

iDove

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

搭建高性能计算环境（一）、Linux操作系统的安装和配置

一般课题组刚开始做计算，往往没有专门的集群，主要用自己的PC机、工作站或者买几台服务器来跑跑；小伙伴们摸索Linux的使用、编译一些开源软件、甚至写点Shell脚本需要耗费很多时间，耽误了读文献、码论文的进展。

在此写几篇Blog，将Linux系统的安装、设置，常用软件的安装、编译整理出来，分享给大家(内容只包含单节点的情况，不涉及集群、作业调度系统及跨节点计算)。

1， 安装CentOS6.2。

1) 从光盘启动后的界面，开始安装系统。



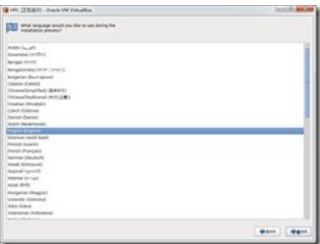
2) 提示检查光盘的完整性，可以跳过。



3) 根据提示按下一步。



4) 选择语言，默认英文可以按需要选择中文。



4) 选择键盘模式、默认US不用改。

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

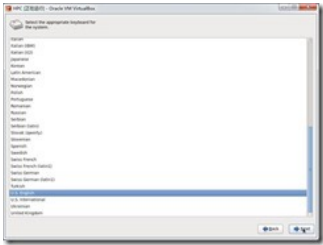
[我的随笔](#)  
[我的评论](#)  
[我的参与](#)  
[最新评论](#)  
[我的标签](#)

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\(5\)](#)



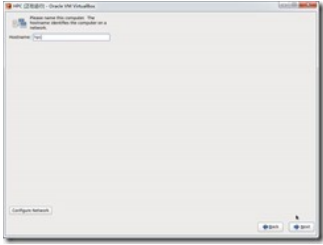
5) 开始硬盘分区部分。



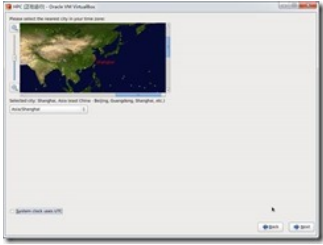
6) 新硬盘会提示此警告，选择Yes。



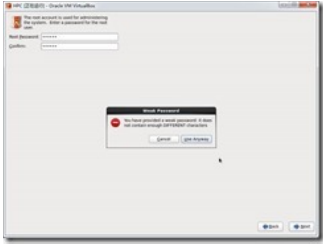
7) 设置机器的主机名，也可以装好后再设置。



8) 选择时区，一般选亚洲/上海。



9) 设置root用户(管理员)密码，密码过于简单会提示、可以无视。



10) 选择custom自定义分区，也可以选择其他项让系统自动分区。

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VASP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

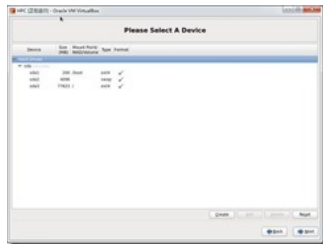
- 1. 搭建高性能计算环境（四）、应用软件的安装之VASP(2)
- 2. 搭建高性能计算环境（一）、Linux操作系统的安装和配置(1)

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)



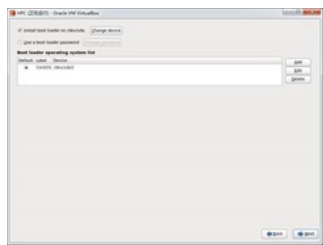
11) 此处分3个分区, 200M的/boot, 4G的交换分区和剩余的全部分到根分区/。



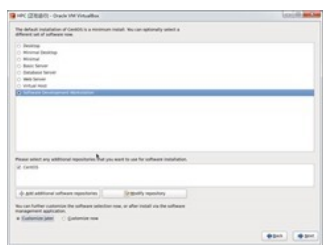
12) 选择“write changes to disk”开始按照设置分区并格式化。



13) 引导的安装位置, 一般不用改(如果用U盘装系统, 此处一般需要改动)。



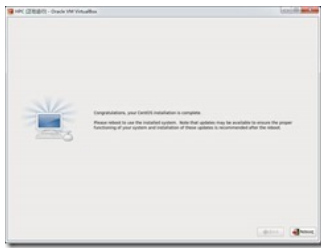
14) 选择要安装的软件包, 可以根据需要在custom中选择全部的软件包, 此处选择开发工作站。



