[Telepítés Windowsra 2](#_Toc79529114)

[Telepítés Linuxra 6](#_Toc79529115)

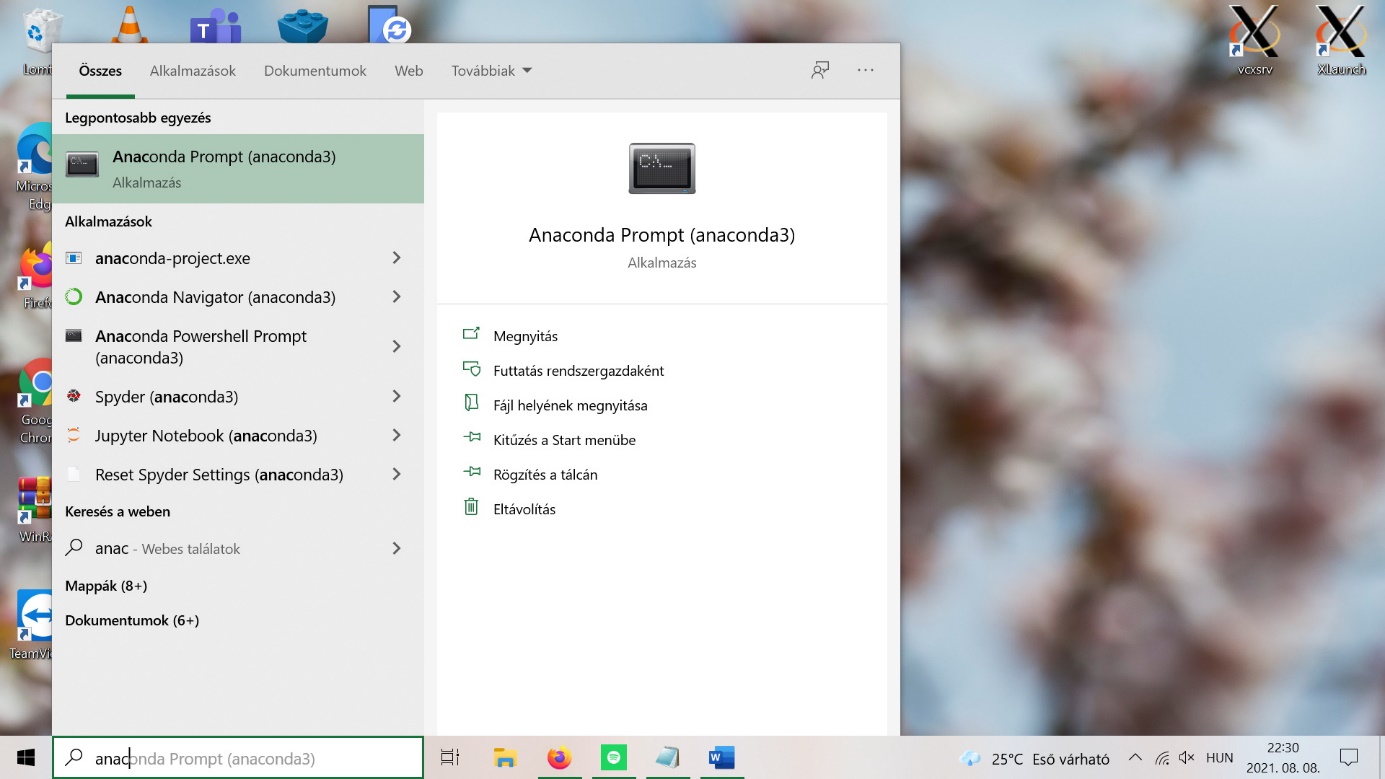
[A Juypter Notebook indítása a kód szerkesztéséhez és az executable elkészítése 7](#_Toc79529116)

[Linux: 7](#_Toc79529117)

[Windows: 9](#_Toc79529118)

Telepítés Windowsra

1. A CrystSimGUI.exe-t másold fel, lehetőleg a C:\Users\saját felhasználód\ mappába
2. Telepítsd az Anaconda programot ( <https://www.anaconda.com/products/individual#windows> ), semmi különleges opció nem kell, minden beállítás jó úgy, ahogy felajánlja
3. Nyisd meg az Anaconda prompt-ot



1. conda create --name myenv python=2.7.17 scipy matplotlib numpy

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

1.: ez kell megjelenjen utána

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

2. y, enter, várni amíg befejezi…

1. amikor befejezte és utána minden újraindításkor: conda activate myenv
2. a program indítása: .\CrystSimGUI.exe (ha máshova tetted: C:\ahol\a\program\van\CrystSimGUI.exe)

Indítás:

