

生活是丰富多彩的，生活又是充满挫折的，不论生活怎样，我们都要有一颗乐观的、平常的、勇敢的心！

首页

相册

其他

订阅1

个人资料



勇敢的心1982

博客年龄：7年5个月  
访问：74364次  
文章：418篇

个人描述

姓名：goodluck  
职业：学生  
年龄：24  
位置：中国，北京  
爱好：计算机、游泳、小游戏、睡觉、音乐等

博主最新文章

[转载]章立凡：考证——网传“毛泽东在宪法讨论会上的讲话”疑似伪造

主机ssh访问vmware中的虚拟机

linux

网络打印机奇遇记之二

[转载]2012年最热门中国研究论文50强

关于win8的启动

[转载]多铁性-磁与电的珠联璧合-时与空的交叉反演

“世界最难数独”

Mathematica 后台及脚本运行

[转载]英文论文投稿前的经典28个细节检查

内存对台式机性能的影响

更多文章>>

日志正文

## 安装 abinit

分类：科学计算 | 标签：abinit netcdf etsf

2012-04-05 20:32

阅读(276) 评论(0)

abinit只简单的接触过一段时间，上次用已经是七年前的事情了。这次再装它是因为想读取波函数，因为听说它的波函数数据文件里直接给出的就是布洛赫波的平面波展开系数。简单看了一下介绍，说其一个特点就是文档较全，适合自学，代码规范，注释详细，每个源文件里都有功能介绍以及输入输出的详细说明。对于波函数，doc/theory/ 目录下的 1WF.pdf 和 set\_WFs.pdf 文件提供了很多信息。

下面简单说下安装。按正常的 configure, make, make install 过程即可，默认装在 /usr/local 下。自己想指定的并不多，一是编译器，一是 lapack 库。想用 ifort 即 mkl。如果只是想指定编译器，configure FC=ifort 即可，但指定 mkl 却没那么容易。虽然 configure 有 --with-linalg-libs 等参数，但是指定了却不管用，configure 完之后依然会提示使用的自带 lapack。原来有另一种方式指定编译设置及选项，即通过 .ac 文件。doc/config/build-d-examples 目录下有很多 .ac，找一个与自己情况最接近的拷到 abinit 根目录下，并重命名为 hostname.ac，其中 hostname 是自己机子的主机名（可通过 hostname 命令得到）。然后修改其中的设置，比如在这里修改编译器为 ifort 和 icc，lapack 库指定为 mkl，具体链接选项根据自己 mkl 版本确定。本想使用 mkl 里带的静态 fftw3 库，但发现 configure 时总是不认（难道是静态库的原因？），于是作罢。配置好了 hostname.ac 文件，直接 configure 就行了，完了以后 make。

make 过程中竟然出现一个错误，在编译 02\_clib 时说找不到文件 xmalloc.h，查找了计算机确实没有这个文件。于是尝试在那个目录下 touch 了一个空的 xmalloc.h，继续 make 竟然通过了。

编译完之后先不急 make install，可以先测试一下。到 tests 目录下 make help，可以看到可选的测试类型，比如 make tests\_min 的测试就很全面，不过时间也是比较长的，六七百个例子总共用了好几个小时。最后测试结果基本都通过。

注意：abinit 和许多外部程序有接口或关联，比如 atompaw（产生 PAW 势文件的程序）、wannier90 等。如果系统中已经装了这些程序，可通过配置来使用它们，比如在 hostname.ac 中指定接口 with\_dft\_flavor="atompaw+bigdft+libxc+wannier90" 后并指定这些外部程序库、源文件等的位置。这样，在 configure 时就会去找这些外部内容，如果找到了就用它们，如果没找到，就会使用 abinit 的实现（必要的话会从网上下载相应源码包到 ~/.abinit/tarballs 里），前提是要启用 fallback，这是默认的，如果手动关闭了 fallback 的话，找不到指定的外部资源时 configure 将会失败。由于我系统中原来没有这些程序，于是便启用了默认的 fallback 策略，abinit 自动下载它们并编译到 fallbacks 目录下，但注意，最后 make install 时并不把它们安装到系统中，make clean 后这些东西又没了。编译完后，东西全在 fallbacks/exports 目录下（bin、lib、doc、share）可以手动把它们弄到 /usr/local 下就当安装了。不过这样编译出的 atompaw 叫 atompaw-abinit。可以通过 grep 'run\_' config.log 来看将会有哪些东西编译到 fallbacks 里面。由于原来 make install 之后就 make clean 了，所以 atompaw 没有装上，要重新编译它应该到 fallbacks 下 make，而不是到 src/64\_atompaw 下 make，后者绘出错。

