

ADVENTURE_sFlow/ThermalConvection

Non-stationary Thermal Convection Solver with HDDM

Version 1.0

プログラム使用マニュアル

March 25, 2015

ADVENTURE プロジェクト

目次

1. はじめに.....	1
1.1. 本モジュールの特徴.....	1
1.2. 稼働環境.....	1
1.3. コンパイルとインストール.....	2
1.3.1. コンパイル.....	2
1.3.2. インストール.....	3
1.4. 実行方法.....	3
2. ソルバーの特徴.....	5
2.1. 特性曲線法による対称ソルバーの導入と弱連成問題.....	5
2.2. 並列処理機能.....	5
2.3. 非定常解析機能.....	8
2.4. 領域分割 (ADVENTURE_Metis) について.....	8
2.4.1. 領域分割のパラメータ.....	8
2.4.2. 2つの領域分割モデル.....	9
3. 解析機能.....	10
3.1. 解析の流れ.....	10
3.2. 入出力データについて.....	13
3.3. 単位系について.....	13
3.4. 境界条件.....	14
3.5. 物性値.....	14
3.6. 解析結果出力.....	14
4. 実行方法.....	15
4.1. 入出力ファイル名.....	15
4.2. 実行時オプション.....	15
4.2.1. 非定常解析の指定.....	15
4.2.2. 反復法のコントロールオプション.....	16
4.2.3. 入出力ファイル名の変更オプション.....	17
4.2.4. その他のオプション.....	18
Appendix.....	19
A 要素について.....	20
A.1 4面体1次要素.....	20
B 境界条件と物性値について.....	21
B.1 自由度指定境界条件 (流体).....	21

B.2	温度指定境界条件	22
B.3	熱流束境界条件	23
B.4	熱伝達境界条件	24
B.5	物性値.....	25
B.6	重力加速度	25
B.7	BCtool Ver.2.1における境界条件設定	26
C	ツール類について.....	27
C.1	一体型解析モデル変換フィルタ sFlow_makefem_c.....	27
C.2	面グループ節点リスト作成ツール fgr_getnode	28
C.3	速度・圧力・温度結合ツール hddmmrg_ts.....	28
C.4	データ変換ツール advsflow_p_rest2ucd.....	28
C.5	データ変換ツール sflow_vtkconv.....	29
C.6	データ変換ツール sflow_pvconv	30
D	解析例	31
D.1	非定常熱対流問題解析例	31
E	依存ライブラリのインストール手順.....	42
E.1	Lis のインストール	42
E.2	MUMPS のインストール	42
	参考文献	47

1. はじめに

本書は ADVENTURE Project[1]において開発中の、階層型領域分割法(Hierarchical Domain Decomposition Method, 以下 HDDM)を用いた並列処理による非定常非圧縮性粘性流問題(Navier-Stokes 方程式) 解析のための有限要素ソルバー, ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection の使用マニュアルである. 1 章では ADVENTURE_sFlow の概要及び実行までの操作手順を説明し, 2 章以降では本プログラムの解析機能等を紹介する.

1.1. 本モジュールの特徴

ADVENTURE_sFlow は以下のような特徴を持っている.

- ・ 熱対流方程式の非定常問題の解析が可能
- ・ 4 面体 1 次要素に対応
- ・ 安定化有限要素法を使用
- ・ Lagrange 微分を特性曲線法によって近似した有限要素法を使用
- ・ 伝熱問題と流れ問題を分離して解く弱連成問題として定式化
- ・ 階層型領域分割法による負荷分散を行った並列処理が可能 (流れ問題の求解のみ)
- ・ 領域分割法による負荷分散を行った並列処理が可能 (伝熱問題の求解のみ)

1.2. 稼働環境

本プログラムは以下の環境で動作確認をしている.

対応プラットフォーム : UNIX, Linux

並列通信ライブラリ : MPI

並列線形代数ソルバー : MUMPS, Lis

フリーの MPI ライブラリとして有名なものには, MPICH と LAM/MPI がある. 最近の Linux ディストリビュータではどちらかがインストールされている場合もあるが, 無い場合にはインストールが必要となる.

- ・ MPICH の入手先 <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>
- ・ LAM の入手先 <http://www.lam-mpi.org/>

MUMPS と Lis は, 共に熱解析処理の実装に用いた TryDDM ライブラリから呼び出される, 並列線形代数ソルバーライブラリである. 入手法及びインストール手順については, Appendix E をご覧いただきたい. TryDDM ライブラリは ADVENTURE_sFlow のソースコードに同梱されたカスタム版を使用するため, ダウンロード等は不要である.

1.3. コンパイルとインストール

1.3.1. コンパイル

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection のモジュールをコンパイルするには、C コンパイラと MPI のコンパイル環境、ADVENTURE_IO がインストールされている必要がある。ADVENTURE_sFlow モジュールをコンパイルするには、以下の手順に従えばよい。

- (1) アーカイブファイルを展開する。

```
gunzip -c AdvFlow-1.0.tar.gz | tar xvf -
```

- (2) 展開したディレクトリに移動し、コンパイルを行う。

Makefile.in の初期状態は、\${HOME}/ADVENTURE にインストールすることを前提とした記述になっている。それ以外の場所にインストールする場合などは、Makefile.in をテキストエディタで開き、以下のマクロを環境に合わせて設定する。

ADVSYS_DIR	ADVENTURE システムのトップディレクトリ
ADVIO_CONFIG	ADVENTURE_IO のスクリプト advsys-config までのフルパス
MPI_CC	MPI の C コンパイラ
MPI_LINKER	MPI の C リンカ
CC	C コンパイラ
LINKER	C リンカ
CFLAGS	最適化オプション
EXT_LIB_BASE_DIR	MUMPS 等の外部ライブラリのインストールディレクトリ

なお、Makefile.in の初期状態は、ADVENTURE_sFlow/Thermal Convection で使用している外部ライブラリ類が全て EXT_LIB_BASE_DIR で指定したディレクトリにインストールされていることを前提としている。これらのライブラリを個別にインストールした場合は、以下のマクロを個別に設定する必要がある。

MUMPS_DIR	MUMPS のヘッダとライブラリがあるディレクトリ
SCALAPACK_DIR	Scalapack のヘッダとライブラリがあるディレクトリフルパス
BLAS_DIR	BLAS のヘッダとライブラリがあるディレクトリ
PARMETIS_DIR	ParMetis のヘッダとライブラリがあるディレクトリ
LIS_INC_DIR	Lis のヘッダがあるディレクトリ

LIS_LIB_DIR	Lis のライブラリがあるディレクトリ
-------------	---------------------

その後 `make` を実行する.

```
make
```

1.3.2. インストール

コンパイルに成功したら, 以下のコマンドによりインストールが行われる.

```
make install
```

なお, インストール先ディレクトリへの書き込み権限を持ったユーザーにて行う必要がある.

インストールするディレクトリを変更するには, 以下のコマンドを実行すればよい.

```
make install prefix=install_dir
```

ただし, `install_dir` はインストールするディレクトリのフルパスを指定する必要がある.

1.4. 実行方法

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection には並列版の静的負荷分散型の `advflow-p` の実行モジュールがある.

また, 並列版では MPI を用いているが, ここでは MPICH における実行方法を例として紹介する. MPI には種々の実装があり, コンパイルや実行方法は実装系に依存しているため, それぞれの実装系におけるマニュアルを参照し, 適宜該当部分を置き換えることで実行が可能である.

```
mpirun [options for mpirun] advflow-p [options] data_dir
```

[options for mpirun]

`mpirun` に対するオプションとして主なものに以下のようなものがある. なお, 詳細は MPICH のマニュアルを参照のこと.

- `-np number_of_hosts`
`number_of_hosts` に起動する MPI プロセスの数を指定する.

- **-machinefile** *machine_file*
並列計算に使用するマシン名のリストを指定する。指定しない場合は、システムで設定されているデフォルトファイルが使用される。

[*options*]

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection に対するオプション指定により、解析種類の指定や種々の設定を行う。詳しくは後述する。

2. ソルバーの特徴

2.1. 特性曲線法による対称ソルバーの導入と弱連成問題

Navier-Stokes 問題に Galerkin 近似を導入した場合、非線形項の処理で問題があることが知られている。ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection ではその問題に対処するため、Ver.0.5b までは安定化法のみを用いていた。その場合、後退 Euler 法の各ステップで解く連立一次方程式が非対称となるため、GPBi-CG, Bi-CGSTAB, Bi-CGSTAB2 法といった非対称ソルバーを使用していた。

ADVENTURE_Solid など ADVENTURE の他のソルバーモジュールでは、対称ソルバーに対して BDD 前処理などの強力な前処理手法を適用することで大幅な高速化を実現している。そこで、Ver.1.0 では Lagrange 微分(物質微分)を特性曲線法で近似することで対称ソルバーを利用する方式に改めた。

また、Ver.0.5b までは流れ問題と伝熱問題を単一の方程式として解く強連成問題として定式化していたが、Ver.1.0 ではこれらを分離して解く弱連成問題として定式化する手法に改めた。

2.2. 並列処理機能

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection では、階層型領域分割法を用いることで並列処理を可能としている。領域の階層型分割を模式的に図示したものが [図 1](#) である。一階層目の大きな分割単位を“部分(Part)”とし、二階層目の細かい分割単位を“部分領域(Subdomain)”と呼ぶことにする。これらの領域分割は ADVENTURE_Metis により先だ行って行っておく必要がある。

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection は並列ライブラリとして MPI を用いており、起動時にはユーザーの指定に応じて複数のプロセス(環境によってはスレッド)が起動される。1 ノード(CPU)あたり 1 プロセスを起動するのが一般的であるため、以下では分かりやすさのためプロセス、ノード、CPU といった言葉は特に区別せず用いている。ただし、1 ノードに対して複数のプロセスを割り当てることももちろん可能である。

並列処理には静的負荷分散版(`advflow-p`)が実行バイナリとして用意されている。[図 2](#) に示すように、1つの Part を 1つのプロセスに静的に割り当てることで並列に計算を行う。領域分割における Part 数と実行プロセス数が同じであるため、あらかじめ ADVENTURE_Metis において Part 数を静的負荷分散で使用するプロセス数に揃える必要がある。

