

# 1<sup>ère</sup> installation de OpenCALPHAD (=OC) sous WINDOWS

P Zeller - 21 septembre 2016

**Contexte** : OpenCALPHAD est un logiciel "open source" dont la source est en fortran (sous forme d'un ensemble de fichiers textes). Il revient à l'utilisateur de construire l'exécutable en compilant la source. Par ailleurs OpenCALPHAD fait appel au logiciel GNUPLOT.

Ce document décrit une façon de l'installer le code en vue de le faire fonctionner dans une [invite de commande Windows](#). Il s'adresse à un nouvel utilisateur qui n'a jamais compilé de code sous Windows.

**Avertissement** : Ce document N'EST PAS un "manuel d'installation", c'est un COMPTE RENDU de ma propre expérience.

Je ne garantis pas que le lecteur pourra en reproduire le déroulement. En particulier il devra vraisemblablement modifier les noms des fichiers téléchargés, soit parce qu'il ne démarre pas avec la même configuration que moi, soit parce que les noms des fichiers évoluent au fil des releases.

## 1 Avant de commencer l'installation

### 1.1 Configuration initiale du PC et prérequis

NB : il ne s'agit pas vraiment de choix : c'est la config de mon PC. Le lecteur qui n'a pas cela devra adapter la suite de la procédure à son cas particulier.

OS	Windows 7 Enterprise Service Pack 1, Système d'exploitation 64 bits.
GNUPLOT	S'il n'est pas déjà installé, commencer par " <a href="#">install de GNUPLOT</a> " puis revenir ici.

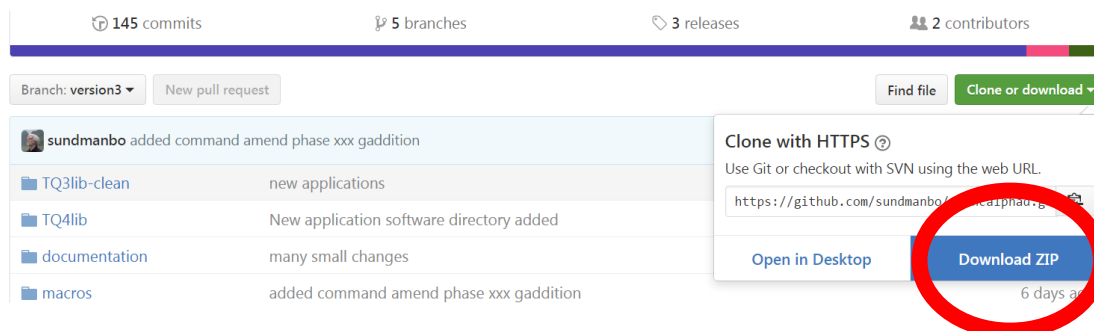
L'installation nécessite de savoir utiliser l'outil "[Invite de commandes](#)" de Windows.

L'installation nécessite de savoir "[modifier les variables d'environnement](#)" de Windows.

### 1.2 Téléchargement de OpenCALPHAD

Option	Ordre de préférence	
github ( <a href="https://github.com/sundmanbo/opencalphad">https://github.com/sundmanbo/opencalphad</a> )	1	mise à jour fréquemment
opencalphad.com	2	dernière version stable

Télécharger l'archive zip :



L'extraire dans un répertoire "C:\OPENCALPHAD" ou dans un autre répertoire dont le nom ne comporte aucun espace.

### 1.3 Choix code séquentiel / parallèle

Utilisation envisagée	Installation à réaliser
Calculs en ligne de commande	OC version <i>séquentielle</i> ou version <i>parallèle</i>
Interfaçage avec un autre code (champ de phase, diffusion, thermomécanique, etc)	OC version <i>parallèle</i>
	Installation OCASI (= OC Application Software Interface)

NB :

- Pour un nouvel utilisateur de OpenCALPHAD, la version séquentielle n'a aucun avantage sur la version parallèle. En particulier elle n'est ni plus facile, ni plus rapide à installer.
- La version séquentielle ne peut présenter un intérêt que pour un ancien utilisateur qui souhaite faire une *mise à jour*, auquel cas la compilation est rapide et facile.
- Ce document ne contient pas de méthode pour l'installation de OCASI.

