

Windows で Fortran と分子動力学 =インストール編=

概説-----

1. コンパイルするために
Cygwin をインストール。
g95 をインストール。
2. プログラムを編集するために
エディタをインストール。
3. 結果をみるために
Xming のインストール。
Atomeye をインストール。

1. まず cygwin をインストールします。

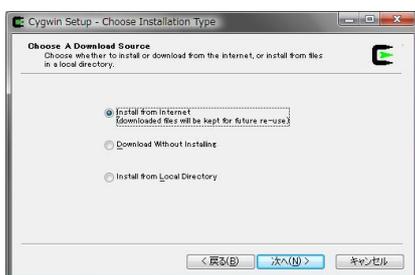
Windows で Unix っぽいことをするための環境です。

<http://www.cygwin.com/> にアクセスして、真ん中のあたりにある “Install or update

now! ” をクリック。そして実行。



「次へ」



→ “install from internet” 「次へ」



→ (問題なければデフォルトのまま) 「次へ」



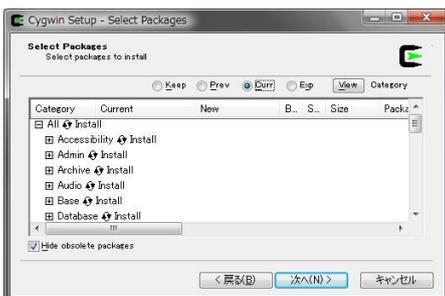
→ (マイドキュメント⇨ダウンロードとか Users¥Name¥Downloads とか適当なフォルダを指定して) 「次へ」



→ “Direct Connection” 「次へ」

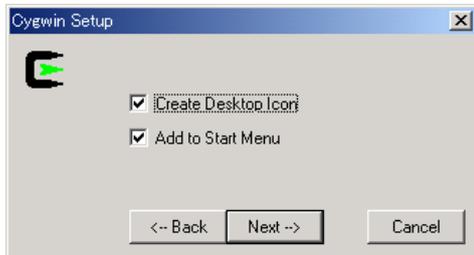


→ “ftp://ftp.jaist.ac.jp あたりを適当に選択して” 「次へ」



→ (面倒なのでフルインストール) “All の横の  マークをクリックして Default を Install に変える” 「次へ」

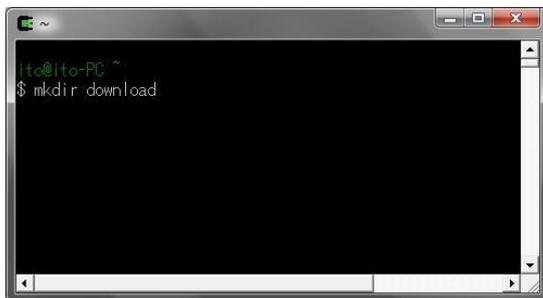
→ 2、3時間待つ。止まっているように見えてもたぶん動いているので、待つ。途中で何か聞かれたら ok とでも答える。



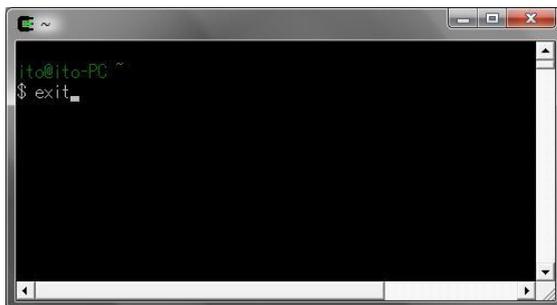
最後に Create Icons になるので、両方にチェックをいれて、「完了」、ok。