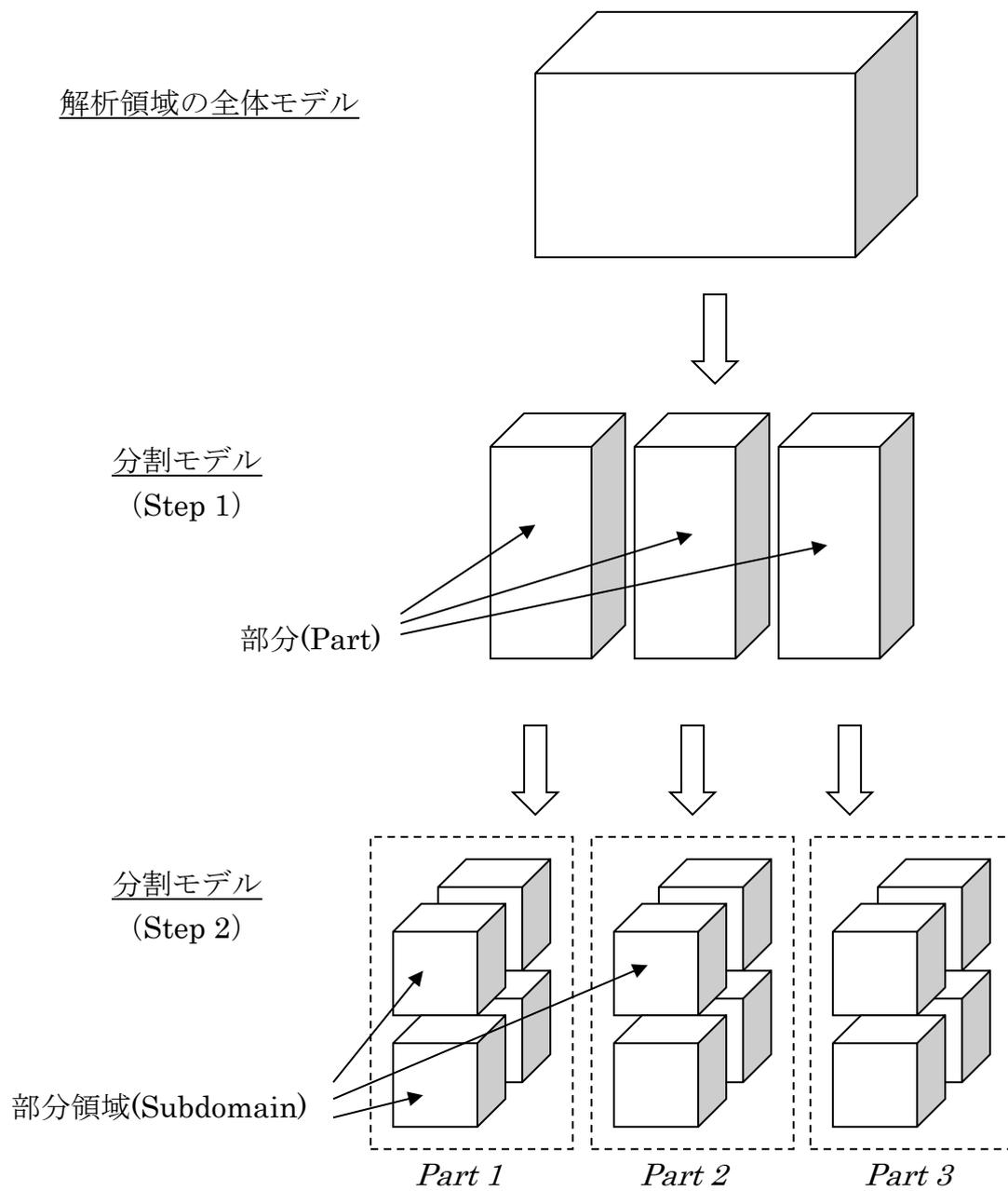


図 1: 階層型領域分割

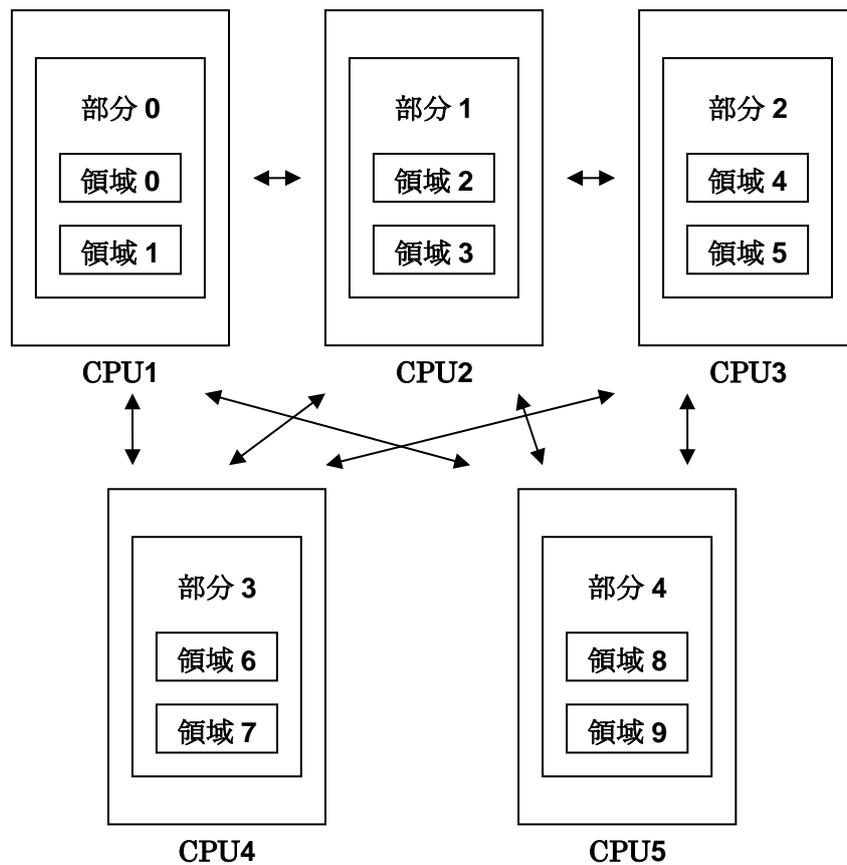


図 2: 領域の CPU への割り当て - 静的負荷分散版

2.3. 非定常解析機能

非定常解析においては、後退 Euler 法を用いている。また、ステップごとに伝熱問題と流れ問題を分離して求解している（弱連成解法）。これらの処理の大きな流れは図 3 のようになる。全体として、2重のループになっており、外側のループは非定常反復、内側のループは階層型領域分割法におけるインターフェース問題の求解のための反復である。また、図では省略したが、実際は伝熱問題の求解処理でも CG 法による反復計算が存在する。

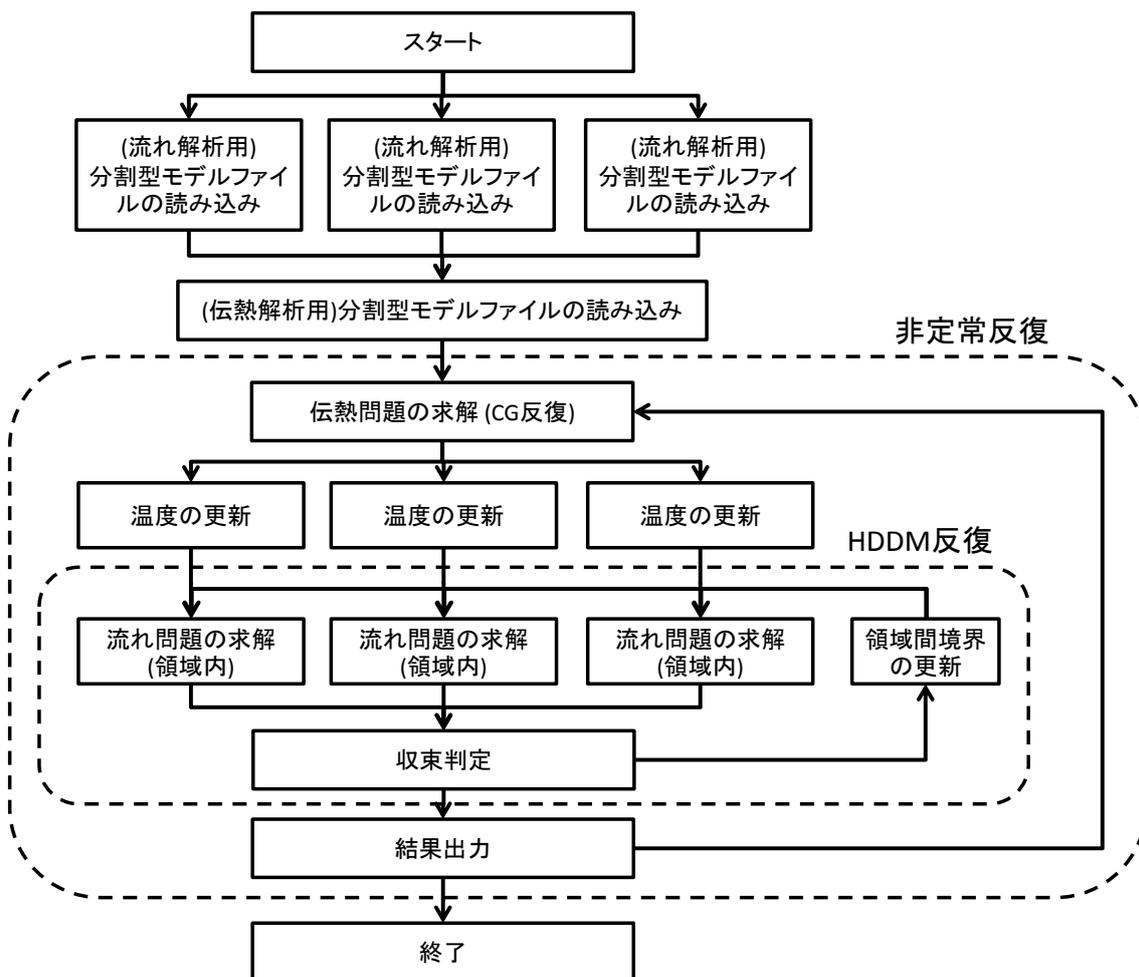


図 3：解析の流れ

2.4. 領域分割 (ADVENTURE_Metis) について

2.4.1. 領域分割のパラメータ

ADVENTURE_Metis では、非常に細かい分割を行った場合、要素を一つも含まないような領域が作られてしまうことがある。ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection では実行時にそのような領域が見つかったら、警告を出して終了するようになっている。また、

総要素数に対して非常に粗い分割を行った場合、計算量が多くなりメモリ不足になることがあります、このときも警告を出して終了するようになっている。

このように ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection モジュールの計算性能は、適切な領域分割に依存している。基本的に、“Part”数は並列処理の手法、ネットワークで使用されるノードの数や計算機環境に基づいて決定される。“Subdomain”数は、計算処理に必要とされるメモリに基づいて決定される。細かく分割すれば Subdomain あたりのメモリ使用量を少なくできることは自明のことである。

2.4.2. 2つの領域分割モデル

ADVENTURE_sFlow / ThermalConveciton Ver.1.0 では、流れ解析と伝熱解析で別の解析モデルファイルを使用する。

流れ解析用の領域分割モデルでは、複数“Part”への分割を行うことができる。このとき、内部境界上の節点の自由度を 4 に指定するためのオプション(-difn 4)が必須である。

伝熱解析用の領域分割モデルでは、使用しているライブラリ(TryDDM)の制約により、1Part のみの分割を行う必要がある。また、内部境界上の節点の自由度を 1 に指定するためのオプション(-difn 1)が必須である。

ADVENTURE_Metis の実行方法等の詳細は、3.1 節で後述する。

3. 解析機能

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection は、並列処理により、非定常熱対流問題の解析が可能である。これらの解析における機能を以下に示す。

3.1. 解析の流れ

ADVENTURE システムにおいて、ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection および前後の処理の流れは図 4 のようになっている。

(1) メッシュデータの作成(ADVENTURE_TetMesh)

解析対象に対してメッシュ分割を行う。

(2) 境界条件の付加(ADVENTURE_BCtool)

解析対象のメッシュに境界条件を付加する。

(3) 解析モデルの変換(makefem3 もしくは fgr_getnode, sFlow_makefem_c, makebc)

一体型の解析モデルファイルの作成には、ADVENTURE_BCtool Ver.2.1 付属のツール makefem3 を使用する。

ADVENTURE_BCtool Ver.2.1 を使用できない場合には、ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection 付属のツールである fgr_getnode, 及び sFlow_makefem_c を使用する。これらはそれぞれ境界面に属する節点データの作成を行うためのもの、そして一体型解析モデルファイルを作成するためのものである。また、熱流束及び熱伝達境界条件の設定には ADVENTURE_BCtool Ver.2 の makebc を使用する。詳しい実行方法は後述の Appendix を参照して頂きたい。

