

Installation de OpenCALPHAD sous WINDOWS

P Zeller - 7 septembre 2016

A faire relire par Bo.

Choix entre deux options :

- installer dans Windows directement (pour faire fonctionner opencalphad depuis une "invite de commandes windows"). Ça marche en séquentiel mais pas en parallèle.
- ou à travers CYGWIN (comportement type linux). Tout fonctionne.

1 Install sous Windows directement

Vérifier d'abord si gfortran et/ou gnuplot sont déjà installés sur votre PC. Si c'est le cas, sauter directement au § [1.3](#).

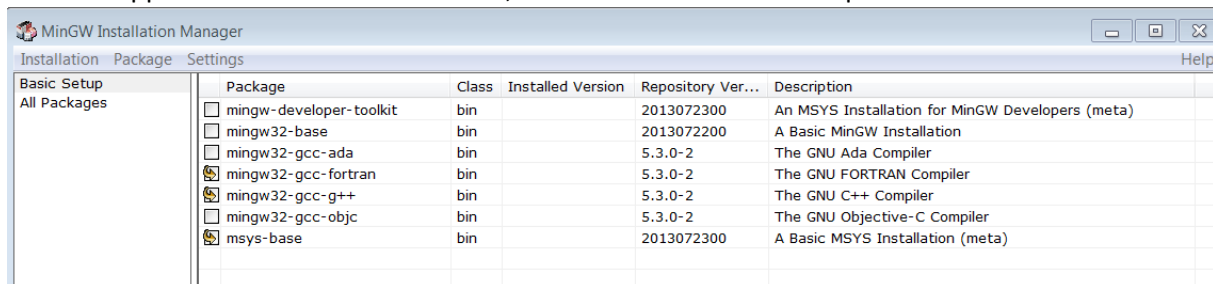
1.1 Etape préliminaire : installation de gfortran

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

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

(version 64 bits: à compléter)

- 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.



Option : choisir ce qu'on veut en plus, par exemple "mingw32-base".

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

- 3) Ajuster le 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).

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, pour ajouter ou supprimer ou mettre à jour des composants de MinGW, relancer l'installateur "MinGW Installation Manager" qui apparaît dans le Menu Démarrer.

1.2 Etape préliminaire : install de GNUPLOT

*NB : Faut-il la version 32 bits ou 64 bits ? apparemment on s'en fout.
Compatibilité avec MinGW ? apparemment on s'en fout.*

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

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

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

Installer.

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

1.3 Install de opencalphad

- 1) créer un répertoire

c:\OpenCALPHAD

- 2) télécharger opencalphad :

<http://www.opencalphad.com/downloads/opencalphad-version3.zip>

- 3) Extraire l'archive dans C:\OpenCALPHAD, ce qui crée un ss-répertoire "opencalphad-version3".
- 4) Faire une copie du répertoire "opencalphad-version3" en "opencalphad-version3_parallel".
- 5) Ouvrir et lire les fichiers d'aide :
 - readme-general.pdf
 - OC3-commands.pdf
 - manual/ochelp3.pdf
 - documentation/*
- 6) Dans "opencalphad-version3", éditer les fichiers suivants en commentant (par un caractère "!" en tête de ligne) les lignes "use OMP_LIB" et/ou "use omp_lib" :
 - pmain1-save.F90
 - models\gtp3.F90
 - minimizer\matsmin.F90
 - userif\pmon6.F90

Sauvegarder.

- 7) Modifier le nom du fichier "linkmake.txt" en "linkmake.cmd"
- 8) Dans une invite de commandes (Maj+Clic droit dans le dossier puis choisir "ouvrir une fenetre de commandes ici"), entrer la commande :

linkmake.cmd

- 9) Vérifier que le mot "error" n'apparaît pas trop souvent... :-\$. Quand c'est fini, l'exécutable oc3B.exe est présent dans le répertoire.
- 10) Pour lancer opencalphad, entrer la commande :

oc3B

1.4 Reste à clarifier

1.4.1 Compilation de la version parallèle (ça marche pas... ☹)

- 1) Se placer dans "opencalphad-version3_parallel".

- 2) Modifier le nom du fichier "linkpara.txt" en "linkpara.cmd"
- 3) Double-clic sur le fichier "linkpara.cmd"

et ça bugge !

2 Installation sous CYGWIN

Avantages :

- il n'y a pas de bug. (Une fois cygwin installé,) ça prend environ 1 minute et ça marche !
- environnement de travail (shell bash) plus pratique que l'invite de commandes Windows

Si cygwin est déjà installé, vérifier que les packages nécessaires sont bien déjà présents (voir liste ci-dessous), et si c'est pas le cas : les installer.

2.1 Install de cygwin/X

Télécharger de préférence **setup64.exe**, c'est-à-dire la version 64 bits, sur le site <http://cygwin.com> et le 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>)

Choix des packages:

(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)

(All : Default)

Archive : bzip2, pax, unzip, zip

Devel : gcc-core, gcc-fortran, gcc-g++, git, make

Editors : gedit, nano, nedit, vim

Graphics : gnuplot

Math : lapack (liblapack0), openblas (libopenblas) (cocher les binaires si besoin), grace

Net: openssh

Web : wget

X11: Install

(= tout ce qu'il faut pour établir des sessions graphiques sur une machine locale ou distante et pour compiler et faire tourner OpenCALPHAD).

NB : Il est possible de compléter cela afin de se rapprocher d'un système linux complet, mais attention à ne pas être trop gourmand : l'install complète fait 8 Go et prend 4 heures (ainsi que chaque mise à jour ultérieure)!

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

Lancement :

Menu Démarrer / Tous les programmes / Cygwin-X : choisir l'un ou l'autre des environnements X proposés.

2.2 Install OpenCALPHAD séquentiel

(tout ce qui suit est fait dans un shell cygwin)

Entrer une par une les commandes qui suivent :

```
wget http://www.opencalphad.com/downloads/opencalphad-version3.zip
unzip opencalphad-version3.zip
mv opencalphad-version3 opencalphad-version3_SEQ
cp -R opencalphad-version3_SEQ opencalphad-version3_para
cd opencalphad-version3_SEQ
make
```

La dernière commande compile la version séquentielle du code.

Ensuite, pour le lancer :

```
oc3B
```

Pour faire des tests, utiliser les "macros" fournies qui sont dans le répertoire macros/ocv3. Par exemple pour faire tourner la macro "map9" :

```
cd macros/ocv3
../.. /oc3B
macro map9
```

2.3 Install OpenCALPHAD parallèle

Pour compiler : depuis le répertoire d'installation, entrer les commandes :

```
cd opencalphad-version3_para
cp Makefile-parallel Makefile
make
```

Ensuite, pour lancer le code :

```
oc3P
```

Pour faire des tests, utiliser les "macros" fournies qui sont dans le répertoire macros/ocv3. Par exemple pour faire tourner la macro "parallel2" :

```
cd macros/ocv3
../.. /oc3P
macro parallel2
```

(NB :

- *le parallélisme est utile pour les gros calculs mais il peut aussi ralentir les "petits calculs".*
- *la version parallèle utilisée avec un seul thread est parfois (toujours ?) plus rapide que la version séquentielle :*

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

- *tout ça est à discuter avec Bo...*