### 1.4 Choix de l'environnement de travail pour la compilation et l'exécution

Option	Avantages	Inconvénients
<b>MinGW</b> version "0.6.2-beta-20131004-1"	Tout se fait dans une invite de commandes Windows (pas besoin d'apprendre à parler "bash")	1. Réservé à "openalphad séquentiel", car environnement <b>buggé</b> . 2. Nécessité d'éditer les fichiers sources *.F90 de OC pour espérer réussir la compilation. 3. Impossible de compiler la version parallèle.
<b>cygwin</b> ou <b>cygwin/X</b>	1. Outil très <b>robuste</b> : pas de problèmes ni pour l'installation ni pour l'utilisation. 2. Le terminal graphique (xterm) est beaucoup plus puissant et convivial que l'invite de commande Windows (cmd) 3. L'exécutable OC est utilisable dans une invite de commandes Windows.	Nécessite d'apprendre les bases du langage "bash" Unix/Linux : cd, ls, cp, mv, rm, ...
<b>MSYS2</b> version "msys2-x86_64-20160921"	1. Version très récente de gcc (6.2.0), produisant un binaire oc4P.exe très performant. (3% plus rapide qu'avec cygwin) 2. L'exécutable OC est utilisable dans une invite de commandes Windows.	1. Nécessite d'apprendre les bases du langage "bash" Unix/Linux : cd, ls, cp, mv, rm, ... 2. Installation de MSYS2 un peu difficile, avec plusieurs <b>pièges</b> (pour ne pas dire des bugs!!!)

NB :

1. Quelle que soit l'option retenue pour l'environnement de travail, le compilateur utilisé sera toujours "mingw", c'est-à-dire le compilateur gcc (=GNU Compiler Collection <https://gcc.gnu.org/>) configuré pour produire des exécutables binaires qui fonctionnent directement sous Windows. Il fait appel pour les bibliothèques parallèles à des DLL de Microsoft.
2. Les bugs évoqués dans le tableau ci-dessus sont susceptibles de disparaître dans les versions ultérieures de MinGW et MSYS2.

3. *J'ai également testé la piste de la compilation avec gcc natif dans cygwin (package gcc-core, par opposition à mingw64-i686-gcc-core). Cela produit un binaire parallèle qui utilise très mal la parallélisation et se révèle globalement moins performant que le code séquentiel.*
4. *Il existe d'autres versions de MinGW et MSYS. Peut-être avec moins de bugs ? ... ou plus ?*

Ma préférence va clairement à l'option n°2 = "cygwin/X".

Continuer en suivant l'un des liens dans la liste suivante, au choix :

[Install de OC parallèle sous Cygwin/X](#)

[Install de OC parallèle sous MSYS2](#)

[Install de OC séquentiel sous MinGW](#)

## 2 Install de OC parallèle sous Cygwin

Pour voir si cygwin est installé : Menu Démarrer / taper "cygwin" dans la case recherche.

Si cygwin est déjà installé : passer à la [mise à jour](#)

Si cygwin n'est pas installé : passer à l'[installation](#)

### 2.1 Si cygwin est déjà installé : mise à jour

Il s'agit juste de vérifier que tous les packages nécessaires sont bien déjà présents, et compléter si besoin.

NB :

- Pour vérifier la présence de packages dont une partie du nom est connu (par exemple \*gcc\*), utiliser les commandes

```
cygcheck -c -d | grep gcc
```

Par exemple pour les compilateurs, vérifier si des packages équivalents mais en version mingw64-**i686** au lieu de mingw64-**x86\_64** sont déjà installés :

```
cygcheck -c -d | grep mingw64-i686-gcc-core
```

S'ils sont déjà installés, inutile d'en installer d'autres car ils conviennent tout à fait et ils produisent tous exactement les mêmes exécutables opencalphad.

- Puis, pour voir le contenu d'un package (la liste des commandes qu'il contient), par exemple :

```
cygcheck -l mingw64-i686-gcc-fortran
```

- Enfin, pour vérifier à la fois la présence et la version d'une commande (par exemple gcc ou gnuplot), entrer

```
gnuplot --version
```

ou

```
x86_64-w64-mingw32-gfortran --version
```

Liste des packages nécessaires : voir [ici](#).

### 2.2 Si cygwin n'est pas encore installé : installation

Sur le site <http://cygwin.com>, télécharger **setup64.exe**, c'est-à-dire la version 64 bits, et la mettre dans C:\CYGWIN\_annexe.

Créer un raccourci vers setup64.exe, puis éditer le raccourci en rajoutant l'option "--no-admin" sur la ligne de commande.

