Windows で Fortran と分子動力学 =インストール編=

- 概説------
  - 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。
  - プログラムを編集するために エディタをインストール。
  - 結果をみるために Xming のインストール。 Atomeye をインストール。

-----

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



→ "install from internet" 「次へ」

Select the directory where you want to insta installation parameters.	ll Cyntwin - Also choose a few	E		
Root Directory				
C#cygwin		Browse		
Install For	Default Text File Type			
All Users (RECOMMENDED)	🥘 Unix / binary (RECOMMEN	DED)		
Cygwin will be available to all users of the system. NOTE: This is required if you wish to run services like sshd, etc.	No line translation done; a in binary mode. Files on di line endings.	l files opened sk will have LF		
<ul> <li>Just Me</li> <li>Cvzwin will only be available to the</li> </ul>	ODS / text Line endings will be transla	ted from unix		
current user. Only select this if you lack Admin.privileges or you have specific	(LF) to DDS (CR-LF) on w verse on read.	rite and vice		
needs.	read more about n	e modes		
	展る(B) 次へ(N) >	キャンヤル	1	
(問題なけた	ドデフェル	トのせ	— とよ)	Γ Vhr J
(問題なければ	ぼデフォル	トの	_ まま)	「次~
(問題なければ	ボデフォル	トの言	— まま)	「次・
(問題なけれね Cygwin Setup - Select Local Package I	ばデフォル Directory	トの言	 とま) ▲	「次~
(問題なけれは Cygwin Setup - Select Local Package I Select Local Package Directory	ばデフォル Directory	トのま	ー まま)	「次~
(問題なけれる Sygwin Setup - Select Local Package I Select Local Package Directory Saket & denotry where you want Salay A	ばデフォル Directory a store the installation files it drags and already exist.	トのま	_ まま) ▲	「次~
(問題なけれに Cygwin Setup - Select Local Package I Select Lacal Package Directory Select advectiventer gour want Setup & downloads. The directory will be created iff	ビデフオル Directory o store the installation files it does not already exist.	トのま	_ まま) <sup>▲</sup>	「次~
(問題なけれは Cygwin Setup - Select Local Package I Select Local Package Diractory Select a directorywhere you wait Setup t domicad: The directorywill be created if	ボデフオル Directory actore the instalation files it t does not already exist.	トの言	_ まま) _	「次・
(問題なけれに Cygwin Setup - Select Local Package I Select Accal Package Orectory Salect affectory will be created if download: The directory will be created if	ビデフオル Directory o store tha instalation the rit i does not already exist.	トの  E	_ €ま) ×	「次~
(問題なけれた) Cygwin Setup - Select Local Package I Sate of Arcting Whene you want Setup t Soundod: The directory will be created if Local Package Directory	ビデフオル Directory o store the installation files it does not already exist.	トの 	_ €ま) ×	「次~
(問題なけれに Cygwin Setup - Select Local Package I Salect a dectory where you wait Setup t Select a dectory where you wait Setup Select a dectory where you wait Setup t Could Package Directory	ビデフオル Directory Datore the installation files if does not already exist.	トの E Protect	_ まま) ■	「次~
(問題なけれた) Select Local Package I Select Local Package Directory Somical: The dectory will be created if Local Package Directory CWUsersWIGHDownloadg	ボデフォル directory a dove the instillation file if dove not directly exist.	トの E Browse	_ まま) -	「次~
(問題なけれに Cygwin Setup - Select Local Package I Salet 1 ader to ywhar you wai Setup 1 Salet 1 ader to ywhar you wai Setup 1 Salet 1 ader to ywai Setup 1 Salet 1 ader to ywai Setup 1 Cotul Package Directory Cotul ar silitozi Downloada	ビデフオル Arectory O store the installation files it does not already exist.	トの E Biowsa	_ €ま) 	「次~
(問題なけれた) Cygwin Setup - Select Local Package [ Select Lacal Package Directory Select adjrocophere you want Setup A downloads: The directory will be created iff Local Package Directory CHUBersWiteWDownloads]	ばデフォル Directory Dotore the installation files it does not already exist.	トの Browse	_ €ま)	「次・
(問題なけれた) Select Local Package I Salect Local Package Directory Baket a gructory where you want Salue t dominads: The directory will be created if Local Package Directory CHUSersBinoBDominosds	ボデフオル Directory o down the institution the it down not intensity outst	トのご E Bionse	±±)	「次,
(問題なけれに Cygwin Setup - Select Local Package I Salect a directory where you was Setup & Salect a directory will be created if Local Package Directory 	ビデフオル Directory O store the installation files it does not already exist.	FOUR	E ま)	「次~
(問題なけれた) Cygwin Setup - Select Local Package I Salect Local Package Directory Somicas: The directory will be created if Local Package Directory CWUsersWIOHDownloadg	ボデフォル Directory a date not illestift files it dates not illestift esty exist.	FO	E ま)	「次~

→ (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」

Setup needs to know how you v the appropriate settings below.	want it to connect to the internet. Choo:	se 💽
Direct Connect     Use [E5 Setting     Use HTTP/FTP	ian s Eroxy:	
Proxy <u>H</u> ost Por <u>t</u>	80	

→ "Direct Connection" 「次へ」

Choose a s	ite from this list, or add your own sites to the list	L L
	Available Download Sites:	
	ftp://ftpheanetie http://ftpheanetie ftp://ftpheanetie http://ftpittm.ac.in http://ftpittm.ac.in ftp://ftpittm.ac.in http://ftp.mirrorg.arr.it	*
	no//hpistacio http://fbistacio no//fbistacio no//fbistacio no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacion no//fbistacio no//fbis	-
User URL:		bbA

→ "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  $\odot$  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。



<u>http://www.g95.org/</u>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。



真ん中のあたりの Cygwin x86 tarball のところの「HTTP」か「FTP」かをクリック (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。



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。

<u>http://sourceforge.net/projects/xming</u> 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。「<u>Xming-6-9-0-31-setup.exe</u>」 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。

<u>http://mt.seas.upenn.edu/Archive/Graphics/A/#download</u> 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**



## **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。



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。



下のシステムトレ

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。

<b>E</b> ~	_ 🗆 🗙
ito@ito-PC ~ \$ g95 test3.f	
ito@ito-PC ~ \$ ./a.exe	
ito@ito-PC ~ \$ atomeye atomtest.cfg -	
•	▼ ▶

原子

X atomtest	📸 atomtest	
Main Options VT Options VT Fonts		
Compressed atom-atom list; 39 entries, 444 bytes allocated, max=5, min=0, avg=1,82, std.dev.=1,28 (70.2%). All bin-related allocations freed. Coord. Courd Percentage R G B Name 1 9 23.08% 0,251 0,878 0.816 turquoise 2 5 12.82% 0,871 0,722 0,529 burlywood 3 5 12.82% 0,874 0,728 0,529 burlywood 3 5 12.82% 0,745 0,745 0,745 gray 5 6 15.38% 1,000 0,000 0,000 red 6 8 20.51% 0,627 0,155 0,165 brown 7 2 5,13% 0,627 0,125 0,941 purple		
average = 3.64103, most populous = 1.		
1.191768 -0.189373 0.024022   avg. M =   -0.189373 1.145333 -0.079918   0.024022 -0.079918 0.662899   avg. microscopic shear strain = 0.179299 This process has used up to 4.14 MB.		

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