

资源备忘

个人资料



tengh

访问：390580次

积分：6542

等级：

BLOG

5

排名：第2463名

原创：203篇 转载：329篇

译文：4篇 评论：39条

文章搜索

Q

文章分类

- MATERIALS STUDIO (8)
- VASP (3)
- MOLPRO (6)
- Linux系统 (176)
- 学习 (31)
- 工作 (108)
- 生活 (40)
- 编程 (72)
- 量化资源 (60)
- NWChem (16)
- 网络 (35)
- abinit (2)
- MS (5)
- 期刊资源 (2)
- Python (7)
- windows (7)
- 实验装置 (8)
- Pipeline Pilot (2)
- GPU (5)
- cp2k (5)
- WRF (4)
- polyrate (1)
- Turbomole (1)

【公告】博客系统优化升级

【Lib Vote】来来来,表个态

主流编程语言图谱之二

采用intel编译器并行编译执行杂化函数计算CP2K

标签：

编译器

compilation

fortran

library

compiler

binding

2012-06-01 17:17

1164人阅读

评论(0)

收藏

举报

分类：

cp2k (4)

在采用intel的ifort编译支持hybrid functional计算的CP2K时，尽管编译得到了cp2k.popt的可执行模块，但是在运行时常遇到如下的错误：

```
HFX_MEM_INFO would be printed out:
forrtl: severe (174): SIGSEGV, segmentation fault occurred
Image PC Routine Line Source
cp2k.popt 0000000001321BCE Unknown Unknown Unknown
```

经过多次的尝试，找到了一种解决办法，似乎是intel的ifort(至少11.1.072)还不支持ISO\_C\_BINDING。

下面将成功编译得到支持hybrid functional计算的CP2K的步骤给列出来，以作备份。  
我用的编译器是intel的11.1.072/bin/intel64/ifort, 并与openmpi/1.4.2绑定的mpif90,  
用intel的编译器编译得到的fftw-3.2.2;  
scalapck、lapack、blas库等用的是intel/11.1.072/mkl/lib/em64t带的。

1、下载libint-1.1.4.tar.gz，它可从  
<http://libint.valeev.net/>  
<http://sourceforge.net/projects/libint/files/v1-releases/>  
下载到。

下载解压后运行该目录下的./configure。整个命令如下，  
./configure --prefix='被安装到的目录' --with-libint-max-am=5 --with-libderiv-max-aml=4  
F77=ifort  
这里“被安装的目录”，根据自己的程序安装要求自行设置它的实际路径。  
比如我实际的命令：

```
./configure --prefix='/home/zh/soft/libint-1.1.4' --with-libint-max-am=5 --with-libderiv-
max-aml=4 F77=ifort
然后就是
make
make install
```

这样就将编译好的libint 1.1.4版本安装到了所指定的目录。

2、下载CP2K。  
从  
<http://cp2k.berlios.de/download.html>  
下载最新版本的CP2K。  
我目前安装的版本是CP2K version 2.2.263 (Development Version)和CP2K version 2.1.397

职场 (8)  
 PHP编程 (1)  
 lammps (4)  
 PBS (4)  
 教育 (4)  
 AdNDP (2)  
 项目管理 (4)  
 Project 2013 (4)  
 ORCA (1)  
 Jmol (1)  
 电路 (1)

#### 文章存档

2016年01月 (1)  
 2015年11月 (1)  
 2015年01月 (2)  
 2014年12月 (5)  
 2014年11月 (3)

展开

#### 阅读排行

Windows 7上安装Micros (8416)  
 高性能计算专业应用软件 (7867)  
 英文信件格式 (6122)  
 在linux下安装gaussian05 (4962)  
 Materials Studio 5.0 安装 (4943)  
 cint\_create: RPC: Progr (4326)  
 能不吃最好别吃: 一个食 (3956)  
 环境资源与相关词汇中英 (3428)  
 Material Studio 5.0安装 (2750)  
 如何解决 OpenQuant 过 (2527)

#### 评论排行

PBS的配置 (22)  
 NI Measurement Studio (4)  
 LSI磁盘阵列卡管理操作 (3)  
 Lustre的安装与配置 (2)  
 Windows 7上安装Micros (2)  
 BT、VeryCD倒下了,但是 (1)  
 MPI的安装 (1)  
 TeamViewer Pro(附破解) (1)  
 PDF编辑:Adobe Acroba (1)  
 NWCHEM 6 make (1)

