FrontISTR インストールマニュアル

FrontISTR Commons

2019年7月30日

目次

Ĺ	Fron	ntISTR インストールマニュアル	2
	1.1 マニ	ュアルリスト	3
	1.2 本マ	ニュアルの記載内容	3
	1.3 動作	環境	3
	1.3.1	必要なソフトウェア	3
	1.3.2	動作確認環境	6
	1.4 アー	カイブファイルの解凍・展開	7
	1.5 イン	ストール	7
	1.5.1	サポートされているインストール方法	7
	1.6 cma	ke でのインストール	ę
	1.6.1	準備	ć
	1.6.2	構築	ć
	1.6.3	make install の実行	ć
	1.6.4	cmake のオプション	1(
	1.7 簡易	テスト機能について	11
	1.8 ソー	スコードのドキュメンテーションについて	12
	1.9 デバ	「ッグを有効にする	12
	1.10 Mak	xefile.conf でのインストール	12
	1.10.1	Makefile.conf の編集	12
	1.10.2	setup.sh の実行	13
	1.10.3	make の実行	14
	1.10.4	make install の実行	15
	1.10.5	Windows 環境へのインストール	15
	1.11 付録	E	15
	1.11.1	Makefile.conf の変数一覧	15
	1.11.2	Makefile.conf の設定例	19
	1.11.3	京コンピュータおよび富士通 FX10 における注意	20
	1.12 付録	E	21
	1.12.1	Makefile.conf の変数一覧	21
	1.12.2	Makefile.conf の設定例	24
	1 19 3	京コンピュータおよび富士通 FX10 における注意	26

1.13 参え	考 CentOS7.6 へのインストール手順例 (cmake)	26
1.13.1	準備	26
1.13.2	ライブラリのインストール	27
1.13.3	FrontISTR のコンパイル	30
1.14 参表	考 CentOS7.6 へのインストール手順例 (Makefile.conf)	32
1.14.1	準備	33
1.14.2	ライブラリのインストール	33
1.14.3	FrontISTR のコンパイル	37
1.15 参表	考 Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (cmake)	41
1.15.1	準備	41
1.15.2	ライブラリのインストール	41
1.15.3	FrontISTR のコンパイル	45
1.16 参表	考 Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (Makefile.conf)	47
1.16.1	準備	47
1.16.2	ライブラリのインストール	47
1.16.3	FrontISTR のコンパイル	51
1.17 参表	考 Windows10 へのインストール手順例 (Makefile.conf)	55
1.17.1	準備	55
1.17.2	ライブラリのインストール	56
1 17 9	Enough ICTD (D 7 N/2 / 1).	<i>C</i> 1

1 FrontISTR 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をシーズとして、継続的に開発されている並列有限要素解析プログラムです。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。



項目	説明
ソフトウェア名称	FrontISTR
バージョン	5.0
ライセンス形態	MIT License
問い合わせ先	一般社団法人 FrontISTR Commons 東京都文京区弥生二丁目 11 番 16 号 (東京大学大
	学院工学系研究科総合研究機構内)E-mail:support@frontistr.com

1.1 マニュアルリスト

- イントロダクション
- インストールマニュアル
- 理論マニュアル
- 解析マニュアル
- チュートリアル

本マニュアルでは、大規模並列 FEM 非線形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。

1.2 本マニュアルの記載内容

- PDF
- 動作環境
- アーカイブの解凍・展開
- インストールの概要
- cmake でのインストール
 - CentOS7.6 へのインストール手順例 (cmake)
 - Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (cmake)
- Makefile.conf でのインストール
 - Makefile.conf での設定項目
 - CentOS7.6 へのインストール手順例 (Makefile.conf)
 - Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (Makefile.conf)
 - Windows10 へのインストール手順例 (Makefile.conf)

1.3 動作環境

1.3.1 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。

1.3.1.1 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。

1.3.1.2 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。

OpenMPI は下記の WEB サイトから

https://www.open-mpi.org/

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.mpich.org/

1.3.1.3 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。

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/metis/metis/overview

1.3.1.4 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。

ParMETIS 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/metis/parmetis/overview

1.3.1.5 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。

1.3.1.6 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 の最新版は下記の WEB サイトからダウンロードすることができます。

http://www.multi.k.u-tokyo.ac.jp/FrontISTR/

1.3.1.7 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

1.3.1.8 LAPACK/BLAS

本ソフトウェアは、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ています。本機能を利用する場合には LAPACK が必要になります。また、LAPACK を利用するには BLAS が必要となります。

LAPACK のリファレンス実装は下記 WEB サイトからダウンロードすることができます。

http://www.netlib.org/lapack/

BLAS のリファレンス実装は下記 WEB サイトからダウンロードすることができます。

http://www.netlib.org/blas/

高速なオープンソースの実装としては OpenBLAS などが利用できます。OpenBLAS は下記 WEB サイトからダウンロードすることができます。

http://www.openblas.net/

なお、後述する Intel MKL がインストールされている場合、改めてインストールする必要はありません。

1.3.1.9 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://mumps.enseeiht.fr/

1.3.1.10 ScaLAPACK

本ソフトウェアで直接利用していませんが、上述の MUMPS は ScaLAPACK を利用します。ScaLAPACK 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.netlib.org/scalapack/

なお、後述する Intel MKL がインストールされ ScaLAPACK ライブラリがインストールされている場合、改めてインストールする必要はありません。

1.3.1.11 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。

https://trilinos.org/

1.3.1.12 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。

1.3.2 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。

1.3.2.1 動作確認環境

システム	オペレーティングシステム	CPU	コンパイラ	並列化環境
K computer	Linux	SPARC64 VIIIfx	Fujitsu compiler	Fujitsu MPI
PRIMEHPC	Linux	SPARC V9 $+$	Fujitsu compiler	Fujitsu MPI
FX100		HPC-ACE2		
EARTH SIMU-	SUPER UX	SX-ACE	NEC compiler	NEC MPI
LATOR(ES3)		6		

システム	オペレーティングシステム	CPU	コンパイラ	並列化環境
UV2000	Linux (SUSE Linux	Intel Xeon	Intel compiler	SGI MPT
	Enterprise 10)			
PC cluster	Linux (CentOS-7)	Intel Xeon	Intel compiler	Intel MPI
PC cluster	Linux (RedHat Enterprise	Intel Xeon	Intel compiler	OpenMPI
	Linux 7)			
Desktop PC	Linux (ubuntu 16.04, 18.04)	AMD Ryzen	GNU compiler	OpenMPI
Desktop PC	Linux (ubuntu 16.04, 18.04)	AMD Ryzen	PGI compiler	OpenMPI
Desktop PC	Linux (ubuntu 16.04, 18.04)	Intel Core-i7	GNU compiler	OpenMPI
Desktop PC	Windows (7, 10)	Intel Core-i7	GNU compiler	Microsoft
			(mingw)	MPI
Raspberry PI 3	Linux (raspbian 32bit)	ARM Cortex-A53	GNU compiler	OpenMPI
B+				
Notebook PC	macOS Mojave	Intel Core i7	GNU Compiler	OpenMPI

1.4 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。

\$ tar xzf FrontISTR_V50.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。

 $\ gzip - dc \ FrontISTR_V50.tar.gz \ | \ tar \ xf -$

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。

1.5 インストール

1.5.1 サポートされているインストール方法

本ソフトウェアでは、2つのインストール方法がサポートされています。

1.5.1.1 cmake でのインストール

本ソフトウェアは、cmake を用いたインストールをサポートしています。

cmake を予めインストールしておく必要があります。cmake は下記 WEB サイトからダウンロードすることができます。

https://cmake.org/

- \$ cd \${FSTRBUILDDIR}
- \$ mkdir build
- \$ cd build
- \$ cmake ...
- make -j2
- \$ make install

インストールされているライブラリを自動で探索し、FrontISTR の機能を有効にします。また、複数コアを持ったコンピュータでは、並列コンパイルを有効にすることで、コンパイル時間の短縮が期待できます。

cmake でのインストールつづき

1.5.1.1.1 参考

- 参考 CentOS7.6 へのインストール手順例 (cmake)
- 参考 Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (cmake)

1.5.1.2 Makefile.conf でのインストール

本ソフトウェアでは、手動でライブラリやコンパイラ、有効にする機能を指定する方法がサポートされています。

- \$ cd \${FSTRBUILDDIR}
- \$ cp Makefile.conf.org Makefile.conf
- \$ vi Makefile.conf ファイルを編集しコンパイラやライブラリの場所を指定
- \$./setup.sh [有効にしたい機能を指定]
- \$ make
- \$ make install

cmake での自動設定が困難な環境では、こちらの方法での構築を推奨します。なお、こちらの方法は並列コンパイルがサポートされていません。

Makefile.conf でのインストールつづき

1.5.1.2.1 参考

- 参考 CentOS7.6 へのインストール手順例 (Makefile.conf)
- 参考 Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (Makefile.conf)
- 参考 Windows10 へのインストール手順例 (Makefile.conf)

1.6 cmake でのインストール

cmake には、ライブラリの自動探索機能が備わっています。それらを手動で明示することもできます。 cmake コマンドの詳細は、https://cmake.org/ をご覧ください。

1.6.1 準備

本ソフトウェアの構築に必要なライブラリを予めインストールします。

インストールするライブラリのディレクトリ構成は

\$HOME

```
|-- local
|-- bin
|-- include
|-- lib
```

の様な構成を推奨します。

その際、上記の場合 \$PATH 環境変数に \$HOME/local/bin を追加してください。

cmake がインストールされているかを確認します。cmake はバージョン 2.8.11 以上が必要になります。

\$ cmake —version cmake version 2.8.12.2

1.6.2 構築

次に FrontISTR を構築します。

- \$ mkdir build
- \$ cd build
- \$ cmake ...
- make -j2

make のオプション -j2 は、並列コンパイルの数を示しています。構築するコンピュータのコア数に併せて数を増やすことで、コンパイル時間の短縮が期待できます。

1.6.3 make install の実行

make の実行が正常に終了したあと、本ソフトウェアをインストールするため、以下のコマンドを実行します。

\$ make install

以上で/usr/local/binもしくは、-DCMAKE_INSTALL_PREFIXで指定したディレクトリに、本ソフトウェアがインストールされます。

インストールする場所を変えるには、cmake コマンドにオプションを追加します。

 $\$ cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=\$HOME/local ...

