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」

MIT ライセンス フリーソフトウェア

FrontISTR

Ver. 4.5

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または営利目的でご使用になる場合「MIT ライセンス」をご了承頂くことが前提となります。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

FrontISTR 研究会

(東京大学大学院 新領域創成科学研究科 人間環境学専攻 奥田研究室)

〒277-8563 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

Tel/Fax: 04-7136-4604

E-mail: fstr_seminar@multi.k.u-tokyo.ac.jp

目 次

1. Id	tじめに	
1.1		
1.2	Ver.4.3 における主な更新内容	
2. 動	h作環境	
2.1	····································	
2.2	動作確認環境	
3. ア	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	
	ンストール	
4.1	Makefile.conf の編集	
4.2	setup.sh の実行	
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	
付録 1		
付録 2		
付録 3	・ 京コンピュータおよび富士通 FX10 における注意	16

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.4.4 における主な更新内容

- 代数マルチグリッド (AMG) 法にもとづく前処理ライブラリ ML に対応しました。(試験的)
- CG 法および GMRES 法を用いた前処理適用後行列の条件数推定機能が実装されました。本機能は内部で Lapack のルーチンを利用しています。

1.2 Ver.4.3 における主な更新内容

- METIS Ver.5 系列に対応しました。
- リファイナ使用時の 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(ENSEEIHT)-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/

(11) ML

本ソフトウェアは、代数マルチグリッド法に基づく前処理ライブラリ ML (Multi-Level Preconditioner) に対応しています。ML は、Sandia National Laboratories で進められている Trilinos プロジェクトで開発されているパッケージのひとつです。ML 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://trilinos.org/packages/ml/

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 思われます。

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	Intel Compiler	Intel MDI	
CentOS 5		Intel MPI	
AMD Opteron Cluster	Intel Commiles	OnsuMDI	
RedHat Enterprise Linux 5	Intel Compiler	OpenMPI 	
Intel Itanium Cluster	Intal Compiler	Intel MPI	
SUSE Linux Enterprise 10	Intel Compiler		
AMD Opteron Cluster	Intel Compiler	MDIOU 1 0 7-1	
CentOS 4.4	Intel Compiler	MPICH 1.2.7p1	
PC	man Camanilan	MDICHO 1 2 2-1	
Windows XP, Windows 7	gnu Compiler	MPICH2-1.3.2p1	
PC	Intal Commiles	Intel MPI	
Windows XP x64	Intel Compiler	Inter MP1	

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_V44.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_V44.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。

MPIDIR: MPI がインストールされているディレクトリ

PREFIX : 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

METISDIR : METIS がインストールされているディレクトリ

PARMETISDIR: ParMETIS がインストールされているディレクトリ

REFINERDIR: REVOCAP_Refiner がインストールされているディレクトリ REVOCAPDIR: REVOCAP Coupler がインストールされているディレクトリ

MUMPSDIR: MUMPS がインストールされているディレクトリ

CC : C コンパイラー起動コマンド

CPP : C++コンパイラー起動コマンド

F90 : Fortran90 コンパイラー起動コマンド

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	
with-lapack	Lapack ルーチンの使用	条件数推定機能を利用する場
		合に必要
with-ml	ML の使用	

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。

(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。

既定值:.

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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(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。

既定值: \$(MUMPSDIR)/lib

(8)ML に関する設定

MLDIR

説明:ML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。

既定值: \$(HOME)/ trilinos/11.8.1/ml

MLINCDIR

説明: ML 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。

既定值: \$(MLDIR)/include

MLLIBDIR

説明: ML 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。

既定值: \$(MLDIR)/lib

(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。

既定值: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

既定值:-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。

既定值: -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]

(10) C++コンパイラーに関する設定

CPP

説明: C++コンパイラーの起動コマンドを指定する。

既定值:mpic++

CPPFLAGS

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++コンパイラー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 コンパイラーでは必須

CPPLDFLAGS

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

CPPOPTFLAGS

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。

既定值: -O3

(11) Fortran90 コンパイラーに関する設定

F90

説明:Fortran90 コンパイラーの起動コマンドを指定する。

既定值:mpif90

F90FLAGS

説明: Fortran90 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

F90LDFLAGS

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:なし

F90OPTFLAGS

説明:Fortran90 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。

既定值: -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]

(12) 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。

既定值: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。

既定值: 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。

既定值: 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。

既定值:rm-f

MKDIR

設定: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。

既定值:mkdir-p

付録 2 Makefile.conf の設定例

```
# MPI
MPIDIR
MPIBINDIR
MPILIBDIR
MPIINCDIR
MPILIBS
# for install option only
           = $ (HOME) /FrontISTR
= $ (PREFIX) /bin
PREFIX
BINDIR
                   = $(PREFIX)/lib
LIBDIR
INCLUDEDIR
                   = $(PREFIX)/include
# Metis
METISDIR
                   = $(HOME)/Metis-4.0
= $(METISDIR)
METISLIBDIR
                   = $ (METISDIR) /Lib
METISINCDIR
# ParMetis
PARMETISDIR = $(HOME)/ParMetis-3.1
PARMETISLIBDIR = $(PARMETISDIR)
PARMETISINCDIR = $(PARMETISDIR)/ParMETISLib
# Refiner
REFINERDIR = $(HOME)/REVOCAP_Refiner-1.1.0

REFINERINCDIR = $(REFINERDIR)/Refiner

REFINERLIBDIR = $(REFINERDIR)/Iib/x86_64-Iinux
# Coupler
REVOCAPDIR
REVOCAPDIR = $ (HOME) / REVOCAP_Coupler-1.6.2
REVOCAPINCDIR = $ (REVOCAPDIR) / librcap
REVOCAPLIBDIR = $ (REVOCAPDIR) / librcap
# MUMPS
                = $(HOME)/MUMPS_4.10.0
= $(MUMPSDIR)/include
MUMPSDIR
MUMPSINCDIR
MUMPSLIBDIR
                   = $(MUMPSDIR)/lib
# ML
MLDIR
                   = $(HOME)/trilinos/11.8.1/ml
= $(MLDIR)/include
MLINCDIR
MLLIBDIR
                    = \$(MLDIR)/lib
# C compiler settings
ĊС
                   = mpiicc
CFLAGS
LDFLAGS
                   = -Im
OPTFLAGS
                   = -03
CLINKER
                    = mpiicc
# C++ compiler settings
CPP
              = mpiicpc
CPPFLAGS
                   = -DMPICH_IGNORE_CXX_SEEK -I$ (HOME) / include
CPPLDFLAGS
CPPOPTFLAGS
                 = -03
# Fortran compiler settings
F90
                   = mpiifort
F90FLAGS
F90LDFLAGS
                  = -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5
F900PTFLAGS
                   = -02
F90LINKER
                    = mpiifort
```

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ーメータ変数 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。