

“计算凝聚态物理选讲” 上机环境的配置

龙宣宇 清华大学高等研究院

2020 年 8 月 21 日

按照正文即可从零开始安装好课程需要的 Abinit 计算软件。可不必关注“注意”和“提示”部分。

1 安装 VirtualBox 并创建虚拟机

VirtualBox 是一款开源的虚拟机软件，支持在 Windows, MacOS 和 Linux 操作系统下使用。

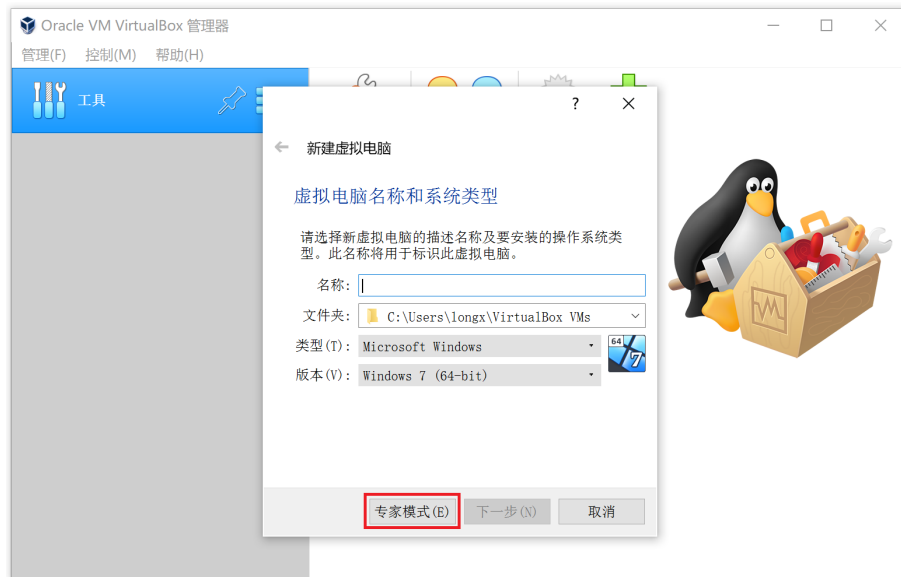
提示

- (1) 接下来只演示在 Windows 系统下的操作流程，其它系统下的操作大同小异。
- (2) 建议先在虚拟机环境下安装计算软件，防止误操作。
- (3) 如果你有 VMware 等虚拟机软件，可直接使用。
- (4) 如果你有 Linux 系统，可直接参考第 3 节安装 Abinit。

从 <https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/help/virtualbox/> 下载最新版。运行 `virtualbox-Win-latest.exe`，按照提示完成安装。运行 VirtualBox，点击“新建”按钮：



点击“专家模式”按钮：



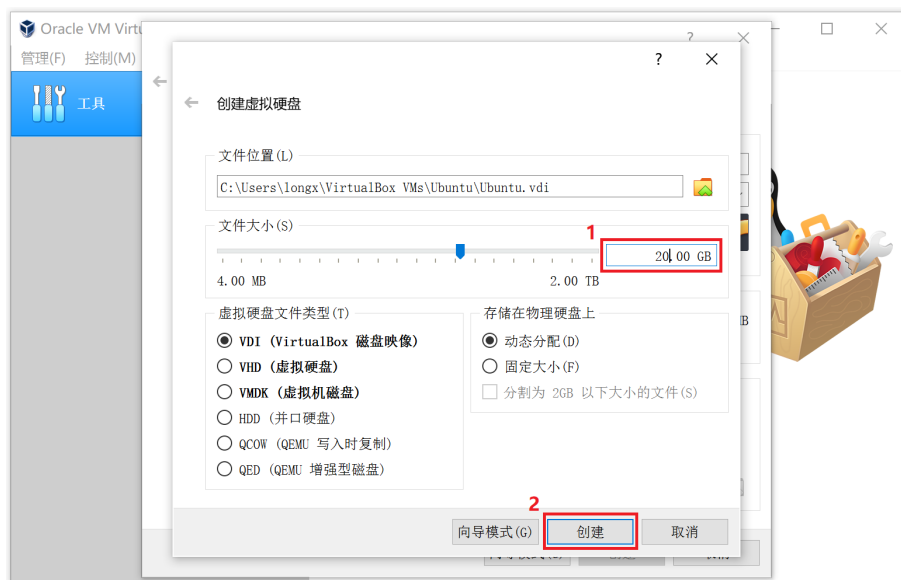
在“名称”栏键入“Ubuntu”，它能自动识别出“类型”为“Linux”，“版本”为“Ubuntu (64-bit)”。然后设定分配给虚拟机的内存大小，建议在 2GB 以上。最后点击“创建”：