などとオプションを追加してください。

コンパイルされた FrontISTR(fistr1)が、どの機能を有効になっているかは

./ fistr1 -v

 $FrontISTR \ version \ 5.0.0 \ (eb7fb1c1a3d210b0c1f70b41c92995bfcb050e82)$

MPI: Enabled
OpenMP: Enabled

HECMW METIS VER: 5

 $Compile\ Option:\ -p\ --with-tools\ --with-metis\ --with-mumps\ --with-lapack\ --with-ml$

で確認することができます。

1.6.4 cmake のオプション

cmake コマンドを実行する際、オプションを指定することで挙動を明示的に指定することができます。

オプション (デフォルト)	説明	備考
-DWITH_TOOLS=ON	パーティショナなどのツールもコンパイル	hecmw_part1 などツール
-DWITH_MPI=ON	MPI を有効	ライブラリが必要
-DWITH_OPENMP=ON	OpenMP を有効	コンパイラの対応が必要
-DWITH_REFINER=ON	REVOCAP_Refiner の機能を有効	ライブラリが必要
$-DWITH_REVOCAP = ON$	REVOCAP_Coupler の機能を有効	ライブラリが必要
-DWITH_METIS=ON	METIS の機能を有効	4.0.3 と 5.1.0 に対応
$- DMETIS_VER_4 = OFF$	metis-4.0.3 を使う場合に設定	metis-5.1.0 の場合指定不要
$\hbox{-DWITH_PARMETIS=ON}$	ParMETIS の機能を有効	3.2.0 と 4.0.3 に対応
$- DMETIS_VER_3 = OFF$	ParMetis-3.2.0 を使う場合に設定	parmetis-4.0.3 の場合指定不要
-DWITH_MKL=ON	MKL PARDISO の機能を有効	ライブラリが必要
$\hbox{-}DWITH_MUMPS \hbox{=}ON$	MUMPS の機能を有効	ライブラリが必要
$\hbox{-DWITH_LAPACK=ON}$	LAPACK の機能を有効	ライブラリが必要
$-\mathrm{DWITH_ML}{=}\mathrm{ON}$	Trilinos ML の機能を有効	ライブラリが必要
$\hbox{-DWITH_DOC=OFF}$	FrontISTR のソースコードをドキュメント化	doxygen と graphviz が必要
-DOLD_RES_FORMAT=OFF	ON で result ファイルの旧フォーマット出力を有効化	

cmake で設定されている変数の一覧は

で確認できます。

その他、使用するコンパイラの指定やライブラリの指定をするオプションは以下の通りです。

オプション	説明	備考	
-	利用する BLAS のベンダーを指定	FindBLAS.cmake を参照	
DBLA_VENDO	R=		
-	BLAS ライブラリを直接指定	ライブラリを絶対パスで直接指定	
DBLAS_LIBRA	RIES =		
-	LAPACK ライブラリを直接指定	ライブラリを絶対パスで直接指定	
DLAPACK_LIB	RARIES=		
-	インストールするパスを設定。デ	$\hbox{-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=\$HOME/local} \ \ {}^{\raisebox{-0.15ex}{$\raisebox{-0.15ex}{}}}}}}}}}}}}}}}}}}}$	
DCMAKE_INSTALZL*#PREEIXAst/local		\$HOME/local/bin などにプログラムがインストールさ	
		れる	
-	C コンパイラを指定	-DCMAKE_C_COMPILER=icc (Intel C コンパイラ)	
DCMAKE_C_C	COMPILER=		
-	C++ コンパイラを指定	-DCMAKE_CXX_COMPILER=icpc (Intel C++ \sqsupset	
DCMAKE_CXX	COMPILER=	ンパイラ)	
-	Fortran コンパイラを指定	$\hbox{-DCMAKE_Fortran_COMPILER=} \hbox{ifort (Intel}$	
DCMAKE_Forti	can_COMPILER=	Fortran コンパイラ)	
-	ライブラリ等の格納場所を指定	-DCMAKE_PREFIX_PATH= $\$$ HOME/tools (ライブ	
DCMAKE_PRE	FIX_PATH=	ラリなどを探索するパス)	

1.7 簡易テスト機能について

本ソフトウェアには、コンパイルしたオブジェクトが正しく動くことを確認するための簡易テストスクリプトが同梱されています。

テストを行うにはrubyを予めインストールします。rubyがインストールされていれば、cmake時にテストが自動的に有効になります。

cmakeで本ソフトウェアをコンパイル後、以下のようにしてテストを実行します。

\$ make test

テストは以下のように実行されます。

/home/fistr/Work/FrontISTR/build\$ make test

Running tests...

Test project /home/fistr/Work/FrontISTR/build

Start 1: Static_exA_Test

1/23 Test #1: Static_exA_Test Passed 6.85 sec

Start 2: Static_exB_Test

2/23 Test #2: Static_exB_Test Passed 6.48 sec

Start 3: Static_exC_Test

. . .

更に詳細なメッセージを出力する場合

\$ make test ARGS="-VV -O test_log.txt"

とすると、test_log.txtファイルの中に結果が出力されます。オプションの詳細は

\$ ctest —help

を参照してください。

1.8 ソースコードのドキュメンテーションについて

本ソフトウェアのソースコードを学習に用いる際、各サブルーチンの相関やソースコードに埋め込まれているコメントを、 ブラウザで参照することができます。

ソースコードのドキュメントを HTML で構築するには、予めdoxygenとgraphvizをインストールします。

以下の手順で HTML を構築します。

- \$ cmake -DWITH DOC=ON ..
- \$ make doc

作成された HTML を以下のようにして参照します。

\$ firefox doc/html/index.html

1.9 デバッグを有効にする

デバッグを有効にするには、

 $\$ cmake –DCMAKE_BUILD_TYPE="DEBUG" $\ \ldots$

としてからmakeをします。更に高度なデバッグオプションを有効にするには

とすると、メモリリークなどの検出に役立ちます。

1.10 Makefile.conf でのインストール

以下の手順で、本ソフトウェアをインストールします。

1.10.1 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。

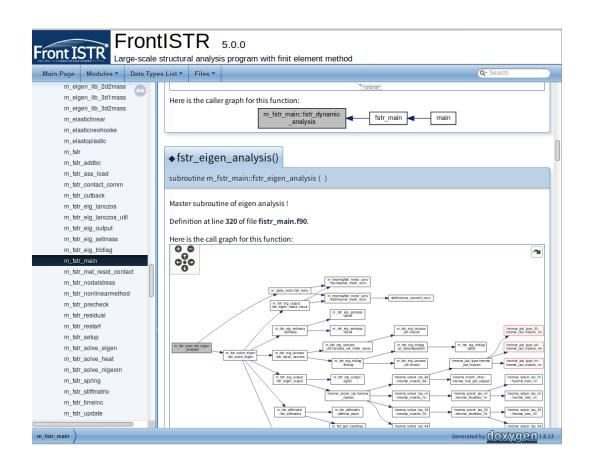


図1 ドキュメンテーション

変数名	説明
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。

1.10.2 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

1.10.2.2 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

1.10.2.3 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

1.10.2.4 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

1.10.2.5 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 Intel MKL は使えません。

1.10.3 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下さい。

1.10.4 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

1.10.5 Windows 環境へのインストール

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, Cygwin
- 並列処理版: MinGW + Microsoft MPI, Cygwin + OpenMPI

1.11 付録

1.11.1 Makefile.conf の変数一覧

1.11.1.1 MPI に関する設定

MPI 対応コンパイラーが自動参照している場合は、MPI に関する設定は不要である。

変数名	説明	既定值
MPIDIR	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	なし
MPIBINDIR	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	なし
MPIINCDIR	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	
MPILIBDIR	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	
MPILIBS	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	なし

1.11.1.2 インストールディレクトリに関する設定

変数名	説明	既定值
PREFIX	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	\$(HOME)/FrontIST
BINDIR	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	(PREFIX)/bin
INCLUDEDIR	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	(PREFIX)/include
LIBDIR	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	(PREFIX)/lib

1.11.1.3 METIS に関する設定

変数名	説明	既定值
METISDIR	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	\$(HOME)/metis
METISINCE	DIMIETIS 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	\$(METISDIR)/include
	ィレクトリのパスを指定する	
METISLIBD	IMETIS 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	(METISDIR)/lib
	パスを指定する	

1.11.1.4 ParMETIS に関する設定

変数名	説明	既定值
PARMETISD	I IP arMETIS 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。	\$(HOME)/ParMetis
PAEMETISIN	J CHAIN IETIS のヘッダーファイル群(parmetis.h など)がインストールされて	\$(PARMETISDIR)/include
	いるディレクトリのパスを指定する	
PARMETISL	I BFAFR IETIS のライブラリ(libparmetis.a)がインストールされているディレ	${\rm \$(PARMETISDIR)/lib}$
	クトリのパスを指定する	

1.11.1.5 REVOCAP_Refiner に関する設定

変数名	説明	既定值
REFINERDI	R 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	\$(HOME)/REVOCAP_Refiner
	定する	
REFINERIN	CIMEVOCAP_Refiner のヘッダーファイル群がインストールされているデ	\$(REFINERDIR)/include
	ィレクトリのパスを指定する	
REFINERLII	BIRRVOCAP_Refiner のライブラリ群がインストールされているディレク	(REFINERDIR)/lib
	トリのパスを指定する	

1.11.1.6 REVOCAP_Coupler に関する設定

変数名	説明		既定值	
REVOCAF	PDIRREVOCAP	_Coupler がインストールされているディレクトリのパスを	\$(HOME)/REVOCAP	_Coupler
	指定する	16		

変数名	説明	既定值
REVOCAPIN	CRENOCAP_Coupler のヘッダーファイル群がインストールされている	\$(REVOCAPDIR)/include
	ディレクトリのパスを指定する	
REVOCAPLI	B RFF VOCAP_Coupler のライブラリ群がインストールされているディレ	(REVOCAPDIR)/lib
	クトリのパスを指定する	

1.11.1.7 MUMPS に関する設定

変数名	説明	既定値
MUMPSDIR	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	\$(HOME)/MUM
MUMPSINCDIR	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	\$(MUMPSDIR)/
MUMPSLIBDIR	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	\$(MUMPSDIR)/

1.11.1.8 ML に関する設定

変数名	説明	既定值
MLDIR	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	(HOME)/trilinos
MLINCDIR	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	(MLDIR)/include
MLLIBDIR	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	(MLDIR)/lib

1.11.1.9 C コンパイラーに関する設定

変数		既定
名	説明	値
$\overline{\text{CC}}$	C コンパイラーの起動コマンドを指定する	mpicc
CFLA	GSC コンパイラーに付与するオプションを指定する	なし
LDFL	\mathbf{AGS} リンカーに付与するオプションを指定する。 $\mathbf{REVOCAP}$ _Refiner を使用する場合で、 \mathbf{C} プログ	$-\mathrm{lm}$
	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(- $\mathrm{lstdc}++$ など)を指	
	定する必要がある。	
OPTF	LACS 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	-O3
CLINE	KER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、	\$(CC)
	${ m C}$ プログラムのリンクに ${ m C}_{++}$ コンパイラーを用いる必要がある場合などに指定する。	

1.11.1.10 C++ コンパイラーに関する設定

変数名	説明	既定值
CPP	C++ コンパイラーの起動コマンドを指定する	mpic++
CPPFL	\mathbf{AGS}_+ コンパイラーに付与するオプションを指定する。 \mathbf{Boost} ライブラリが \mathbf{C}_{++} コンパ	-DMPICH_IGNORE_0
	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。	
CPPLD	FCAGSリンカーに付与するオプションを指定する	なし
CPPOF	TELAGS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	-O3

1.11.1.11 Fortran90 コンパイラーに関する設定

変数		
名	説明	既定值
F90	Fortran90 コンパイラーの起動コマンドを指定する	mpif90
F90F	LAFGGran90 コンパイラーに付与するオプションを指定する	-DMPICH_IGNORE
F90Ll	OFFbAGA90 リンカーに付与するオプションを指定する。Intel MKL を利用する場合には、その	なし
	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。	
F90O	P TolkAG9 0 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	-O2
F90Ll	N HòFiR an90 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	\$(F90)
	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(京コンピュータでは "mpiFCCpx –linkfortran" を指定する)。	

