



国外vps网站

学习ps

学习编程

酒店特色服务

如何自学编程

情侣网站

# Quantum espresso笔记-安装



Jiafanhao

关注

2019.07.24 19:36:58 字数 381 阅读 1,792

环境变量配置：（由于超算的原因，未使用最新的编译器）

```
export I_MPI_FABRICS=shm:tcp

source /THFS/opt/intel/parallel_studio_xe_2018_update2/compilers_and_libraries_2018.2.199
/linux/bin/compilervars.sh intel64

source /THFS/opt/intel/parallel_studio_xe_2018_update2/impi/2018.2.199/intel64
/bin/mpivars.sh intel64

source /THFS/opt/intel/parallel_studio_xe_2018_update2/compilers_and_libraries_2018.2.199
/linux/mkl/bin/mklvars.sh intel64
```

然后./configure --prefix= MPIF90=mpiifort CC=icc FC=ifort F77=ifort

make all

\*一般来说，只要正确设置了MKL和FFTW相关环境变量，configure时都能识别这些库。如果识别失败，就需要手动指定链接方式。BLAS、LAPACK和FFTW不能识别时的解决方案，如下所示：

# Static linking

```
export MKL_LIB_PATH=/opt/intel/composer_xe_2013.0.079/mkl/lib/intel64

export FFT_LIB_PATH=$HOME/lib/fftw-3.3.4/lib

./configure BLAS_LIBS="-Wl,-start-group $MKL_LIB_PATH/libmkl_intel_lp64.a
$MKL_LIB_PATH/libmkl_sequential.a $MKL_LIB_PATH/libmkl_core.a -Wl,-end-group"

SCALAPACK_LIBS="-Wl,-start-group $MKL_LIB_PATH/libmkl_scalapack_lp64.a
$MKL_LIB_PATH/libmkl_blacs_intelmpi_lp64.a -Wl,-end-group"
FFT_LIBS="$FFT_LIB_PATH/libfftw3.a"
```


# Dynamic linking

```
export MKL_LIB_PATH=/opt/intel/composer_xe_2013.0.079/mkl/lib/intel64 export
FFT_LIB_PATH=$HOME/lib/fftw-3.3.4/lib

./configure BLAS_LIBS="-L$MKL_LIB_PATH -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core"
SCALAPACK_LIBS="-L$MKL_LIB_PATH -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64"
```



龙芯笔记本



Jiafanhao

总资产0

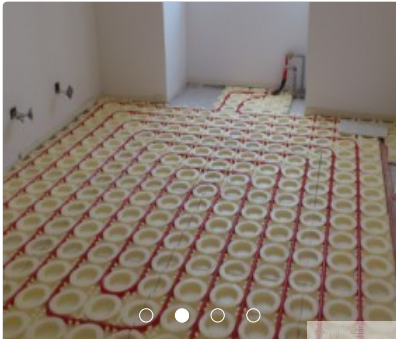
关注

## 热门故事

- 我家祖传给人算命，我爷爷说有三种人的命给多少钱都不能算
- 妻子去世半年，我再娶一个小十岁的女人有错吗？
- 直播间打赏五十万，女主播主动私信我要见面
- 你那么孤独，却说一个人真好

## 推荐阅读

- R在linux中的library path的问题：阅读 57
- yum cleanall 运行failed 阅读 134
- 从零开始安装EdgeX 阅读 521
- 基因注释：MAKER3安装（非root） 阅读 375
- ubuntu下交叉编译arm64/armbian内核模块 阅读 460



安装地暖要多少钱

\*暂定试用wannier90-3.0.0，不确定一定works。（QE与VASP不同, 需要重新编译才能使用wannier90）

mkdir W90

cp ../../wannier90-3.0.0/wannier90.x ./W90

 0人点赞 >



 日记本




更多精彩内容，就在简书APP



"小礼物走一走，来简书关注我"

赞赏支持

还没有人赞赏，支持一下



Jiafanhao

总资产0 共写了381字 获得0个赞 共1个粉丝

关注

不用学代码,也能编程序



写下你的评论...

全部评论 0 只看作者

按时间倒序 按时间正序

推荐阅读

更多精彩内容 >

caffe安装过程分享（for osx10.11.4）  
因为要做人脸识别，所以先要安装caffe，首先说明一下我的安装环境 电脑：MacBook Pro显卡：NVIDIA...