Lancer **setup64.exe** via son raccourci et choisir "Install from internet";

Miroirs: miroir français, par exemple <ftp://mirror.cict.fr> ou <http://cygwin.cict.fr> ; si le logiciel s'arrête pendant le téléchargement, cliquer sur "Précédent" et ajouter d'autres miroirs (sélection par Ctrl et clic gauche) comme <ftp://mirror.switch.ch>, (<ftp://ftp-stud.fht-esslingen.de>, <ftp://ftp.easynet.be>, <ftp.inf.tu-dresden.de>, <ftp://uni-erlangen.de>)

### Liste des packages à installer:

(NB: pour faire apparaître "Install", cliquer une fois sur "Default".

Sinon, pour afficher la liste détaillée des packages dans une catégorie, cliquer sur la case marquée "+" à gauche du nom de la catégorie)

#### 1. Minimum vital

(All : Default)

Devel : make

#### 2. Packages spécifiques à la compilation de OpenCALPHAD :

Rechercher mingw64-x86\_64, puis dans la catégorie Devel, sélectionner :

5.4.0-2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	13,550k	mingw64-x86_64-gcc-core: GCC for Win64 toolchain (C, OpenMP)
5.4.0-2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6,596k	mingw64-x86_64-gcc-fortran: GCC for Win64 toolchain (Fortran)
5.4.0-2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	9,926k	mingw64-x86_64-gcc-g++: GCC for Win64 toolchain (C++)
5.4.0-2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	10,674k	mingw64-x86_64-gcc-objc: GCC for Win64 toolchain (Objective-C, C++)

et

20100619-5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	107k	mingw64-x86_64-pthreads: pthreads-win32 for mingw-w64 64bit runtime stub
------------	-------------------------------------	--------------------------	------	--

NB :

- Ces choix entraîneront automatiquement l'install des dépendances suivantes, qu'il faudra accepter :

mingw64-x86_64-binutils	(2.25.0.1.23f238d-1)
Binutils for MinGW-w64 Win64 toolchain	
Required by: mingw64-x86_64-gcc-core	
mingw64-x86_64-headers	(4.0.6-1)
MinGW-w64 runtime headers and libraries	
Required by: mingw64-x86_64-runtime	
mingw64-x86_64-runtime	(4.0.6-1)
MinGW-w64 runtime headers and libraries	
Required by: mingw64-x86_64-gcc-core	
mingw64-x86_64-windows-default-manifest	(6.4-1)
Default Windows application manifest	
Required by: mingw64-x86_64-gcc-core	
mingw64-x86_64-winpthread	(4.0.6-1)
MinGW-w64 POSIX threads	
Required by: mingw64-x86_64-gcc-core, mingw64-x86_64-headers	

#### 3. Facultatif mais recommandé : Les packages complémentaires suivants ajoutent des fonctionnalités utiles, comme l'établissement de sessions graphiques sur une machine locale ou distante

(All : Default)

Archive : bzip2, pax, unzip, zip, gzip

Devel : git

Editors : gedit, nano, nedit

Graphics: gnuplot

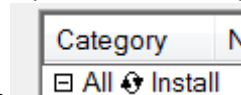
Web : wget

X11: Install

#### 4. Autres packages

Il est possible de compléter la liste afin de se rapprocher d'un système linux complet, mais attention à

ne pas être trop gourmand ! Ne surtout pas faire apparaître



: l'install complète

*fait au moins 8 Go et prend 4 heures (ainsi que chaque mise à jour ultérieure!). Si c'est le cas, annuler l'installation et recommencer.*

Poursuivre l'installation sans rien changer aux valeurs par défaut (surtout pas le répertoire d'installation).

**Lancement d'une invite de commandes cygwin :**

Menu Démarrer / Tous les programmes / Cygwin / Cygwin terminal .

**Lancement du serveur X :**

Menu Démarrer / Tous les programmes / Cygwin-X : choisir dans la liste l'un ou l'autre des environnements X proposés (par exemple XWin ou WindowMaker ou OpenBox ou XLaunch ou ... ).