1.11.1.12 UNIX コマンドに関する設定

変数名	説明	既定値
MAKE	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。	make
AR	アーカイブの作成、変更などを行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。	ar ruv
CP	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。	cp - f
RM	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。	rm - f
MKDIR	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。	$\operatorname{mkdir} - \operatorname{p}$
MV	ファイルを移動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。	mv

MPI **MPIDIR** MPIBINDIR =MPILIBDIR =MPIINCDIR =MPILIBS # for install option only PREFIX = \$(HOME)/FrontISTR BINDIR = \$(PREFIX)/bin = \$(PREFIX)/libLIBDIR INCLUDEDIR = \$(PREFIX)/include # Metis METISDIR =\$ (HOME) / Metis -4.0METISLIBDIR = \$(METISDIR)METISINCDIR = (METISDIR)/Lib# ParMetis PARMETISDIR =\$ (HOME) / ParMetis -3.1PARMETISLIBDIR = \$(PARMETISDIR)PARMETISINCDIR = \$(PARMETISDIR)/ParMETISLib# Refiner REFINERDIR =\$ (HOME) / REVOCAP_Refiner -1.1.0REFINERINCDIR = \$(REFINERDIR)/Refiner REFINERLIBDIR = $\frac{(REFINERDIR)}{1ib} \times 86_{64}-1inux$ # Coupler REVOCAPDIR =\$ (HOME) / REVOCAP_Coupler - 1.6.2 $REVOCAPINCDIR = \frac{REVOCAPDIR}{1ibrcap}$ REVOCAPLIBDIR = \$(REVOCAPDIR) / librcap# MUMPS MUMPSDIR =\$ (HOME) /MUMPS_4.10.0 $MUMPSINCDIR = \frac{MUMPSDIR}{include}$ MUMPSLIBDIR = (MUMPSDIR) / lib

1.11.2 Makefile.conf の設定例

ML

 $MLDIR = \frac{HOME}{trilinos} / 11.8.1 / ml$

 $MLINCDIR = \frac{MLDIR}{include}$

 $MLLIBDIR = \frac{MLDIR}{lib}$

C compiler settings

CC = mpiicc

CFLAGS =

 ${\rm LDFLAGS} \ = -{\rm lm}$

OPTFLAGS = -O3

CLINKER = mpiicc

C++ compiler settings

 CPP = $\operatorname{mpiicpc}$

 $\label{eq:continuous} \mathsf{CPPFLAGS} \qquad = -\mathsf{DMPICH_IGNORE_CXX_SEEK} - \mathsf{I\$} \left(\mathsf{HOME} \right) / \mathsf{include}$

CPPLDFLAGS =

CPPOPTFLAGS = -O3

Fortran compiler settings

F90 = mpiifort

F90FLAGS =

F90LDFLAGS = -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5

F90OPTFLAGS = -O2

F90LINKER = mpiifort

1.11.3 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。

1.12 付録

1.12.1 Makefile.conf の変数一覧

1.12.1.1 MPI に関する設定

MPI 対応コンパイラーが自動参照している場合は、MPI に関する設定は不要である。

-		
変数名	説明	既定值
MPIDIR	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	なし
MPIBINDIR	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	なし
MPIINCDIR	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	
MPILIBDIR	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	
MPILIBS	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	なし

1.12.1.2 インストールディレクトリに関する設定

変数名	説明	既定值
PREFIX	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	\$(HOME)/FrontIST
BINDIR	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	(PREFIX)/bin
INCLUDEDIR	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	(PREFIX)/include
LIBDIR	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	(PREFIX)/lib

1.12.1.3 METIS に関する設定

変数名	説明	既定值
METISDIR	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	\$(HOME)/metis
METISINCE	DIMETIS 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	\$(METISDIR)/include
	ィレクトリのパスを指定する	
METISLIBD	IRMETIS 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	(METISDIR)/lib
	パスを指定する	

1.12.1.4 ParMETIS に関する設定

変数名	説明	既定值
PARMETISD	I R 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。	(HOME)/ParMetis
PAEMETISIN	I CFlaFM IETIS のヘッダーファイル群(parmetis.h など)がインストールされて	\$(PARMETISDIR)/include
	いるディレクトリのパスを指定する	
PARMETISL	IHPAFMETIS のライブラリ(libparmetis.a)がインストールされているディレ	(PARMETISDIR)/lib
	クトリのパスを指定する	

1.12.1.5 REVOCAP_Refiner に関する設定

変数名	説明	既定值
REFINERDIE	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	\$(HOME)/REVOCAP_Refiner
	定する	
REFINERING	CIMIEVOCAP_Refiner のヘッダーファイル群がインストールされているデ	(REFINERDIR)/include
	ィレクトリのパスを指定する	
REFINERLIE	BIHRVOCAP_Refiner のライブラリ群がインストールされているディレク	(REFINERDIR)/lib
	トリのパスを指定する	

1.12.1.6 REVOCAP_Coupler に関する設定

変数名	説明	既定值
REVOCAPI	DIRREVOCAP_Coupler がインストールされているディレクトリのパスを	$\frac{\text{$(\text{HOME})/\text{REVOCAP}_Coupler}}{}$
	指定する	
REVOCAPI	NCRRENOCAP_Coupler のヘッダーファイル群がインストールされている	(REVOCAPDIR)/include
	ディレクトリのパスを指定する	
REVOCAPI	LIB RHV OCAP_Coupler のライブラリ群がインストールされているディレ	(REVOCAPDIR)/lib
	クトリのパスを指定する	

1.12.1.7 MUMPS に関する設定

変数名	説明	既定値
MUMPSDIR	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	\$(HOME)/MUM
MUMPSINCDIR	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	\$(MUMPSDIR)/
MUMPSLIBDIR	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	\$(MUMPSDIR)/

1.12.1.8 ML に関する設定

変数名	説明	既定值
MLDIR	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	(HOME)/trilinos
MLINCDIR	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	(MLDIR)/include
MLLIBDIR	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	(MLDIR)/lib

1.12.1.9 C コンパイラーに関する設定

変数		既定
名	説明	値
$\overline{\text{CC}}$	C コンパイラーの起動コマンドを指定する	mpicc
CFLA	GSC コンパイラーに付与するオプションを指定する	なし
LDFL	A CCSリンカーに付与するオプションを指定する。 $REVOCAP_Refiner$ を使用する場合で、 C プログ	-lm
	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(- $\operatorname{lstdc}++$ など)を指	
	定する必要がある。	
OPTF	L ACCS 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	-O3
CLINE	KER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、	\$(CC)
	${ m C}$ プログラムのリンクに ${ m C}_{++}$ コンパイラーを用いる必要がある場合などに指定する。	

1.12.1.10 C++ コンパイラーに関する設定

変数名	説明	既定値
CPP	C++ コンパイラーの起動コマンドを指定する	mpic++
CPPFI	AC $S+$ コンパイラーに付与するオプションを指定する。 $Boost$ ライブラリが $C++$ コンパ	-DMPICH_IGNORE_0
	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。	
CPPLI	DF C AGSリンカーに付与するオプションを指定する	なし
CPPO	PT ELACS 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	-O3

1.12.1.11 Fortran90 コンパイラーに関する設定

変数		
名	説明	既定值
F90	Fortran90 コンパイラーの起動コマンドを指定する	mpif90
F90F	LÆG&ran90 コンパイラーに付与するオプションを指定する	-DMPICH_IGNORE
F90L	DFbAGA90 リンカーに付与するオプションを指定する。Intel MKL を利用する場合には、その	なし
	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。	
F90O	P TotLAG ® 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	-O2
F90L	[N IKKFIR an90 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	\$(F90)
	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(京コンピュータでは "mpiFCCpx –linkfortran" を指定する)。	

1.12.1.12 UNIX コマンドに関する設定

変数名	説明	既定値
MAKE	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。	make
AR	アーカイブの作成、変更などを行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。	ar ruv
CP	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。	cp - f
RM	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。	rm - f
MKDIR	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。	mkdir -p
MV	ファイルを移動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。	mv

1.12.2 Makefile.conf の設定例

MPI

MPIDIR =

 $\mathrm{MPIBINDIR} \, = \,$

 $\mathrm{MPILIBDIR} \, = \,$

MPIINCDIR =

 $\mathrm{MPILIBS} \quad = \quad$

for install option only

 $\begin{array}{ll} \text{PREFIX} & = \$ \left(\text{HOME} \right) / \text{FrontISTR} \end{array}$

 $\begin{array}{ll} \text{BINDIR} & = \$ (\text{PREFIX}) / \sin \end{array}$

 $LIBDIR \hspace{1cm} = \hspace{1cm} \$ \hspace{1cm} (PREFIX) / \hspace{1cm} 1i \hspace{1cm} b$

INCLUDEDIR = \$(PREFIX)/include

Metis

```
METISDIR
             = $ (HOME) / Metis -4.0
METISLIBDIR = \$(METISDIR)
METISINCDIR = \frac{METISDIR}{Lib}
# ParMetis
PARMETISDIR
                 = $ (HOME) / ParMetis -3.1
PARMETISLIBDIR = \$(PARMETISDIR)
{\tt PARMETISINCDIR} \, = \, \$ \, ({\tt PARMETISDIR}) \, / \, {\tt ParMETISLib}
# Refiner
REFINERDIR
                = $ (HOME) / REVOCAP_Refiner -1.1.0
REFINERINCDIR = \$(REFINERDIR) / Refiner
REFINERLIBDIR = \frac{(REFINERDIR)}{1ib} \times 86 = 64 - 1inux
# Coupler
REVOCAPDIR
                = $ (HOME) / REVOCAP_Coupler - 1.6.2
REVOCAPINCDIR = \$(REVOCAPDIR) / librcap
REVOCAPLIBDIR \, = \, \$ \, (REVOCAPDIR) \, / \, li \, b \, r \, c \, a \, p
# MUMPS
MUMPSDIR
              = (HOME)/MUMPS_4.10.0
MUMPSINCDIR = \frac{MUMPSDIR}{include}
MUMPSLIBDIR = MUMPSDIR / 1ib
\# ML
MLDIR
          = $ (HOME) / trilinos /11.8.1 / ml
MLINCDIR = \frac{MLDIR}{include}
MLLIBDIR = (MLDIR)/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

1.12.3 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。

1.13 参考 CentOS7.6 へのインストール手順例 (cmake)

CentOS7.6 上へ本ソフトウェアと、それに必要な外部ライブラリの構築手順の例を示します。他の環境へのインストールの参考にしてください。

また、各ライブラリの詳細な構築方法は、それぞれのドキュメントを参考にしてください。

1.13.1 準備

最初に本ソフトウェアをコンパイルするのに必要なツールやパッケージをインストールしてください。

\$ su

yum group mark install "Development Tools"

yum update

yum install openmpi-devel cmake

exit

次に MPI の環境設定を行います。コマンドライン上で

```
$ module purge
```

\$ module load mpi/openmpi-x86_64

\$HOME/.bash_profileに記述しておけば、次回ログイン時も設定が反映されます。

gcc/g++/gfortran および MPI のラッパーが正しくインストールされているか確認してください。

