

Instalación rápida para LICHEM Taller de Dinámica Molecular 2017

Prof. G. Andrés Cisneros
Erik Vázquez Montelongo



Requerimientos mínimos de LICHEM:

- LICHEM binary: OpenMP
- LICHEM test suite: Python
- LICHEM manual: LaTeX, BibTeX, TeXLive
- VMD (nota: no es un programa que necesite LICHEM en si, pero es altamente recomendado)

Instrucciones para instalar PSI4:

1. Página principal de PSI4: <http://psicode.org/>
2. Hacer la instalación rápida de PSI4: <http://www.psicode.org/psi4manual/master/conda.html>
3. Seguir las instrucciones para la estación rápida:

```
Quick Installation

Sequence of commands to get you to a working Psi4. Installs Miniconda into $HOME/miniconda and the Psi4 executable into the main conda environment at $HOME/miniconda/bin/psi4.

# Linux or Mac, Py2 or Py3 for main environment (immaterial to Py for Psi4): select between four lines
# Windows: in Ubuntu shell, select either Linux line
>>> curl -o Miniconda-latest.sh "https://repo.continuum.io/miniconda/Miniconda2-latest-Linux-x86_64.sh"
>>> curl -o Miniconda-latest.sh "https://repo.continuum.io/miniconda/Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh"
>>> curl -o Miniconda-latest.sh "https://repo.continuum.io/miniconda/Miniconda2-latest-MacOSX-x86_64.sh"
>>> curl -o Miniconda-latest.sh "https://repo.continuum.io/miniconda/Miniconda3-latest-MacOSX-x86_64.sh"

>>> bash
>>> bash Miniconda-latest.sh -b -p $HOME/miniconda # agrees to conda's license terms
>>> echo "export PATH=$HOME/miniconda/bin:$PATH" >> ~/.bashrc # Mac: use ~/.bash_profile
# log out, log back in so conda in path
>>> conda update --yes --all
>>> conda config --add channels http://conda.anaconda.org/psi4
>>> conda install --yes psi4
>>> psi4 "$(dirname $(which psi4))/../share/psi4/samples/sapt1/test.in # test installation. works b/c PSI_4"
```

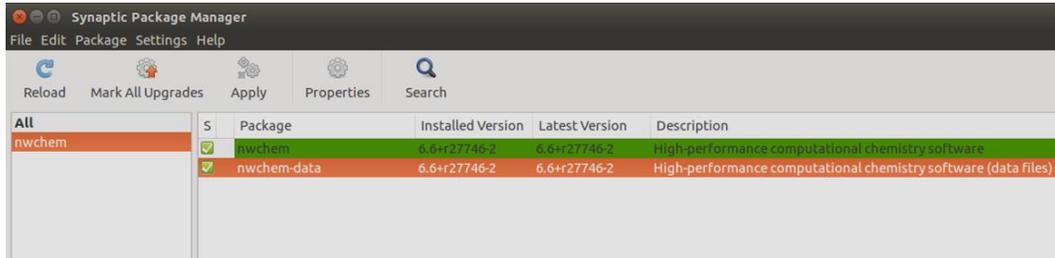
4. Modificar su PATH para que pueda ser llamado por LICHEM.

Instalación rápida para LICHEM
Taller de Dinámica Molecular 2017
Prof. G. Andrés Cisneros
Erik Vázquez Montelongo



Instrucciones para instalar NWChem:

- Por medio de synaptic (sudo apt-get install synaptic), buscar e instalar Nwchem. NOTA: esto solo instalara la versión serial de NWCHEM.



- Modificar su PATH para que pueda ser llamado por LICHEM.

Instrucciones para instalar TINKER:

1. Página principal de TINKER: <https://dasher.wustl.edu/tinker/>
2. Descargar los ejecutables o el código fuente y compilarlo.