**Lancement de un ou plusieurs (autant qu'on veut) terminaux graphiques :**

Menu Démarrer / Tous les programmes / Cygwin-X / Xterm

## 2.3 Install OpenCALPHAD parallèle sous cygwin

Dans un terminal cygwin ou xterm, entrer les commandes suivantes.

```
cd /cygdrive/c/OPENCALPHAD      # a ajuster suivant le repertoire choisi
cd opencalphad-version3        # a ajuster suivant la version telechargee
```

En vue de faire tourner OpenCALPHAD sous Windows, il faut utiliser un compilateur dont le nom contient "MinGW". Repérer le compilateur gfortran souhaité dans la liste renvoyée par la commande suivante :

```
cygcheck -c -d | grep fortran | cut -d" " -f1 | xargs cygcheck -l {} | grep fortran.exe
```

Si l'un des Makefile-\* de la distribution OpenCALPHAD correspond au compilateur présent, en faire un fichier "Makefile" :

```
ls -l Makefile-*
cp Makefile-x86_64-w64-mingw32 Makefile
```

Sinon, sélectionner le fichier le plus proche (par exemple Makefile-parallel ou Makefile-generic) et en faire un fichier "Makefile" :

```
cp Makefile-generic Makefile
```

puis éditer ce fichier Makefile avec un éditeur de texte quelconque de façon à ajuster le nom des compilateurs.

C'est prêt, il n'y a plus qu'à compiler. Lancer la commande suivante et observer s'il n'y a pas de message d'erreur :

```
make
```

Lancement et tests : voir [ici](#).

## 3 Install de OC parallèle sous MSYS2

### 3.1 Si MSYS2 n'est pas encore installé : installation

Installer selon les indications du site <https://msys2.github.io/> en veillant aux points (= sources de problèmes) suivants :

- Faire l'installation avec le compte sous lequel est ouvert la session Windows. (Par opposition à : clic droit puis "exécuter en tant qu'administrateur"). Installer pour "Just for me" et non pas "All users".
- Conformément au point 9 de la procédure décrite sur le site web, ouvrir la page <https://sourceforge.net/p/msys2/wiki/MSYS2%20installation/> pour résoudre les problèmes. J'ai moi-même rencontré le bug n° 4 :

"Sometimes a package upgrade fails with failed to commit transaction (conflicting files) and some-pkg: /path/to/some/file exists in filesystem. If you're sure you didn't put the offending files there manually, move or delete the files and start the upgrade again."

⇒ Solution : Supprimer (vers la corbeille) les fichiers "C:\msys64\mingw64.exe" et "C:\msys64\mingw32.exe" et recommencer les étapes de mise à jour.

### 3.2 Install OpenCALPHAD parallèle sous MSYS2

Dans un terminal MSYS2 (Menu Démarrer / Tous les programmes / MSYS2 / MSYS2 MINGW 64-bits), entrer les commandes suivantes.

```
cd /c/OPENCALPHAD          # a ajuster suivant le repertoire choisi
cd opencalphad-version3     # a ajuster suivant la version telechargee
cp Makefile-parallel Makefile
```

Lancer la commande suivante et observer s'il n'y a pas de message d'erreur :

```
make
```

Lancement et tests : voir [ici](#).

## 4 Install de OC séquentiel sous MinGW

*NB : Ceci n'a d'intérêt que pour les utilisateurs qui disposent déjà d'une installation de MinGW qui fonctionne correctement.*

Ouvrir une invite de commande Windows.

Vérifier que gfortran est déjà installé sur le PC. Pour cela entrer la commande :

```
gfortran --version
```

La réponse indique très clairement si c'est installé ou pas.

Si gfortran est installé, passer directement à l'[install de OC](#).

Si gfortran n'est pas installé, alors je recommande chaudement de choisir une autre option : [cygwin](#) ou [MSYS2](#). Pour ceux qui persistent à vouloir utiliser MinGW, commencer par essayer d'installer gfortran comme ci-dessous.

### 4.1 Etape préliminaire : installation de gfortran

*NB : franchement, j'insiste, aucun utilisateur ne devrait être intéressé par ce §.*

Voir aide sur

[http://www.mingw.org/wiki/HOWTO\\_Specify\\_the\\_Location\\_of\\_Libraries\\_for\\_use\\_with\\_MinGW](http://www.mingw.org/wiki/HOWTO_Specify_the_Location_of_Libraries_for_use_with_MinGW)