```
$ which gcc g++ gfortran mpicc mpic++ mpifort
/usr/bin/gcc
/usr/bin/g++
/usr/bin/gfortran
/usr/lib64/openmpi/bin/mpicc
/usr/lib64/openmpi/bin/mpic++
/usr/lib64/openmpi/bin/mpifort
```

1.13.2 ライブラリのインストール

本ソフトウェアに必要なライブラリをインストールします。作業ディレクトリはSHOME/Work、インストール先のディレクトリはSHOME/Work、インストール先のディレクトリはSHOME/Workのでは、

各ディレクトリを作成し、\$HOME/local/binを PATH 環境変数に追加します。

- \$ cd \$HOME
- \$ mkdir work
- \$ mkdir -p local/bin local/lib local/include
- \$ export PATH=\$HOME/local/bin:\$PATH

1.13.2.1 ダウンロード

以下のソフトウェアをダウンロードし、作業ディレクトリ\$HOME/workへ保存します。

ソフトウェア名	ダウンロード先
REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz	https://www.frontistr.com/
$FrontISTR_V50.tar.gz$	https://www.frontistr.com/
${\it OpenBLAS-0.2.20.tar.gz}$	http://www.openblas.net/
metis-5.1.0.tar.gz	http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/download
scalapack-2.0.2.tgz	http://www.netlib.org/scalapack/
$MUMPS_5.1.2.tar.gz$	$\rm http://mumps.enseeiht.fr/$
trilinos-12.14.1-Source.tar.bz2	https://trilinos.org/download/

```
$ cd $HOME/work
$ tar xvf REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz
\ cd\ REVOCAP\_Refiner-1.1.04
$ make
$ cp Refiner/rcapRefiner.h ~/local/include
1.13.2.3 OpenBLAS のコンパイル
$ cd $HOME/work
 tar xvf OpenBLAS-0.2.20.tar.gz 
\  \,  make BINARY=64 NO_SHARED=1 USE_OPENMP=1
$ make PREFIX=~/local install
1.13.2.4 METIS のコンパイル
$ cd $HOME/work
  \text{star xvf metis} - 5.1.0. tar.gz 
delta = 0.1.0
$ make config prefix=~/local cc=gcc openmp=1
$ make
$ make install
1.13.2.5 ScaLAPACK のコンパイル
$ cd $HOME/work
 tar xvf scalapack -2.0.2.tgz 
\ cd scalapack -2.0.2
$ mkdir build
\ cmake <code>-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/local</code> \
        -DCMAKE_EXE_LINKER_FLAGS="-fopenmp" \
        -DCMAKE_BUILD_TYPE="Release" \
       -DBLAS_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
        -DLAPACK_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
```

make

\$ make install

1.13.2.6 MUMPS のコンパイル

\$ cd \$HOME/work

\$ cd MUMPS 5.1.2

\$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc

コピーしたMakefile.incの以下の部分を書き換えます。

\$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc

\$ vi Makefile.inc

 $LMETISDIR \, = \, \$ \, (HOME) \, / \, local$

IMETIS = -I\$ (LMETISDIR) / include

LMETIS = -L\$(LMETISDIR)/lib -lmetis

ORDERINGSF = -Dmetis -Dpord

CC = mpicc

FC = mpifort

FL = mpifort

LAPACK = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas

SCALAP = -L\$(HOME)/local/lib -lscalapack

 $INCPAR = -I/usr/include/openmpi-x86_64$

 $LIBPAR = \frac{SCALAP}{-L/usr/lib64/openmpi/lib -lmpi}$

LIBBLAS = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas

 $OPTF = -O -DBLR_MT - fopenmp$

OPTC = -O - I . - fopenmp

OPTL = -O - fopenmp

書き換えが完了したら保存し make します。

\$ make

\$ cp lib/*.a \$HOME/local/lib

\$ cp include/*.h \$HOME/local/include

```
1.13.2.7 Trilinos ML のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf trilinos -12.14.1-Source.tar.gz
$ cd trilinos -12.14.1 - Source
$ mkdir build
$ cmake -DCMAKE INSTALL PREFIX=$HOME/local \
        -DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
        -DCMAKE CXX COMPILER=mpic++ \
        -DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpifort \
        -DTPL ENABLE MP⊨ON \
        –DTPL_ENABLE_LAPACK=ON \setminus
        -DTPL_ENABLE_SCALAPACK=ON \
        -DTPL ENABLE METIS=ON \
        -DTPL_ENABLE_MUMPS=ON \
        -DTPL_MUMPS_INCLUDE_DIRS=$HOME/local/include \
        -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{ML}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
        -DTrilinos\_ENABLE\_Zoltan=ON \setminus
        -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{OpenMP}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
        -DTrilinos_ENABLE_ALL_OPTIONAL_PACKAGES=OFF \
        -DBLAS_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib \
        -DSCALAPACK_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib" \
        -DBLAS_LIBRARY_NAMES="openblas" \
        -DLAPACK_LIBRARY_NAMES="openblas" \
        -DSCALAPACK_LIBRARY_NAMES="scalapack" \
$ make
$ make install
1.13.3 FrontISTR のコンパイル
上記ライブラリのコンパイルが済んだら FrontISTR をコンパイルします。
$ cd $HOME/work
\ tar xvf FrontISTR_V50.tar.gz
$ cd FrontISTR
$ mkdir build
$ cd build
```

```
$ cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/FrontISTR \
-DWITH_ML=ON \
-DBLAS_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
-DLAPACK_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
```

1.13.3.1 make の実行

make を実行します。

\$ make

4並列コンパイルをする場合、

make -i4

とします。並列コンパイルにより、コンパイル時間が短縮されます。

1.13.3.2 make install の実行

make が完了したら、make install を実行し指定したディレクトリへインストールします。この例では \$(HOME)/FrontISTR/bin になります。

\$ make install

1.13.3.3 動作確認

本ソフトウェアに同梱されているチュートリアルを実行して、動作を確認します。

```
$ cd $HOME/work/FrontISTR/tutorial
```

\$ cd 01_elastic_hinge

\$ \$HOME/FrontISTR/bin/fistr1

Step control not defined! Using default step=1

fstr_setup: OK

Start visualize PSF 1 at timestep 0

loading step= 1

sub_step= 1, current_time= 0.0000E+00, time_inc= 0.1000E+01

loading_factor= 0.0000000 1.0000000

3x3 BLOCK CG, SSOR, 1

1 1.903375E+00

2 1.974378E+00

```
3 2.534627E+00
```

4 3.004045E+00

5 3.202633E+00

6 3.203864E+00

. . .

解析が終了すると以下の様に画面上に表示されます。

. . .

2966 1.143085E-08

2967 1.078272E-08

2968 1.004759E-08

2969 9.372882E-09

Relative residual = 9.39169E-09

summary of linear solver

2969 iterations 9.391687E-09

 set-up time
 :
 4.108060E-01

 solver time
 :
 6.506822E+01

 solver/comm time
 :
 4.342469E-01

 solver/matvec
 :
 1.923199E+01

 solver/precond
 :
 2.688405E+01

solver/precond : 2.688405E+01 solver/1 iter : 2.191587E-02

work ratio (%) : 9.933263E+01

Start visualize PSF 1 at timestep 1 ### FSTR_SOLVE_NLGEOM FINISHED!

TOTAL TIME (sec): 74.93

pre (sec) : 1.86

solve (sec) : 73.07

FrontISTR Completed !!

1.14 参考 CentOS7.6 へのインストール手順例 (Makefile.conf)

CentOS7.6 上へ本ソフトウェアと、それに必要な外部ライブラリの構築手順の例を示します。他の環境へのインストールの参考にしてください。

また、各ライブラリの詳細な構築方法は、それぞれのドキュメントを参考にしてください。

1.14.1 準備

exit

```
最初に本ソフトウェアをコンパイルするのに必要なツールやパッケージをインストールしてください。
```

```
$ su
# yum group mark install "Development Tools"
# yum update
# yum install openmpi-devel cmake
```

次に MPI の環境設定を行います。コマンドライン上で

```
$ module purge
```

\$ module local mpi/openmpi-x86_64

\$HOME/.bash_profileに記述しておけば、次回ログイン時も設定が反映されます。

gcc/g++/gfortran および MPI のラッパーが正しくインストールされているか確認してください。

```
$ which gcc g++ gfortran mpicc mpic++ mpifort
/usr/bin/gcc
/usr/bin/g++
/usr/bin/gfortran
/usr/lib64/openmpi/bin/mpicc
/usr/lib64/openmpi/bin/mpic++
/usr/lib64/openmpi/bin/mpifort
```

1.14.2 ライブラリのインストール

本ソフトウェアに必要なライブラリをインストールします。作業ディレクトリは ${
m SHOME/work}$ 、インストール先のディレクトリは ${
m SHOME/local}$ とします。

各ディレクトリを作成し、\$HOME/local/binを PATH 環境変数に追加します。

- \$ cd \$HOME
- \$ mkdir work
- \$ mkdir -p local/bin local/lib local/include
- \$ export PATH=\$HOME/local/bin:\$PATH

1.14.2.1 ダウンロード

以下のソフトウェアをダウンロードし、作業ディレクトリ\$HOME/workへ保存します。

ソフトウェア名	ダウンロード先
REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz	https://www.frontistr.com/
$FrontISTR_V50.tar.gz$	https://www.frontistr.com/
${\it OpenBLAS-0.2.20.tar.gz}$	http://www.openblas.net/
metis-5.1.0.tar.gz	http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/download
scalapack-2.0.2.tgz	http://www.netlib.org/scalapack/
$MUMPS_5.1.2.tar.gz$	http://mumps.enseeiht.fr/
trilinos-12.14.1-Source.tar.bz2	https://trilinos.org/download/

1.14.2.2 REVOCAP_Refiner のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- $\$\ tar\ xvf\ REVOCAP_Refiner-1.1.04.\,tar.\,gz$
- $\ cd\ REVOCAP_Refiner-1.1.04$
- \$ make
- $$ cp lib/x86_64-linux/libRcapRefiner.a \sim/local/lib$
- \$ cp Refiner/rcapRefiner.h ~/local/include

1.14.2.3 OpenBLAS のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf OpenBLAS-0.2.20.tar.gz
- $\ \ \,$ make BINARY=64 NO_SHARED=1 USE_OPENMP=1
- \$ make PREFIX=~/local install

1.14.2.4 METIS のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf metis -5.1.0. tar.gz
- delta cd metis -5.1.0
- $\mbox{make config prefix} = \sim /local cc = gcc openmp = 1$
- \$ make
- \$ make install

1.14.2.5 ScaLAPACK のコンパイル

```
$ cd $HOME/work
 tar xvf scalapack -2.0.2.tgz 
\ cd scalapack -2.0.2
$ mkdir build
-DCMAKE_EXE_LINKER_FLAGS="-fopenmp" \
        -DBLAS_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
        -DLAPACK_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
$ make
$ make install
1.14.2.6 MUMPS のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf MUMPS 5.1.2.tar.gz
$ cd MUMPS_5.1.2
$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc
コピーしたMakefile.incの以下の部分を書き換えます。
$ vi Makefile.inc
$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc
$ vi Makefile.inc
LMETISDIR \, = \, \$ \, (HOME) \, / \, local
          = -I$ (LMETISDIR) / include
IMETIS
          = -L\$(LMETISDIR)/lib -lmetis
LMETIS
\begin{array}{ll} \text{ORDERINGSF} & = -\text{D}\,\text{metis}\ -\text{D}\,\text{pord} \end{array}
CC
        = mpicc
FC
        = mpifort
FL
        = mpifort
LAPACK = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas
SCALAP = -L\$(HOME)/local/lib -lscalapack
INCPAR = -I/usr/include/openmpi-x86\_64
LIBPAR = \frac{SCALAP}{-L/usr/lib64/openmpi/lib-lmpi}
```