#### 推荐文章

\* 郭神带你真正理解沉浸式模式  
 \* 优秀代码的格式准则  
 \* Hadoop的数据库实践——OLAP与数据可视化(二)  
 \* Android 视图篇——恼人的分割线留白解决之道  
 \* 移动端开发者眼中的前端开发流程变迁与前后端分离

#### 最新评论

Intel Fortran Compiler  
 wwa100: 哪儿有下载啊?  
 Project 2013项目管理教程 (1): 巧  
 q287414973: 很感谢您!!! 下载使

(Development Version)。

下载解压后, 进入cp2k/tools/hfx\_tools/libint\_tools目录下, 参考该目录里面的“README\_LIBINT”, 运行如下的命令:

```
g++ -O3 -c libint_cpp_wrapper.cpp -I'path_to_libint_include'
```

由于我将libint库安装到了/home/zh/soft/libint-1.1.4目录中, 我实际运行的命令为:

```
g++ -O3 -c libint_cpp_wrapper.cpp -I/home/zh/soft/libint-1.1.4/include
```

然后进入CP2K的arch目录, 即cp2k/arch, 编辑里面的Linux-x86-64-intel.popt, 它的里面的设置为:

```
# by default some intel compilers put temporaries on the stack
# this might lead to segmentation faults is the stack limit is set to low
# stack limits can be increased by sysadmins or e.g with ulimit -s 256000
# furthermore new ifort (10.0?) compilers support the option
# -heap-arrays 64
# add this to the compilation flags is the other options do not work
# The following settings worked for:
# - AMD64 Opteron
# - SUSE Linux Enterprise Server 10.0 (x86_64)
# - Intel(R) Fortran Compiler for Intel(R) EM64T-based applications, Version 10.0.025
# - AMD acml library version 3.6.0
# - MPICH2-1.0.5p4
# - SCALAPACK library 1.8.0
#
CC = cc
CPP =
FC = mpif90
LD = mpif90
AR = ar -r
DFFLAGS = -D__INTEL -D__FFTS -D__parallel -D__BLACS -D__SCALAPACK -D__FFTW3 -D__LIBINT
-D__HAS_NO_ISO_C_BINDING
CPPFLAGS =
INTEL_INC = /usr/apps/isv/intel/11.1.072/include
LIBINT_INC = $(HOME)/soft/libint-1.1.4/include
FFTW_INC = /usr/apps/free/fftw/3.2.2_i/include
FCFLAGS = $(DFFLAGS) -I$(LIBINT_INC) -I$(INTEL_INC) -I$(FFTW_INC) -O2 -xW -heap-arrays 64
-funroll-loops -fpp -free
FCFLAGS2 = $(DFFLAGS) -I$(LIBINT_INC) -I$(INTEL_INC) -O1 -xW -heap-arrays 64 -fpp -free
LDFFLAGS = $(FCFLAGS) -I$(INTEL_INC)

FFTW_LIB = /usr/apps/free/fftw/3.2.2_i
INTEL_LIB = /usr/apps/isv/intel/11.1.072/mkl/lib/em64t
LIBINT = $(HOME)/soft/libint-1.1.4
LIBS = -L$(INTEL_LIB) -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_openmpi_lp64 -lmkl_intel_lp64
-lmkl_sequential -lmkl_core \
$(HOME)/soft/cp2k-2.1/tools/hfx_tools/libint_tools/libint_cpp_wrapper.o \
$(LIBINT)/lib/libderiv.a \
$(LIBINT)/lib/libint.a \
-lstdc++ \
$(FFTW_LIB)/lib/libfftw3.a

OBJECTS_ARCHITECTURE = machine_intel.o

graphcon.o: graphcon.F
$(FC) -c $(FCFLAGS2) $<
```

用了!谢谢

LSI磁盘阵列卡管理操作(实例:L  
ysmjaycn: 你好, 请教一下, 我在  
尝试对自家家中老PC加装整列卡  
时遇到不能识别的问题, 请问下可  
能会是什么原因呢。详...

LSI磁盘阵列卡管理操作(实例:L  
ysmjaycn: 你好, 请教一下, 我在  
尝试对自家家中老PC加装整列卡  
时遇到不能识别的问题, 请问下可  
能会是什么原因呢。详...

