

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発
「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」

CISS フリーソフトウェア

FrontISTR

Ver. 4.3

インストールマニュアル

本ソフトウェアは文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトによる成果物です。本ソフトウェアを無償でご使用になる場合「CISS フリーソフトウェア使用許諾条件」をご了承頂くことが前提となります。営利目的の場合には別途契約の締結が必要です。これらの契約で明示されていない事項に関して、或いは、これらの契約が存在しない状況においては、本ソフトウェアは著作権法など、関係法令により、保護されています。

お問い合わせ先

(契約窓口)

一般財団法人生産技術研究奨励会

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1

(ソフトウェア管理元)

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1

Fax : 03-5452-6662

E-mail : software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

目 次

1. はじめに.....	1
1.1 Ver.4.3 における更新内容.....	1
2. 動作環境.....	1
2.1 必要なソフトウェア.....	1
2.2 動作確認環境.....	4
3. アーカイブファイルの解凍・展開.....	4
4. インストール.....	5
4.1 Makefile.conf の編集.....	5
4.2 setup.sh の実行.....	5
4.3 make の実行.....	7
4.4 make install の実行.....	7
4.5 Windows 環境におけるインストール.....	7
付録 1 Makefile.conf の変数一覧.....	8
付録 2 Makefile.conf の設定例.....	14
付録 3 京コンピュータおよび富士通 FX10 における注意.....	15

1. はじめに

本マニュアルでは、大規模有限要素法構造解析プログラム **FrontISTR** のインストール方法を説明します。

1.1 Ver.4.3 における更新内容

- METIS Ver.5 系列に対応しました。
- リファイン使用時の **Makefile.conf** の指定方法が変更されました。(付録 1 **Makefile.conf** の変数一覧 (8)および(10) 参照)
- 京コンピュータおよび **FX10** 向けにチューニングされたコードが利用可能です。(付録 3 京コンピュータおよび富士通 **FX10** における注意 参照)

2. 動作環境

2.1 必要なソフトウェア

本ソフトウェアのインストールに際して、インストールする環境に以下のソフトウェアがインストールされている必要があります。なお、これらのソフトウェアのインストールについては、各ソフトウェアのインストールマニュアルをご参照ください。

(1) C、C++、Fortran90 コンパイラー

本ソフトウェアのインストールには、C、C++および **Fortran90** コンパイラーが必要です。

(2) Boost ライブラリ

本ソフトウェアの C++ソースコードのコンパイルには、**Boost** ライブラリが必要です。インストールする環境に **Boost** ライブラリがインストールされていない場合、下記の **WEB** サイトからダウンロードすることができます。

<http://www.boost.org/>

(3) Intel MKL (Math Kernel Library)

本ソフトウェアの接触解析モジュールでは、**Intel MKL** を利用しています。インストールする環境に **Intel MKL** がインストールされていない場合、接触解析の一部の機能が利用できません。

(4) MPI

本ソフトウェアは **MPI** により並列化されているため、**MPI-1** 規格に準拠した **MPI** ライブラリが必要となります。**MPI** を実装したフリーで利用できるライブラリの代表的なものには、**MPICH** や **OpenMPI** などがあります。**MPICH** は下記の **WEB** サイトからダウンロードすることができます。

<http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpich2>

(5) METIS

本ソフトウェアの領域分割ユーティリティは、METIS のライブラリを使用することで pMETIS、kMETIS による領域分割が可能です。これらの領域分割機能を利用する場合には METIS が必要となります。なお、METIS のバージョンは、最新の Ver.5 系列と Ver.4 系列が利用可能ですが、後述の MUMPS を利用する場合で、MUMPS のオーダリングに METIS を利用する場合には、MUMPS が METIS の Ver.4 系列のみに対応しているため、Ver.4 系列の METIS をお使いください。また、METIS がインストールされていない環境でも、RCB アルゴリズムによる領域分割は可能です。METIS は下記の WEB サイトからダウンロードすることができます。

<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis/index.html>

(6) ParMETIS

本ソフトウェアの並列領域分割ユーティリティは、ParMETIS ライブラリを使用する予定です。現時点では ParMETIS は不要です。

(7) HEC-MW

本ソフトウェアは、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトおよび「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトで開発された HEC-MW ライブラリを利用しています。この HEC-MW は FrontISTR のアーカイブに同梱されており、本ソフトウェアのインストール時に自動的にコンパイルされるため、別途インストールする必要はありません。