```
LIBBLAS = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas
OPTF
        = -O -DBLR_MT -fopenmp
OPTC
        = -O -I . -fopenmp
        = -O -fopenmp
OPTL
書き換えが完了したら保存し make します。
$ make
$ cp lib/*.a $HOME/local/lib
1.14.2.7 Trilinos ML のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf trilinos -12.14.1-Source.tar.gz
$ cd trilinos -12.14.1 - Source
$ mkdir build
$ cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/local \
        -DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
        -DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpifort \
        -DTPL ENABLE MP⊨ON \
        –DTPL_ENABLE_LAPACK=ON \setminus
        -DTPL ENABLE SCALAPACK=ON \
        -DTPL_ENABLE_METIS=ON \
        -DTPL_ENABLE_MUMPS=ON \
        -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{ML}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
        -DTrilinos ENABLE Zoltan=ON \setminus
        -DTrilinos\_ENABLE\_OpenMP=\!ON \ \setminus
        -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{Amesos}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
        -DTrilinos_ENABLE_ALL_OPTIONAL_PACKAGES=OFF \
        -DBLAS_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib \
        -DLAPACK LIBRARY DIRS-$HOME/local/lib" \
        -DSCALAPACK_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib" \
        -DBLAS_LIBRARY_NAMES="openblas" \
        -DLAPACK_LIBRARY_NAMES="openblas" \
        -DSCALAPACK_LIBRARY_NAMES="scalapack" \
$ make
```

36

1.14.3 FrontISTR のコンパイル

上記ライブラリのコンパイルが済んだら FrontISTR をコンパイルします。

- \$ cd \$HOME/work
- $\$ tar xvf FrontISTR_V50.tar.gz
- \$ cd FrontISTR

1.14.3.1 Makefile.conf の編集

雛形をコピーして、環境に合わせた内容に編集します。この例では、以下の様に編集します。

\$ cp Makefile.conf.org Makefile.conf

\$ vi Makefile.conf

#

MPI

MPIDIR = /usr/lib64/openmpi

 $\begin{array}{lll} \text{MPIBINDIR} & = \$(\text{MPIDIR})/\sin \\ & \text{MPILIBDIR} & = \$(\text{MPIDIR})/\sin \end{array}$

 $\begin{array}{ll} \text{MPIINCDIR} & = /\operatorname{usr/include/openmpi-x86_64} \\ \text{MPILIBS} & = -\operatorname{lmpi} -\operatorname{lmpi_cxx} -\operatorname{lmpi_mpifh} \\ \end{array}$

for install option only

PREFIX = \$(HOME)/FrontISTR

 $\begin{array}{ll} \text{BINDIR} & = \$(\text{PREFIX})/\sin \\ \text{LIBDIR} & = \$(\text{PREFIX})/\text{lib} \end{array}$

INCLUDEDIR = \$(PREFIX)/include

Metis

 $\label{eq:metricond} \text{METISINCDIR} \qquad = \, \$ \, (\text{METISDIR}) \, / \, \text{include}$

```
# ParMetis
PARMETISDIR
                                                   = \$(HOME) / local
PARMETISLIBDIR = (PARMETISDIR) / lib
PARMETISINCDIR = $(PARMETISDIR)/include
# Refiner
REFINERDIR
                                                    = $ (HOME) / local
REFINERINCDIR = \$(REFINERDIR) / include
REFINERLIBDIR = (REFINERDIR) / lib
# Coupler
REVOCAPDIR
                                                    = \$(HOME)/local
REVOCAPINCDIR = \$(REVOCAPDIR) / include
REVOCAPLIBDIR = (REVOCAPDIR) / lib
# MUMPS
MUMPSDIR
                                                    = $ (HOME) / local
                                                    = \, \, \$ \, (\text{MUMPSDIR}) \, / \, \, \text{include}
MUMPSINCDIR
                                                    = $ (MUMPSDIR) / lib
MUMPSLIBDIR
MUMPSLIBS
                                                    = -ldmumps -lmumps_common -lpord -L$(HOME)/local/lib -lscalapack
# MKL PARDISO
MKLDIR
                                     = \$ (HOME) /
MKLINCDIR = \frac{MKLDIR}{include}
\label{eq:mkldir} \text{MKLLIBDIR} \ = \ \$ \, (\text{MKLDIR}) \, / \, \text{lib}
\# ML
MLDIR
                                                    = \$(HOME)/local
MLINCDIR
                                                    = $(MLDIR)/include
MLLIBDIR
                                                    = \frac{(MLDIR)}{lib}
MLLIBS
                                                    =-lml\ -lamesos\ -ltrilinosss\ -lzoltan\ -lepetra\ -lteuchosremainder\ -lteuchosnus -lteuchosn
# C compiler settings
CC
                                                    = mpicc -fopenmp
CFLAGS
LDFLAGS
                                                    = -l \operatorname{std} \operatorname{c} + + -l \operatorname{m}
OPTFLAGS
                                                    = -03
# C++ compiler settings
```

= mpic++-fopenmp

CPP

CPPFLAGS

CPPLDFLAGS

CPPOPTFLAGS = -O3

Fortran compiler settings

F90 = mpif90 - fopenmp

F90FLAGS =

F90LDFLAGS = -1stdc++-L\$(HOME)/local/lib-lopenblas

F90OPTFLAGS = -O2 F90FPP = -cpp

F90LINKER = mpif90 - fopenmp

 $\begin{array}{lll} \text{MAKE} & = & \text{make} \\ \text{AR} & = & \text{ar ruv} \\ \text{MV} & = & \text{mv} - \text{f} \\ \text{CP} & = & \text{cp} - \text{f} \\ \text{RM} & = & \text{rm} - \text{f} \\ \text{MKDIR} & = & \text{mkdir} - \text{p} \end{array}$

1.14.3.2 setup.sh の実行

編集が完了したら、setup.sh を実行します。

 $\ \ ./setup.sh\ -p\ --with-tools\ --with-refiner \ \ --with-metis\ --with-mumps\ --with-lapack\ --with-ml$

1.14.3.3 make の実行

make を実行します。

\$ make

1.14.3.4 make install の実行

make が完了したら、make install を実行し Makefile.conf で指定したディレクトリへインストールします。この例では \$(HOME)/FrontISTR/bin にインストールされます。

\$ make install

1.14.3.5 動作確認

solver/precond

```
本ソフトウェアに同梱されているチュートリアルを実行して、動作を確認します。
$ cd $HOME/work/FrontISTR/tutorial
d cd 01_elastic_hinge
$ $HOME/FrontISTR/bin/fistr1
 Step control not defined! Using default step=1
 fstr setup: OK
 Start visualize PSF 1 at timestep 0
 loading step=
                 1
sub_step= 1, current_time= 0.0000E+00, time_inc= 0.1000E+01
 loading_factor=
                   0.0000000
                               1.0000000
### 3x3 BLOCK CG, SSOR, 1
      1
          1.903375E+00
      2
          1.974378E+00
      3
          2.534627E+00
      4
          3.004045E+00
      5
          3.202633E+00
          3.203864E+00
      6
解析が終了すると以下の様に画面上に表示されます。
   2966
         1.143085E-08
   2967
          1.078272E-08
   2968
          1.004759E-08
   2969
           9.372882E-09
### Relative residual = 9.39169E-09
### summary of linear solver
      2969 iterations
                          9.391687E-09
    set-up time
                   :
                          4.108060E-01
    solver time
                          6.506822E+01
    solver/comm time :
                         4.342469E-01
    solver/matvec
                         1.923199E+01
```

2.688405E+01

solver/1 iter : 2.191587E-02 work ratio (%) : 9.933263E+01

Start visualize PSF 1 at timestep 1 ### FSTR_SOLVE_NLGEOM FINISHED!

TOTAL TIME (sec): 74.93

pre (sec) : 1.86

solve (sec) : 73.07

FrontISTR Completed !!

1.15 参考 Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (cmake)

Ubuntu18.04 上へ本ソフトウェアと、それに必要な外部ライブラリの構築手順の例を示します。他の環境へのインストールの参考にしてください。

また、各ライブラリの詳細な構築方法は、それぞれのドキュメントを参考にしてください。

1.15.1 準備

最初に本ソフトウェアをコンパイルするのに必要なツールやパッケージをインストールしてください。

\$ sudo apt install build-essential gfortran cmake openmpi-bin libopenmpi-dev

gcc/g++/gfortran および MPI のラッパーが正しくインストールされているか確認してください。

\$ which gcc g++ gfortran mpicc mpic++ mpifort

/usr/bin/gcc

/usr/bin/g++

/usr/bin/gfortran

/usr/bin/mpicc

/usr/bin/mpic++

/usr/bin/mpifort

1.15.2 ライブラリのインストール

本ソフトウェアに必要なライブラリをインストールします。作業ディレクトリは\$HOME/work 、インストール先のディレクトリは\$HOME/localとします。

各ディレクトリを作成し、\$HOME/local/binを PATH 環境変数に追加します。

\$ cd \$HOME

- \$ mkdir work
- \$ mkdir -p local/bin local/lib local/include
- \$ export PATH=\$HOME/local/bin:\$PATH

1.15.2.1 ダウンロード

以下のソフトウェアをダウンロードし、作業ディレクトリ\$HOME/workへ保存します。

ソフトウェア名	ダウンロード先
REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz	http://www.frontistr.com/
$FrontISTR_V50.tar.gz$	https://www.frontistr.com/
${\it OpenBLAS-0.2.20.tar.gz}$	http://www.openblas.net/
metis-5.1.0.tar.gz	http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/download
scalapack-2.0.2.tgz	http://www.netlib.org/scalapack/
$MUMPS_5.1.2.tar.gz$	http://mumps.enseeiht.fr/
trilinos-12.14.1-Source.tar.bz 2	https://trilinos.org/download/

1.15.2.2 REVOCAP_Refiner のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz
- $\$ \ \ cd \ \ REVOCAP_Refiner-1.1.04$
- \$ make
- \$ cp Refiner/rcapRefiner.h \$HOME/local/include

1.15.2.3 OpenBLAS のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf OpenBLAS -0.2.20. tar.gz
- $\ \ \,$ make BINARY=64 NO_SHARED=1 USE_OPENMP=1
- \$ make PREFIX=\$HOME/local install

1.15.2.4 METIS のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf metis -5.1.0.tar.gz