提示

建议使用 Ubuntu 操作系统，因为它的用户多，常见的问题在网上都能搜到解答。

设置虚拟硬盘的最大大小，建议 10GB 以上。然后点击“创建”：



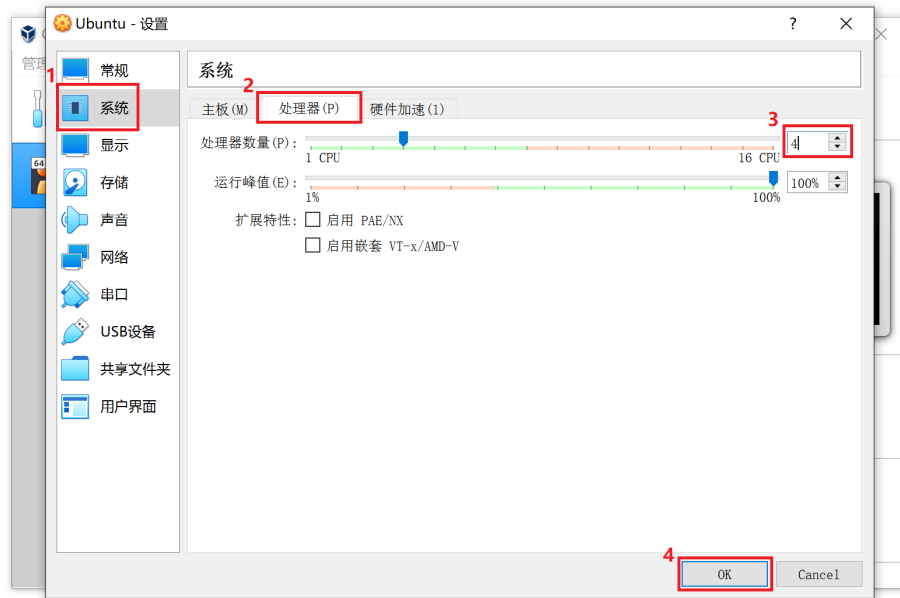
点击“设置”：



依次点击“系统” - “处理器”，设定分配给虚拟机的 CPU 核数，建议 2~4 核。点击“OK”后虚拟机创建完毕。

提示

分配给虚拟机的资源可以随时在“设置”中更改。



提示

如果虚拟机无法正常使用，可以很方便地删除。右键点击要删除的虚拟机，再点击“删除”即可。应选择“删除所有文件”。



2 安装 Ubuntu 操作系统

提示

- (1) 推荐使用较新的 Ubuntu 18.04 LTS 或 20.04 LTS 版本。
- (2) 本节只演示 Ubuntu 18.04 LTS 系统的安装过程，其它版本的安装过程很类似。

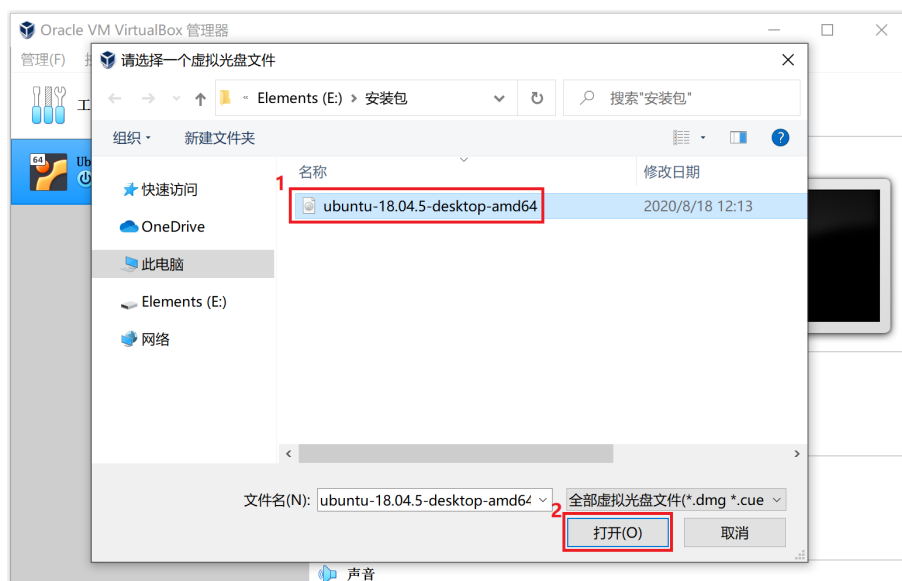
首先从 <https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/ubuntu-releases/> 下载 Ubuntu 系统镜像文件，如 ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.iso：