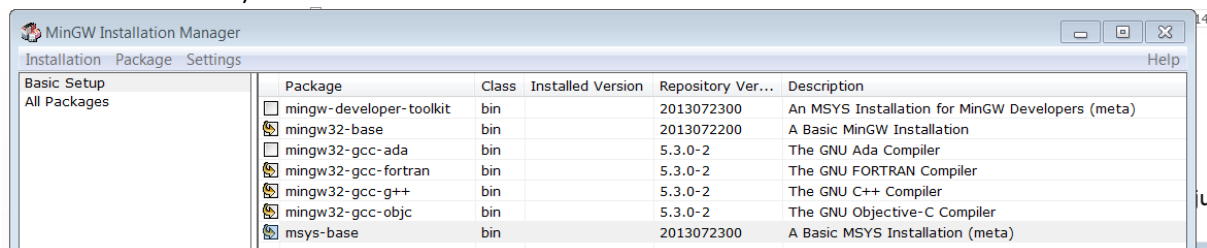
Bien noter la date de la dernière mise à jour de cette page d'aide (=2009). Si malgré cela vous persistez à vouloir installer MinGW, suivre la procédure suivante.

1) télécharger l'installateur de MinGW gfortran version 32 bits :

<https://sourceforge.net/projects/mingw/files/latest/download?source=files>



- 2) et le lancer (en tant qu'utilisateur et non-admin), sans rien changer aux options jusqu'à l'apparition de la fenêtre suivante, où on cochera comme indiqué (clic droit et "mark for installation").



Puis lancer l'installation en cliquant sur "Installation / Apply changes"

- 3) Modifier la variable d'environnement PATH :

Menu Démarrer / taper "Modifier les variables" / cliquer sur "modifier les variables d'environnement pour mon compte"

puis choisir la variable PATH ou path et la modifier en ajoutant à gauche :

c:\MinGW\bin;

Puis OK.

Fermer la session, puis la rouvrir (pour que cette variable soit prise en compte).<sup>1</sup>

Pour vérifier que le nouveau PATH est correct, ouvrir une invite de commandes (Menu Démarrer / cmd) et taper :

gfortran --version

la réponse doit être par exemple "version 5.3.0".

- 4) En cas de remords ou de problème, supprimer tout le répertoire C:/MinGW et recommencer.

<sup>1</sup> Pour les gens pressés qui ne veulent pas fermer et rouvrir la session, après ouverture d'une invite de commandes, commencer par ajuster le PATH en entrant :  
set PATH=C:\MinGW\bin;%PATH%

## 4.2 Install de opencalphad

- 1) créer un répertoire

c:\OpenCALPHAD

- 2) télécharger opencalphad, "development version", à partir du Opencalphad repository sur github : <https://github.com/sundmanbo/opencalphad>
- 3) Extraire l'archive dans C:\OpenCALPHAD, ce qui crée un sous-répertoire "opencalphad-version3".
- 4) Entrer dans ce répertoire puis modifier le nom du fichier "linkmake.txt" en "linkmake.cmd"
- 5) Dans une invite de commandes (Maj+Clic droit dans le dossier puis choisir "ouvrir une fenetre de commandes ici"), entrer la commande :

linkmake.cmd

- 6) Vérifier que le mot "error" n'apparaît pas trop souvent... :-\$. Quand c'est fini, l'exécutable oc4A.exe est présent dans le répertoire.

En cas d'erreur avec un message du genre :

```
use omp_lib
1
```

```
Fatal Error: Can't open module file 'omp_lib.mod' for reading at (1): No such file or directory
```

rechercher tous les fichiers source \*.f90 contenant "use OMP\_LIB" ou "use omp\_lib" et commenter les lignes correspondantes. Puis recommencer la compilation.

L'exécutable s'appelle oc4A.exe .

Lancement et tests : voir [ici](#).

## 5 Exécution et tests de OpenCALPHAD

*NB : les exécutables construits via cygwin ou MSYS2 peuvent également être utilisés dans une invite de commandes Windows.*

### 5.1 Lancement

L'exécutable s'appelle "oc4A.exe" ou "oc4P" ou "oc4P.exe" pour la version 4, il est situé dans le répertoire racine de l'installation. Pour le lancer, ouvrir un terminal ou une invite de commandes et se placer dans le répertoire de travail. Puis entrer la commande de l'exécutable.