デスクトップのアイコンをダブルクリックして一度起動する。



mkdir download とタイプしてエンター。



exit とタイプしてエンターを押して終了。

次に g95 をインストールします。

Fortran95 のコンパイラです。



<http://www.g95.org/>にアクセスして、左の方の「Downloads」をクリック。出現した「Binaries」をクリック。

Linux x86 (Debian)	(2009-03-15 11:07)	HTTP FTP
Linux x86-64 (Debian)	(2009-03-15 11:07)	HTTP FTP
Self-extracting Windows x86	(2009-03-15 11:05)	HTTP FTP
Cygwin x86 tarball	(2009-03-15 11:02)	HTTP FTP Extract in the root directory
Self-extracting Cygwin x86	(2009-03-15 11:04)	HTTP FTP
Self-extracting Windows x86 (gcc 4.1, experimental)	(2009-03-15 11:05)	HTTP FTP
Cygwin x86 tarball (gcc 4.1, experimental)	(2009-03-15 11:04)	HTTP FTP Extract in the root directory

真ん中のあたりの Cygwin x86 tarball のところの「HTTP」か「FTP」をクリック（どちらでもいい）。「保存」。Cドライブの `cygwin¥home¥ito(user name)¥download` に、ファイルの種類を“すべてのファイル”にして、ファイル名を“g95-x86-cygwin.tar.gz”として保存。

```
ito@ito-PC ~
$ cd /
ito@ito-PC /
$ tar zxvf ~/download/g95-x86-cygwin.tar.gz
```

Cygwin を立ち上げる。 `cd /` とタイプしてエンター。

`tar zxvf ~/download/g95-x86-cygwin.tar.gz` とタイプして、エンター。

これでインストール完了。

2. エディタをインストール。

プログラムを書いたり、編集したりするものです。ようは windows のメモ帳です。メモ帳を使っても構いません。さくらエディタでも、秀丸でも、meadow でも、好きなものを使ってください。

3. Xming をインストールします。

これは後述の Atomeye が動くために必要です。Cygwin にも同等のソフトが入っていますが、いまいち不安定なのでそれは使いません。

<http://sourceforge.net/projects/xming> にアクセスする。緑色の「download」のところをクリック。「xming」のところをクリック。「[Xming-6-9-0-31-setup.exe](#)」のところをクリック。実行。ほとんどデフォルトで「Next」の連打。最後の create a desktop icon for Xming のところだけはチェックをいれて、インストール。

Atomeye をインストールします。

これは、分子動力学の結果をみるときにしばしば用いられるソフトです。

<http://mt.seas.upenn.edu/Archive/Graphics/A/#download> にアクセスして、9行目あたりの windows のところをクリック。

Binary Release

These are raw binaries. Right-click on the link and "Save Target As..." to one of your directories, such as `cnt8x3.cfg`.

- [i686 Linux](#)
- [Alpha Linux GLIBC2.1](#)
- [Sgi Irix](#)
- [Sgi Irix64](#)
- [Sun Solaris](#)
- [HP UX](#)
- [Windows with Cygwin / X \(README.txt\)](#)
- [Alpha Tru64 UNIX](#)
- [Mac OS X \(v10.4 and before, v10.5 "Leopard"\) with Darwin \(see A, B, C for binaries\)](#)

When I get the chance, I try to make up-to-date executables for different platforms with full functionality.

Frequently Asked Questions

適当なところに保存して、ダブルクリック。中にある A.exe だけをコピーして、`c:\cygwin\usr\local\bin` あたりにでも置く。A.exe という名前では紛らわしいので、atomeye.exe とでも改名しておく。

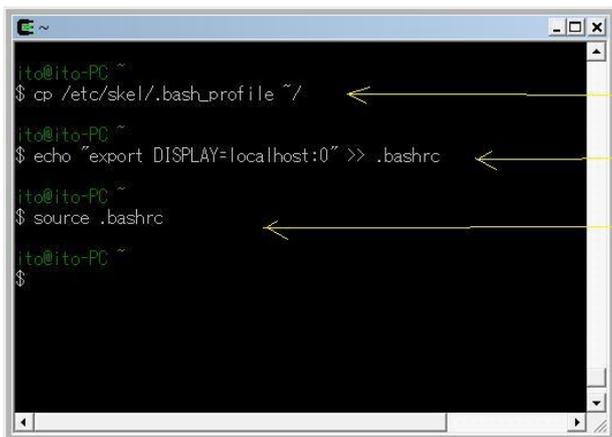
これでインストール編終了です。

次は、設定と動作確認をしましょう。

=設定&確認編=

Cygwin の設定をします。

Cygwin のデフォルトのシェルは `bash` と呼ばれるシェルです。この `bash` の設定ファイルは各自のホームディレクトリにある `.bashrc` です。しかし、最近の `cygwin` は `.bashrc` を読み込んでくれないときがあります。



```
ito@ito-PC ~
$ cp /etc/skel/.bash_profile ~/
ito@ito-PC ~
$ echo "export DISPLAY=localhost:0" >> .bashrc
ito@ito-PC ~
$ source .bashrc
ito@ito-PC ~
$
```

