## 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. 4.1

# 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) (財)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

FrontIS	5TR	1
Ver. 4.1		1
1. はし	<b>ンめに</b>	1
2. 動作	乍環境	1
2.1	必要なソフトウェア	1
2.2	動作確認環境	2
3. アー	- カイブファイルの解凍・展開	3
4. イン	ノストール	3
4.1	Makefile.conf の編集	3
4.2	setup.sh の実行	4
4.3	make の実行	5
4.4	make install の実行	5
4.5	Windows 環境におけるインストール	5
付録 1	Makefile.conf の変数一覧	6
付録 2	Makefile.conf の設定例	1

## 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。

## 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

#### 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。

環境(OS)	コンパイラー	並列化環境	
Intel Xeon Supercomputer	Intel Compiler	Intel Compiler Intel MPI	Intel MPI
CentOS 5		inter in i	
AMD Opteron Supercomputer	Intal Compiler	OpenMDI	
RedHat Enterprise Linux 5	Intel Compiler	OpenMPI 	
Intel Itanium Cluster	Intal Compiler	Intel MPI	
SUSE Linux Enterprise 10	Intel Compiler	Inter MPI	

表 1 動作確認環境

AMD Opteron Cluster	Intel Compiler	MPICH 1.2.7p1
CentOS 4.4		
PC	gnu Compiler	MPICH2-1.3.2p1
Windows XP		
PC	Intal Campilar	Intel MPI
Windows XP x64	Intel Compiler	Inter 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\_V4.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-V4.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

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。

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	

表 2 setup. sh 実行時オプション

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。

## (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

## 4.3 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。

既定值: \$(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) 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**

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

#### (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。

既定值: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

## **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。

既定値:なし

## **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

## (9) 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。

既定値:なし

#### F900PTFLAGS

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

## (10) 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
MPÏDIR
MPIBINDIR
MPILIBDIR
MPIINCDIR
                   = .
MPILIBS
# for install option only
            = $(HOME)/FrontISTR
= $(PREFIX)/bin
= $(PREFIX)/lib
R = $(PREFIX)/include
PREFIX
BINDIR
LIBDIR
INCLUDEDIR
# Metis
METISDIR
METISLIBDIR
                   = $(HOME)/Metis-4.0
= $(METISDIR)
= $(METISDIR)/Lib
METISINCDIR
# ParMetis
PARMETISDIR
PARMETISDIR = $(HOME)/ParMetis-3.1
PARMETISLIBDIR = $(PARMETISDIR)
PARMETISINCDIR = $(PARMETISDIR)/ParMETISLib
# Refiner
REFINERDIR = $(HOME)/REVOCAP_Refiner-0.4.3
REFINERINCDIR = $(REFINERDIR)/Refiner
REFINERLIBDIR = $(REFINERDIR)/Iib/x86_64-Iinux
# Coupler
REVOCAPDIR = $ (HOME) / REVOCAP_Coupler-1.3
REVOCAPINCDIR = $ (REVOCAPDIR) / librcap
REVOCAPLIBDIR = $ (REVOCAPDIR) / librcap
# C compiler settings
CC
                  = mpiicc
CFLAGS
LDFLAGS
                   = -Im
                   = -03
OPTFLAGS
# C++ compiler settings
ĊΡΡ
                   = 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
MAKE
                   = make
AR
                   = ar ruv
CP
                   = cp -f
RM
                   = rm - f
MKDIR
                   = mkdir -p
```