(4) 領域分割(ADVENTURE_Metis)

一体型の解析モデルより階層型に領域分割されたモデルを作成する。

領域分割モデルは、流れ解析用と熱解析用の 2 つを用意する必要がある。どちらも同じ一体型解析ファイルから、領域分割モジュール ADVENTURE_Metis を用いて作成する。

流れ解析用の領域分割モデルは、adventure_metis のオプション-difn 4 を用いて、例えば以下のように実行される必要がある。

```
mpirun [mpi options] adventure_metis -difn 4 [options]
      model_filename directory_name div_num
```

このオプション“-difn 4”は、内部境界上の節点の自由度を 4 に指定するためのものである。これは、固体静解析では求める節点変位の自由度は 3 であるのに対し、流れ問題での解析で求める節点の自由度が 4 であるためである。

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection への入力モデル作成において、`-difn 4` は必須オプションである。

熱解析用の領域分割モデルは、`adventure_metis` のオプション`-difn 1` を用いて、例えば以下のように実行される必要がある。

```
adventure_metis -difn 1 [options]
                    model_filename directory_name_th div_num
```

このオプション”`-difn 1`”は、内部境界上の節点の自由度を 1 に指定するためのものである。これは、熱解析で求める自由度(温度)は 1 節点につき 1 自由度であることによる。ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection への入力モデル作成において、`-difn 1` は必須オプションである。

また、流れ解析用の分割型解析ファイルと区別するため、出力先のディレクトリは流れ解析用の `adventure_metis` 実行時のものとは別にすることがある点、及び 1Part のみの分割となるため、`mpirun` が不要である点にも注意を要する。

(5) 非定常熱対流問題解析(ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection)

分割された解析モデルを入力として、有限要素解析を行う。

ただし、Ver.1.0 では流れ問題用と伝熱問題用の 2 種類の分割型解析ファイルを入力ファイルとして使用している点には注意が必要である。

(6) 可視化(ParticleViewerHPC/AVS/ParaView など)

解析結果を可視化する。

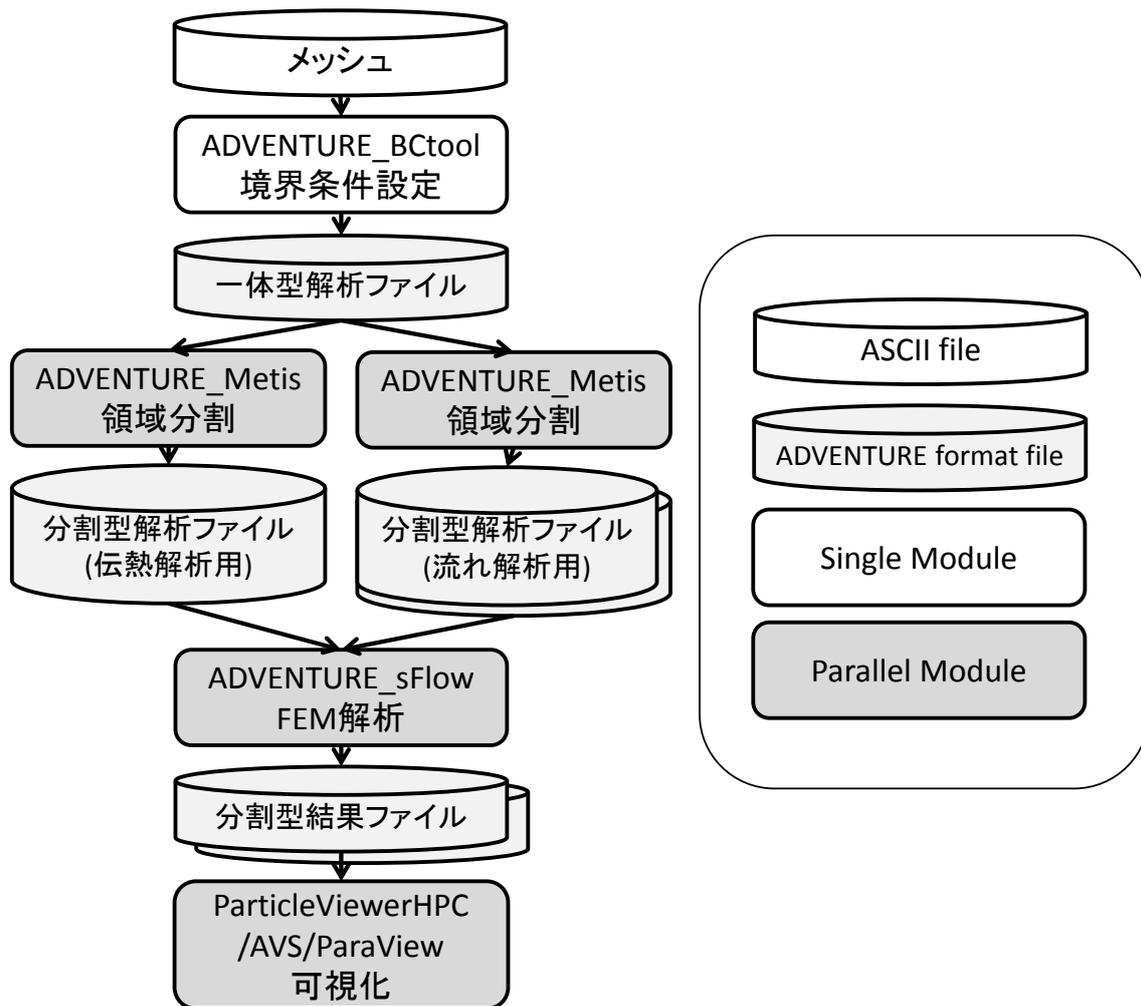


図 4：解析の流れ

3.2. 入出力データについて

ADVENTURE_sFlow における入出力ファイルは図 5 のようになっている。画面のログ出力以外のファイルは全て、ADVENTURE フォーマットであり、Part ごとに 1 ファイルとなっている。ただし、流れ解析用の分割型解析ファイルとは別に、伝熱問題求解用の分割型解析ファイルも同時に用いる。

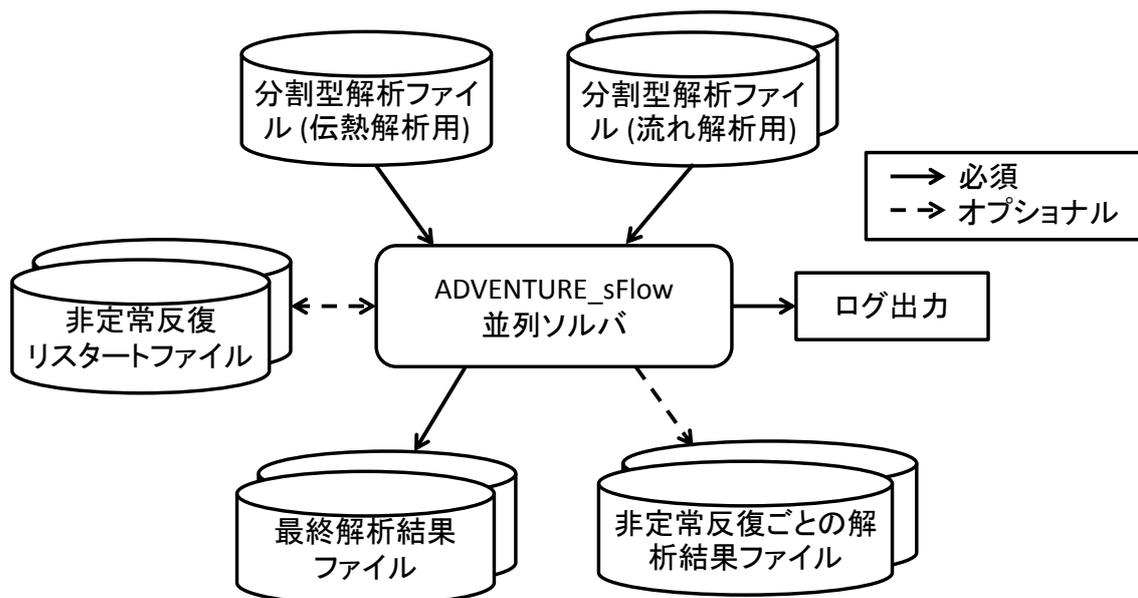


図 5: 入出力ファイル

出力ファイルも階層型に領域分割された形式で与えられ、節点ごとに速度と圧力、並びに温度の物理量を持つ。非定常解析時には時間ステップ毎の出力も可能である。これらも階層型に領域分割された形式での出力となる。

連続して実行できる時間が限られている環境などでも解析可能なように、途中までの計算結果を一旦ファイルにセーブし、その時点から計算を再開するためのリスタート機能がある。使用できるリスタートファイルには、非定常反復リスタートファイルがある。

3.3. 単位系について

ADVENTURE_sFlow では、速度、密度で正規化した圧力（以下圧力）、温度の値を自由度として採用している。その他の単位系の指定機能は含まれておらず、入力データ作成時に矛盾のない単位系を使用しておく必要がある。

3.4. 境界条件

付加できる境界条件には以下のものがある.

- ・ 自由度指定境界条件 (節点指定/流速, 圧力, 温度)
- ・ 自然境界条件 (表面力無し, 熱流束なし)
- ・ その他 (熱流束あり, 熱伝達)

3.5. 物性値

等方的な材料物性に対し, 以下の物性値が使用できる.

- ・ 動粘性係数
- ・ 温度伝導率 (拡散係数に相当)
- ・ 熱膨張率
- ・ 参照温度

また, 厳密には物性値とは言えないが, 重力加速度も同様の形式で定義することができる.

3.6. 解析結果出力

解析結果としては階層型に領域分割された形式で与えられ, 各節点での速度, 圧力, 温度が出力される.

解析モデルと同様に **Part** ごとに 1 ファイルの **ADVENTURE** フォーマットで出力される.