TINKER Downloads

TINKER Summary Sheet	PDF
TINKER License Agreement	PDF
TINKER Wiki Site	WEB SITE
TINKER User's Guide	PDF
TINKER Logo Illustration	GIF
TINKER Distribution Directory	DIRECTORY
Force Field Parameter Sets	DIRECTORY
TINKER Source Code Directory	DIRECTORY
TINKER Complete Distribution (GNU gzip, 32.7 Mb)	DOWNLOAD
TINKER Complete Distribution (Windows zip, 35.0 Mb)	DOWNLOAD
TINKER Executables for 64-bit Linux (GNU gzip, 69.2 Mb)	DOWNLOAD
TINKER Executables for MacOS (GNU gzip, 69.3 Mb)	DOWNLOAD
TINKER Executables for 64-bit Windows (Windows zip, 69.7 Mb)	DOWNLOAD

3. Modificar su PATH para que pueda ser llamado por LICHEM.

Instalación rápida para LICHEM
Taller de Dinámica Molecular 2017
Prof. G. Andrés Cisneros
Erik Vázquez Montelongo



Instrucciones para instalar LICHEM:

1. Ir a la siguiente liga: https://github.com/kratman/LICHEM_QMMM
2. Descargar o hacer “git clone”

File/Folder	Commit Message	Time Ago
Eigen3	Eigen update	27 days ago
doc	A lot of updates for code clean up	a year ago
include	Minor updates	8 months ago
src	Eigen and doxygen updates	2 months ago
tests	Test update	5 months ago
.travis.yml	OSX build fix	5 months ago
Makefile	OSX build fix	5 months ago
README.md	Minor doc. update	8 months ago

```
Terminal
erik@redtea: ~/Documents/Taller-DM
erik@redtea:~/Documents/Taller-DM$ git clone https://github.com/kratman/LICHEM_QMMM.git
Cloning into 'LICHEM_QMMM'...
remote: Counting objects: 7473, done.
remote: Compressing objects: 100% (12/12), done.
remote: Total 7473 (delta 0), reused 1 (delta 0), pack-reused 7461
Receiving objects: 100% (7473/7473), 8.81 MiB | 0 bytes/s, done.
Resolving deltas: 100% (5788/5788), done.
Checking connectivity... done.
erik@redtea:~/Documents/Taller-DM$
```

3. Ir al directorio principal y escribir “make install”

Instalación rápida para LICHEM
Taller de Dinámica Molecular 2017

Prof. G. Andrés Cisneros
Erik Vázquez Montelongo



```
erik@redtea:~/Documents/Taller-DM/LICHEM_QMMM$ make install
#####
#
# LICHEM: Layered Interacting CHEmical Models #
#
# Symbiotic Computational Chemistry #
#
#####
### Compiling the LICHEM binary ###
g++ ./src/LICHEM.cpp -o ./bin/lichem -static -Ofast -fopenmp -I./Eigen3/ -I./src
/ -I./include/
In file included from ./include/LICHEM_headers.h:91:0,
                 from ./src/LICHEM.cpp:20:
./include/LICHEM_clibs.h:23:38: note: #pragma message: OpenMP is enabled.
#pragma message("OpenMP is enabled.")
^
/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/5/libgomp.a(target.o): In function `gomp_target_in
it':
(.text+0xba): warning: Using 'dlopen' in statically linked applications requires
at runtime the shared libraries from the glibc version used for linking

### Creating test suite executable ###
echo "#!/usr/bin/python" > ./tests/runtests
cat ./src/runtests.py >> ./tests/runtests

### Compiling the documentation ###
pdflatex manual
bibtex manual

Done.
```

4. Si todo salió bien, se creará un ejecutable en la carpeta bin/, llamado "lichem".
5. Modificar tu PATH (.bashrc) para poder llamar a LICHEM desde cualquier terminal.
6. NOTA: es necesario que su PATH esté modificado para llamar a Gaussian, NWChem, PSI4 y TINKER. De lo contrario, al ejecutar LICHEM, éste no podrá invocar a los paquetes computacionales mencionados.