

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

CISS フリーソフトウェア

ナノ・物質・材料・マルチスケール機能シ ミュレーション

PHASE ver.10.01

インストールマニュアル

- 本ソフトウェアは文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトによる成果物です。本ソフトウェアを無償でご使用になる場合「CISS フリーソフトウェア使用許諾条件」をご了承頂くことが前提となります。営利目的の場合には別途契約の締結が必要です。これらの契約で明示されていない事項に関して、或いは、これらの契約が存在しない状況においては、本ソフトウェアは著作権法など、関係法令により、保護されています。
- お問い合わせ先
 - (公開/契約窓口) (財) 生産技術研究奨励会
〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1
 - (ソフトウェア管理元) 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター
〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1
FAX: 03-5452-6662
E-mail: software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

COPYRIGHT of the program codes

Copyright (C) 1993-2006 Hideki Katagiri, Koichi Kato, Tsuyoshi Miyazaki, Yoshitada Morikawa, Hideaki Sawada, Toshihiro Uchiyama, Tsuyoshi Uda, Takahiro Yamasaki, Noriaki Hamada, Akira Yanase, Takenori Yamamoto, Hideaki Tsukioka, Masakuni Okamoto, Hideo Mizouchi, Kiyoshi Betsuyaku and Kazuki Mae.

It is understood by the authors that the Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, distributes this program as "CISS Free Software" with users' agreement with the terms and conditions written in the file, LICENSE.pdf or LICENSE_J.pdf (in Japanese).

HISTORY

The original version of this set of the computer programs "PHASE" was developed by the members of the Theory Group of Joint Research Center for Atom Technology (JRCAT), based in Tsukuba, in the period 1993-2001. The names of the contributors to the original version are Hideki Katagiri, K. Kato, T. Miyazaki, Y. Morikawa, H. Sawada, T. Uchiyama, T. Uda and T. Yamasaki. Since 2002, this set has been tuned and new functions have been added to it as a part of the national project "Frontier Simulation Software for Industrial Science (FSIS)", which is supported by the IT program of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) of Japan. The program was developed further mainly by T. Yamasaki, T. Uda, T. Yamamoto, H. Tsukioka, M. Okamoto, H. Mizouchi, K. Betsuyaku and K. Mae contributed to the improvement of the code. The tetrahedron interpolation codes developed by N. Hamada, A. Yanase and Kiyoyuki Terakura was included. The symmetrization code developed by A. Yanase and N. Hamada was also included. The manual and tutorial were written by Makoto Itoh with the cooperation by Mineo Saito, H. Tsukioka, T. Yamamoto and T. Yamasaki. The sample calculations were prepared by T. Yamamoto, H. Tsukioka and Hiroyoshi Momida. Since 2006, this program set has been developed as a part of the national project "Revolutionary Simulation Software (RSS21)", which is supported by the next-generation IT program of MEXT of Japan. Since 2008, this program set has been developed as a part of the national project "Research and Development of Innovative Simulation Software", which is supported by the next-generation IT program of MEXT of Japan. The activity of "Multiscale Simulation System for Function Analysis of Nanomaterials", CISS, is supervised by Takahisa Ohno.

CONTACT ADDRESS

Center for Research on Innovative Simulation Software The Institute of Industrial Science (IIS), The University of Tokyo
4-6-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8505, Japan
FAX +81-(0)3-5452-6662
E-mail: software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp URL <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp>

* When distributing CISS Software duplications, the user must attach the full text in this file.

■ License to Use CISS Free Software for noncommercial purposes
Terms and Conditions of the CISS Free Software License

The Center for Research on Innovative Simulation Software (CISS) at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo gives explicit permission for anyone to use any or all of the free software that is maintained and made publicly available at the CISS site free of charge, subject to the terms and conditions detailed below.

1. Definition of CISS Free Software

CISS Free Software is any software explicitly marked “ CISS Free Software ” in CISS project source programs, object programs, specifications, design specifications, data, implementation results, and instruction manuals.