(8) REVOCAP_Refiner

本ソフトウェアは、「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトで開発されたメッシュ細分化ツール REVOCAP_Refiner に対応しています。メッシュ細分化機能を利用する場合には REVOCAP_Refiner が必要となります。REVOCAP_Refiner は下記の WEB サイトからダウンロードすることができます。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/index.php>

(9) REVOCAP_Coupler

本ソフトウェアは、「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトで開発された連成解析ツール REVOCAP_Coupler に対応しています。連成解析機能を利用する場合には REVOCAP_Coupler が必要となります。REVOCAP_Coupler は下記の WEB サイトからダウンロードすることができます。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/index.php>

(10) MUMPS

本ソフトウェアは、パブリックドメインの並列直接法ソルバー MUMPS (a MUltifrontal Massively Parallel sparse direct Solver) に対応しています。MUMPS は、Esprit IV European

project PARASOL (1996-1999)で開発されたソフトウェアをベースとし、CERFACS, CNRS, ENS Lyon, INPT(ENSEEIH)-IRIT, INRIA, および University of Bordeaux の各機関により研究開発されたものです。MUMPS は下記の WEB サイトからダウンロードすることができます。

<http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/>

2.2 動作確認環境

本ソフトウェアは、下記の環境において動作確認を行っています。ただし、これ以外の環境においても、前述のインストールに必要なソフトウェアが導入されている場合、正常に動作すると思われる。

表 1 動作確認環境

環境(OS)	コンパイラー	並列化環境
K computer	Fujitsu Compiler	Fujitsu MPI
EARTH SIMULATOR (ES2)	NEC Compiler	NEC MPI
Intel Xeon Cluster CentOS 5	Intel Compiler	Intel MPI
AMD Opteron Cluster RedHat Enterprise Linux 5	Intel Compiler	OpenMPI
Intel Itanium Cluster SUSE Linux Enterprise 10	Intel Compiler	Intel MPI
AMD Opteron Cluster CentOS 4.4	Intel Compiler	MPICH 1.2.7p1
PC Windows XP, Windows 7	gnu Compiler	MPICH2-1.3.2p1
PC Windows XP x64	Intel Compiler	Intel MPI

3. アーカイブファイルの解凍・展開

アーカイブファイルは、tar によりアーカイブ化され、gzip により圧縮されています。このアーカイブファイルを、以下のコマンドで解凍・展開します。(行頭の\$はプロンプトを示します)

```
$ tar xzf FrontISTR_V43.tar.gz
```

本ソフトウェアをインストールする環境の tar コマンドが z オプションをサポートしていない場合は、以下のコマンドで解凍・展開します。

```
$ gzip -dc FrontISTR_V43.tar.gz | tar xf -
```

アーカイブファイルを解凍・展開すると、アーカイブを展開したディレクトリに「FrontISTR」というディレクトリが作成されます。(以下、このディレクトリを\${FSTRBUILDDIR}と記します)

4. インストール

以下の手順で、本ソフトウェアをインストールします。

4.1 Makefile.conf の編集

`#{FSTRBUILDDIR}`にある `Makefile.conf.org` を、本ソフトウェアをインストールする計算機環境に合わせて編集し、`Makefile.conf` を作成します。定義できる変数は数多くありますが、ほとんどの変数については既定値をそのまま利用できます。多くの環境では、下記の変数以外を変更する必要はないと思われます。

<code>MPIDIR</code>	: MPI がインストールされているディレクトリ
<code>PREFIX</code>	: 本ソフトウェアの実行モジュールをインストールするディレクトリ
<code>METISDIR</code>	: METIS がインストールされているディレクトリ
<code>PARMETISDIR</code>	: ParMETIS がインストールされているディレクトリ
<code>REFINERDIR</code>	: REVOCAP_Refiner がインストールされているディレクトリ
<code>REVOCAPDIR</code>	: REVOCAP_Coupler がインストールされているディレクトリ
<code>MUMPSDIR</code>	: MUMPS がインストールされているディレクトリ
<code>CC</code>	: C コンパイラ起動コマンド
<code>CPP</code>	: C++コンパイラ起動コマンド
<code>F90</code>	: Fortran90 コンパイラ起動コマンド