Index of /ubuntu-releases/18.04/			Last Update: 2020-08-18 20:13
File Name ↓	File Size ↓	Date ↓	
Parent directory/	-	-	
FOOTER.html	810 B	2020-08-13 23:02	
HEADER.html	3.9 KiB	2020-08-13 23:02	
MD5SUMS-metalink	296 B	2020-02-12 21:42	
MD5SUMS-metalink.gpg	916 B	2020-02-12 21:42	
SHA256SUMS	202 B	2020-08-13 23:39	
SHA256SUMS.gpg	833 B	2020-08-17 20:28	
ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.iso	2.0 GiB	2020-08-07 06:59	
ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.iso.torrent	163.8 KiB	2020-08-13 23:02	
ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.iso.zsync	4.1 MiB	2020-08-13 23:02	
ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.list	7.9 KiB	2020-08-07 06:59	
ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.manifest	59.0 KiB	2020-08-07 06:56	
ubuntu-18.04.5-live-server-amd64.iso	945.0 MiB	2020-08-07 07:05	
ubuntu-18.04.5-live-server-amd64.iso.torrent	74.2 KiB	2020-08-13 23:00	
ubuntu-18.04.5-live-server-amd64.iso.zsync	1.8 MiB	2020-08-13 23:00	
ubuntu-18.04.5-live-server-amd64.list	10.4 KiB	2020-08-07 07:05	
ubuntu-18.04.5-live-server-amd64.manifest	14.2 KiB	2020-08-07 07:02	