2. Extent of Free Use

Users may use CISS Free Software free of charge to run their own data, and use any results obtained for their own personal use. Users also have the rights to copy, to modify, and to redistribute the CISS Free Software.

3. Rules for Modification and Distribution

If the user creates a modified version of CISS Free Software by modifying the software itself, by incorporating it into other software, or any other means; then copies and/or distributes the software, the user must retain the words “ CISS free software ” in the name of the modified version (e.g., if the CISS free software is named ProteinDF, the new software is named _____/ProteinDF.); however, this shall not apply if the user concludes separately a contract for the purpose of profit-making business. And also the user displays a copyright notice in the modified version.

The “ copyright notice ” in the internal code of the CISS Free Software may not be altered for any reason, except to update or add to modification records such as altering the name of the modifier or the date of modification.

4. Copyright Notice

Users must prominently and conspicuously display the copyright notice in every CISS Free Software copy at or near the beginning of the credits along with the name of the software, the version, and the copyright holder. When distributing copies of CISS Free Software, the user must attach the full text of these Terms and Conditions without any changes.

5. User Obligations

To publicly acknowledge that results have been achieved using CISS Free Software, users are obligated to clearly display the name, version, and copyright holder, and acknowledge that “these results were achieved by using Innovative Simulation Software for an Industrial Science Project. ”

If the user modifies the CISS Software and acknowledges that results were achieved using the software, the user must attach an explanation detailing how the software was modified.

We request that users report any bugs or problems they discover in using the CISS Software to the Center for Research on Innovative Simulation Software at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo. Users may not publicly announce or disclose bugs or problems they discover in CISS software without permission.

6. Commercial Use

If a user intends to use CISS Free Software for a commercial purpose such as described in examples (1)-(3) below, the user must enter into a separate commercial license agreement before using the CISS software.

(1) A user copies and distributes CISS Free Software, then demands compensation from the recipient for the software itself as a copyrighted product or for copying and distributing the software.

(2) A user (corporate or individual) uses CISS Free Software not for personal use but to provide services to other parties, regardless of whether the services are offered gratis or for a fee.

(3) A user seeks to assume a right of pledge, a security interest, or some other form of commercial interest in CISS Free Software, including portions of the software that were modified by the user.

However, if a public entity seeks to provide services using CISS software for the purpose disseminating the software, we require an exchange of memorandums between the CISS and the entity (in lieu a conventional for-profit license agreement) detailing the nature of the service, regardless of whether the proposed service is offered gratis or for a fee. The user acknowledges in advance that if he or she violates any of the provisions of this agreement, the copyright holder of any software shall prohibit the user from using the software. The user also acknowledges in advance that the copyright holder is entitled to be compensated by an amount equivalent to any profit gained by the user through the violation of the terms of this agreement.

7. No Warranty

The Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, the Foundation for the Promotion of Industrial Science, and other concerned parties disclaim all warranties with respect to the quality, the performance, or the results of CISS Free Software, either express or implied. The user assumes sole responsibility for the use of CISS software including any damages or losses arising out of the use of the CISS software.

8. Violations of Terms and Conditions

If a user is found to be in violation of these Terms and Conditions, he or she agrees to immediately pursue any and all steps required by the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo to get back into compliance.

CISS フリーソフトウェア使用許諾条件

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター（以下 革新センター）は、次の条件や制限のもとで、革新センターで管理・公開するプロジェクト等による成果物の全てまたは一部を無償で使用することを許諾します。

1．CISS フリーソフトウェアの定義革新センター（CISS）で管理しているソースプログラム、オブジェクトプログラム、仕様書、設計書、データ、実行結果 および マニュアルなどの内、インターネット上に公開しているソフトウェアを CISS フリーソフトウェアと呼びます。

2．無償使用の範囲利用者が CISS フリーソフトウェアを無償で利用できる行為には、自己のために CISS フリーソフトウェアを任意のデータを用いて実行する行為、その結果を利用者の自己のために使用する行為、CISS フリーソフトウェアを複製し頒布する行為、および、CISS フリーソフトウェアを改変しそれを実行する行為等を含みます。