すべての変数の詳細については、「付録 1 Makefile.conf の変数一覧」をご参照ください。また、「付録 2 Makefile.conf の設定例」に `Makefile.conf` の一例を記載します。

4.2 setup.sh の実行

`#{FSTRBUILDDIR}`にて、シェルスクリプト `setup.sh` を以下のように実行し、`Makefile` を作成します。

```
$ ./setup.sh
```

並列計算用のライブラリを生成する場合などは、下記のオプションを指定して `setup.sh` を実行してください。

表 2 setup.sh 実行時オプション

オプション	意味	備考
-g または --debug	デバック用ライブラリの生成	
-p または --parallel	並列実行用ライブラリの生成	
--with-tools	パーティショナーなどのツール生成	
--with-refiner	REVOCAP_Refiner の組み込み	
--with-revocap	REVOCAP_Coupler の組み込み	
--with-metis	METIS の使用	
--with-parmetis	ParMETIS の使用	現時点では無効
--with-mkl	Intel MKL の使用	
--with-mumps	MUMPS の使用	
--with-paracon	並列接触解析用実行モジュールの生成	

以下では、setup.sh 実行の例を示します。

(1) 並列処理用にコンパイルする場合

MPI がインストールされている並列実行環境で本ソフトウェアを使用する場合、以下のように -p または --parallel オプションを付けて setup.sh を起動します。

```
$ ./setup.sh -p
```

(2) パーティショナーなどのツールを生成する場合

パーティショナー (RCB) やビジュアライザーなどのプリ・ポスト処理用ツールが必要な場合、以下のように -with-tools オプションを付けて setup.sh を実行すると、各種ツールが生成されます。

```
$ ./setup.sh -p --with-tools
```

(3) METIS を使用する場合

METIS がインストールされている環境では、さらに以下のように --with-metis オプションを付けて setup.sh を実行すると、パーティショナーにおいて METIS の使用が可能となります。

```
$ ./setup.sh -p --with-tools --with-metis
```

(4) 接触解析用にコンパイルする場合

接触解析用にコンパイルする場合、並列なしの場合と並列ありの場合の 2 通りの方法があります。並列なしの場合は、Intel MKL または MUMPS の利用が必要となります。

```
$ ./setup.sh --with-mkl または、 $ ./setup.sh --with-mumps
```

並列ありで接触解析を行う場合は、-p、--with-metis オプションも必要となります。また並列ありの場合は Intl MKL は使えません。

```
$ ./setup.sh -p --with-metis --with_mumps --with_paracon
```

4.3 make の実行

`$(FSTRBUILDDIR)`にて、以下のように `make` を実行します。

```
$ make 2>&1 | tee make.log
```

`make` の実行には、計算機環境によっては数十分かかる場合があります。実行中にエラーが生じた場合は、`Makefile.conf` の設定の見直し等を行なってください。

4.4 make install の実行

`make` の実行が正常に終了した後、`Makefile.conf` で指定したディレクトリに本ソフトウェアをインストールするために、以下のように `make install` を実行します。

```
$ make install
```

4.5 Windows 環境におけるインストール

Windows 環境では、以下の UNIX ライク環境を用いることにより、上記の手順でインストールが可能です。

逐次処理版 : MinGW

並列処理版 : Cygwin

付録 1 Makefile.conf の変数一覧

(1) MPI に関する設定

MPIDIR

説明：MPI がインストールされているディレクトリのパスを指定する。MPI 対応コンパイラーが自動参照している場合は、以下も含めて設定不要である。

既定値：なし

MPIBINDIR

説明：MPI の実行ファイル群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：なし

MPILIBDIR

説明：MPI のライブラリ群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：.

MPIINCDIR

説明：MPI のヘッダーファイル群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：.