コピー
文追加
読み込

そんなわけで、`C:\cygwin\etc\skel\` にある `.bash_profile` をコピーして各自のホームディレクトリ (`C:\cygwin\home\ito(user name)`) に置いてください。これで、`.bashrc` に何か書けば設定が反映されるようになります。

`.bashrc` に次の一文を書き加えてください。

```
export DISPLAY=localhost:0
```

です。ホームディレクトリに `.bashrc` が見当たらなければ作ってください。設定完了。Cygwin を再起動するか、`source ~/.bashrc` と入れてください。

次は動作確認です。

<http://www.fml.t.u-tokyo.ac.jp/~izumi/CMS/intro/test3.f>

をダウンロードして、ホームディレクトリに置いてください。

まずは、コンパイル。Cygwin で

```
g95 test3.f
```

これでコンパイルできます。基本的に `g95` は `gcc` の仲間なので、コンパイルオプションは同じように使えます。

そして、実行。Cygwin で

```
./a.exe
```

そうすると、`atomeye` テスト用のファイル `atomtest.cfg` ができる。

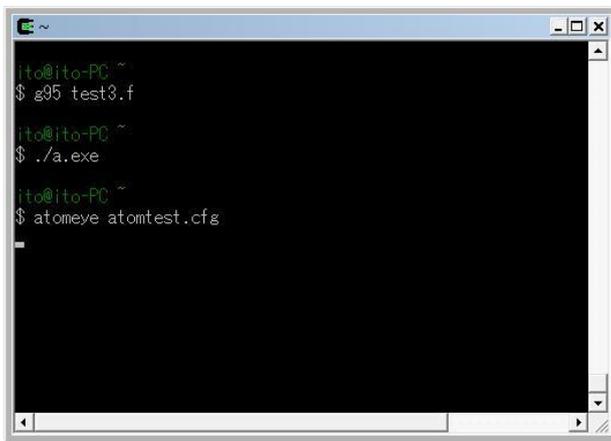


デスクトップの **Xming** をダブルクリックして、**Xming** を立ち上げてください。右

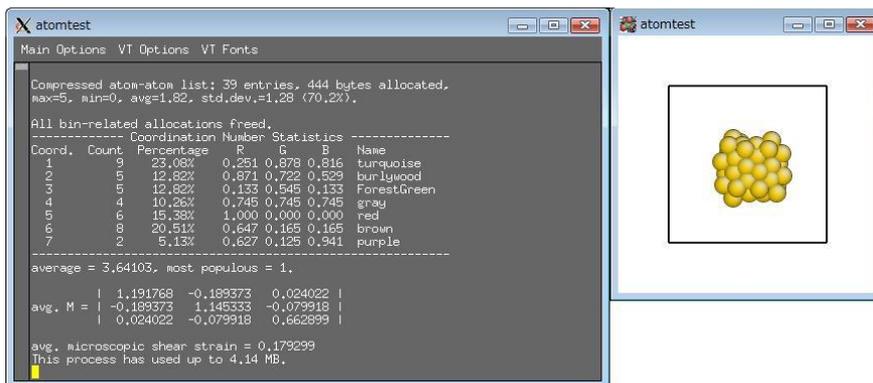
下のシステムトレイ  に X のマークが在れば、起動しています。

Atomeye を使ってみましょう。Cygwin で
`atomeye atomtest.cfg`

新しいウィンドウが開いて原子を表示していたら成功です。



原子



`test3.f`, `a.exe`, `atomtest.cfg` はもういらないので削除してください。

以上