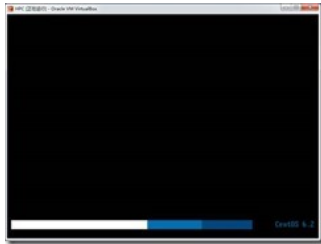
15) 开始安装选择的软件包, 根据机器配置和选择的软件包数量需要的时间不定。



16) 系统安装完成, 重新启动。



17) 系统重启中。



18) 系统首次启动需要配置一些选项。



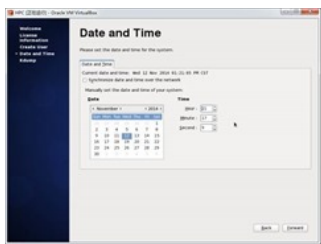
19) 选择Yes。



20) 创建一个普通用户，输入用户名、密码。



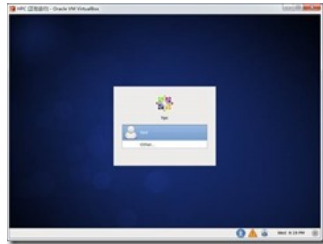
21) 设置好系统时间。



22) kdump为系统如果异常崩溃，会将内存转储到core文件中，以便以后分析原因，一般人也不懂这个信息，所以关掉吧(如果机器内存太小，这个就根本不能选Enable)。



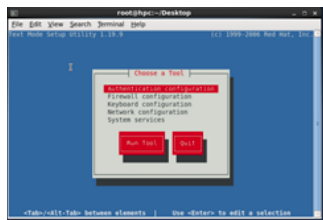
23) 选择Finish正式进入系统。



2, 系统设置(使用root用户登录系统)。

1) 关闭防火墙。

打开一个终端,输入setup,回车,出现如下画面。



选择Firewall configuration回车, 去掉Enable的选择



选择OK回车, 提示警告确认, 选择YES。

2) 关闭一些不需要的服务。

在终端输入

```
chkconfig iptables off
```

```
chkconfig ip6tables off
```

```
chkconfig abrt-ccpp off
```

```
chkconfig abrt-oops off
```

```
chkconfig abrt-d off
```

```
chkconfig NetworkManager off
```

```
chkconfig avahi-daemon off
```

```
chkconfig bluetooth off
```

```
chkconfig certmonger off
```

```
chkconfig iscsi off
```

```
chkconfig iscsid off
```

```
chkconfig kdump off
```

```
chkconfig libvirt off
```

```
chkconfig libvirt-guests off
```

```
chkconfig postfix off
```

```
chkconfig qpid off
```

3) 关闭selinux。

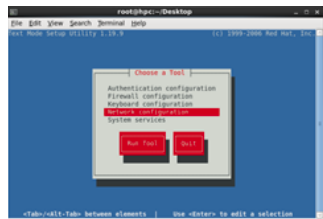
编辑selinux文件, 修改为SELINUX=disabled(重启后生效)

```
gedit /etc/sysconfig/selinux
```



4) 设置网络。

进入setup打开画面的Network configuration选项



选择Device configuration为网卡配置IP地址



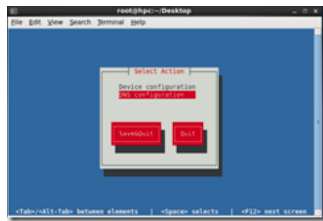
网卡一般显示为eth0、eth1等, 一般服务器都有两个以上的网卡, 本机只有一块网卡eth0



为eth0网卡设置地址, 如果是自动获取ip选择use dhcp然后直接选择ok



使用DNS configuration配置主机名和DNS



填入相应的主机名和dns信息

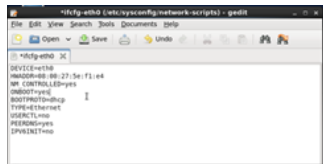


网络配置好后一定要使用Save&Quit保存网络设置信息并退出界面

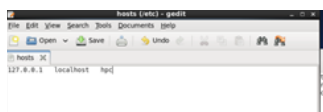


**注意：**因为系统默认开启NetworkManager管理网络，所以推荐手动修改网卡配置文件/etc/sysconfig/network-scripts/ifcfg-ethX中的ONBOOT的no为yes，使网络能随机器开机启动。

若机器有多个网卡，可以使用ethtool -p eth0来定位eth0对应的网口(网口有灯闪烁)。



5) 修改/etc/hosts文件，加入自己的主机名。



如果是固定ip建议写成如下两行：

127.0.0.1 localhost

自己的ip 自己的主机名

操作系统的安装配置到此结束。

附CentOS6.2下载地址：

<http://download.chinaunix.net/down.php?id=35273&ResourceID=13166&site=6>

分类：[Linux](#)

标签：[linux](#)

好文要顶 关注我 收藏该文



iDove  
关注 - 1  
粉丝 - 5

+加关注

0

0

» 下一篇：[搭建高性能计算环境\(二\)、远程登录Linux服务器](#)

posted @ 2014-11-13 09:32 iDove 阅读(313) 评论(1) 编辑 收藏

## 评论列表

#1楼 2015-02-06 10:24 coffetan

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。

支持(0) 反对(0)

[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:

- 张旭豪最新内部讲话：饿了么怎么看友（he）商（bing）？
  - 携程发行7.5亿美元可转债及2250万股美国存托凭证
  - 通用电气斥资14亿美元收购欧洲两家3D打印公司
  - 百度否认与新美大进行合并谈判 从未聘请华兴资本
  - 腾讯昨日成亚洲市值最高公司，今日股价继续上涨成全球十大市值公司
- » 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