依次点击“光驱” - “选择虚拟盘”：



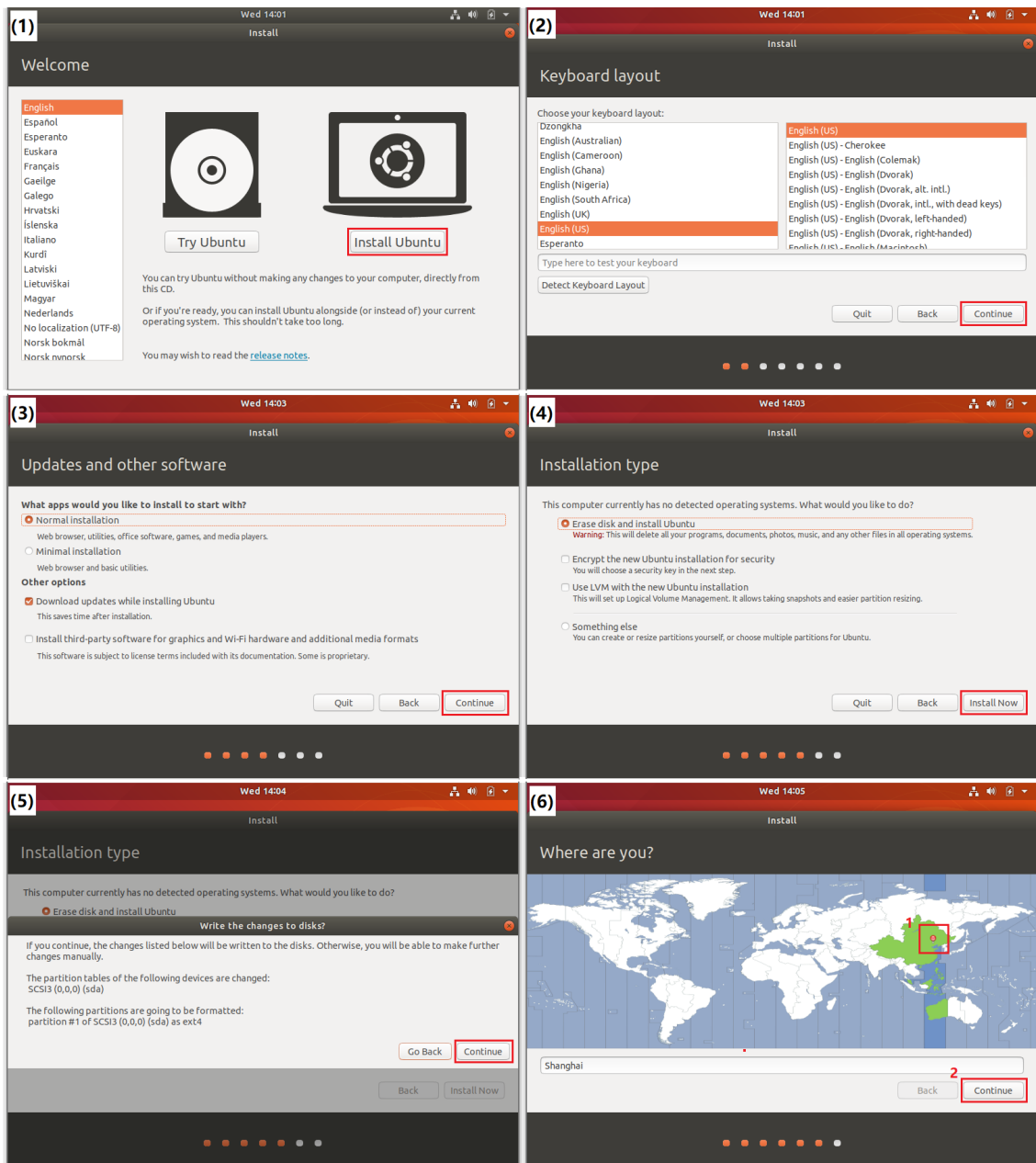
找出刚下载的系统镜像文件 `ubuntu-18.04.5-desktop-amd64.iso` 的位置，选中后点击“打开”：



确保连接互联网，点击“启动”按钮：



依次按下图的 (1)-(6) 进行设置。前五步无需特殊操作，最后一步需要设置时区：