4. 実行方法

起動のコマンドは、並列版の起動には MPI が必要である。mpich での起動コマンドは

```
mpirun [options for mpirun] advsflow-p [options] data_dir
```

である。

ここで、[options for mpirun]は mpirun コマンドに対するオプションである。

[options]は ADVENTURE_sFlow 自身に対するオプションであり、このオプション指定により解析種類の指定や種々の設定を行う。(詳しくは 4.2 参照)

data_dir は必須オプションであり、入出力データファイルのトップディレクトリを指定する。この下のディレクトリおよびファイル名は次節に示すようになる。

4.1. 入出力ファイル名

各入出力ファイル名はデフォルトでは以下のようにになっている。data_dir は入出力ファイルのトップディレクトリであり、各ファイルはこの data_dir 以下に置かれる。

- ・ 分割型解析モデルファイル(流れ解析用):
data_dir/model/advhddm_in_P.adv
- ・ 分割型解析モデルファイル(伝熱解析用):
data_dir/model_th/advhddm_in_0.adv
- ・ 解析結果ファイル:
data_dir/result/advhddm_out_P.adv
- ・ リスタートファイル(非定常解析時の途中ファイル):
data_dir/result/advhddm_out_S_P.adv

ここで、P は Part 番号、S は後退 Euler 法のステップ番号を示している。

4.2. 実行時オプション

実行時に可能なオプションは以下の通りである。

4.2.1. 非定常解析の指定

(流れ解析・伝熱解析共通)

- ・ -ns
非定常解析を行う。このオプションをつけないと Stokes 問題となる。さらに以下のようなサブオプションが指定可能であり、-ns に続けて指定することができる。

- `--ns-tol x`
収束判定のためのトレランスを指定する。これは後退 Euler 法における相対変化量であり、これより相対変化量が小さくなった時点で定常解に達したとみなす。デフォルトでは 1.0×10^{-4} に設定してある。
- `--step n`
後退 Euler 法のステップ回数の上限を n 回に指定する。デフォルトでは 20 になっている（デフォルト値は便宜上の値である）。
- `--out-interval n`
後退 Euler 法の最終ステップ以外に、ステップ n 回ごとに解析結果ファイルを出力する。デフォルトでは出力しない。
- `--use-resin n`
前の実行において出力された後退 Euler 法のステップ n におけるリスタートファイルを読み込み、そこから解析を再開する。
- `--dt`
時間刻みを指定する。

(流れ解析用)

- `--init_v Vx0 Vy0 Vz0`
初期速度を指定する。指定しない場合は (0.0, 0.0, 0.0) となる。

(伝熱解析用)

- `--init_t T0`
初期温度を指定する。指定しない場合は 0.0 となる。

4.2.2. 反復法のコントロールオプション

ADVENTURE_sFlow では、階層型領域分割法に基づく反復計算を行っており、それらをコントロールするためにいくつかのオプションがある。

(流れ解析・伝熱解析共通)

- `-cg-tol x`
収束判定のためのトレランスを指定する。これは反復における初回での残差に対する相対誤差であり、反復においてこれより相対誤差が小さくなった時点で収束とする。デフォルトでは 1.0×10^{-6} に設定してある。

(流れ解析用)

- `-precon [bdd | bdd-diag | diag | none]`
階層型領域分割法のインターフェース問題の求解に使用する前処理として、**BDD** 前処理(**bdd**)・**BDD-diag** 前処理(**bdd-diag**)・対角スケーリング前処理(**diag**)及び前処理なし(**none**)のいずれかを指定する。デフォルトでは前処理なし(**none**)に設定してある。
- `-cgloop-max n`
反復回数の上限を指定する。デフォルトでは 10,000 になっている。
- `-cg-norm [Euclid | Max]`
Max のときは反復法の相対残差を **Max** ノルムで取る。**Euclid** のときは反復法の相対残差を **2** ノルムで取るようにする。デフォルトでは **Euclid** (**2** ノルム)である。

なお、伝熱解析における CG 反復のパラメータは、Ver.1.0 では以下のように固定している点に注意を要する。

- CG 反復回数の上限 : 30 万回
- 反復法の相対残差ノルム : **Euclid** (**2** ノルム)

4.2.3. 入出力ファイル名の変更オプション

入出力に用いるファイルの指定方法は、基本的にそれらのトップディレクトリのみを指定し、そこからのファイル、ディレクトリ名はデフォルト値を用いるようになっている。これらを変更する場合は、以下のオプションを使用する。以下では **S** が時間ステップ番号、**P** が **Part** 番号を示している。

(流れ解析用)

- `-model-file file`
流れ解析用の入力解析モデルファイル名を **file** とする。実際のファイル名は、これに **_P.adv** をつけたものとなる。デフォルトは **advhddm_in** である。
- `-model-dir dir`
入力解析モデルファイルのあるサブディレクトリ名を **dir** とする。デフォルトは **model** である。

(伝熱解析用)

- `-thermal-model-file file`
伝熱解析用の入力解析モデルファイルを **file** とする。流れ解析用のファイル指定と異なり、ディレクトリ名も含めて、完全なファイル名(ただし末尾の".adv"は除く)で指定する必要がある。

(流れ解析・伝熱解析共通)

- `-result-file file`
解析結果ファイル名を `file` とする。実際のファイル名は、これに `_P.adv` をつけたものとなる。デフォルトは `advhddm_out` である。
- `-result-dir dir`
解析結果ファイルのあるサブディレクトリ名を `dir` とする。デフォルトは `result` である。
- `-ns-resin-file file`
時間ステップリスタート入力ファイル名を `file` とする。実際のファイル名は、これに `_S_P.adv` をつけたものとなる。デフォルトは `advhddm_out` である。
- `-ns-resin-dir dir`
時間ステップリスタート入力ファイルのあるサブディレクトリ名を `dir` とする。デフォルトは `result` である。

4.2.4. その他のオプション

(流れ解析・伝熱解析共通)

- `-memlimit n`
各プロセスが使用するメモリの上限を `n [MByte]` とし、これを越えた場合、その時点で実行を停止する。デフォルトは `1,024 [MByte]` である。
- `-help` または `-h`
メインのヘルプメッセージを表示する。
- `-version` または `-v`
モジュールのバージョンを表示する。
- `-help-ns`
非正常反復のコントロールオプション指定のためのヘルプメッセージを表示する。
- `-help-iter`
反復法のコントロールオプション指定のためのヘルプメッセージを表示する。

Appendix

- A 要素について
- B 境界条件と物性値について
- C ツール類について
- D 解析例
- E 依存ライブラリのインストール手順

A 要素について

ADVENTURE_sFlowは、4面体1次要素に対応している。

A.1 4面体1次要素

節点数は4であり、要素コネクティビティでの各節点の節点番号の並び順は図 6 のようになっている。

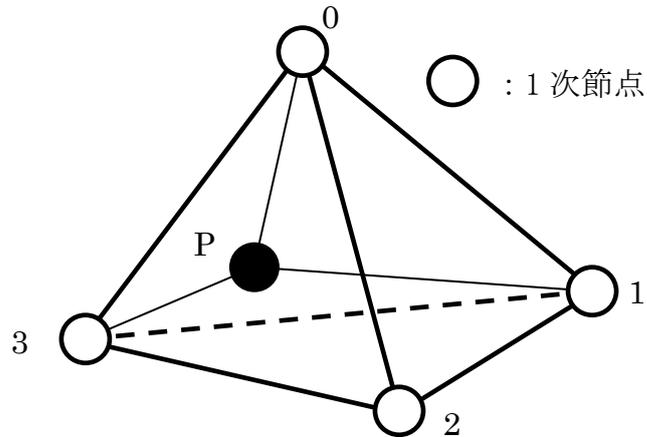


図 6：四面体 1 次要素

節点番号と要素面番号の対応を図 7 に示す。

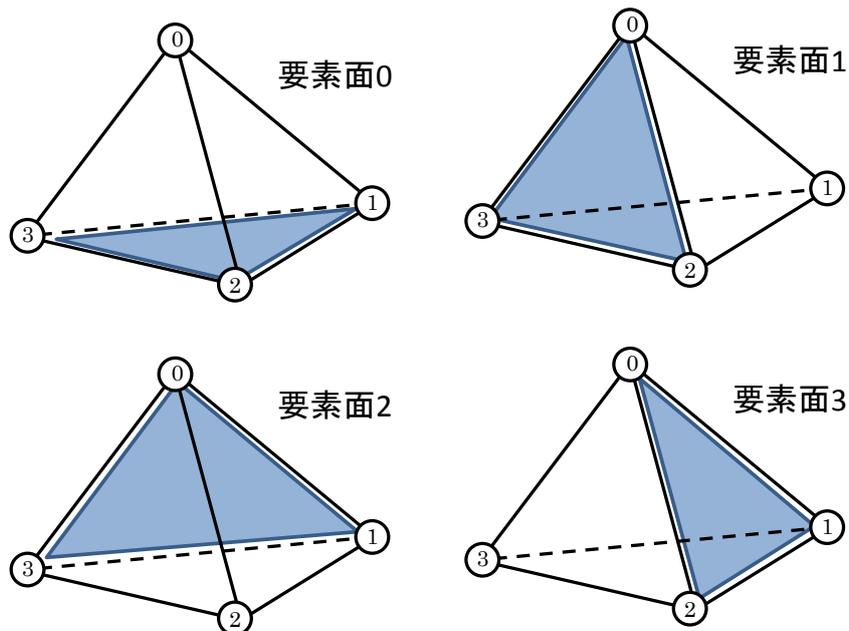


図 7：節点番号と要素面番号の対応

B 境界条件と物性値について

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvectionで利用可能な境界条件のフォーマットの例を以下に示す.

B.1 自由度指定境界条件 (流体)

```
[Properties]
1: content_type=FEGenericAttribute
2: num_items=81
3: feqa_type=NodeVariable
4: label=DirichletBC
5: format=i4f8
6: index_byte=4
[Data]
0 0 1.000000e+00
1 0 1.000000e+00
3 0 1.000000e+00
58 0 1.000000e+00
59 0 1.000000e+00
60 0 1.000000e+00
...
...
```

図 8: 自由度指定境界条件フォーマット例

左から順に, 節点番号, 方向成分, 設定値[圧力, 速度]を示している. ただし, 方向成分に関しては, 非定常熱対流問題の解析では1節点あたりの自由度が4 (熱解析は分離して解いている)のために, 流速の方向成分0, 1, 2のほかに圧力の成分として3が必要になる.

B.2 温度指定境界条件

```
[Properties]
1: content_type=FEGenericAttribute
2: num_items=81
3: fega_type=Nodevariable
4: label=Temperature
5: format=i4f8
6: index_byte=4
[Data]
0 0 1.000000e+00
1 0 1.000000e+00
3 0 1.000000e+00
...
...
```

図 9：温度規定境界条件フォーマット例

左から順に、節点番号、方向成分、温度を示している。ただし、方向成分に関してはソルバー内部で無視される。このフォーマットは、ADVENTUREプロジェクトで開発されている熱解析ソルバーADVENTURE_Thermalの温度規定境界条件と同一である。

なお、label名は”DirichletBC1”としてもよい。

B.3 熱流束境界条件

```
[Properties]
1: content_type=FEGenericAttribute
2: num_items=81
3: fega_type=NodeVariable
4: label=HeatFlux
5: format=i4f8
6: index_byte=4
[Data]
0 0 1.000000e+00
59 0 1.000000e+00
60 0 1.000000e+00
...
...
```

図 10: 温度規定境界条件フォーマット例

左から順に、節点番号、方向成分、熱流束を示している。ただし、方向成分に関してはソルバー内部で無視される。このフォーマットは、ADVENTUREプロジェクトで開発されている熱解析ソルバーADVENTURE_Thermalの熱流束境界条件と同一である。

B.4 熱伝達境界条件

```
[Properties]
1: content_type=FEGenericAttribute
2: num_items=81
3: feqa_type=ElementVariable
4: label=HeatConvection
5: format=i4f8f8
6: index_byte=4
[Data]
0 0 1.000000e+02 1.000000e+00
1 0 0.000000e+00 1.000000e+00
...
...
```

図 11： 温度規定境界条件フォーマット例

左から順に、要素番号、要素面番号、外部温度、熱伝達係数を示している。

このフォーマットは、ADVENTUREプロジェクトで開発されている熱解析ソルバーADVENTURE_Thermalの熱伝達境界条件と同一である。

B.5 物性値

```
[Properties]
1: content_type=FEGenericAttribute
2: num_items=1
3: fega_type=AllElementVariable
4: label=Kinematicviscosity
5: format=f8
[Data]
1.0000000e-2
```

図 12: 物性値フォーマット例

ここでは動粘性係数の値のみを指定している。

B.6 重力加速度

```
[Properties]
1: content_type=FEGenericAttribute
2: num_items=1
3: fega_type=AllElementVariable
4: label=gravity
5: format=f8f8f8
[Data]
0.0000000e+0 0.0000000e+0 -9.8000000e+0
```