1. Anaconda Promptban conda activate myenv
2. .\CrystSimGUI.exe (vagy C:\ahol\a\program\van\CrystSimGUI.exe)
3. 1-2 perc és el is indul

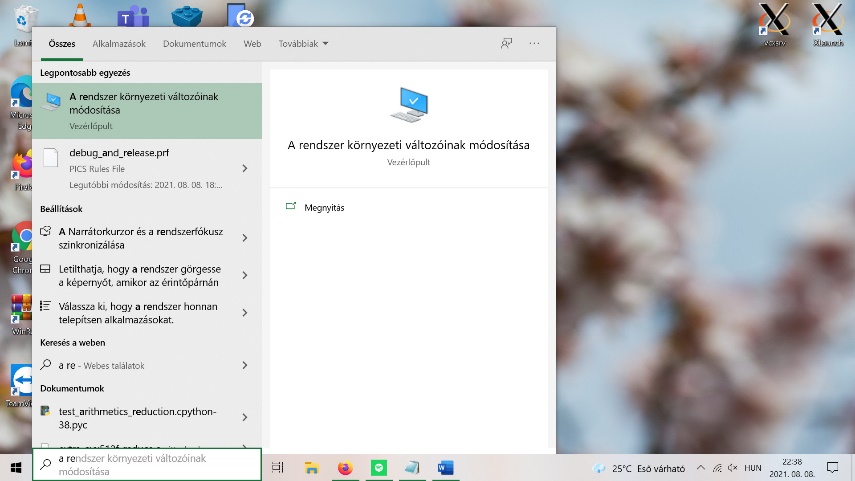
A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

Ismert problémák a program indításánál:

* program nem indul el és ilyen hibát dob: LookupError: unknown encoding: cp65001

Megoldás: A rendszer környezeti változóinak módosítása🡪Környezeti változók🡪Rendszerváltozónál Új…

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírásA képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

itt az új változó neve: PYTHONIOENCODING, értéke: UTF-8

ezután mindent le kell okézni és az anaconda prompt-ot újraindítani, utána működni fog

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

* nem dob semmilyen hibaüzenetet, de nem jelenik meg a grafikus felület:

Megoldás: valószínűleg a PyQt könyvtár nincs telepítve: conda list pyqt ha nem ad ki semmilyen találatot, akkor conda install pyqt

ha van telepítve egy PyQt 5.x.x verzió és így sem indul el a grafikus felület, akkor meg lehet próbálkozni egy PyQt4 telepítésével (lásd itt; nem valószínű, hogy ez a hiba előjön a kész .exe fájl használatakor, de megeshet)

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

* a szimuláció elindítása után azt írja ki, hogy a program nem válaszol

Igen. Miközben a szimuláció fut, a grafikus felület tényleg „lefagy”, nem lehet benne semmit sem csinálni, ezt a Windows úgy érzékeli, hogy a program nem válaszol. Ettől még a számolás fut a háttérben (a konzolon lehet ellenőrizni, hogy megjelennek az iterációs körökhöz tartozó cost értékek), ha befejezte, akkor a grafikus felület is visszaáll.

Telepítés Linuxra

elméletileg a Linux executable használható anélkül is, hogy az Anaconda telepítve lenne (ellentétben a Windows verzióval)

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

3 a futtatható program dependenciái (WSL-Ubuntu 20.04)

ettől függetlenül, ha cd ahol/a/fájl/van és ./CrystSimGUI után nem indul el, akkor érdemes felállítani az anaconda environmentet és abban próbálkozni (lásd [itt](#conda_newenv))

A Juypter Notebook indítása a kód szerkesztéséhez és az executable elkészítése

Linux:

1. telepítsd a gfortran-t (sudo apt install gfortran)
2. telepítsd az Anacondát

curl -O https://repo.anaconda.com/archive/Anaconda3-2019.07-Linux-x86\_64.sh majd

bash Anaconda3-2019.07-Linux-x86\_64.sh

"Do you wish the installer to initialize Anaconda3 by running conda init?" yes

1. készíts egy új környezetet a megfelelő csomagokkal

conda create --name myenv scipy matplotlib numpy jupyter majd conda activate myenv

1. cd ahol/a/fcrystal/van, majd f2py -c -m fcrystal fcrystal.f90. Ez lefordítja az f90 kódot és egy Pythonba importálható csomagot csinál. Meg kell jelenjen egy fcrystal.cpython-37m-x86\_64-linux-gnu.so (vagy hasonló) fájl (ls -lh-val ellenőrizhető, hogy mikori a legutóbbi .so fájl) Ezt a Fortran kód minden módosítása után meg kell csinálni
2. ugyanitt jupyter notebook megnyitja a szerkesztőt egy új böngészőablakban és onnan futtathatóak az .ipynb fájlok

A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

4 a Jupyter Notebook indítása.