MPILIBS

説明：C および Fortran90 のオブジェクトファイルにリンクさせる MPI ライブラリを指定する。

既定値：なし

(2) インストールディレクトリに関する設定

PREFIX

説明：本ソフトウェアをインストールするディレクトリのパスを指定する。

既定値：\$(HOME)/FrontISTR

BINDIR

説明：本ソフトウェアの実行ファイル群をインストールするディレクトリのパスを指定する。通常は、この変数の値を変更する必要はない。

既定値：\$(PREFIX)/bin

LIBDIR

説明：本ソフトウェアのライブラリ群をインストールするディレクトリのパスを指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(PREFIX)/lib

INCLUDEDIR

説明：本ソフトウェアのヘッダーファイル群をインストールするディレクトリのパスを指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(PREFIX)/include

(3) METIS に関する設定

METISDIR

説明：METIS がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：\$(HOME)/metis-4.0

METISLIBDIR

説明：METIS のライブラリ (libmetis.a) がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(METISDIR)

METISINCDIR

説明：METIS のヘッダーファイル群 (metis.h など) がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(METISDIR)/Lib

(4) ParMETIS に関する設定

PARMETISDIR

説明：ParMETIS がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：\$(HOME)/ParMetis-3.1

PARMETISLIBDIR

説明：ParMETIS のライブラリ (libparmetis.a) がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(PARMETISDIR)

PAEMETISINCDIR

説明：ParMETIS のヘッダーファイル群 (parmetis.h など) がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(PARMETISDIR)/ParMETISLib

(5) REVOCAP_Refiner に関する設定

REFINERDIR

説明：REVOCAP_Refiner がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：\$(HOME)/ REVOCAP_Refiner

REFINERINCDIR

説明：REVOCAP_Refiner のヘッダーファイル群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(REFINERDIR)/Refiner

REFINERLIBDIR

説明：REVOCAP_Refiner のライブラリ群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(REFINERDIR)/lib

(6) REVOCAP_Coupler に関する設定

REVOCAPDIR

説明：REVOCAP_Coupler がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：\$(HOME)/ REVOCAP_Coupler

REVOCAPINCDIR

説明：REVOCAP_Coupler のヘッダーファイル群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(REVOCAPDIR)/librcap

REVOCAPLIBDIR

説明：REVOCAP_Coupler のライブラリ群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(REVOCAPDIR)/librcap

(7)MUMPS に関する設定

MUMPSDIR

説明：MUMPS がインストールされているディレクトリのパスを指定する。

既定値：\$(HOME)/ MUMPS

MUMPSINCDIR

説明：MUMPS のヘッダーファイル群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(MUMPSDIR)/include

MUMPSLIBDIR

説明：MUMPS のライブラリ群がインストールされているディレクトリのパスを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：\$(MUMPSDIR)/lib

(8) C コンパイラーに関する設定

CC

説明：C コンパイラーの起動コマンドを指定する。

既定値：mpicc

CFLAGS

説明：C コンパイラーに付与するオプションを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：なし

LDFLAGS

説明：C リンカーに付与するオプションを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。ただし、REVOCAP_Refiner を使用する場合で、C プログラムのリンクに C コンパイラーを用いる場合には、C++ の標準ライブラリ (-lstdc++ など) を指定する必要がある。

既定値：-lm

OPTFLAGS

説明：C コンパイラーに付与する最適化オプションなどを指定する。

既定値：-O3

CLINKER

説明：C プログラムのリンク時に用いるコマンドを指定する。REVOCAP_Refiner を使用する場合で、C プログラムのリンクに C++ コンパイラーを用いる必要がある場合などに指定する。

既定値：[CC に指定した値]

(9) C++ コンパイラーに関する設定

CC

説明：C コンパイラーの起動コマンドを指定する。

既定値：mpic++

CFLAGS

説明：C コンパイラーに付与するオプションを指定する。基本的には、この変数の値を

既定値から変更する必要はないが、Boost ライブラリが C++コンパイラから自動参照されない場合、-I オプションにより、インクルードファイルが格納されているディレクトリを指定する。

既定値：-DMPICH_IGNORE_CXX_SEEK 注：Intel コンパイラでは必須

LDLFLAGS

説明：C リンカーに付与するオプションを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：なし

OPTFLAGS

説明：C コンパイラに付与する最適化オプションなどを指定する。

既定値：-O3

(10) Fortran90 コンパイラに関する設定

F90

説明：Fortran90 コンパイラの起動コマンドを指定する。

既定値：mpif90

F90FLAGS

説明：Fortran90 コンパイラに付与するオプションを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：なし

F90LDLFLAGS

説明：Fortran90 リンカーに付与するオプションを指定する。基本的には、この変数の値を既定値から変更する必要はないが、Intel MKL を利用する場合には、そのリンクオプションを指定する。また、REVOCAP_Refiner を使用する場合で、Fortran90 プログラムのリンクに Fortran90 コンパイラを用いる場合には、C++の標準ライブラリ (-lstdc++ など) を指定する必要がある。