図 13: 重力加速度フォーマット例

重力加速度は、X/Y/Z成分ごとに値を設定する。

B.7 BCtool Ver.2. 1における境界条件設定

BCtool Ver.2.1 以降の makefem3 では、ADVENTURE_sFlow/ThermalConvection 用の境界条件と重力加速度を設定可能である。それぞれ、以下の書式を使用する。

- 流速指定境界条件
velocOnFaceGroup <fgrId> 0 <dir> <value>
- 圧力境界条件
presOnFaceGroup <fgrId> 0 3 <value>
- 温度規定境界条件
tempOnFaceGroup <fgrId> 0 0 <value>
- 熱流束境界条件
fluxOnFaceGroup <fgrId> 0 0 <value>
- 熱伝達境界条件
convOnFaceGroup <fgrId> <ref_temp> <coeff>
- 重力加速度
gravity <gx> <gy> <gz>

設定方法や end ファイルのフォーマットの詳細は、BCtool のマニュアルを参照されたい。

C ツール類について

ADVENTURE_sFlow / ThermalConvectionのアーカイブ中には、本体モジュールの他に以下のツールが含まれている。

C.1 一体型解析モデル変換フィルタ sFlow_makefem_c

sFlow_makefem_cは、ADVENTURE_BCtoolにより得られる構造解析用の解析条件ファイル(拡張子 cnd)を非定常熱対流問題解析用に変換するツールである。具体的には以下のような変換を行うことができる。

- 変位境界条件 ⇒ 自由度指定境界条件 (流速・圧力・温度)

実行方法は

```
sFlow_makefem_c <kinematic viscosity> <heat conductivity> <beta> <Tr>  
mshFile datFile cndFile advFile
```

である。

ここで、mshFileは、ADVENTURE_TetMeshにより作成されるメッシュデータ、datFileはfgr_getnode(後述)によって作成される面グループ節点リストデータ、cndFileは、ADVENTURE_BCtoolにより作成される境界条件データである。

<kinematic viscosity>には動粘性係数、<heat conductivity>には温度伝導率、<beta>には熱膨張率、<Tr>には参照温度を指定する。またadvFile名は各自の好きなように指定できる。

このコマンドを実行することで、ADVENTURE_sFlow / ThermalConvection解析用advFileが出来上がる。本ツールにおいて物性値の変換は行うのでADVENTURE_BCtoolにおけるmakefemコマンドにより一体型ファイルを作成する必要はない。

また、熱流束境界条件と熱伝達境界条件 については、BCtool Ver.2に含まれるmakebcコマンドを使用して境界条件のみのadvファイルを作成し、advcatコマンドを使ってsFlow_makefem_cで作成したadvファイルと結合することで使用可能である。

C.2 面グループ節点リスト作成ツール fgr_getnode

ADVENTURE_BCtoolのmsh2pchコマンドにて作成された面グループファイル (fgrファイル)から、面グループに所属する節点のリストを作成するツールである。

実行方法は

```
fgr_getnode fgrFile datFile
```

である。

ここで、fgrFileはmsh2pchで作成される面グループ定義データ、datFileは面グループ節点リストデータである。

C.3 速度・圧力・温度結合ツール hddmmrg_ts

ADVENTURE_Metisにて分割後、ADVENTURE_sFlow / ThermalConvectionにて解析することにより求められた、分割された速度・圧力・温度成分をそれぞれ1つにまとめるものである。

実行方法は

```
hddmmrg_ts -step <num> [Pressure, Temperature or Velocity]  
directory_for_analysis
```

である。

[Pressure, Temperature or Velocity]は、圧力場を求めたいときはPressureを、温度場を求めたいときはTemperatureを、速度場を求めたいときはVelocityを選択する。

directory_for_analysisは、ADVENTURE_Metisで分割されたモデル、及びADVENTURE_sFlow / ThermalConvectionにて解析された結果が入っているディレクトリ名を指定する。

このコマンドを実行することで、Pressure.dat、Temperature.datもしくはVelocity.datが得られ、各節点ごとの圧力・温度・速度の値を知ることが出来る。また、これらを次節で紹介するデータ変換ツールを実行する際に使う。

C.4 データ変換ツール advsflow_p_rest2ucd

解析結果をAVSのUCD形式に変換するツールである。これにより、Micro AVS等を用いて解析結果の速度場・圧力場・温度場をチェックすることが出来る。

実行方法は

```
advflow_p_rest2ucd advFile ucdFile step del_time
```

である.

advFileは, 一体型解析モデル変換フィルタnon_stationary_makefemによって求められたadvFileである. ucdFileは, 出力されるUCDファイル名である. ファイル名は各自で自由に指定できる.

また, 実行する際の注意点として, advFile, ucdFileの拡張子は入力しないこと. また, 前節で紹介したhddmrg_tsにて出力されたPressure.dat, Temperature.dat 及び Velocity.datが advFileと同じディレクトリにある必要がある.

C.5 データ変換ツールsflow_vtkconv

解析結果をvtk形式に変換するツールである. これにより, ParaView等を用いて解析結果の速度場・圧力場・温度場をチェックすることが出来る.

実行方法は

```
sflow_vtkconv_ns.sh mshFile vtk_prefix interval label1 dim1 [label2  
dim2 ...]
```

である.

mshFileはADVENTURE形式のメッシュファイルである.

vtk_prefixは出力されるvtkファイルのプリフィックスとなる. 例えば, "step"という文字列を指定した場合は, "step_0.vtk""step_1.vtk"といったような一連のファイルが出力される(数字はステップ番号).

intervalは時間ステップの出力間隔で, advflow-p実行時の"-out-interval"と同じ数字を指定する必要がある.

labelNとdimNは, vtkファイルに出力する変数名とその変数の値の次元数を指定する. 例えば, 速度場を変換する場合は"Velocity 3"のように, 温度場を変換する場合は"Temperature 1"と指定する. 複数の変数をまとめて変換する場合は変数の数だけ変数名と次元数を列挙する. なお, 前々節で紹介したhddmrg_tsにて出力された変数のファイルが存在する必要がある.

C.6 データ変換ツールsflow_pvconv

解析結果をParticleViewerHPC形式に変換するツールである。これにより、ParticleViewerHPCを用いて解析結果の速度場・圧力場・温度場をチェックすることが出来る。

実行方法は

```
sflow_pvconv.sh mshFile lst_prefix start_step end_step interval
```

である。

実行すると、hddmmrgから出力されたdatファイルとともに、ParticleViewerHPC用のlstファイルができる。これらのファイルとmshファイルを同一ディレクトリにコピーし、ParticleViewerHPCの「動解析の結果を開く」を選ぶことで、可視化を行う。

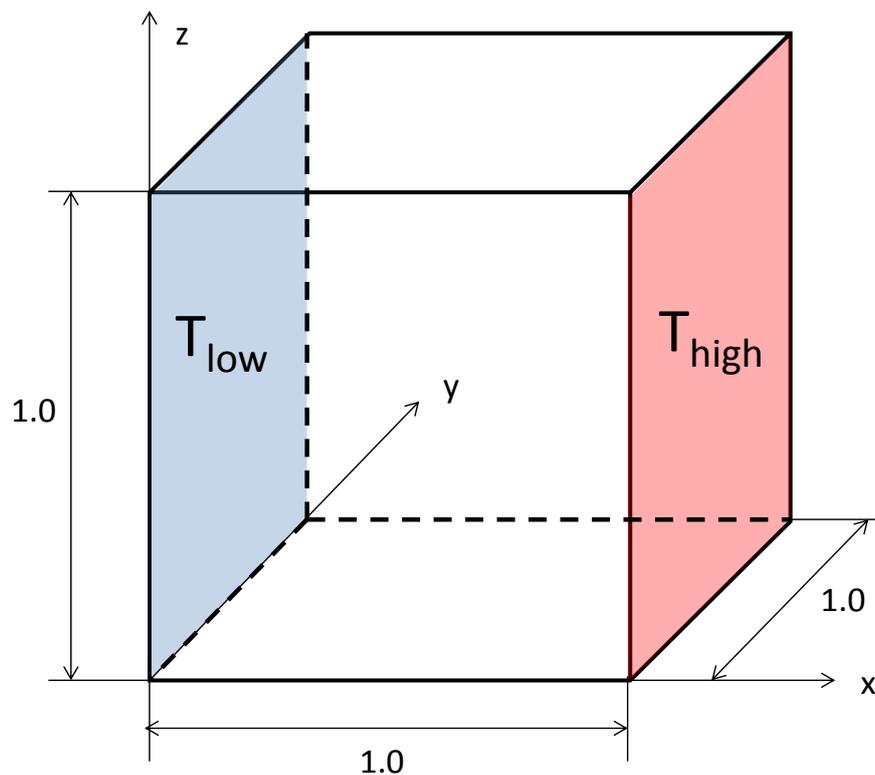
D 解析例

D.1 非定常熱対流問題解析例

ここでは、ADVENTURE Systemを用いたモデル作成と、ADVENTURE_Metisによる領域分割、このモデルのADVENTURE_sFlow / ThermalConvectionによる解析例を示す。モデルの作成にはADVENTURE_CAD, ADVENTURE_TetMesh, ADVENTURE_BCtoolの各モジュールを用いる。

以下に、各手順、及びこの例の実行に使用したコマンドを示す。それぞれのコマンドの詳細に関しては、各システムのマニュアルを参照していただきたい。

図 14に解析モデルの形状と境界条件を示す。



温度指定:

$$T_{\text{high}} = 1.0[\text{K}], T_{\text{low}} = 0.0[\text{K}]$$

速度指定

$$[x=0.0, x=1.0] (u, v, w) = (0, 0, 0) [\text{m/s}]$$

$$[y=0.0, y=1.0] v = 0 [\text{m/s}]$$

$$[z=0.0, z=1.0] (u, v, w) = (0, 0, 0) [\text{m/s}]$$

図 14 : Thermal Cavity 解析モデルの形状と境界条件

(1) モデル形状の作成

ここでは、簡単な形状モデルの Thermal Cavity 問題の解析例を示していく。まず、geometry file : thermal_cavity.gm3d を作成する。

```
thermal_cavity.gm3d
```

```
box 0 0 0 1 1 1
```

図 15 形状定義ファイルの作成例

(2) 表面パッチの作成

ジオメトリファイルをもとに ADVENTURE_CAD を用いて表面パッチを作成する。まず、節点密度ファイルを適当なエディタで作成する。図 16 に作成例を示す。

```
thermal_cavity.ptn
```

```
BaseDistance
```

```
0.05
```

図 16: 節点密度ファイルの作成例

次のコマンドにより、thermal_cavity.pcm が作成される。ここでは、節点密度を 0.05 としている。

```
advcad thermal_cavity.gm3d thermal_cavity.pcm 0.05 -pcm
```

(3) メッシュデータの作成

4 面体メッシュを切り、節点要素情報を入力する。

次のコマンドにより thermal_cavityc.pcc が作成され、続いて、thermal_cavityc.msh が作成される。

```
advtmesh9p thermal_cavity
advtmesh9m thermal_cavityc
```

(4) 境界条件の付加

ADVENTURE_BCtool を用いて境界条件を付加する。

次のコマンドにより、thermal_cavityc_3.fgr, thermal_cavityc_3.pch, thermal_cavityc_3.pcg, thermal_cavityc_3.trn が作成される。

```
msh2pch thermal_cavityc.msh 3
```

続いて次のコマンドにより bcGUI を実行すると図 17 のようなウィンドウが開く.

```
bcGUI thermal_cavityc_3.pch thermal_cavityc_3.pcg
```

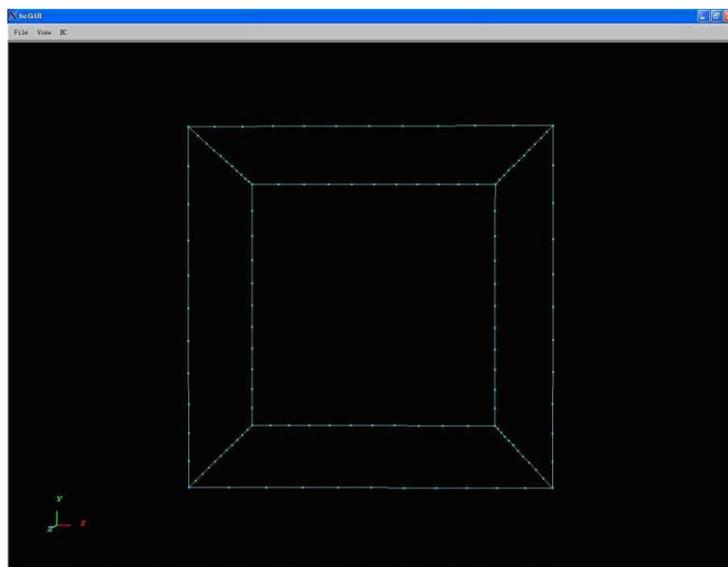


図 17: bcGUI コマンドによるウィンドウ表示

まずは, 図 18 に示す面 (黄面) において x , y , z の各面の速度を 0 に指定する. ただし速度の境界条件は変位 (Displacement) で代用する.

