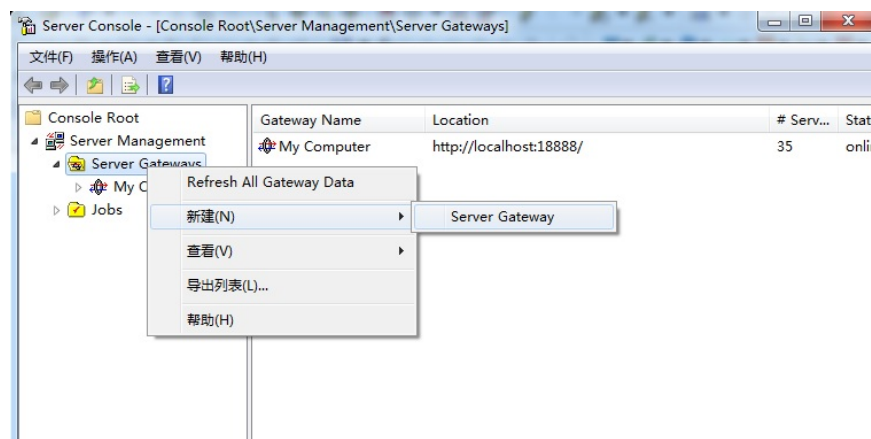
完成后将计算返回到windows下，且如果计算中windows客户端软件关闭或关机均不影响计算。

添加Gateway的步骤如下：

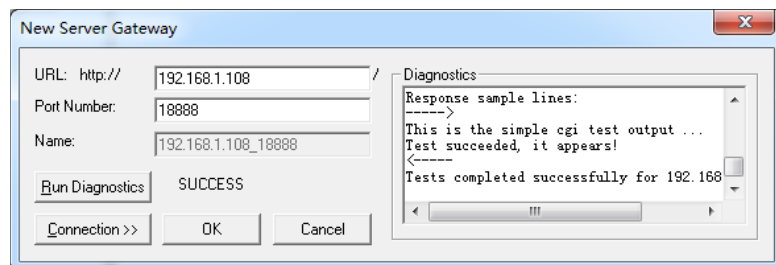
- 1) 打开菜单Tools->Server Console，进入配置界面



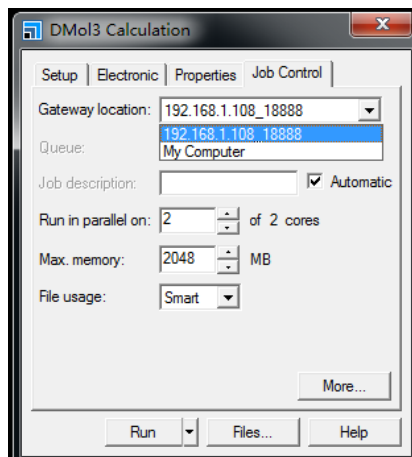
- 2) 右键选择Server Gateway新建一个Gateway



- 3) 输入Linux服务器的ip地址，默认端口18888，点Run Diagnostics测试Gateway是否正常，如图所示验证成功，点OK关闭窗口



- 4) 计算的时候选择Gateway为Linux服务器就可以了，其他的与本地计算相同。



分类: [HPC](#), [Linux](#)

标签: [HPC](#), [MS](#)

好文要顶

关注我

收藏该文



iDove

关注 - 1

粉丝 - 5

+加关注

0

0

« 上一篇: [搭建高性能计算环境 \(六\)、应用软件的安装之lammps](#)

» 下一篇: [搭建高性能计算环境 \(八\)、应用软件的安装之gromacs](#)

posted @ 2014-11-19 22:03 iDove 阅读(376) 评论(0) 编辑 收藏

[刷新评论](#) [刷新页面](#) [返回顶部](#)

注册用户登录后才能发表评论, 请 [登录](#) 或 [注册](#), [访问网站首页](#)。

【推荐】50万行VC++源码: 大型组态工控、电力仿真CAD与GIS源码库

【活动】硅谷IT教育平台Udacity邀请您来免费上课

【推荐】移动直播百强八成都在用融云即时通讯云

【推荐】报表开发有捷径: 快速设计轻松集成, 数据可视化和交互

【推荐】网易云信-一天开发一个微信, 独创1对1技术顾问让开发加速



最新IT新闻:

- 三星专利: 让智能手机同时运行Android和Windows Mobile系统
 - 施普林格·自然集团回应: 韩春雨事件尚无最终结果
 - 苹果香港网站页面意外出现新一代iPhone正式名称
 - 2016微博用户研究: 新欢、旧爱、核心价值与迫切之疾
 - 沃尔沃将向其它汽车制造商出售无人驾驶汽车技术
- » 更多新闻...



最新知识库文章:

- 程序猿媳妇儿注意事项
- 可是姑娘, 你为什么要编程呢?
- 知其所以然 (以算法学习为例)
- 如何给变量取个简短且无歧义的名字
- 编程的智慧

» 更多知识库文章...

Copyright ©2016 iDove