接下来设置用户名和密码，点击“continue”后开始安装。安装完毕后按提示重新启动虚拟机。

注意

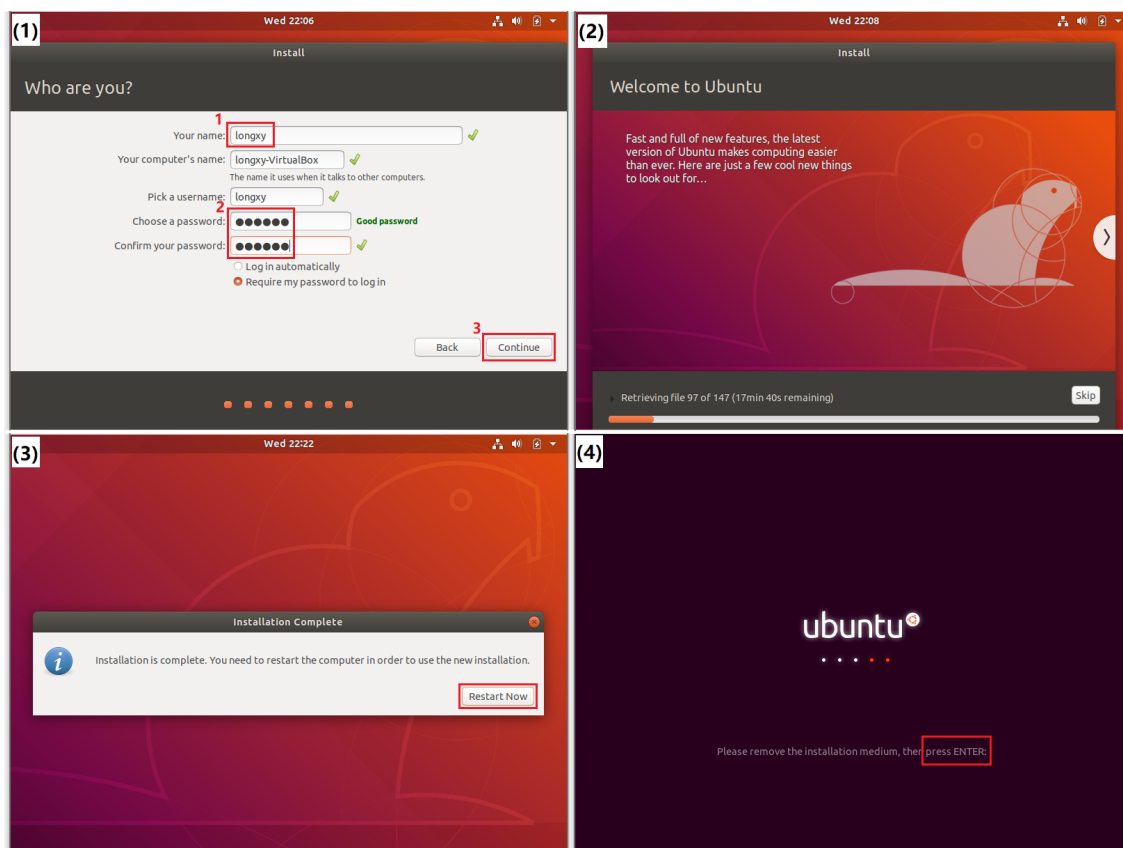
如果在“Retrieving file”过程中点击“skip”或由于网络不好而自动跳过，`apt-get` 可能无法正常使用。此时需连接互联网并在终端中执行：

```
sudo apt-get update
```