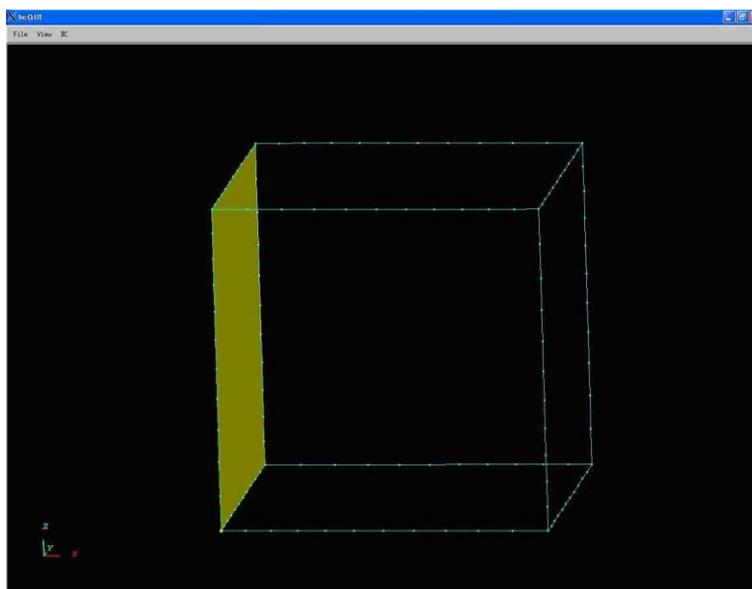


図 18: 境界条件指定例 1

次に、上と同様に、図 19 に示す 6 つの面それぞれに適切な境界条件を設定する。温度の境界条件設定は後に説明する。

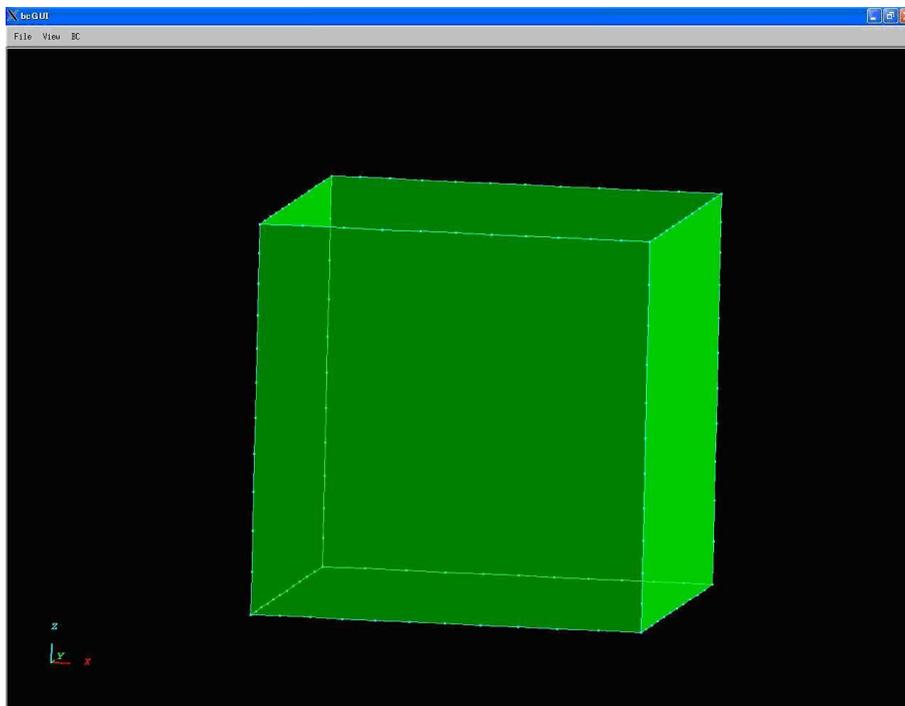


図 19：境界条件指定例 2

すべての境界条件を設定し終わったら、“thermal_cavity.cnd”というファイル名で出力する。

温度の境界条件は直接入力する必要がある。図 20 に示すように、この場合 16 ある境界条件のうち下から 1 つ目と 2 つ目が温度の境界条件を示している。4 つある番号の 1 個目が面の番号を示し、3 個目の 4 が温度の境界条件を示し、4 個目が温度 1.0[K], 0.0[K]を示している。なお、この例では面の座標値と面番号の関係は以下のようにになっている。環境によってはこの関係が異なることもあるため、その都度確認していただきたい。

- ・ 面番号[0] : $x=0$
- ・ 面番号[1] : $z=0$
- ・ 面番号[2] : $z=1$
- ・ 面番号[3] : $y=1$
- ・ 面番号[4] : $y=0$
- ・ 面番号[5] : $x=1$

```
gravity 0 0 -9.8
boundary 16
dispOnFaceGroup 0 0 0 0
dispOnFaceGroup 0 0 1 0
dispOnFaceGroup 0 0 2 0
dispOnFaceGroup 1 0 0 0
dispOnFaceGroup 1 0 1 0
dispOnFaceGroup 1 0 2 0
dispOnFaceGroup 2 0 0 0
dispOnFaceGroup 2 0 1 0
dispOnFaceGroup 2 0 2 0
dispOnFaceGroup 3 0 1 0
dispOnFaceGroup 4 0 1 0
dispOnFaceGroup 5 0 0 0
dispOnFaceGroup 5 0 1 0
dispOnFaceGroup 5 0 2 0
dispOnFaceGroup 5 0 4 1
dispOnFaceGroup 0 0 4 0
```

図 20：解析条件ファイル (拡張子 `cnd`)フォーマット例

なお、ADVENTURE_BCtool Ver.2.1 以降の `makefem3` を使用する場合は、境界条件と物性値をそれぞれ以下のように記述する。

```
gravity 0 0 -9.8
boundary 16
velocOnFaceGroup 0 0 0 0
velocOnFaceGroup 0 0 1 0
velocOnFaceGroup 0 0 2 0
velocOnFaceGroup 1 0 0 0
velocOnFaceGroup 1 0 1 0
velocOnFaceGroup 1 0 2 0
velocOnFaceGroup 2 0 0 0
velocOnFaceGroup 2 0 1 0
velocOnFaceGroup 2 0 2 0
velocOnFaceGroup 3 0 1 0
velocOnFaceGroup 4 0 1 0
```

```

velocOnFaceGroup 5 0 0 0
velocOnFaceGroup 5 0 1 0
velocOnFaceGroup 5 0 2 0
tempOnFaceGroup 5 0 4 1
tempOnFaceGroup 0 0 4 0

```

図 21 makefem3 を使用する場合の境界条件ファイル

```

KinematicViscosity 0.71
HeatConductivity 1.0
beta 710
Tr 0.5

```

図 22 makefem3 を使用する場合の物性値ファイル

(5) 一体型解析モデルの作成

sFlow_makefem_c は ADVENTURE_BCtool により得られる解析条件ファイルを非定常熱対流問題解析用に変換するツールである。

まず、初めに fgr_getnode で各面の節点一覧を作成する。

以下のコマンドを入力する。出力ファイルは“thermal_cavity.dat”である。

```
fgr_getnode thermal_cavityc_3.fgr thermal_cavity.dat
```

続けて、以下のコマンドにより一体型解析モデルを作成する。ただし、出力されるファイルは thermal_cavity.adv である。

```
sFlow_makefem_c 0.71 1.0 710 0.5 thermal_cavityc.msh
thermal_cavity.dat thermal_cavity.cnd thermal_cavity.adv
```

この問題では熱流束境界条件と熱伝達境界条件は不要なので、これで一体型解析モデルは完成である。

なお、ADVENTURE_BCtool Ver.2.1 以降の makefem3 を使用する場合は、以下のコマンドで一体型解析モデルを作成する。“-sflow”オプションを使用することで、sFlow用の解析モデルが作成される。

```
makefem3 -sflow thermal_cavityc.msh thermal_cavityc_3.fgr
thermal_cavity.cnd mp.dat thermal_cavity.adv
```

(6) 領域分割 (流れ解析用)

作成した一体型解析モデルをもとに `ADVENTURE_Metis` を用いて階層型に領域分割されたモデルを作成する。なお、実行時にはオプション `-difn 4` を用いる必要がある。これは、対流問題では1節点あたりの自由度が4 (熱問題は流体とは別に解く(弱連成)ため、ここでの自由度にはカウントしない)であることによる。Ver.0.5b では熱対流問題を一体の方程式で解いていた(いわゆる強連成)ため、`-difn 5` を指定していたので注意が必要である。

まず、階層型の領域分割をするために、部分 (Part) 数と部分領域 (Subdomain) 数を決定する。ここでは、2 台の PC を用いて静的負荷分散版で解析することとする。このため、Part 数を 2 とする。ここで、解析モデルの要素数は 95,182 であり、1 部分領域あたりの要素数を 500 とすると、

$95,307$ (要素数) $\div 2$ (Part 数) $\div 500$ (1 部分領域あたりの要素数) $= 95.307$ となるので1部分あたりの部分領域数を 96 とする。なお、解析領域全体での部分領域数は

$$(\text{Part 数}) \times (1 \text{ 部分領域あたりの部分領域数})$$

なので、192 となる。領域分割は次のコマンド例のように行う。

```
mpirun -np 2 -machinefile machinefile adventure_metis -difn 4
thermal_cavity.adv . 96
```

ここで、`-machinefile` は MPI のオプションである。なお、`."` は入出力用のディレクトリとして現在のディレクトリを指定することを表す。

(7) 領域分割 (伝熱解析用)

伝熱解析用にも、作成した一体型解析モデルをもとに `ADVENTURE_Metis` を用いて階層型に領域分割されたモデルを作成する。なお、実行時にはオプション `-difn 1` を用いる必要がある。これは、伝熱問題では1節点あたりの自由度が1 (節点温度)であることによる。

Ver.1.0 では、伝熱解析モデルの分割では、使用する PC の台数に関わらず、部分 (Part) 数は 1 でなければならない。解析モデルの要素数は 95,307 であり、1 部分領域あたりの要素数を 100 とすると、