LSI磁盘阵列卡管理操作(实例:L  
ysmjaycn: 你好, 请教一下, 我在  
尝试对自家家中老PC加装整列卡  
时遇到不能识别的问题, 请问下可  
能会是什么原因呢。详...

PDF编辑:Adobe Acrobat X Pro  
zhengkangzhen: 非常强大

TeamViewer Pro(附破解版下载和  
淡然一笑0ooo: 下来看看

PBS的配置

ai297313:  
@tengh:35.node90\$qstatJob ID  
Na...

PBS的配置

tengh: @ai297313:这个就不太清  
楚了, pbs自带的调度就是不太好  
用。如果你准备长期使用的话, 还  
是建议...

PBS的配置

ai297313: @ai297313:最新情况  
是所有的作业都会在qrun命令下  
执行 会输出文件什么的 就是调度  
不好用 ...



李华亭



如何编程游戏



儿童编程



代办

```
qs_vxc_atom.o: qs_vxc_atom.F
$(FC) -c $(FCFLAGS2) $<
```

编辑好了之后进入makefiles目录, 然后运行如下命令:

```
make ARCH=Linux-x86-64-intel VERSION=popt
```

运行cp2k编译器来较慢, 等10来分钟后, 就可以得到可执行模块。

然后就是测试cp2k/tests/QS/regtest-hybrid目录里面的例子, 比如CH3-hybrid-HSE06-lsd.inp, 看能否正  
常运行。对于hybrid functional的计算, 通常需要很大的内存。

顶

0

踩

0

上一篇 Build CP2K using Intel Fortran compiler Professional Edition

下一篇 CentOS修改mac

我的同类文章

cp2k (4)

- How to build CP2K with Int... 2012-06-07 阅读 721
- Build CP2K using Intel Fort... 2012-05-31 阅读 884
- cp2k x86\_64的串行/并行编... 2012-05-28 阅读 1137
- Obtaining CP2K 2012-05-28 阅读 587

猜你在找

- |                           |   |
|---------------------------|---|
| Linux环境C语言编程基础            | 基于MapReduce实现并行化K-means算法                     |
| C++ 单元测试 (GoogleTest)     | cocos2d-x 使用opengl 函数报错 undefined             |
| 《C语言/C++学习指南》Linux开发篇     | C++学习笔记16-2 编译器对构造函数的调用处理                     |
| Linux快速学习以及监控分析实战【小强测试出品】 | wsdl2java The attribute required is undefined |
| Oracle RMAN高级备份恢复         | 浅谈并行编程中的任务分解模式 转自                             |



聚贤堂 男士硅胶接尿器 男性老年人萎缩型(大口)卧床尿壶配集尿袋

¥78.00 网购上京东, 多、快、好、省!  
京东www.JD.com

查看评论

暂无评论

您还没有登录,请[\[登录\]](#)或[\[注册\]](#)

\* 以上用户言论只代表其个人观点, 不代表CSDN网站的观点或立场

核心技术类目

- |           |               |            |           |         |           |            |          |            |            |           |
|-----------|---------------|------------|-----------|---------|-----------|------------|----------|------------|------------|-----------|
| 全部主题      | Hadoop        | AWS        | 手机游戏      | Java    | Android   | iOS        | Swift    | 智能硬件       | Docker     | OpenStack |
| VPN       | Spark         | ERP        | IE10      | Eclipse | CRM       | JavaScript | 数据库      | Ubuntu     | NFC        | WAP       |
| BI        | HTML5         | Spring     | Apache    | .NET    | API       | HTML       | SDK      | IIS        | Fedora     | XML       |
| Splashtop | UML           | components | Windows   | Mobile  | Rails     | QEMU       | KDE      | Cassandra  | CloudStack |           |
| FTC       | coremail      | OPhone     | CouchBase | 云计算     | iOS6      | Rackspace  | Web App  | SpringSide | Maemo      |           |
| Compuware | 大数据           | aptech     | Perl      | Tornado | Ruby      | Hibernate  | ThinkPHP | HBase      | Pure       | Solr      |
| Angular   | Cloud Foundry | Redis      | Scala     | Django  | Bootstrap |            |          |            |            |           |

