

isSPA 安装指南

版本：1.2

作者：程渊溟

日期：2025 年 11 月 30 日

1. 安装虚拟环境模块（其中 python 版本可根据 Linux 版本调整）：`sudo apt install python3.10-venv`
2. 创建虚拟环境：`python3 -m venv isSPA_env`
3. 启动虚拟环境：例如，`source /home/user/Software/isSPA_env/bin/activate`
4. 安装依赖库：`pip install PyQt6 nvidia-ml-py mrcfile scipy`
5. 从官网下载 HDF5 压缩包：
support.hdfgroup.org/releases/hdf5/v1_14/v1_14_6/downloads/index.html
6. 解压缩：例如，`tar xzf /home/user/Software/hdf5-1.14.5.tar.gz`
7. 根据 `hdf5-1.14.6/release_doc` 文件夹中的指南进行安装，记住安装路径
8. 进入 `isSPA_1.1.12` 文件夹，根据第 7 步的安装路径修改 `Makefile` 文件中 `LIB_HDF5` 和 `INCLUDE_HDF5` 的路径
9. 编译
 - a) `make -j N`（N 为线程数）；
 - b) `make install`
10. （建议）将 `./isSPA_1.1.12/build` 和 `./isSPA_1.1.12/scripts` 对应的绝对路径添加到环境变量中，例如
`export PATH=/home/user/Software/isSPA_1.1.12/build:$PATH`
`export PATH=/home/user/Software/isSPA_1.1.12/scripts:$PATH`
11. （建议）将 `hdf5` 库的绝对路径添加到 `LD_LIBRARY_PATH`，例如
`export`
`LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:/home/user/Software/hdf5/lib`