- Sous cygwin :

```
~/OPENCALPHAD/opencalphad-version3/oc4P
```

- Sous MSYS2 :

```
/c/OPENCALPHAD/opencalphad-version3/oc4P
```

- Dans une invite de commandes Windows :

```
C:\OPENCALPHAD\opencalphad-version3\oc4P
```

Ouvrir et lire les fichiers d'aide :

```
readme-general.pdf
OC3-commands.pdf
manual/ochelp3.pdf
documentation/*
```



## 5.2 Tests

Pour faire des tests, utiliser les "macros" fournies qui sont dans le répertoire macros/ocv4. Par exemple pour faire tourner la macro "map9", depuis le répertoire racine de l'installation :

```
cd macros/ocv4
../.. /oc4P
macro parallel12
```

## 5.3 Ajustement du nombre de cœurs en parallèle

Par défaut, oc4P utilise toutes les ressources installées sur le PC : tous les cœurs du ou des processeurs et aussi le hyperthreading (s'il a été activé dans le BIOS).

Il est possible de modifier ce comportement à l'aide de la variable d'environnement OMP\_NUM\_THREADS qui est le nombre de processus en parallèle utilisés par un job oc4P.

- Sous cygwin ou MSYS2 :

```
OMP_NUM_THREADS=1 ../.. /oc3P.exe
```

- Dans l'invite de commandes Windows

```
set OMP_NUM_THREADS=3
..\..\oc3P.exe
```

## 6 Annexe : installation de GNUPLOT

Vérifier d'abord si gnuplot est déjà installé sur votre PC. Pour faire la vérification : ouvrir une invite de commandes Windows et entrer les commandes :

```
gnuplot --version
```

La réponse indique très clairement si c'est installé ou pas.

### 6.1 En vue de l'utilisation de OpenCALPHAD via l'invite de commandes Windows

Télécharger l'une des versions "gp\*-win32-\*" ou "gp\*-win64-\*" sur :

(NB: les "\*.exe" nécessitent des droits admin, alors que les "\*.zip" n'en ont pas besoin.)

<https://sourceforge.net/projects/gnuplot/files/gnuplot/>

Installer, de préférence dans un répertoire dont le nom ne contient pas d'espace vide (par exemple C:\GNUPLOT).

Si on a choisi l'archive ZIP, ne pas oublier ensuite d'ajuster la variable PATH (méthode = comme ci-dessus pour MinGW).

### 6.2 En vue de l'utilisation de OC dans Cygwin

La compilation de OC sous cygwin décrite dans ce document produit un exécutable OC qui tourne aussi bien dans un terminal cygwin que dans une invite de commandes Windows.

Dans le cas où on envisage de lancer OC depuis un terminal cygwin, pour qu'il puisse appeler GNUPLOT, il faut :

- soit indiquer au préalable à cygwin le chemin d'accès à GNUPLOT installé sous Windows.

Pour cela, on créera un alias du genre (en ajustant le chemin d'accès) :

```
alias gnuplot='cygstart /cygdrive/c/GNUPLOT/bin/gnuplot'
```

- soit avoir installé X11 et gnuplot dans cygwin.

Installation de GNUPLOT dans cygwin:

- Si cygwin est déjà installé, entrer

```
gnuplot --version
```

pour voir si gnuplot est déjà installé.

Si la commande n'est pas reconnue, installer le package gnuplot avec setup64.exe.

- Si cygwin n'est pas installé :

Alors l'installation de gnuplot est faite en même temps que celle de cygwin, voir ici.

## 7 Annexe : Invite de commandes Windows

Plusieurs solutions pour la faire apparaître.

Méthode	Positionnement du prompt au lancement
Lancer l'explorateur de fichiers (Windows+E), ouvrir le répertoire de travail, faire "Maj+clic droit" dans ce répertoire, puis choisir "Ouvrir une fenêtre de commandes ici".	répertoire de travail
"menu Démarrer" / tous les programmes / Accessoires / Invite de commande	répertoire HOME
"menu Démarrer" puis taper "invite" dans la case "rechercher les programmes et fichiers"	
"menu Démarrer" puis taper "cmd" dans la case "rechercher les programmes et fichiers"	répertoire racine du profil utilisateur (C:\Users\toto)

## 8 Annexe : "modifier les variables d'environnement" de Windows

### 8.1 Dans une invite de commandes (et uniquement pour la durée de la session)

Utiliser les commandes "set" et "echo".

Exemple pour modifier le nombre de processus en parallèle :

```
set OMP_NUM_THREADS=3
echo %OMP_NUM_THREADS%
```

### 8.2 De façon permanente

"menu Démarrer" puis taper "modifier les variables " dans la case "rechercher les programmes et fichiers". Choisir "Modifier les variables d'environnement pour votre compte". etc...