3．改変・頒布での遵守事項 CISS フリーソフトウェアを変更したり、他のソフトに組み込む等の行為により、改変した CISS フリーソフトウェアを複製・頒布する場合は、そのソフトウェア名には CISS フリーソフトウェアの名称を残して（例えば、CISS フリーソフトウェアの名称を ProteinDF とした場合、○○○ / ProteinDF のようにネーミング）下さい。ただし、別途営利目的の場合における実施許諾契約を締結している場合はこの限りではありません。また、著作権表示を行うことを義務づけます。目的の如何を問わず、CISS フリーソフトウェア内部コードの『著作権表示』記載部分を修正する行為は、改変者氏名や改変日時などの改変記録を追加する場合を除き、禁止されています。

4．著作権の表示利用者は、各々の CISS フリーソフトウェアの複製物に、ソフトウェア名・バージョン・著作者氏名などの著作権表示を表示の先頭部等の箇所に適切かつ目立つように掲載するとともに、頒布する場合は、複製物に本許諾条件の全文をそのまま添付しなければなりません。

5．利用者義務 CISS フリーソフトウェアを利用した結果を公表する場合には、関連プロジェクト等の成果を利用した（例：『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の成果を利用した』）旨を、使用した CISS ソフトウェアの名前、バージョン、著作者氏名などの記載とともに、明示して下さい。利用者が CISS ソフトウェアを改変し、その実行結果を公表する場合は、改変内容や改変履歴が特定できる説明を添付して公表しなければなりません。利用者が CISS ソフトウェアのバグや不具合を発見した場合、革新センターに報告して下さい。発見したバグや不具合を許可なく公表したり、第三者に知らせることを禁止します。

6．営利目的に使用する場合利用者は、CISS フリーソフトウェアを下記 (1)～(3) に例示するような営利目的に使用する場合には、事前に別途営利目的の場合における実施許諾契約を締結する必要があります。

(1) 利用者が CISS フリーソフトウェアを複製・頒布する場合、著作物としての対価のみならず、複製ないし頒布に必要な経費など経済的価値を、頒布を受ける者に対して提示ないし要求すること。(2) 法人を含み利用者は、自己の目的に限り CISS フリーソフトウェア実行が許諾されているものであり、有償無償を問わず第三者へのサービスのために CISS ソフトウェアを実行する行為をすること。(3) 利用者は、自己が改変した部分も含み、CISS フリーソフトウェアを質権や担保など、いかなる商取引の対象に加えること。

ただし、公的機関が当該ソフトウェアの普及促進を目的としてそれを利用したサービスを提供する場合は、そのサービスの有償無償を問わず、別途その内容に関して革新センターとの間で覚書等を交わすことをもって営利目的用実施許諾契約締結の代用とすることができるとします。利用者が本項に反する行為を行った場合には、各ソフトウェア等の著作権者によりその利用を差し止められることを利用者は予め了解します。かつ、利用者は、それにより得た利益相当額の賠償をもとめられることも予め了解します。

7．無保証 CISS フリーソフトウェアは、その品質や性能あるいは実行結果について、利用者に対してはいかなる保証もされていません。利用者は自己の責任において使用することに同意することとし、もし使用することにより損害が生じた場合には、第三者への損害や被害の修復も含み、その結果責任は全て利用者に帰することとします。

8．利用者が本使用許諾条件に違反した場合利用者が本使用許諾条件に違反した場合には、利用者は、革新センターがその状態を是正するために必要と認めて行う措置に無条件に従うものとします。

- 以上 -

目 次

1	はじめに	1
2	対応環境	1
3	インストール方法	1
4	環境ごとの注意	4
4.1	GNU/Linux	4
4.2	Windows XP	4
4.3	Intel 版 Mac OS X	5
4.4	Sun Solaris	5
4.5	SGI Altix	5
4.6	IBM AIX	5
4.7	Hitachi SR11000	5