说一下安装 netcdf 和 etsf\_io

netcdf 是一种通用的科学数据存储格式，为的是便于数据传播，可以在不同程序及平台间共享数据同时保持机器精度。而 etsf 则是基于 netcdf 的一种格式，主要用于电子结构模拟程序的数据记录（<http://www.etsf.eu/fileformat>），所以 etsf\_io 依赖于 netcdf，应该先装 netcdf。

## 推荐博文



越总理府女  
服务员



我在巴黎偶  
遇熊黛林

教授叹收入分配太不均  
甘犁

是谁把城市化变成了一场灾难  
赵海均

习近平鲜为人知的兄妹  
李子迟

古代王朝的能量  
许石林

早餐要洋气:黑胡椒土豆鸡蛋饼  
狼之舞

衣柜都有3件单品搭出气质秋装  
兰哥

[更多相关文章>>](#)

52)。因为 etsf\_io 依赖于 netcdf，所以先装 netcdf。

(1).

不知为什么，configure abinit 时不支持静态库，所以编译 netcdf 时只能编成动态库，好在有这个选项（--enable-shared=yes，注意：默认是关闭的，所以默认编译出的只有 .a 文件）。由于编译 abinit 使用 intel 编译器（FORTRAN: ifort, C: icc, C++: icpc），那么编译 netcdf 时也要指定 intel 编译器：

```
~/netcdf-4.1.1$ CC=icc FC=ifort CXX=icpc FCFLAGS=-fPIC ./configure --enable-shared=yes --prefix=/usr/local
```

注意：必须指定fortran编译器的选项 -fPIC，否则无法生成动态库，不过C和C++的却不必指定，比较奇怪。另外，编译完成后最好 make check 或 make tests 一下。另外，make install 时竟然出现错误，同样要指定编译器后才正常：

```
~/netcdf-4.1.1$ CC=icc FC=ifort CXX=icpc FCFLAGS=-fPIC make install
```

(2).

装完 netcdf 后，装 etsf\_io，装这个时需要指定 netcdf 的位置，当然也要指定编译器及编译选项：

```
~/etsf_io-1.0.4: CC=icc CXX=icpc FC=ifort FCFLAGS=-fPIC ./configure --with-netcdf-prefix=/usr/local --prefix=/usr/local
```

须注意的是，必需使用与 netcdf 同样的编译器，我机器上有系统装的 netcdf，在 /usr 下，如果就使用 gcc 及 gfortran 编译的话，--with-netcdf-prefix=/usr 就行；但如果 --with-netcdf-prefix=/usr 却使用 intel 编译器的话，会提示找不到 netcdf，可见不认不同编译器装的 netcdf。另一个需要注意的是，etsf\_io 没有选项可以指定编译成动态库，所以得到的只是静态库，需要手动将其转为动态库（<http://goodluck1982.blog.sohu.com/211434848.html>），编译选项中的 -fPIC 就是为了这个做的准备。手动生成 .so 动态库文件后再拷到 /usr/local/lib 下。

(3).

abinit 中的相应配置：在前面的基础上修改 \$(hostname).ac 文件：

```
with_trio_flavor="netcdf+etsf_io+fox"
with_etsf_io_incs="-I/usr/local/include"
with_etsf_io_libs="-L/opt/etsf/lib -letsf_io -letsf_io_utils"
with_netcdf_incs="-I/usr/local/include"
with_netcdf_libs="-L/usr/local/lib -lnetcdf -lnetcdff"
```

然后 configure，完了以后，如果执行 grep etsf config.log 的话，会发现  
configure:38701: running /bin/sh ./configure ... '--enable-etsf-io=no' ...  
的字样，难道还没有启用 etsf 吗？其实不必在意，这是以前版本的指定方式，现在通过 with\_trio\_flavor 来指定了，因而 enable... 之类的选项已经失效了，可查看 [release\\_notes\\_v6.6.html](#) 中 A.1 的说明。另外，最初没有生成动态的 netcdf 库时，configure 时竟然通过，我想应该是它找到了系统装在 /usr/lib/ 下的 netcdf 了，因为同样没有装动态的 etsf\_io 时 configure 就报错了，说找不到，因为系统中没有预先装 etsf\_io。

体验新版博客

分享到：

阅读(276) 评论(0)

上一篇：静态库 .a 转成共享库 .so

下一篇：又遇到Mathematica的一个bug

评论 想第一时间抢沙发？

由于最近广告泛滥，暂只允许登录用户对此文评论。[登录](#)

[帮助](#) - [客服中心](#) - [意见建议](#) - [举报](#) - [搜狐博客](#) - [搜狐首页](#) - [全部博文](#) - [新闻](#) | [举报不良信息](#)

Copyright © 2013 Sohu.com Inc. All rights reserved. 搜狐公司 版权所有