```
delta delt
$ make config prefix=$HOME/local cc=gcc openmp=1
$ make
$ make install
1.15.2.5 ScaLAPACK のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf scalapack -2.0.2.tgz
d cd scalapack -2.0.2
$ mkdir build
\ cmake <code>-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/local</code> \
                            -DCMAKE_EXE_LINKER_FLAGS="-fopenmp" \
                            -DBLAS_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
                            -DLAPACK_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
$ make
$ make install
1.15.2.6 MUMPS のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf MUMPS_5.1.2.tar.gz
\ cd\ MUMPS\_5.1.2
$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc
 コピーしたMakefile.incの以下の部分を書き換えます。
$ vi Makefile.inc
$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc
$ vi Makefile.inc
LMETISDIR = \frac{(HOME)}{local}
                                  = -I$ (LMETISDIR) / include
IMETIS
                                   = -L\$(LMETISDIR)/lib -lmetis
LMETIS
ORDERINGSF = -Dmetis -Dpord
CC
                            = mpicc
FC
                            = mpifort
FL
                            = mpifort
```

```
LAPACK = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas
SCALAP = -L\$(HOME)/local/lib -lscalapack
INCPAR =
LIBPAR = \$(SCALAP)
LIBBLAS = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas
OPTF
         = -O -DBLR_MT -fopenmp
         = -O -I. -fopenmp
OPTC
OPTL
         = -O -fopenmp
書き換えが完了したら保存し make します。
$ make
$ cp lib/*.a $HOME/local/lib
$ cp include/*.h $HOME/local/include
1.15.2.7 Trilinos ML のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf trilinos -12.14.1 - Source.tar.gz
$ cd trilinos -12.14.1-Source
$ mkdir build
\ cmake –DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/local \
         –DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \setminus
         -DCMAKE CXX COMPILER=mpic++ \
         -DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpifort \
         –DTPL_ENABLE_MPI=ON \setminus
         -DTPL_ENABLE_LAPACK=ON \
         -DTPL_ENABLE_SCALAPACK=ON \
         −DTPL ENABLE METIS=ON \
         -DTPL_ENABLE_MUMPS=ON \
         –DTrilinos ENABLE ML=ON \setminus
         -DTrilinos\_ENABLE\_Zoltan\!\!=\!\!\!ON \setminus
         -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{OpenMP}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
         -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{Amesos}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
         -DTrilinos_ENABLE_ALL_OPTIONAL_PACKAGES=OFF \
```

```
-DBLAS_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib \
        -DLAPACK_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib" \
        -DSCALAPACK_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib" \
        -DBLAS_LIBRARY_NAMES="openblas" \
        -DLAPACK_LIBRARY_NAMES="openblas" \
        -DSCALAPACK_LIBRARY_NAMES="scalapack" \
$ make
$ make install
1.15.3 FrontISTR のコンパイル
上記ライブラリのコンパイルが済んだら FrontISTR をコンパイルします。
$ cd $HOME/work/FrontISTR
$ mkdir build
$ cd build
\ cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/FrontISTR \
        –DWITH_ML=ON \setminus
        -DBLAS_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
```

-DLAPACK_LIBRARIES=\$HOME/local/lib/libopenblas.a \

1.15.3.1 make の実行

make を実行します。

\$ make

4並列コンパイルをする場合、

make -j4

とします。並列コンパイルにより、コンパイル時間が短縮されます。

1.15.3.2 make install の実行

make が完了したら、make install を実行し Makefile.conf で指定したディレクトリへインストールします。この例では \$(HOME)/FrontISTR/bin になります。

\$ make install

1.15.3.3 動作確認

solver/precond

```
本ソフトウェアに同梱されているチュートリアルを実行して、動作を確認します。
$ cd $HOME/work/FrontISTR/tutorial
d cd 01_elastic_hinge
$ $HOME/FrontISTR/bin/fistr1
 Step control not defined! Using default step=1
 fstr setup: OK
 Start visualize PSF 1 at timestep 0
 loading step=
                 1
sub_step= 1, current_time= 0.0000E+00, time_inc= 0.1000E+01
 loading_factor=
                   0.0000000
                               1.0000000
### 3x3 BLOCK CG, SSOR, 1
      1
          1.903375E+00
      2
          1.974378E+00
      3
          2.534627E+00
      4
          3.004045E+00
      5
          3.202633E+00
          3.203864E+00
      6
解析が終了すると以下の様に画面上に表示されます。
   2966
         1.143085E-08
   2967
          1.078272E-08
   2968
          1.004759E-08
   2969
           9.372882E-09
### Relative residual = 9.39169E-09
### summary of linear solver
      2969 iterations
                          9.391687E-09
    set-up time
                   :
                          4.108060E-01
    solver time
                          6.506822E+01
    solver/comm time :
                         4.342469E-01
    solver/matvec
                         1.923199E+01
```

2.688405E+01

solver/1 iter : 2.191587E-02 work ratio (%) : 9.933263E+01

Start visualize PSF 1 at timestep 1 ### FSTR_SOLVE_NLGEOM FINISHED!

TOTAL TIME (sec): 74.93

pre (sec) : 1.86

solve (sec) : 73.07

FrontISTR Completed !!

1.16 参考 Ubuntu18.04 へのインストール手順例 (Makefile.conf)

Ubuntu18.04 上へ本ソフトウェアと、それに必要な外部ライブラリの構築手順の例を示します。他の環境へのインストールの参考にしてください。

また、各ライブラリの詳細な構築方法は、それぞれのドキュメントを参考にしてください。

1.16.1 準備

最初に本ソフトウェアをコンパイルするのに必要なツールやパッケージをインストールしてください。

\$ sudo apt install build-essential gfortran cmake openmpi-bin libopenmpi-dev

gcc/g++/gfortran および MPI のラッパーが正しくインストールされているか確認してください。

\$ which gcc g++ gfortran mpicc mpic++ mpifort

/usr/bin/gcc

/usr/bin/g++

/usr/bin/gfortran

/usr/bin/mpicc

/usr/bin/mpic++

/usr/bin/mpifort

1.16.2 ライブラリのインストール

本ソフトウェアに必要なライブラリをインストールします。作業ディレクトリは\$HOME/work 、インストール先のディレクトリは\$HOME/localとします。

各ディレクトリを作成し、\$HOME/local/binを PATH 環境変数に追加します。

\$ cd \$HOME

- \$ mkdir work
- \$ mkdir -p local/bin local/lib local/include
- \$ export PATH=\$HOME/local/bin:\$PATH

1.16.2.1 ダウンロード

以下のソフトウェアをダウンロードし、作業ディレクトリ\$HOME/workへ保存します。

ソフトウェア名	ダウンロード先
REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz	https://www.frontistr.com/
$FrontISTR_V50.tar.gz$	http://www.frontistr.com/
${\it OpenBLAS-0.2.20.tar.gz}$	http://www.openblas.net/
metis-5.1.0.tar.gz	http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/download
scalapack-2.0.2.tgz	http://www.netlib.org/scalapack/
$MUMPS_5.1.2.tar.gz$	http://mumps.enseeiht.fr/
trilinos-12.14.1-Source.tar.bz2	https://trilinos.org/download/

1.16.2.2 REVOCAP_Refiner のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz
- $\$ \ \ cd \ \ REVOCAP_Refiner-1.1.04$
- \$ make
- \$ cp Refiner/rcapRefiner.h \$HOME/local/include

1.16.2.3 OpenBLAS のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- tar xvf OpenBLAS-0.2.20.tar.gz
- $\ \ \,$ make BINARY=64 NO_SHARED=1 USE_OPENMP=1
- \$ make PREFIX=\$HOME/local install

1.16.2.4 METIS のコンパイル

- \$ cd \$HOME/work
- \$ tar xvf metis -5.1.0.tar.gz

```
delta delt
$ make config prefix=$HOME/local cc=gcc openmp=1
$ make
$ make install
1.16.2.5 ScaLAPACK のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf scalapack -2.0.2.tgz
d cd scalapack -2.0.2
$ mkdir build
\ cmake <code>-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/local</code> \
                            -DCMAKE_EXE_LINKER_FLAGS="-fopenmp" \
                            -DBLAS_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
                            -DLAPACK_LIBRARIES=$HOME/local/lib/libopenblas.a \
$ make
$ make install
1.16.2.6 MUMPS のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf MUMPS_5.1.2.tar.gz
\ cd\ MUMPS\_5.1.2
$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc
 コピーしたMakefile.incの以下の部分を書き換えます。
$ vi Makefile.inc
$ cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc
$ vi Makefile.inc
LMETISDIR = \frac{(HOME)}{local}
                                  = -I$ (LMETISDIR) / include
IMETIS
                                   = -L\$(LMETISDIR)/lib -lmetis
LMETIS
ORDERINGSF = -Dmetis -Dpord
CC
                            = mpicc
FC
                            = mpifort
FL
                            = mpifort
```

```
LAPACK = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas
SCALAP = -L\$(HOME)/local/lib -lscalapack
INCPAR =
LIBPAR = \$(SCALAP)
LIBBLAS = -L\$(HOME)/local/lib -lopenblas
OPTF
         = -O -DBLR_ML -fopenmp
         = -O -I. -fopenmp
OPTC
OPTL
         = -O -fopenmp
書き換えが完了したら保存し make します。
$ make
$ cp lib/*.a $HOME/local/lib
$ cp include/*.h $HOME/local/include
1.16.2.7 Trilinos ML のコンパイル
$ cd $HOME/work
$ tar xvf trilinos -12.14.1 - Source.tar.gz
$ cd trilinos -12.14.1-Source
$ mkdir build
\ cmake –DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/local \
         –DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \setminus
         -DCMAKE CXX COMPILER=mpic++ \
         -DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpifort \
         –DTPL_ENABLE_MPI=ON \setminus
         -DTPL_ENABLE_LAPACK=ON \
         -DTPL_ENABLE_SCALAPACK=ON \
         −DTPL ENABLE METIS=ON \
         -DTPL_ENABLE_MUMPS=ON \
         –DTrilinos ENABLE ML=ON \setminus
         -DTrilinos\_ENABLE\_Zoltan\!\!=\!\!\!ON \setminus
         -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{OpenMP}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
         -\mathrm{DTrilinos}\_\mathrm{ENABLE}\_\mathrm{Amesos}\!\!=\!\!\mathrm{ON}\ \setminus
         -DTrilinos_ENABLE_ALL_OPTIONAL_PACKAGES=OFF \
```

```
-DBLAS_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib \
       -DLAPACK_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib" \
       -DSCALAPACK_LIBRARY_DIRS=$HOME/local/lib" \
       -DBLAS_LIBRARY_NAMES="openblas" \
       -DLAPACK_LIBRARY_NAMES="openblas" \
       -DSCALAPACK_LIBRARY_NAMES="scalapack" \
$ make
$ make install
1.16.3 FrontISTR のコンパイル
上記ライブラリのコンパイルが済んだら FrontISTR をコンパイルします。
$ cd $HOME/work
$ tar xvf FrontISTR\_V50.tar.gz
$ cd FrontISTR
1.16.3.1 Makefile.conf の編集
雛形をコピーして、環境に合わせた内容に編集します。この例では、以下の様に編集します。
$ cp Makefile.conf.org Makefile.conf
$ vi Makefile.conf
Setup Configulation File for FrontISTR
#
                                           #
# MPI
MPIDIR
             = /usr/lib/x86 64-linux-gnu/openmpi
MPIBINDIR
             = /usr/bin
MPILIBDIR
             = $(MPIDIR)/lib
MPIINCDIR
             = $(MPIDIR)/include
MPILIBS
             = -lmpi - lmpi cxx - lmpi mpifh
# for install option only
PREFIX
             = $(HOME)/FrontISTR
             = $(PREFIX)/bin
BINDIR
```

LIBDIR

= \$(PREFIX)/lib