表 目 次

1 PHASE 対応環境 1

図 目 次

1 はじめに

本プログラムパッケージには、物質中の電子状態を密度汎関数理論に基づいて計算し、物性予測を可能にするプログラム PHASE と EKCAL が含まれています。これらのインストールの仕方について解説します。プログラムの詳しい利用方法はチュートリアルマニュアルとユーザマニュアルに書かれています。

2 対応環境

PHASE の対応環境を表 1 に示します。GNU/Linux 環境などは複数の MPI ライブラリ (MPICH1, MPICH2, OpenMPI) に対応しています。MPI ライブラリディレクトリをホームディレクトリ直下に配置するとインストールが簡単になります。

```
$HOME/mpich      (MPICH1)
$HOME/mpich2      (MPICH2)
$HOME/openmpi     (OpenMPI)
```

また、非並列バイナリを作成することもできます。

GNU Fortran を使用する場合は、バージョン 4.3 以降をご使用ください。最新の GNU Fortran バイナリ (Windows 版、MacOS 版、Linux 版) は <http://gcc.gnu.org/wiki/GFortranBinaries> から入手できます。

G95 Fortran コンパイラを使用する場合は、最新の G95 バイナリを <http://ftp.g95.org/> から入手してインストールしてください。

各環境向けの最新の AMD Core Math Library は <http://developer.amd.com/acml.jsp> から入手できます。

PGI compiler を使用する場合は、バージョン 6.2 を使ってください。Mac OS 環境以外で Intel compiler を使用し、かつ外部 LAPACK ライブラリを使わないときは、バージョン 9.1 の Intel compiler を使用してください。

表 1: PHASE 対応環境

環境	コンパイラ	利用可能ライブラリ
GNU/Linux	GNU, G95, Intel, PGI	MKL, ACML, FFTW3
Windows XP	GNU, G95, Intel, PGI	MKL, ACML, FFTW3
Intel 版 Mac OS X	GNU, G95, Intel	MKL, ACML, FFTW3
Sun Solaris	GNU, G95, Sun	Sun Perf.(LAPACK), ACML, FFTW3
SGI Altix	Intel	SCSL, MKL, FFTW3
IBM AIX	IBM XL	ESSL(LAPACK), FFTW3
Hitachi SR11000	HITACHI, IBM XL	MATRIX/MPP(FFT), HITACHI LAPACK, ESSL(LAPACK)
NEC SX Series	Fortran90/SX	Mathkeisan(LAPACK), ASL(FFT)

3 インストール方法

GNU/Linux 環境を例にしてインストール方法を説明します。ここでは、GNU/Linux 環境に Intel Fortran compiler 9.1 がインストールされていることを仮定します。別のコンパイラを利用する場合はコンパイラの選択のときに、そのコンパイラを選択してください。また、MPICH2 が予めインストールされていることを仮定していますが、プログラムモデルの選択のときに「Serial」を選択すれば MPI ライブラリを使用しないでプログラムを作成することもできます。

まず、PHASE パッケージ `phase_v1001.tar.gz` をホームディレクトリに展開してください。

```
$ cd $HOME
$ tar xzf phase_v1001.tar.gz
```

ディレクトリ `phase_v1001` に移り、インストーラを実行してください。

```
$ cd phase_v1001
```

```
$ ./install.sh
=== PHASE installer ===
Do you want to install PHASE? (yes/no) [yes]
```

インストールするかどうか聞いてきますので、何も入力せずに Enter キーを押してください。

```
Supported platforms
0) GNU Linux (IA32)
1) GNU Linux (EM64T/AMD64)
2) GNU Linux (IPF)
3) Sun Solaris (IA32)
4) Sun Solaris (EM64T/AMD64)
5) Sun Solaris (UltraSPARC)
6) Intel-powered Mac (32bit)
7) Intel-powered Mac (64bit)
8) SGI Altix
9) IBM AIX
10) HITATCH SR11000
11) NEC SX Series
12) MS Windows MinGW/MSYS (IA32)
13) MS Windows MinGW/MSYS (EM64T/AMD64)
x) Exit
Enter number of your platform. [0]
```