$95,307$ (要素数) $\div 1$ (Part 数) $\div 500$ (1 部分領域あたりの要素数) $= 190.614$ となるので1部分あたりの部分領域数を 190 とする。このように、流れ解析の全部分領域数と伝熱解析の部分領域数が同じでなくとも問題ない。また、流れ解析用の分割型解析モデルファイルと区別するため、出力先のディレクトリを初期値から変更して

おく必要がある。領域分割は次のコマンドは次の例のように行う。

```
adventure_metis -difn 1 -subdir_name model_th thermal_cavity.adv .
950
```

ここで、`-machinefile` は MPI のオプションである。また、“`-subdir_name model_th`” オプションを使用して、出力先のディレクトリを標準に“`model`”から“`model_th`”に変更している。“.” は入出力用のディレクトリとして現在のディレクトリを指定することを表す。

(8) 解析の実行

ADVENTURE_sFlow のモジュールを用いて、分割された解析モデルを入力として解析を行う。解析は次のコマンド例のように行う。

```
mpirun -np 2 -machinefile machinefile advsflow-p -ns --ns-tol 0.6
--dt 0.01 --step 61 --out-interval 1 -thermal-model-file
model_th/advhddm_in_0 -cg-norm Euclid -precon diag .
```

ここで、`-ns` は ADVENTURE_sFlow に対するオプションであり、非定常解析を行うための必須オプションである。解析終了時間は`--ns-tol` (0.6) と、ステップ数×時間刻み (=61×0.01=0.61) の小さいほうの値で決定される。また、この例では対角スケール前処理を用いている(`-precon` オプション)。伝熱解析用の解析ファイルは“`-thermal-model-file`”オプションで指定している。

(9) 解析結果の可視化(ParticleViewerHPC)

ここでは、ParticleViewerHPC による可視化までの例を紹介する。

ADVENTURE_sFlow 付属の `sflow_pvconv.sh` を使うことで ParticleViewerHPC で使用できる `lst` ファイルと `dat` ファイルを作成することができる。以下にコマンド例を示す。

```
sflow_pvconv.sh 0 61 1 thermal_cavityc.msh .
```

1 番目と 2 番目のオプションは変換するステップの最初と最後, 3 番目のオプションは変換するステップの間隔, 4 番目のオプション「`thermal_cavityc.msh`」はメッシュファイル, 5 番目のオプションは `model` と `result` の両ディレクトリがある場所を指定する。

図 24 に ParticleViewerHPC を用いて XZ 面の温度分布を可視化した結果を示す。

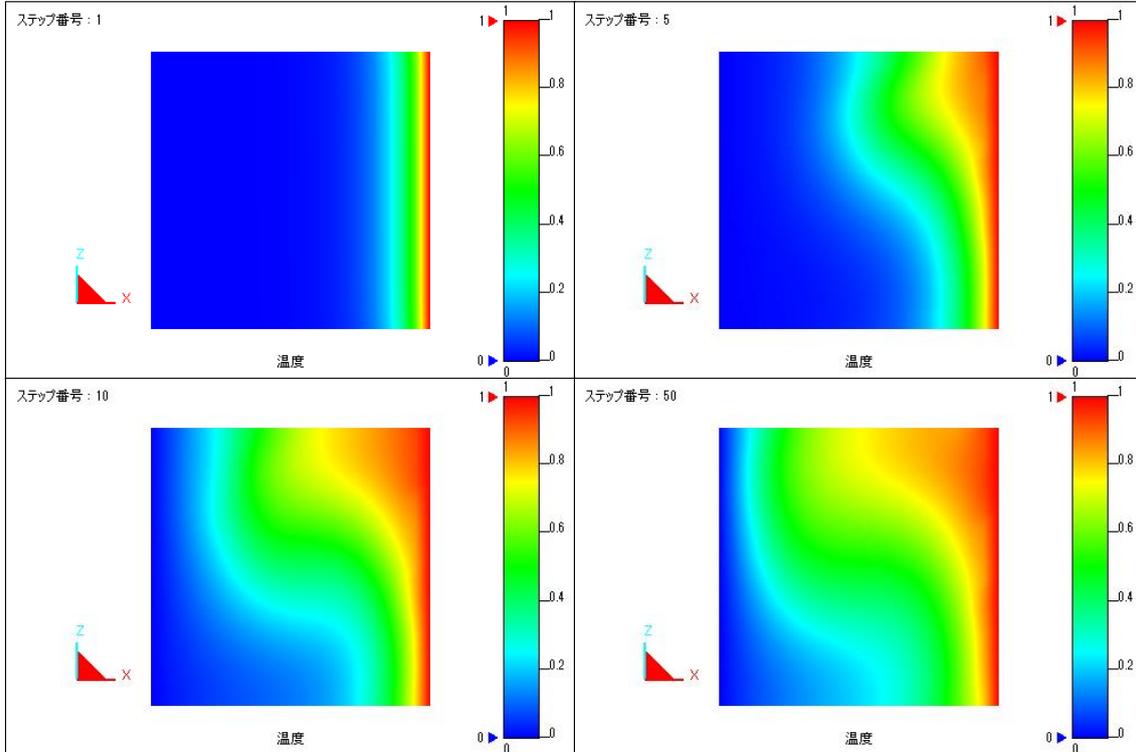


図 23 温度分布の可視化 (ParticleViewerHPC)

(10) 解析結果の可視化(ParaView)

ここでは、ParaView による可視化までの例を紹介する。ADVENTURE_sFlow 付属の `sflow_vtkconv_ns.sh` を使うことで ParaView 等で使用できる VTK ファイルを作成することができる。

まず、解析結果の出力ファイルより圧力、速度、及び温度のデータを取り出す。実行方法は以下のとおりである。

```
hddmrg_ts -step 60 Pressure .
hddmrg_ts -step 60 Velocity .
hddmrg_st -step 60 Temperature .
```

これにより、各節点ごとの圧力、速度、及び温度の値を知ることができる。

次に、出力されたこれらのデータ (`Pressure.dat`, `Velocity.dat`, `Temperature.dat`) と `thermal_cavityc.msh` のファイルより、VTK ファイルを作成する。以下にコマンド例を示す。

```
sflow_vtkconv_ns.sh thermal_cavityc.msh step 61 1 Velocity 3  
Pressure 1 Temperature 1
```

1 番目のオプション「thermal_cavityc.msh」はメッシュファイル, 2 番目のオプション「step」は出力される VTK ファイルのステップ番号を除いた部分, 3 番目のオプション「61」は変換するステップ数, 4 番目のオプション「1」はソルバー実行時の「--out-interval」オプションと同じ数字, それ以降のオプションは出力項目名(label名)と項目ごとの次元数を表す.

図 24 に ParaView を用いて XZ 面の温度分布を可視化した結果を示す.

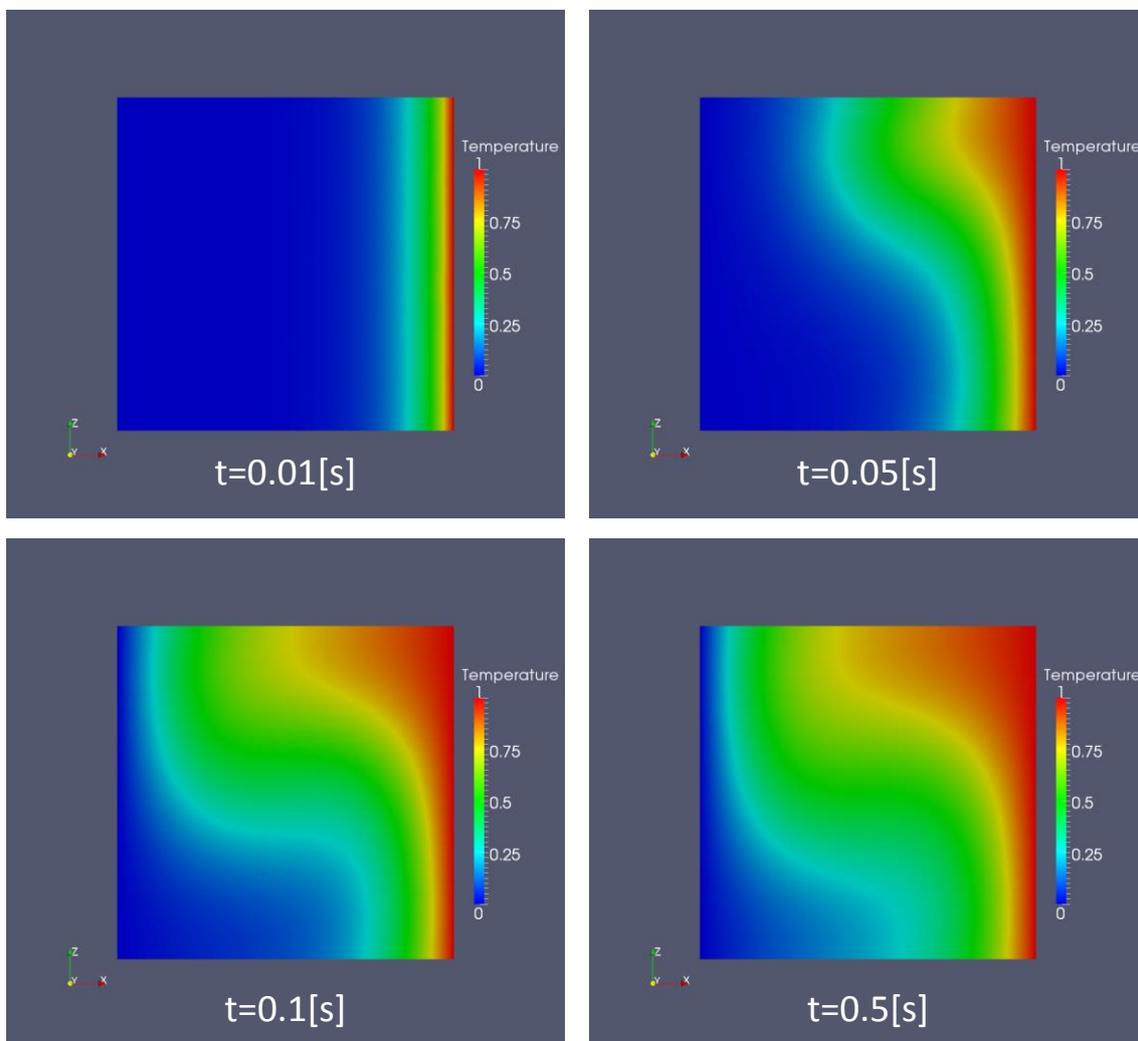


図 24 温度分布の可視化

なお, AVS で可視化する場合は, 以下のようなコマンドで UCD ファイルに変換する.

```
advflow_p_rest2ucd thermal_cavity thermal_cavity 61 0.01
```

ここで, 前者の `thermal_cavity` は ADV ファイル名であり, 後者の `thermal_cavity` は UCD 形式のファイル名である (出力は `thermal_cavity.inp`).

また, `thermal_cavity.adv`, `Pressure.dat`, `Velocity.dat`, `Temperature.dat` が同じディレクトリにあることに注意する.

