

搭建高性能计算环境（十）、应用软件的安装之Wien2k

1，首先安装fftw

```
tar xvf fftw-3.3.4.tar.gz
cd fftw-3.3.4
./configure --prefix=/opt/fftw-3.3.4 --enable-shared --enable-float --enable-mpi CC=icc F77=ifort
make
make install
```

2，安装Wien2k

```
#创建目录并解压缩Wien2k
mkdir Wien2k
cd Wien2k
tar xvf ~/WIEN2k_12.tar
gunzip *.gz
./expand_lapw
配置参数，按照提示操作
./siteconfig_lapw
```

几个关键配置：

1) 系统选择高版本的intel编译器和mkl

```
*****
* Specify a system *
*****

Current system is: unknown

I  Linux (Intel ifort 12.0 compiler + mkl )
J  Linux (Intel ifort 9 or 10 compiler + mkl 9.0 )
K  Linux (Intel ifort 11.0 compiler + mkl )
K1 Linux (Intel ifort 11.1 compiler + mkl )
A  AIX
V  Linux (gfortran compiler + gotolib)
G  GENERIC (should work on any platform)
L  Linux (PGI compiler)
P  Linux (Pathscale compiler)
W  Linux (G95 compiler + gotolib)
S  SGI (Origin)
S1 SGI Altix 350/3000 with Intel 7.1 compiler)
U  SUN
L1 Linux (Lahey LF97 compiler)
M  Mac (mac g4 + absoft compiler)
Selection: I
```

2) lapack、blas库的设置，此处默认即可

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

找找看

谷歌搜索

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)

```
Since intel changes the name of the mkl-libraries from version to version,
you may find the linking options for the most recent ifort version at
http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl-link-line-advisor/

Recommended options for system linuxifc are:
Compiler options:      -FR -mpi -w -prec_div -pc80 -pad -ip -DINTEL_VML -traceback
Linker Flags:          $(FOPT) -L$(MKLRROOT)/lib/$(MKL_TARGET_ARCH) -pthread
Preprocessor flags:    '-DParallel'
R_LIB (LAPACK+BLAS):   -lmkl_lapack95_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -openmp -lpthread

Current settings:
O  Compiler options:    -FR -mpi -w -prec_div -pc80 -pad -ip -DINTEL_VML -traceback
L  Linker Flags:        $(FOPT) -L$(MKLRROOT)/lib/$(MKL_TARGET_ARCH) -pthread
P  Preprocessor flags   '-DParallel'
R  R_LIB (LAPACK+BLAS): -lmkl_lapack95_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -openmp -lpthread

S  Save and Quit

To change an item select option.

Selection: █
```

3) 选择编译器, 使用ifort和icc

```
*****
*   Specify compilers   *
*****

Recommended setting for f90 compiler: ifort
Current selection:      f90

Your compiler: ifort

Changing Compiler to ifort
Recommended setting for C compiler: cc
Current selection:      cc

Your compiler: icc█
```

4) 并行设置

```
*****
*   Configure parallel execution   *
*****

These options are stored in  parallel_options  of WIENROOT
You can change them later also manually.

Do you use ONLY a shared memory parallel architecture (ONE single multi-core
node)  ?

On shared memory system it is normally better to start jobs in the
background rather than using remote commands. If you select a shared memory
system WIEN will by default not use remote shell commands
(USE_REMOTE and MPI_REMOTE = 0 in parallel_options)
and set the default granularity to 1.

You still can override this default granularity in your .machines file.

You may also set a specific TASKSET command to bind your executables
to a specific core on multicore machines.
Shared Memory Architecture? (y/n):n
Do you know/need a command to bind your jobs to specific nodes ?
(like taskset -c). Enter N / your_specific_command: N
On most mpi-2 versions, it is better to start an mpijob on the original machine
and not via ssh on a remote system. If you are using mpi2 set MPI_REMOTE to 0  Set MPI_REMOTE to 0 / 1: █
```

5) 选择、设置mpif90

```
*****
Do you have MPI and Scalapack installed and intend to run
finegrained parallel? (This is usefull only for BIG cases
(50 atoms and more / unit cell) and you need to know details
about your installed mpi and fftw )
(y/n) y█
```

6) scalapack库的设置

```
Since intel changes the name of the mkl-libraries from version to version,
and the libraries also depend on the version of your mpi,
you may find the linking options for the most recent ifort version at
http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl-link-line-advisor/
You need to specify MPI, FFTW and Scalapack libraries in  RP_LIBS,
options for parallel compilation in  FFOPT
how to run mpi jobs in  MPIRUN
(during execution _NP_ will be substituted by the "number of processors"
_EXEC_ by the "executable"
and _HOSTS_ by the machines filename)

Recommended options for system linuxifc are:
RP_LIB (SCALAPACK+PBLAS): -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_solver_lp64 -lmkl_blacs_lp64 -L/opt/local/fftw3/lib/ -lfftw3_mpi -lfftw3
$(R_LIBS)
FFOPT(par.comp.options): -FR -mpi -w -prec_div -pc80 -pad -ip -DINTEL_VML -DFFTW3 -traceback
MPIRUN commando : mpirun -np _NP_ -machinefile _HOSTS_ _EXEC_

Current settings:
RP  RP_LIB (SCALAPACK+PBLAS): -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_lp64 -L/opt/fftw-3.3.4/lib/ -lfftw3f_mpi -lfftw3f $(R_LIBS)
FP  FFOPT(par.comp.options): -FR -mpi -w -prec_div -pc80 -pad -ip -DINTEL_VML -DFFTW3 -traceback
MP  MPIRUN commando : mpirun -np _NP_ -machinefile _HOSTS_ _EXEC_

S  Save and Quit

To change an item select option.

Selection: █
```

7) 选择A开始编译

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。  
--coffetan

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)

```
*****
*      Compile/Recompile programs      *
*****

M   Compile programs with modified parameters
A   Compile all programs (suggested)

Q   Quit

Selection: A
```

分类: [HPC](#), [Linux](#)

好文要顶

关注我

收藏该文



iDove

关注 - 1

粉丝 - 5

1

0

+加关注

« 上一篇: [搭建高性能计算环境\(九\)、应用软件的安装之gaussian 09](#)

posted @ 2014-11-22 19:45 iDove 阅读(231) 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...



90%的开发者选择极光推送

不仅是集成简单、24小时一对一技术支持

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