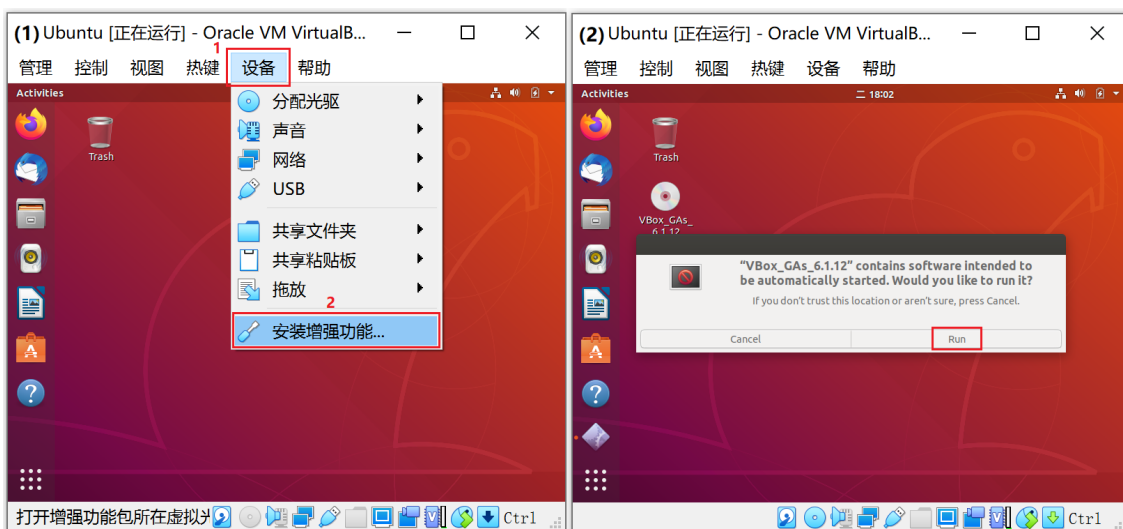
来更新本地的软件包索引列表。也可以尝试为 `apt-get` 更换清华源。

提示

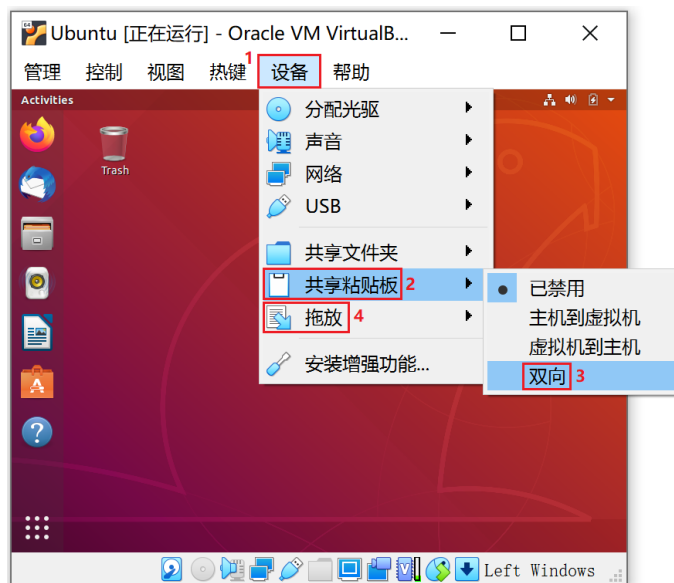
安装完毕后虚拟光驱会自动弹出，最后一步按下回车即可。也可以依次点击“控制” - “重启”。



虚拟机启动后，使用刚才设置的密码登录。接下来为虚拟机安装增强功能。它可以实现虚拟机和主机之间的数据共享，以及便捷地更改虚拟机的分辨率。依次点击“设备” - “安装增强功能”，在弹出的窗口点击“run”，输入密码，安装完成后重新启动虚拟机。