Az executeable elkészítése:

1. először az .ipynb notebookot kell lefordítani .py Python scriptre. Ehhez az nbconvert szükséges (pip install nbconvert, ha még nincs telepítve): jupyter nbconvert --to script CrystSimGUI.ipynb
2. ezután, ha a környezetben minden csomag (matplotlib, stb…), amit használ a program, telepítve van, és a mappában, ahol állsz, ott van minden, amit a program beolvas (fcrystal, pcrystal, képfájlok, stb…) a Pyinstaller-el lehet elkészíteni a futtatható programot (pip install pyinstaller)

Ehhez valószínűleg szükség van arra, hogy a PyQt egy régebbi verzióját telepítsd pip install --user PyQt5==5.15.3 -al (ez a Pyinstaller verziójától is függ, de az 5.15.3-as PyQt biztosan működik). pyinstaller --onefile CrystSimGUI.py elkészíti a futtatható programot

!!! fontos: ha a Jupyter Notebookból lefutott a script, akkor ez is működni fog, kivéve: a %matplotlib inline-t mindenhonnan ki kell szedni (és bármi egyebet, ami nem UTF-8as karaktereket írna ki a konzolra, pl grafikonokat) és az egész legelejére szükséges egy from IPython import get\_ipython

1. a kész executable-t egy dist mappába fogja belerakni abban a mappában, ahonnan elindítottad, úgyhogy ./dist/CrystSimGUI -val elindítható a program

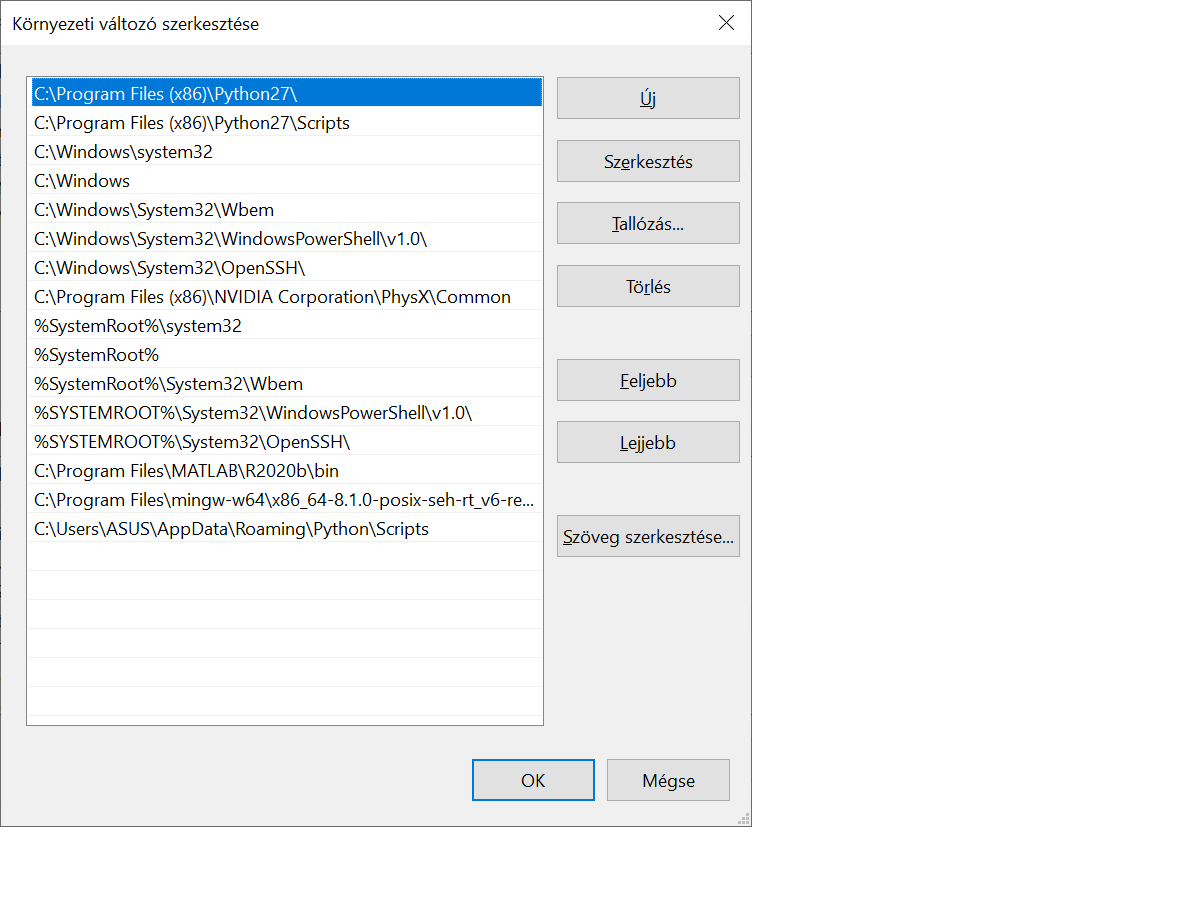
A képen szöveg látható

Automatikusan generált leírás

Windows:

Ezt csak akkor ajánlom, ha már a .exe fájlt szeretnéd elkészíteni. Ha csak a programot szeretnéd módosítani, akkor: <https://docs.microsoft.com/en-us/windows/wsl/install-win10> Fontos: WSL2 legyen, olyan verzió, amiben már elérhető az integrált grafikus felület motor (<https://docs.microsoft.com/en-us/windows/wsl/tutorials/gui-apps> ). Ezzel kapsz egy Linux környezetet, amiben a fentebbi leírás szerint futtatható minden.

1. Telepítsd az Anacondát és hozz létre egy környezetet (ugyanúgy mint a .exe indításához, viszont ehhez még a jupyter csomag is szükséges a többi mellé. Nagyon fontos, hogy 2.7-es Python legyen)
2. Telepítsd a MinGW-t innen: <http://sourceforge.net/projects/mingw-w64/files/Toolchains%20targetting%20Win32/Personal%20Builds/mingw-builds/installer/mingw-w64-install.exe/download> (architecture: x86\_64, minden más opció default)
3. A képen szöveg látható

   Automatikusan generált leírásA környezeti változók között: A PATH-hoz add hozzá: C:\Program Files\mingw-w64\x86\_64-8.1.0-posix-seh-rt\_v6-rev0\mingw64\bin (…vagy ahol nálad van a mingw64 bin mappája) és hozz létre egy C\_INCLUDE\_PATH környezeti változót ami C:\Program Files\mingw-w64\x86\_64-8.1.0-posix-seh-rt\_v6-rev0\mingw64\include

5 Valahogy hasonlóan kell kinézzenek a környezeti változók

1. az fcrystal mappájában állva python C:\Users\ASUS\anaconda3\Scripts\f2py-script.py -c --fcompiler=gnu95 --compiler=mingw32 -m fcrystal fcrystal.f90 (...vagy ahol a te Anacondádban az f2py-script van (lehet, hogy más a neve. f2py, f2py2e pl. lehet) Igen, mingw32, akkor is, ha a 64bites verziót telepítetted, az a biztos. Ha ez nem akar lefutni, hanem „error using mingw compiler in nt environment” jellegű hibával kilép, ami ezt meg kellene oldja: python setup.py build --compiler=gcc, majd az anaconda újraindítása (előfordulhat ilyenkor: hiányzó ftpmirror.py fájl. megoldás: Just add/copy missing file from https://svn.python.org/projects/python/trunk/Tools/scripts/ftpmirror.py to the path C:\path\to\python\Tools\Scripts)
2. most már a jupyter notebook paranccsal elindítható a Jupyter notebook ahonnan lehet szerkeszteni és futtatni az .ipynb fájlt

az .exe fájlhoz:

1. jupyter nbconvert --to script CrystSimGUI.ipynb -tel .py fájlt készíteni
2. Ha van pip, setuptools és wheel: <https://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/#pyqt4> -ről letölteni egy PyQt4-hez tartozó wheel fájlt (nálam 64 bites Anacondához a PyQt4‑4.11.4‑cp27‑cp27m‑win\_amd64.whl volt a jó), majd pip install c:\Users\ASUS\Downloads\PyQt4‑4.11.4‑cp27‑cp27m‑win\_amd64.whl (valószínűleg a saját downloads folderedben lesz). Lehet, hogy a régi PyQt-t akkor ebből a környezetből le kell szedni előtte, mert a 2.7-es Python nem kompatibilis a PyQt5-tel.
3. Ha ez sikerült, akkor telepíthető a Pyinstaller (conda install pyinstaller) és pyinstaller --onefile CrystSimGUI.py meg is alkotja a .exe fájlt, ami a dist mappában lesz. Innen a a conda környezetből indítható úgy, ahogy a telepítési leírásban van.

* Ha nem indul el a jupyter notebook (ezek a WSL-re jellemző hibák, de mindenhol előfordulhat)
  + Ha már fut egy firefox, zárd be
  + ha „Unable to init server: Broadway display type not supported” hibát ad: ellenőrizd, hogy a grafikus elemeket kezelő program kivételként hozzá van-e adva a windows defender tűzfalában
* Ha nem tudja az .ipynb kódból elindítani a grafikus felületet:
  + Valamelyik import hibás (nincs meg a fájl/telepítve a csomag)
  + A kód kommentjeiben olyan karakter van, amit nem tud feldolgozni (ékezetes betű… )