既定値：なし

F90OPTFLAGS

説明：Fortran90 コンパイラに付与する最適化オプションなどを指定する。

既定値：-O2

F90LINKER

説明：Fortran90 プログラムのリンク時に用いるコマンドを指定する。

REVOCAP_Refiner を使用する場合で、Fortran90 プログラムのリンクに C++コンパイ

ラーを用いる必要がある場合などに指定する。(たとえば、京コンピュータでは“mpiFCCpx --linkfortran”を指定する。)

既定値：[F90 に指定した値]

(11) UNIX コマンドに関する設定

MAKE

説明：make の起動コマンドを指定する。オプションが必要な場合は同時に指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：make

AR

説明：アーカイブの作成、変更などを行なうコマンドを指定する。オプションが必要な場合は同時に指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：ar ruv

CP

説明：ファイルやディレクトリをコピーするコマンドを指定する。オプションが必要な場合は同時に指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：cp -f

RM

説明：ファイルやディレクトリを削除するコマンドを指定する。オプションが必要な場合は同時に指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：rm -f

MKDIR

説明：ディレクトリを作成するコマンドを指定する。オプションが必要な場合は同時に指定する。通常は、この変数の値を既定値から変更する必要はない。

既定値：mkdir -p

付録 2 Makefile.conf の設定例

```
# MPI
MPIDIR          =
MPIBINDIR       =
MPILIBDIR       =
MPIINC_DIR      =
MPI_LIBS        =

# for install option only
PREFIX          = $(HOME)/FrontISTR
BINDIR          = $(PREFIX)/bin
LIBDIR          = $(PREFIX)/lib
INCLUDEDIR      = $(PREFIX)/include

# Metis
METISDIR        = $(HOME)/Metis-4.0
METISLIBDIR     = $(METISDIR)
METISINCDIR     = $(METISDIR)/Lib

# ParMetis
PARMETISDIR     = $(HOME)/ParMetis-3.1
PARMETISLIBDIR  = $(PARMETISDIR)
PARMETISINCDIR = $(PARMETISDIR)/ParMETISLib

# Refiner
REFINERDIR      = $(HOME)/REVOCAP_Refiner-1.1.0
REFINERINCDIR   = $(REFINERDIR)/Refiner
REFINERLIBDIR   = $(REFINERDIR)/lib/x86_64-linux

# Coupler
REVOCAPDIR      = $(HOME)/REVOCAP_Coupler-1.6.2
REVOCAPINCDIR   = $(REVOCAPDIR)/librcap
REVOCAPLIBDIR   = $(REVOCAPDIR)/librcap

# MUMPS
MUMPSDIR        = $(HOME)/MUMPS_4.10.0
MUMPSINCDIR     = $(MUMPSDIR)/include
MUMPSLIBDIR     = $(MUMPSDIR)/lib

# C compiler settings
CC              = mpiicc
CFLAGS         =
LDFLAGS        = -lm
OPTFLAGS       = -O3
CLINKER        = mpiicc

# C++ compiler settings
CPP            = mpiicpc
CPPFLAGS       = -DMPICH_IGNORE_CXX_SEEK -I$(HOME)/include
CPPLDFLAGS    =
CPPOPTFLAGS    = -O3

# Fortran compiler settings
F90            = mpiifort
F90FLAGS       =
F90LDFLAGS     = -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5
F90OPTFLAGS    = -O2
F90LINKER      = mpiifort

MAKE           = make
AR             = ar ruv
CP             = cp -f
RM            = rm -f
MKDIR         = mkdir -p
```

付録3 京コンピュータおよび富士通 FX10 における注意

本バージョンでは、京コンピュータおよび富士通 FX10 向けのチューニングが行われていますが、これに伴い、利用する環境に応じてソースコードの一部を変更する必要があります。

変更するファイル：

`hecmw1/src/solver/solver_33/hecmw_tuning_fx.f90`

変更内容：

ファイル内で定義されているパラメータ変数 **TotalSectorCacheSize** を

- ・ 京コンピュータでは **12**
- ・ FX10 では **24**

に設定する。

なお、初期状態では京コンピュータ向けの設定となっています。