

Intel Parallel Studio XE 编译VASP

2018-01-15 由 cndaqiang 在 DFT 与 wasp centos Intel

之前尝试编译VASP在Ubuntu VASP安装和运行，但是在centos上进行重置时，各种报错，现在尝试了安装几次感觉自己的理解更多了，总结如下。这篇文章省略了很多命令，有看不懂的地方参考Ubuntu VASP安装和运行。

编译注意

- 硬盘空间足够

编译时会生成很多临时文件，占据空间大，Intel编译器Intel Parallel Studio XE 2018 for linux安装后占1G，安装包3.5G，硬盘空间不足编译失败
如果硬盘空间太小，可以尝试安装老版的intel编译器
- 内存足够

使用fortran编译vasp时，内存1G编译过程中进程被杀死，添加2G的虚拟内存，编译通过
- 编译器最好一致

vasp安装库：mpif90，使用gfortran和fortran编译产生的库文件不同，最后使用gfortran和fortran编译vasp时容易冲突，所以只使用fortran或gfortran其中的一种进行编译
- configure的一些参数

-prefix 安装目录，是最后 make install 的安装地址
- 安装地址

可以编译在 /home/username 即家目录下，这样只能自己使用
也可以安装到根目录下的某目录（需要root权限），每个用户都可以使用
- PATH

安装软件后，软件执行文件所在目录被添加到系统PATH路径后，才能在shell里直接输入命令如 icc，不添加则需要使用 /opt/intel/bin/icc 运行
添加PATH的方法，参考 [添加PATH](#)
- 编译选项

configure -h 可以查看生成makefile的编译选项，如CC(C编译器)FC(Fortran编译器)MPICC(MPI并行编译并行)MPIF90(并行C/C++编译并行)F90(并行Fortran编译并行)
- 编译并行

编译并行时，指定intel编译器

```
./configure --prefix=/opt/fftw/ CC=icc F77=ifort MPICC=mpicc --enable-mpi
```

vasp编译说明

建议认真读一下vasp4.6的makefile文件，里面说的很详细 [makefile.linux_ifc_P4](#)，还有VASP5.4.1里面的 [README](#)

vasp安装需要

- fortran等编译器

intel:icc ifort
gfortran等
- 数学库 BLAS BLACS LAPACK SCALAPACK

intel:mkl会有
分别从 [NETLIB](#) 编译安装
[SCALAPACK安装包](#) 可以帮助下载所有数学库
- fftw

vasp自带
intel:mkl含有
编译fftw
- 注：

若编译数学库fftw，需和最后编译vasp使用同一fortran编译器
编译数学库需支持mpi并行，这样才能编译支持mpi的vasp

通过上面的分析，我们可以发现，intel的编译器Intel Parallel Studio XE 包含了我们编译vasp所有的工具

编译准备

从Intel Parallel Studio XE 获取账号，获取安装序列号，建议使用edu邮箱注册，获取序列号时间短，我申请的开放贡献者账号好几天都没通过。当然也可以使用license激活的，百度相关资源。

此次我使用的版本Intel Parallel Studio XE 2018 for Linux

vasp来源 [VASP](#)，组里购买的正版，网上也可以搜索的相关的资源，计算请使用正版

此次我使用的文件vasp.5.4.1.24Jun15.tar.gz

编译环境

此次编译在vmware上运行的Centos7.3.10.0-514.el7.x86_64.2G内存，i7-7500U
除了intel需要的库安装方法不一样外，vasp编译运行方式应该适用于所有Linux

编译过程

intel

依赖

```
yum install glibc-devel.i686
yum install libstdc++.so.6
ldconfig
yum install gcc-c++
```

安装过程显示OS unsupported，忽视

有其他依赖缺少时，vasp安装后再Re-check

另外在云服务器上尝试时

- KVM安装时提示 CPU unsupported，暂未继续安装
- ONZ安装提示 内核有问题，暂未继续安装

安装

./install.sh

同意协议，保持默认选项即可，默认安装到 /opt/intel，也可以自定义

使用ubuntu16.04安装时，使用 ./install_GUI.sh ，可以选择安装组件，只安装64位icc,ifort,mpi,mkl就可以运行，安装后占空间约2G

修改 /etc/profile 或 ./bashrc 中就无需上述操作，登陆时source一下或者添加到文件永久修改都可以，看个人喜好

编译并行fftw

下面的路径与实际路径与intel编译器的版本有关，版本变更后适当修改

执行

```
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/bin/compilersvars.sh intel64
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/bin/iccvars.sh intel64
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/bin/fftwvars.sh intel64
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/mkl/bin/mklvars.sh intel64
source /opt/intel/impi/2018.0.128/bin64/mpivars.sh
```

或者上述命令添加到 /etc/profile 或 ./bashrc，具体含义 [添加PATH](#)

可用 which icc ifort ccmpif90 检查是否添加成功

之后编译，若显示 xxx:command not found，则source一遍上述命令

在编译后运行vasp时，若上述命令不在PATH内，也无法运行，需要先执行一遍

修改 /etc/profile 或 ./bashrc 中就无需上述操作，登陆时source一下或者添加到文件永久修改都可以，看个人喜好

添加PATH

下面的路径与实际路径与intel编译器的版本有关，版本变更后适当修改

执行

```
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/bin/compilersvars.sh intel64
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/bin/iccvars.sh intel64
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/bin/fftwvars.sh intel64
source /opt/intel/compilers_and_libraries_2018.0.128/linux/mkl/bin/mklvars.sh intel64
source /opt/intel/impi/2018.0.128/bin64/mpivars.sh
```

或者上述命令添加到 /etc/profile 或 ./bashrc，具体含义 [添加PATH](#)

可用 which icc ifort ccmpif90 检查是否添加成功

之后编译，若显示 xxx:command not found，则source一遍上述命令

在编译后运行vasp时，若上述命令不在PATH内，也无法运行，需要先执行一遍

修改 /etc/profile 或 ./bashrc 中就无需上述操作，登陆时source一下或者添加到文件永久修改都可以，看个人喜好

运行vasp

运行vasp时，若使用 ./vasp.5.4.1.24Jun15.tar.gz 后

编译vasp时若将CC设置为mpif90，报错

```
gfortran: command not found
```

这是因为Intel MPI库因为mpif90是使用gfortran进行编译，gfortran的安装没有安装，冲突

若将CC设置为icc,ifort,ccmpif90，报错

若将CC设置为icc,ifort,ccmpif90，报错