```
INCLUDEDIR
               = $(PREFIX)/include
# Metis
METISDIR
               = \$(HOME) / local
               = $(METISDIR)/lib
METISLIBDIR
               = $(METISDIR)/include
METISINCDIR
HECMW_METIS_VER= 5
# ParMetis
PARMETISDIR
               = \$(HOME) / local
PARMETISLIBDIR = (PARMETISDIR) / lib
PARMETISINCDIR = \$(PARMETISDIR) / include
# Refiner
REFINERDIR
               = \$(HOME) / local
REFINERINCDIR = $(REFINERDIR)/include
REFINERLIBDIR = (REFINERDIR)/lib
# Coupler
REVOCAPDIR
               = \$(HOME)/local
REVOCAPINCDIR = \$(REVOCAPDIR) / include
REVOCAPLIBDIR = (REVOCAPDIR) / lib
\# MUMPS
MUMPSDIR
               = $ (HOME) / local
               = $(MUMPSDIR)/include
MUMPSINCDIR
               = $ (MUMPSDIR) / lib
MUMPSLIBDIR
MUMPSLIBS
               = -ldmumps -lmumps_common -lpord -L$(HOME)/local/lib -lscalapack
# MKL PARDISO
           = \$(HOME) /
MKLDIR
MKLINCDIR = \frac{MKLDIR}{include}
MKLLIBDIR = (MKLDIR) / lib
\# ML
MLDIR
               = \$(HOME)/local
               = $(MLDIR)/include
MLINCDIR
MLLIBDIR
               = $ (MLDIR) / lib
MLLIBS
               = -lml -lamesos -ltrilinosss -lzoltan -lepetra -lteuchosremainder -lteuchosnu
# C compiler settings
```

CC = mpicc - fopenmp

CFLAGS =

LDFLAGS = -lstdc++-lm

OPTFLAGS = -O3

C++ compiler settings

CPP = mpic++-fopenmp

 $\begin{array}{lll} \text{CPPFLAGS} & = & \\ \text{CPPLDFLAGS} & = & \\ \text{CPPOPTFLAGS} & = & -O3 \end{array}$

Fortran compiler settings

F90 = mpif90 - fopenmp

F90FLAGS =

F90LDFLAGS = -1stdc++-L\$(HOME)/local/lib-lopenblas

F90OPTFLAGS = -O2 F90FPP = -cpp

F90LINKER = mpif90 - fopenmp

 $\begin{array}{lll} \text{MAKE} & = & \text{make} \\ \text{AR} & = & \text{ar ruv} \\ \text{MV} & = & \text{mv} - \text{f} \\ \text{CP} & = & \text{cp} - \text{f} \\ \text{RM} & = & \text{rm} - \text{f} \\ \text{MKDIR} & = & \text{mkdir} - \text{p} \end{array}$

1.16.3.2 setup.sh の実行

編集が完了したら、setup.sh を実行します。

 $\ \ ./setup.sh\ -p\ --with-tools\ --with-refiner \ \ --with-metis\ --with-mumps\ --with-lapack\ --with-ml$

1.16.3.3 make の実行

make を実行します。

\$ make

1.16.3.4 make install の実行

make が完了したら、make install を実行し Makefile.conf で指定したディレクトリへインストールします。この例では \$(HOME)/FrontISTR/bin になります。

\$ make install

1.16.3.5 動作確認

```
本ソフトウェアに同梱されているチュートリアルを実行して、動作を確認します。
```

- \$ cd \$HOME/work/FrontISTR/tutorial
- \$ cd 01_elastic_hinge
- \$ \$HOME/FrontISTR/bin/fistr1

Step control not defined! Using default step=1

fstr_setup: OK

Start visualize PSF 1 at timestep 0

loading step= 1

 $sub_step=~1\,, \quad current_time=~0.0000E+00\,,~time_inc=~0.1000E+01$

 $loading_factor = 0.0000000 \quad 1.0000000$

3x3 BLOCK CG, SSOR, 1

- 1 1.903375E+00
- 2 1.974378E+00
- 3 2.534627E+00
- 4 3.004045E+00
- 5 3.202633E+00
- 6 3.203864E+00

. . .

. . .

解析が終了すると以下の様に画面上に表示されます。

. . .

. . .

2966 1.143085E-08

2967 1.078272E-08

2968 1.004759E-08

2969 9.372882E-09

Relative residual = 9.39169E-09

summary of linear solver

2969 iterations 9.391687E-09

set-up time : 4.108060E-01solver time : 6.506822E+01solver/comm time : 4.342469E-01solver/matvec : 1.923199E+01solver/precond 2.688405E+01solver/1 iter : 2.191587E-02work ratio (%) 9.933263E+01:

Start visualize PSF 1 at timestep 1 ### FSTR_SOLVE_NLGEOM FINISHED!

TOTAL TIME (sec): 74.93

pre (sec) : 1.86

solve (sec): 73.07

FrontISTR Completed !!

1.17 参考 Windows10 へのインストール手順例 (Makefile.conf)

Windows10上へ、本ソフトウェアとそれに必要な外部ライブラリの構築手順の例を示します。他の環境へのインストールの参考にしてください。

また、各ライブラリの詳細な構築方法は、それぞれのドキュメントを参考にしてください。

1.17.1 準備

最初に本ソフトウェアをコンパイルするのに必要なツールやパッケージをインストールしてください。

1.17.1.1 開発環境の準備

はじめに開発環境をインストールします。使用する開発環境は MSYS2 です。

https://www.msys2.org/

下記 URL から 64 ビット版のインストーラ $msys2-x86_64-xxxxxxxxx$.exe(xxxxxxxxx はバージョン番号) をダウンロードしインストールします。

1.17.1.2 パッケージのインストール

インストールが完了したらMSYS2 MinGW 64-bitと書かれたコマンドプロンプトを立ち上げ、コンパイルに必要なパッケージをインストールします。

```
(MINGW64) pacman -S base-devel mingw-w64-x86_64-toolchain \ mingw-w64-x86_64-cmake \ mingw-w64-x86_64-binutils \ mingw-w64-x86_64-perl \ git \ gcc/g++/gfortran が正しくインストールされているか確認してください。 (MINGW64) which gcc g++ gfortran /mingw64/bin/gcc
```

1.17.2 ライブラリのインストール

 $/\min_{g \in 4} / \min_{g \in F}$

/mingw64/bin/gfortran

本ソフトウェアに必要なライブラリをインストールします。作業ディレクトリは ${
m SHOME/work}$ 、インストール先のディレクトリは ${
m SHOME/local}$ とします。

各ディレクトリを作成し、\$HOME/local/binを PATH 環境変数に追加します。

```
(MINGW64) cd $HOME

(MINGW64) mkdir work

(MINGW64) mkdir -p local/bin local/lib local/include

(MINGW64) export PATH=$HOME/local/bin:$PATH
```

1.17.2.1 MPI のインストール

この例では、MPIとして Microsoft 社の MPI を利用します。

下記 URL からランタイム (msmpisetup.exe) と SDK(msmpisdk.msi) がダウンロードできます。

Download Microsoft MPI v10.0

1.17.2.1.1 .a ライブラリの作成

インストールしたライブラリを MinGW-w64 の gcc や gfortran でリンクできるように変更を加えます。

インストールした.dll から.a を生成します。

```
(MINGW64) cd $HOME/local/lib
```

(MINGW64) gendef /c/Windows/System32/msmpi.dll

(MINGW64) dlltool -d msmpi.def -l libmsmpi.a -D /c/Windows/System32/msmpi.dll

(MINGW64) ls

libmsmpi.a msmpi.def

1.17.2.1.2 ヘッダファイルの修正

次にヘッダファイルをコピーします。

(MINGW64) cd \$HOME/local/include

(MINGW64) cp $/c/Program \setminus Files \setminus (x86 \setminus) / Microsoft \setminus SDKs/MPI/Include /*.h .$

(MINGW64) cp $/c/Program \ Files \ \ (x86 \)/Microsoft \ SDKs/MPI/Include/x64/*.h .$

(MINGW64) ls

mpi.h mpif.h mpifptr.h mpio.h mspms.h pmidbg.h

1.17.2.2 ダウンロード

その他のソフトウェアをダウンロードし、作業ディレクトリ\$HOME/workへ保存します。

ソフトウェア名	ダウンロード先
REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz	https://www.frontistr.com/
$FrontISTR_V50.tar.gz$	https://www.frontistr.com/
${\it OpenBLAS-0.2.20.tar.gz}$	http://www.openblas.net/
metis-5.1.0.tar.gz	http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/download
scalapack-2.0.2.tgz	http://www.netlib.org/scalapack/
$MUMPS_5.1.2.tar.gz$	http://mumps.enseeiht.fr/
trilinos-12.14.1-Source.tar.bz 2	https://trilinos.org/download/

1.17.2.3 REVOCAP_Refiner のコンパイル

(MINGW64) cd \$HOME/work

(MINGW64) tar xvf REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz

(MINGW64) cd REVOCAP_Refiner -1.1.04

(MINGW64) make

(MINGW64) cp lib/x86_64-linux/libRcapRefiner.a \$HOME/local/lib

(MINGW64) cp Refiner/rcapRefiner.h \$HOME/local/include

1.17.2.4 OpenBLAS のインストール

OpenBLAS は MSYS2 から提供されるバイナリパッケージを利用します。 57

```
1.17.2.5 METIS のコンパイル
(MINGW64) cd $HOME/work
(MINGW64) tar xvf metis -5.1.0. tar.gz
(MINGW64) cd metis -5.1.0
MinGW-w64 に合わせるため、以下のファイルを一部修正します。
   • Makefile
   • GKlib/gk_arch.h
   • GKlib/getopt.c
% vim Makefile
60 行目の
cd $(BUILDDIR) && cmake $(CURDIR) $(CONFIG FLAGS)
を
cd $(BUILDDIR) && cmake -G "MSYS Makefiles" $(CURDIR) $(CONFIG_FLAGS)
に変更
(MINGW64) vim GKlib/gk_arch.h
44 行目の
  #include <sys/resource.h>
を削除
(MINGW64) vim GKlib/gk_getopt.h
54 行目からの
/* Function prototypes */
extern int gk_getopt(int __argc, char **__argv, char *__shortopts);
extern int gk_getopt_long(int __argc, char **__argv, char *__shortopts,
              struct gk_option *__longopts, int *__longind);
extern int gk_getopt_long_only (int __argc, char **_argv,
              char *__shortopts, struct gk_option *__longopts, int *__longind);
を削除。
(MINGW64) make config prefix=$HOME/local cc=gcc openmp=1
(MINGW64) make
(MINGW64) make install
```

