



程序安装简介

李会民

hmli@ustc.edu.cn

中国科学技术大学 超级计算中心

2016-5-27



应用程序的编译与安装简介

应用程序一般有两种方式发布：

- 二进制方式：用户无需编译，只要解压缩后执行安装程序或设置相关环境变量等即可。如Gaussian¹
- 源代码方式：
 - 用户需要自己编译，且可按照需要修改编译参数以编译成最适合自己的可执行程序，之后再设置环境变量等使用，如VASP²
 - 源代码编译时经常用到的编译命令为`make`，编译配置文件为`Makefile`或`makefile`，请查看`make`命令用法及`Makefile`文件说明

应用程序一般都有官方安装说明，建议在安装前，首先仔细查看一下，如到其主页或查看解压缩后的目录中的类似：`README`、`INSTALL`、`doc`等类似文件或目录。

¹Gaussian: <http://www.gaussian.com/>，国内用户只能购买已编译好的二进制可执行文件，有些国家和地区能购买到源代码

²VASP: <http://www.vasp.at/>



二进制程序的安装

以二进制方式发布的程序，安装相对简单，一般只要解压缩后设置好环境变量即可，以Gaussian09为例：

- 将压缩包复制到某个地方，如/opt
- 解压缩：`tar xyf gaussian09.tar.gz`³
- 设置环境变量：修改`~/.bashrc`，添加：

```
##Add_for_g09
export_g09root="/opt"
export_GAUSS_SCRDIR="/tmp"
. $g09root/g09/bsd/g09.profile
##End_for_g09
```

- 刷新环境设置：`. ~/.bashrc`或重新登录下。

³当前主流Linux系统，`tar`命令已能自动识别`.gz`和`.bz`压缩，无需再添加`z`或`j`参数。



源代码程序的安装 I

- 源代码发布的程序安装相对复杂，需了解所采用的编译环境，并对配置等做相应修改（主要修改编译命令、库、头文件等编译参数）
- 主要步骤一般为
 - 查看主页等帮助
 - 解压缩: `tar xvf appsrc.tar.gz`
 - 进入解压缩的目录查看是否有 `README`、`INSTALL` 和 `doc` 等类似文件和目录，有的话先查看
 - 有 `configure` 文件的话，可以 `./configure -h` 看看帮助及选项
 - 生成配置: `./configure [OPTION]... [VAR=VALUE]`
 - 修改生成的 `Makefile` 等文件
 - 编译: `make`
 - 安装: `make install`
- 每种软件的具体安装步骤不一定相同，务必要看对应说明



源代码程序的安装 II

- 一些在configure、Makefile中常见变量：
 - -prefix: 安装到的目录前缀
 - CC: 编译C源文件的编译器命令
 - CLAGS: C程序编译参数
 - CPP: 预处理参数
 - CXX: 编译C++源文件的编译器命令
 - CXXFLAGS: C++程序编译参数
 - F77: 编译Fortran77源文件的编译器命令
 - F90: 编译Fortran90及以后源文件的编译器命令
 - FC: 编译Fortran源文件的编译器命令
 - FFLAGS: Fortran编译参数
 - INCLUDE: 头文件参数
 - LIB: 库文件参数
 - LINK: 链接参数
 - OFLAG: 优化参数



- 查看安装说明: <http://www.open-mpi.org/doc/>
- 解压缩文件: `tar xvf openmpi-1.10.1.tar.gz`
- 查看说明: `README`、`INSTALL`、`doc`等文件或目录
- 查看`configure`选项: `./configure -h`
- 生成默认配置文件:
`./configure --prefix=/opt/openmpi-1.10.1 FC=ifort CC=icc CXX=icpc`
- 查看修改生成的`Makefile`、`Makefile.am`、`Makefile.in`
- 编译: `make`
- 安装到指定目录: `make install`
- 设置环境变量: 比如在`~/.bashrc`中设置安装后的可执行程序目录在环境变量`PATH`中:

```
export PATH=$PATH:/opt/openmpi-1.10.1
```



- 查看安装说明: <http://www.vasp.at/index.php/documentation>
- 解压缩文件:
 - `tar xvf vasp.5.lib.tar.gz`
 - `tar xvf vasp.5.3.5.tar.gz`
- 查看说明: `vasp.5.lib/README.lapack`和`vasp.5.3/README`
- 生成默认配置文件: `cp makefile.linux_ifc_P4 Makefile`
注: VASP无需`./configure`命令生成`Makefile`文件, 而是提供了几种针对不同系统和编译器的`makefile`模板
- 修改`Makefile`文件配置, 设定编译环境等:
 - 对`vasp.5.lib/Makefile`做如下修改:
 - 设定编译Fortran的编译器命令为Intel Fortran编译器命令: `FC=ifort`
 - 对`vasp.5.3/Makefile`做如下修改:
 - 设定MPI Fortran编译器为Intel MPI编译命令: `FC=mpiifort`



- 设定BLAS库使用Intel MKL中的BLAS: $BLAS=-mkl=sequential$
注: 2013及之后的Intel编译器支持-mkl选项自动调用Intel MKL库
- 设定MPI库部分:
 $BLACS=-lmkl_blacs_intelmpi_lp64$
 $SCA=$(MKL_PATH)/libmkl_scalapack_lp64.a $(BLACS)$
- 设定parallal FFT:
 $FFT3D=fftwpiw.o fftmpi_map.o fftw3d.o fft3dlib.o $(MKL_FFTW_PATH)/libfftw3xf_intel.a$
 $INCS=-I$(MKLROOT)/include/fftw$
- 编译:
 - 编译 $vasp.5.lib$ 里的库: 在 $vasp.5.lib$ 目录中执行 $make$
 - 编译成 $vasp$: 在 $vasp.5.3$ 目录中执行 $make$
- 安装: VASP无需执行 $make install$, 只需要将生成的 $vasp$ 复制到相应目录即可, 如 $/opt/bin/vasp.5.3.5$
- 设置环境变量: 如在 $\sim/.bashrc$ 中设置安装后的可执行程序目录在环境变量 $PATH$ 中:



```
export PATH=$PATH:/opt/bin/vasp.5.3.5
```



编译时提示某些文件找不到或函数无法链接

- 提示某些库，如libm.so，找不到：
 - 查找是否是系统库：*yum provides */libm.so**，有的话，则说明是系统库，可联系系统管理者安装
 - 去/opt/intel等目录下查看下是否有：*find /opt/intel -name libm.so*，有的话，一般设置合适链接参数即可
 - 如上述两者都找不到，那么一般需要下相应库进行安装，请搜索。
- 提示某些函数，如zhemm，无法链接：
 - 到怀疑可能有此函数的目录下*grep zhemm **
 - 对于.so文件，如libmkl_mc3.so，可*nm libmkl_mc3.so*查看里面的函数
 - 对于.a文件，如libmkl_blas95_lp64.a，可*ar t libmkl_blas95_lp64.a*查看里面的.o文件
 - 如上述方法显示存在，一般只要添加合适的链接参数即可，如找不到，也许需要安装对应的函数包



- 中国科大超算中心:
 - 电话: 0551-63602248
 - 信箱: sccadmin@ustc.edu.cn
 - 主页: <http://scc.ustc.edu.cn>
 - 办公室: 中国科大东区新图书馆一楼东侧126室
- 李会民:
 - 电话: 0551-63600316
 - 信箱: hmli@ustc.edu.cn
 - 主页: <http://hmli.ustc.edu.cn>
 - 办公室: 中国科大东区新科研楼A座二楼204室