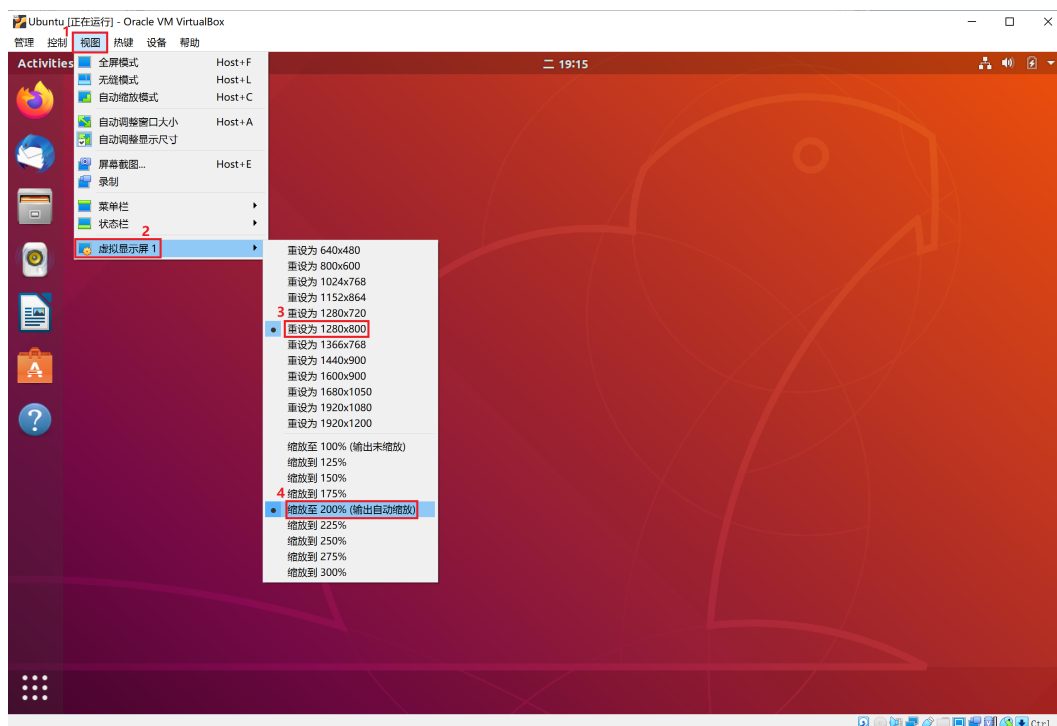


接下来启用虚拟机和主机之间的数据共享。依次点击“设备” - “共享剪贴板” - “双向”。类似地，启用双向拖放。



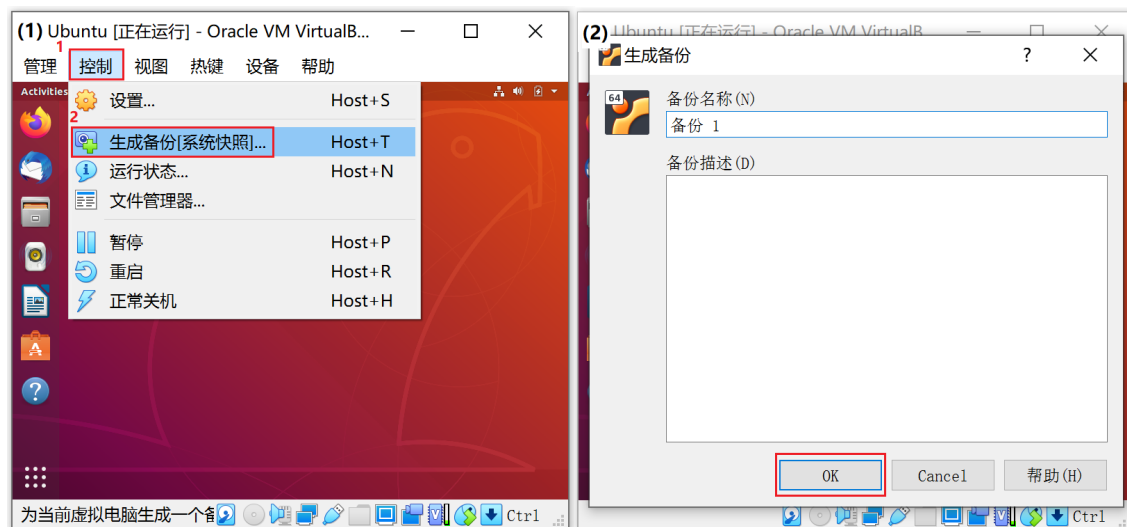
提示

依次点击“视图” - “虚拟显示屏 1”，可以在弹出菜单中设置虚拟机的分辨率和缩放。



提示

虚拟机的一个主要优点是可以便捷地保存系统的状态（称为“快照”）。如果系统异常，可以随时恢复到保存的状态。拍摄快照时，依次点击“控制” - “生成备份”，然后点击“OK”：



恢复快照时，依次点击菜单按钮- “备份”：



然后选中想要恢复到的快照，点击“恢复备份”，最后点击“启动”。



3 安装 Abinit

注意

以下操作流程适用于 Ubuntu 系统。其它 Linux 系统可能有所不同。

安装 Abinit 之前,需要安装 C/C++ 编译器(包含在 `build-essential` 内)和 Fortran 编译器(如 `gfortran`)。确保连接互联网,按 `Ctrl-Alt-T` 打开终端,在终端中输入:

```
sudo apt-get install build-essential gfortran
```

回车后输入当前账户的密码即可。

提示

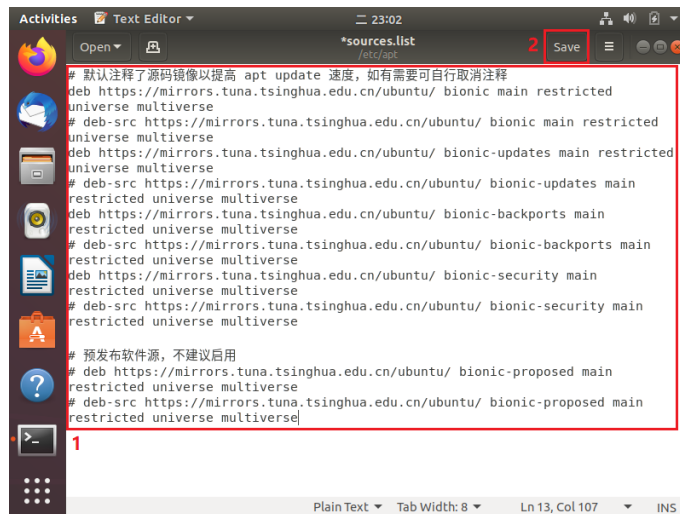
如果使用 `apt-get` 下载软件包时速度慢,可尝试更换清华源。首先备份原来的软件源配置文件:

```
sudo cp /etc/apt/sources.list /etc/apt/sources.list.old
```

然后编辑软件源配置文件:

```
sudo gedit /etc/apt/sources.list
```

打开 <https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/help/ubuntu/>, 选择 Ubuntu 的版本(如 18.04 LTS), 复制网页上的代码, 替换 `/etc/apt/sources.list` 原来的内容, 然后保存:



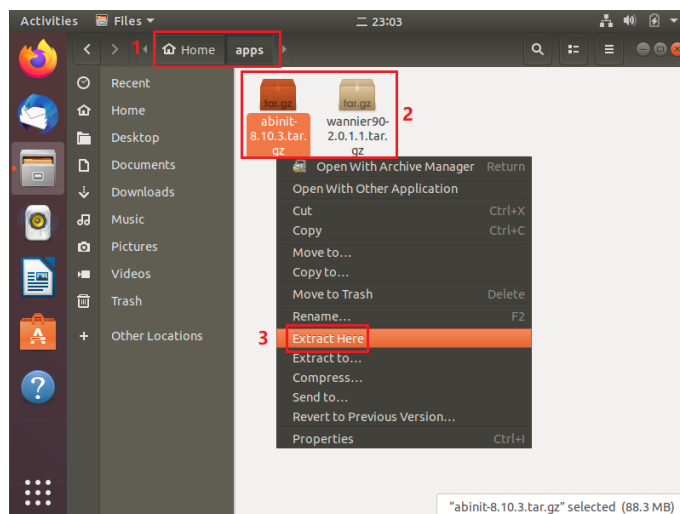
最后更新本地的软件包索引列表：

```
sudo apt-get update
```

后续课程可能要进行 Wannier 函数和 GW 相关的计算，还需安装 Wannier90 (Wannier 函数计算工具) 和 NetCDF (网络通用数据格式) 库。首先安装 NetCDF 库：

```
sudo apt-get install libnetcdf-dev libnetcdf-f77-dev
```

然后安装支持 Wannier90 的 Abinit。首先点击桌面左侧“Files”图标，新建两个文件夹 `apps/` (用来存放安装的程序) 和 `WORKSPACE/` (用来进行计算，保存计算结果)。然后将 Abinit 和 Wannier90 的安装包 `abinit-8.10.3.tar.gz` 和 `wannier90-2.0.1.1.tar.gz` (可从网络学堂下载) 复制到 `apps/` 文件夹内。右键点击 `abinit-8.10.3.tar.gz`，将其解压至 `apps/` 内：



提示

Ubuntu 的图形用户界面使用起来和 Windows 或 MacOS 很类似。

打开终端，进入解压后的文件夹：

```
cd ~/apps/abinit-8.10.3/
```

输入以下命令，进行自动配置：

```
./configure with_dft_flavor="wannier90" with_trio_flavor="netcdf" with_tardir=~/.apps/
```

注意

- (1) `with_tardir=~/.apps/` 表示 `configure` 会在 `~/apps/` 目录下寻找 Wannier90 的安装包 `wannier90-2.0.1.1.tar.gz`。如果找不到则 `configure` 会从互联网下载 Wannier90 的安装包，可能要花费较长时间或配置失败。
- (2) <https://www.abinit.org/fallbacks> 也提供了 Wannier90 的安装包，但 `configure` 无法正常识别。应使用网络学堂提供的安装包。
- (3) 如果这一步无法正常配置，可以直接用：

```
./configure
```

进行配置。这样除了 Wannier 和 GW 之外的大部分 Abinit 功能都能正常使用。

然后进行编译：

```
make
```

提示

编译需要较长时间，可根据分配给虚拟机的核数，用多核进行编译。比如用 4 核编译：

```
make mj4
```

最后执行：

```
sudo make install
```

将 Abinit 安装至 `/usr/local/`，这样系统可以直接找到 `abinit` 命令。

4 安装 Abipy

Abipy 是后处理 Abinit 计算结果的 Python 工具，可以轻松地把计算结果画成图像。我们可以用 pip 来安装。首先安装 Python 3 的 pip：

```
sudo apt-get install python3-pip
```

然后用 `pip3` 命令，先安装 `numpy`，再安装 `abipy`：

提示

pip 的默认源下载速度可能很慢，我们推荐使用清华源。
详情请见 <https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/help/pypi/>。

```
pip3 install -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple numpy  
pip3 install -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple abipy
```

在此期间 pip 会自动下载并安装 `abipy` 依赖的很多软件包。安装完成后重启系统即可。

注意

- (1) Abipy 需要 Python 3。请勿使用 Python 2 的 `pip`。
- (2) 要在 `numpy` 安装完成后安装 `abipy`。否则在安装 `abipy` 依赖的 `pymatgen` 时极为缓慢。