```
(MINGW64) cd $HOME/work
(MINGW64) tar xvf scalapack -2.0.2.tgz
(MINGW64) cd scalapack -2.0.2
サンプルの SLmake.inc.example を SLmake.inc としてコピーし、環境に合わせて編集します。
(MINGW64) cp SLmake.inc.example SLmake.inc
(MINGW64) vi SLmake.inc
#
   The fortran and C compilers, loaders, and their flags
#
FC
              = gfortran -fno-range-check
CC
              = gcc
NOOPT
              = -00
FCFLAGS
              = -O3 -I\$ (HOME) / local / include
              = -O3 -I\$ (HOME) / local / include
CCFLAGS
              = \$(FC)
FCLOADER
              = \$(CC)
CCLOADER
FCLOADFLAGS
             = \$(FCFLAGS) - L\$(HOME) / local / lib - lmsmpi
              = $(CCFLAGS) -L$(HOME)/local/lib -lmsmpi
CCLOADFLAGS
#
  BLAS, LAPACK (and possibly other) libraries needed for linking test programs
#
BLASLIB
              = -lopenblas
LAPACKLIB
             = -lopenblas
LIBS
              = $(LAPACKLIB) $(BLASLIB)
編集が完了したら make し、完成したライブラリをコピーします。
(MINGW64) make
(MINGW64) cp libscalapack.a $HOME/local/lib
コンパイル終了時にエラーが表示されますが無視して構いません。
1.17.2.7 MUMPS のコンパイル
(MINGW64) cd $HOME/work
(MINGW64) tar xvf MUMPS 5.1.2.tar.gz
(MINGW64) cd MUMPS_5.1.2
```

(MINGW64) cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc

コピーしたMakefile.incの以下の部分を書き換えます。

(MINGW64) vi Makefile.inc

(MINGW64) cp Make.inc/Makefile.inc.generic Makefile.inc

(MINGW64) vi Makefile.inc

 $LMETISDIR = \frac{HOME}{local}$

IMETIS = -I (LMETISDIR) / include

LMETIS = -L\$(LMETISDIR)/lib -lmetis

ORDERINGSF = -Dmetis -Dpord

CC = gcc

FC = gfortran -fno-range-check

FL = gfortran

LAPACK = -lopenblas

SCALAP = -L\$(HOME)/local/lib -lscalapack

INCPAR = -I\$ (HOME) / local / include

 $LIBPAR = \frac{SCALAP}{LIBPAR} + \frac{SCALAP}{LIBPAR} + \frac{LIBPAR}{LIBPAR} - \frac{LIBPAR}{LIBPAR} + \frac{LIBPAR}{LIBPA$

LIBBLAS = -lopenblas

LIBOTHERS = -lpthread

OPTF = -O - fopenmp

 $OPTC = -O - I \cdot -fopenmp$

OPTL = -O - fopenmp

書き換えが完了したら保存し make します。

(MINGW64) make

(MINGW64) cp lib/*.a \$HOME/local/lib

(MINGW64) cp include /*.h \$HOME/local/include

1.17.2.8 Trilinos ML のコンパイル

(MINGW64) cd \$HOME/work

```
(MINGW64) tar xvf trilinos -12.14.1-Source.tar.gz
(MINGW64) cd trilinos -12.14.1 - Source
(MINGW64) mkdir build
(MINGW64) cmake -G "MSYS Makefiles" \
       -DCMAKE_INSTALL_PREFIX="$HOME/local" \
       -DCMAKE CXX FLAGS="-I$HOME/local/include" \
       -DCMAKE_C_FLAGS="-I$HOME/local/include" \
       -DBLAS LIBRARY NAMES="openblas" \
       -DLAPACK_LIBRARY_NAMES="openblas" \
       -DMPI USE COMPILER WRAPPERS=OFF \
       -DMPI_C_HEADER_DIR="$HOME/local/include" \
       -DMPI CXX HEADER DIR="$HOME/local/include" \
       -DTPL ENABLE MP⊫ON \
       -DTrilinos\_ENABLE\_OpenMP=ON \setminus
       −DTrilinos ENABLE ML=ON \
       -DTrilinos\_ENABLE\_Zoltan=\!\!ON \setminus
       -DTrilinos ENABLE ALL OPTIONAL PACKAGES=OFF \
(MINGW64) make
(MINGW64) make install
1.17.3 FrontISTR のコンパイル
上記ライブラリのコンパイルが済んだら FrontISTR をコンパイルします。
(MINGW64) cd $HOME/work
(MINGW64) tar xvf FrontISTR_V50.tar.gz
(MINGW64) cd FrontISTR
1.17.3.1 Makefile.conf の編集
雛形をコピーして、環境に合わせた内容に編集します。この例では、以下の様に編集します。
(MINGW64) cp Makefile.conf.org Makefile.conf
(MINGW64) vi Makefile.conf
#
                                             #
#
     Setup Configulation File for FrontISTR
                                             #
#
```

```
# MPI
```

MPIDIR $= \frac{(HOME)}{local}$

MPIBINDIR = "/c/Program\ Files/Microsoft\ MPI/Bin/"

 $\begin{array}{ll} \text{MPILIBDIR} & = \$(\text{MPIDIR})/\operatorname{lib} \\ \text{MPIINCDIR} & = \$(\text{MPIDIR})/\operatorname{include} \\ \end{array}$

MPILIBS = -lmsmpi

for install option only

 $\begin{array}{lll} \text{PREFIX} & = \$(\text{HOME})/\text{FrontISTR} \\ & = \$(\text{PREFIX})/\sin \\ & = \$(\text{PREFIX})/\text{lib} \\ & \text{INCLUDEDIR} & = \$(\text{PREFIX})/\text{include} \end{array}$

Metis

METISDIR = \$(HOME)/local

METISLIBDIR = \$(METISDIR)/lib

METISINCDIR = \$(METISDIR)/include

 $HECMW_METIS_VER=5$

ParMetis

PARMETISDIR = \$(HOME) / local

PARMETISLIBDIR = (PARMETISDIR) / lib

PARMETISINCDIR = \$(PARMETISDIR)/include

Refiner

REFINERDIR $= \frac{(HOME)}{local}$

REFINERINCDIR = \$(REFINERDIR)/include REFINERLIBDIR = \$(REFINERDIR)/lib

Coupler

REVOCAPDIR $= \frac{(HOME)}{\log a}$

 $\begin{aligned} & \text{REVOCAPINCDIR} &= \$ \left(\text{REVOCAPDIR} \right) / \text{include} \\ & \text{REVOCAPLIBDIR} &= \$ \left(\text{REVOCAPDIR} \right) / \text{lib} \end{aligned}$

MUMPS

MUMPSDIR = \$(HOME) / local

 $\begin{aligned} & \text{MUMPSINCDIR} & = \$ \left(\text{MUMPSDIR} \right) / \text{include} \\ & \text{MUMPSLIBDIR} & = \$ \left(\text{MUMPSDIR} \right) / \text{lib} \end{aligned}$

 $\label{eq:mumps_common_lpord} MUMPSLIBS = -ldmumps_common - lpord - L\$HOME/local/lib - lscalapack$

MKL PARDISO

MKLDIR = (HOME) /

 $MKLINCDIR = \frac{MKLDIR}{include}$

MKLLIBDIR = (MKLDIR)/lib

ML

 $MLDIR \hspace{1cm} = \hspace{1cm} \$ \hspace{1cm} (HOME) \hspace{1cm} / \hspace{1cm} l \hspace{1cm} o \hspace{1cm} c \hspace{1cm} a \hspace{1cm} l \hspace{1cm}$

MLINCDIR = \$(MLDIR)/include

 $MLLIBDIR = \frac{MLDIR}{1ib}$

MLLIBS $= -lml - lzoltan - lws2_32$

C compiler settings

 $\begin{array}{lll} \text{CC} & = & \text{gcc} & -\text{fopenmp} \\ \text{CFLAGS} & = & -\text{D_WINDOWS} \\ \text{LDFLAGS} & = & -\text{lstdc++} & -\text{lm} \\ \end{array}$

OPTFLAGS = -O3

C++ compiler settings

CPP = g + -fopenmp

 $\begin{array}{ll} \text{CPPFLAGS} & = -\text{D_WINDOWS} \end{array}$

CPPLDFLAGS =

CPPOPTFLAGS = -O3

Fortran compiler settings

F90 = gfortran -fopenmp -fno-range-check

F90FLAGS =

F90OPTFLAGS = -O2 F90FPP = -cpp

F90LINKER = gfortran - fopenmp

 $\begin{array}{lll} \text{MAKE} & = & \text{make} \\ \text{AR} & = & \text{ar ruv} \\ \text{MV} & = & \text{mv} - \text{f} \\ \text{CP} & = & \text{cp} - \text{f} \\ \text{RM} & = & \text{rm} - \text{f} \\ \text{MKDIR} & = & \text{mkdir} - \text{p} \end{array}$

1.17.3.2 setup.sh の実行

編集が完了したら、setup.sh を実行します。

```
(MINGW64) ./setup.sh -p --with-tools --with-refiner \
--with-metis --with-mumps --with-lapack --with-ml
```

1.17.3.3 make の実行

make を実行します。

(MINGW64) make

1.17.3.4 make install の実行

make が完了したら、make install を実行し Makefile.conf で指定したディレクトリへインストールします。この例では \$(HOME)/FrontISTR/bin です。

(MINGW64) make install

1.17.3.5 動作確認

本ソフトウェアに同梱されているチュートリアルを実行して、動作を確認します。

```
(MINGW64) cd $HOME/work/FrontISTR/tutorial
```

(MINGW64) cd 01_elastic_hinge

(MINGW64\$) \$HOME/FrontISTR/bin/fistr1

Step control not defined! Using default step=1

fstr_setup: OK

Start visualize PSF 1 at timestep 0

 $loading \ step = \ 1$

 $sub_step=\ 1\,, \quad current_time=\ 0.0000E+00,\ time_inc=\ 0.1000E+01$

loading_factor= 0.0000000 1.0000000

3x3 BLOCK CG, SSOR, 1

- 1 1.903375E+00
- 2 1.974378E+00
- 3 2.534627E+00
- $4 \qquad \quad 3.004045E{+00}$
- 5 3.202633E+00
- 6 3.203864E+00

. . .

. . .

解析が終了すると以下の様に画面上に表示されます。

. . .

2966 1.143085E-08

2967 1.078272E-08 2968 1.004759E-08

9.372882E-09

Relative residual = 9.39169E-09

summary of linear solver

2969 iterations 9.391687E-09set-up time : 4.108060E-01solver time $6.506822\mathrm{E}{+01}$ solver/comm time : 4.342469E-01solver/matvec 1.923199E+01solver/precond 2.688405E+01solver/1 iter 2.191587E-02work ratio (%) 9.933263E+01

Start visualize PSF 1 at timestep 1 ### FSTR_SOLVE_NLGEOM FINISHED!

TOTAL TIME (sec): 74.93

pre (sec) : 1.86 solve (sec) : 73.07

FrontISTR Completed !!

1.17.3.6 補足

MinGW のインストールされていない環境で実行するには、FrontISTR fistr1 .exe と同じディレクトリに以下のファイルをコピーします。

- libwinpthread-1.dll
- libgfortran-3.dll
- $libgcc_s_seh-1.dll$
- \bullet libgomp-1.dll
- libstdc++-6.dll
- libquadmath-0.dll

通常は、

$C\!:\! \backslash \, msys64 \backslash mingw64 \backslash \, bin$

の下にありますので、バイナリを実行するコンピュータにコピーします。

また、Microsoft MPI のランタイム MSMpiSetup.exe も実行するコンピュータにインストールします。