E 依存ライブラリのインストール手順

ADVENTURE_sFlow Ver.1.0 は、以下のライブラリの機能を利用した実装となっている。

1. MUMPS
2. Lis

また、MUMPS 自体も多数の外部ライブラリの機能を利用している。

本章ではこれらのライブラリ軍のインストール手順について述べる。

なお、以下の説明では、これらのライブラリのインストール先を $\{\text{HOME}\}/\text{lib}/$ としていることを前提とする。

E.1 Lisのインストール

Lis のソースコードは公式 web サイト(www.ssisc.org/lis/index.ja.html)からダウンロードする。2015/2/24 現在の最新版は `lis-1.5.51.tar.gz` である。

`tar+gzip` で展開すると `lis-1.5.51` ディレクトリ内にソースコードが展開される。

`lis-1.5.51` ディレクトリに移動後、以下のようにコンパイルとインストールを行う。

```
$ CC=mpicc ./configure -prefix=${HOME}/ADVENTURE/extlib/lis/ --enable-mpi
$ make
$ make install
```

TryDDMが“make install”ではインストールされない”`lis_system.h`”を使用するため、`lis-1.5.51`ディレクトリを丸ごと $\{\text{HOME}\}/\text{lib}/$ に移動する。

E.2 MUMPSのインストール

MUMPS(a MULTifrontal Massively parallel sparse direct Solver)は、仏 INRIA などが開発している並列疎行列直接法ソルバーライブラリである。

MUMPS は ScaLAPACK・BLAS・BLACS を利用している。また、オーダリングに AMD・AMF・PORD・METIS/ParMETIS・SCOTCH/PT-SCOTCH のいずれかを利用可能である。

MUMPS は、主要 Linux ディストリビューションであれば、各ディストリビューションのパッケージ管理システムを使用して簡単にインストールできる。

- **Ubuntu Linux**
universe/mumps を apt-get などインストール
- **Debian GNU/Linux**
libmumps-dev を apt-get などインストール
- **Fedora Linux**
MUMPS-devel を yum でインストール
- **RedHatEnterpriseLinux/CentOS**
EPEL(Extra Packages for Enterprise Linux)リポジトリを追加[26]の上、
MUMPS-devel 等を yum でインストール
- **OpenSUSE**
science リポジトリを追加 [27] の上、mumps-devel 等を yast でインストール

また、最近のスーパーコンピュータでは MUMPS がプリインストールされている場合が多い。このように、事前にコンパイルされた MUMPS が利用可能な場合は、そちらを使用することをお勧めする。

以下は、MUMPS 及び MUMPS が利用している外部ライブラリを全てソースコードからインストールするときの手順を簡単にまとめたものである。

依存ライブラリのコンパイル(1) : BLAS

BLAS のソースコードは netlib の web サイト(www.netlib.org/blas/)からダウンロードする。blas.tgz (Apr. 19th 2011 リリース)が最新版 (2014/11/13 現在)である。

ダウンロードした後、tar+gzip 等で展開すると”BLAS”ディレクトリ以下にソースコードが展開される。この状態ですでに Linux+gfortran 用に設定済みである。それ以外の OS や fortran コンパイラを使用する場合は、make.inc を適宜修正する必要がある。その後、”make”を実行すると、blas_LINUX.a ができる。

後で必要となるので、”ln -s blas_LINUX.a libblas.a”として blas_LINUX.a を libblas.a として参照できるようにシンボリックリンクを張る。

これらの作業が完了後、”cp -r BLAS \${HOME}/lib/”としてインストールを行う。

依存ライブラリのコンパイル(2) : LAPACK

netlib からダウンロードした lapack-3.3.1.tgz を展開すると lapack-3.3.1 ディレクトリが生成される。lapack-3.3.1 ディレクトリに移動後、前節で作成した blas_LINUX.a をコピー (LAPACK 付属のテストプログラムが必要とするため)し、make.inc.sample を make.inc にリネームする。その後 make を実行すると、GNU Fortran コンパイラによってコンパイル・リンクが行われる。

コンパイルの完了後、”cp -r lapack-3.5.0 \${HOME}/lib/”でインストールする。

依存ライブラリのコンパイル(3) : BLACS

BLACS には、使用する通信ライブラリによっていくつかのパッケージが存在するが、今回は MPI 版(mpiblags.tgz)を使用する。netlib からダウンロードした mpiblags.tgz を展開すると BLACS ディレクトリが生成される。

BLACS ディレクトリに移動後、BMAKE/Bmake.MPI-LINUX を Bmake.inc にコピーし、Bmake.inc を環境に合わせて修正する。以下は修正例である。

```
(略)
  BTOPdir = $(HOME)/lib/BLACS
(略)
  MPIdir = /usr/lib
(略)
# -----
-----
# The Fortran 77 to C interface to be used.  If you are unsure of the
correct
# setting for your platform, compile and run BLACS/INSTALL/xintfac
e.
# Choices are: Add_, NoChange, UpCase, or f77IsF2C.
# -----
-----
  INTFACE = -DAdd_
(略)
#=====
=====
# The following macros specify compilers, linker/loaders, the archi
ver,
# and their options.  Some of the fortran files need to be compiled
with no
# optimization.  This is the F77NO_OPTFLAG.  The usage of the remain
ing
# macros should be obvious from the names.
#=====
=====
```

```

F77          = g77
F77NO_OPTFLAGS =
F77FLAGS     = $(F77NO_OPTFLAGS) -O
F77LOADER    = $(F77)
F77LOADFLAGS =
CC           = gcc
CCFLAGS     = -O4
CCLOADER    = $(CC)
CCLOADFLAGS =

```

Bmake.inc の修正後、“make mpi” を実行すると、GNU C/Fortran コンパイラによってコンパイル・リンクが行われる。

コンパイルの完了後、“cp -r BLACS \${HOME}/lib/”でインストールする。

依存ライブラリのコンパイル(4) : ScaLAPACK

netlib からダウンロードした scalapack.tgz を展開すると scalapack-1.8.0 ディレクトリが生成される。scalapack-1.8.0 ディレクトリに移動後、INSTALL/SLmake.LINUX を SLmake.inc にコピーし、SLmake.inc を使用する MPI や BLAS/LAPACK のインストール先などに合わせて修正する。

SLmake.inc の修正後、make を実行すると、GNU Fortran コンパイラによってコンパイル・リンクが行われる。

コンパイルの完了後、“cp -r scalapack-2.0.2 \${HOME}/lib/”でインストールする。

依存ライブラリのコンパイル(5) : METIS/ParMETIS

MUMPS が最新の ParMETIS に対応していないため、ここでは ParMETIS3.2.0 を使用する。METIS は ParMETIS に同梱されているため、ParMETIS をコンパイルすればよい。

ソースコードは、Karypis Lab の web サイト (<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>)からダウンロードする。ダウンロードした ParMETIS-3.2.0.tar.gz を展開すると ParMETIS-3.2.0 ディレクトリが出来る。ParMETIS-3.2.0 ディレクトリに移動後、make を実行すると gcc によってコンパイル・リンクが行われる。

コンパイルの完了後、“cp -r ParMETIS-3.2.0 \${HOME}/lib/”でインストールする。

MUMPS のコンパイル

MUMPS_4.10.0.tar.gz を展開すると、MUMPS_4.10.0 ディレクトリが生成される。README の記述にしたがって、Make.inc ディレクトリより Makefile.gfortran.PAR ファ

イルを `Makefile.inc` にコピーし、環境に合わせて修正する。

修正後、” `make alllib` ” を実行することでコンパイル・リンクが完了する。

コンパイルの完了後、” `cp -r MUMPS_4.10.0 ${HOME}/lib/` ” でインストールする。

参考文献

- [1] ADVENTURE Project: <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp>
- [2] Yagawa, G., and Shioya, R.: Parallel finite elements on a massively parallel computer with domain decomposition, *Computing Systems in Engineering*, 4, Nos. 4-6, pp. 495-503(1993).
- [3] Yagawa, G., and Shioya, R.: *Massively Parallel Finite Element Analysis*, Asakura-Shoten, (1998) (in Japanese) ([10]と同じ)
- [4] Miyamura, T., Noguchi, H., Shioya, R., Yoshimura, S., and Yagawa, G. : Massively parallel elastic-plastic finite element analysis using the hierarchical domain decomposition method, *Transactions of Japan Society of Mechanical Engineers (JSME)*, 65-A, No.634, pp. 1201-1208(1999) (in Japanese).
- [5] MPI: <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>
- [6] MPICH: <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>
- [7] Mandel, J.: Balancing domain decomposition, *Communications on Numerical Methods in Engineering*, 9, 233-241(1993)
- [8] Shioya, R., Kanayama, H., Mukaddes, A.M.M., and Ogino, M. : Heat conductive analysis with balancing domain decomposition method, *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, Vol.52, pp.43-53(2003).
- [9] Quarteroni, A. and Vali, A. : *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, Clarendon Press Oxford(1999).
- [10] 矢川元基, 塩谷隆二; 超並列有限要素解析, 計算科学シリーズ, 朝倉書店(1998)
- [11] Franca, L.-P. and Frey S.-L. : Stabilized finite element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 99, pp.209-233 (1992).
- [12] Brooks, A. N., and Hughes, T. J. R. : Streamline upwind / Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 32, pp.199-259 (1982).
- [13] Gerard, L. G. S. and Diederik, R.-F. : BiCGSTAB(L) for linear equations involving unsymmetric matrix with complex spectrum, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, Vol. 1, pp. 11-32(1993).
- [14] Hansbo, P. and Szepessy, A. : A velocity-pressure streamline diffusion finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 84, pp.175-192(1990).

- [15] Hughes, T. J. R. and Brooks, A. N. : A theoretical framework for Petrov-Galerkin methods with discontinuous weighting functions : application to the streamline-upwind procedure, in *Finite Elements in Fluids*, Fallagher, R. H., Norrie, D.H., Oden, H.T., and Zienkiewicz, O.C., eds., Vol.4, pp. 47-65(1982).
- [16] Kanayama, H. and Toshigami, K.: Three-dimensional air flow analysis in clean rooms by a finite element method, *Theoretical and Applied Mechanics*, Vol. 36, pp.35-46(1988).
- [17] Kanayama, H., Toshigami, K., and Motoyama, H. : A partial upwind finite element approximation for the stationary Navier-Stokes equations, *Computational Mechanics*, Vol. 5, pp.209-216 (1989).
- [18] Tabata, M., and Suzuki, A. : A stabilized finite element method for the Rayleigh-Benard equations with infinite Prandtl number in a spherical shell, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190, pp. 387-402(2000).
- [19] Tezduyar, T. E., Mittal, S., and Shih, R. : Time accurate incompressible flow computations with quadrilateral velocity-pressure elements, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 87, pp. 363-384(1991).
- [20] Zhou, T.-X. and Feng, M.-F. : A least squares Petrov-Galerkin finite element method for the stationary Navier-Stokes equations, *Mathematics of Computation*, Vol. 60, pp. 531-543(1993).
- [21] Saad, Y. and Schultz, M. H., GMRES : A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, Vol.7, pp.856-869(1986).
- [22] Shioya, R. and Yagawa, G. : Iterative domain decomposition FEM with preconditioning technique for large scale problem, ECM'99, *Progress in Experimental and Computational Mechanics in Engineering and Material Behavior*, pp, 255-260(1999).
- [23] Kanayama, H., Tagami, D., Araki, T., and Kume, H. : A stabilization technique for steady flow problems, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol.18, No4, pp.297-301(2004).
- [24] Kanayama, H., Tagami, D., and Chiba, M. : Stationary incompressible viscous flow analysis by a domain decomposition method, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI*, pp.611 – 618(2006).
- [25] Yao, O., Kanayama, H., A Coupling Analysis of Thermal Convection Problems Based on a Characteristic Curve Method, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, 59, pp.257-264(2011)

[26] Fedora Project, EPEL/ja, <https://fedoraproject.org/wiki/EPEL/ja>

[27] openSUSE:Science team, openSUSE:Science Repositories,
http://en.opensuse.org/openSUSE:Science_Repositories