対応する環境の一覧が表示されますので、「GNU Linux (IA32)」に対応する 0 を入力して、Enter キーを押してください。

```
Supported compilers
0) GNU compiler collection (gfortran)
1) G95
2) Intel Fortran compiler
3) PGI Fortran compiler
x) Exit
Enter number of a desired compiler. [0]
```

対応するコンパイラーの一覧が表示されますので、「Intel Fortran compiler 9.x」に対応する 2 を入力して、Enter キーを押してください。

```
Supported programming-models
0) Serial
1) MPI parallel
x) Exit
Enter number of a desired programming-model. [0]
```

対応するプログラムモデルの一覧が表示されますので、「MPI parallel」に対応する 1 を入力して、Enter キーを押してください。

```
Supported MPI libraries
0) MPICH1
1) MPICH2
2) Open MPI
x) Exit
Enter number of a desired MPI library. [0]
```

対応する MPI ライブラリの一覧が表示されますので、「MPICH2」に対応する 1 を入力して、Enter キーを押してください。

```
Enter MPI library directory. [/home/you/mpich2]
```

MPI ライブラリのインストール先を聞いてきます。デフォルトの値\$HOME/mpich2 であれば何も入力せずに Enter キーを押してください。別のところにインストールした場合はそのディレクトリまでのフルパスを入力して、Enter キーを押してください。

Supported BLAS/LAPACK

- 0) Netlib BLAS/LAPACK
- 1) AMD Core Math Library (ACML)
- 2) Intel Math Kernel Library (MKL)
- x) Exit

Enter number of a desired library. [0]

対応する BLAS/LAPACK ライブラリの一覧が表示されますので、「Netlib BLAS/LAPACK」に対応する 0 を入力して、Enter キーを押してください。

Supported FFT libraries

- 0) Built-in FFT subroutines
- 1) FFTW3 library (Non-GPL version)
- 2) AMD Core Math Library (ACML) 3.6.x
- 3) Intel MKL 9.x with FFTW3 interface library
- x) Exit

Enter number of a desired library. [0]

対応する FFT ライブラリの一覧が表示されますので、「Built-in FFT subroutines」に対応する 0 を入力して、Enter キーを押してください。

Do you want to use MPI parallel FFT? (yes/no) [no]

選択した FFT ライブラリーの種類によっては、MPI 並列のなされた FFT を利用するかどうか聞いてきますので、利用する場合は yes と入力して、Enter キーを押してください。

Do you want to use DGEMM to speedup $O(N^3)$ operations? (yes/no) [no]

BLAS に含まれる DGEMM 関数を利用して高速な計算ができるようにするかどうか聞いてきますので、利用する場合は yes と入力して Enter キーを押してください。ただし、この機能は BLAS/LAPACK としてお使いのプラットフォームに最適化されたものを選択していないと効力が発揮されないのをご注意ください。

Do you want to edit the makefile that has been generated? (yes/no/exit) [no]

作成された Makefile を編集するかどうか聞いてきます。Makefile を確認したり編集する気がなければ、何も入力せずに Enter キーを押してください。

Do you want to make PHASE now? (yes/no) [yes]

PHASE の作成を開始するかどうか聞いてきます。何も入力せずに Enter キーを押して、PHASE の作成を始めてください。

PHASE was successfully installed.

Do you want to check the installed programs? (yes/no) [no]

PHASE が正常にインストールされたことを告げるメッセージの後、プログラムを検査するかどうか聞いてくるので、必要があれば yes を入力し、Enter キーを押してください。検査しないならば、no を入力して Enter キーを押してください。MPICH2 を選択した場合は mpdboot コマンドで予め、mpd デーモンを起動させておいてから検査を実行してください。検査を実行して以下のような出力が得られれば問題ありません。

Do you want to check the installed programs? (yes/no) [no]

yes

Checking total-energy calculation.

Total energy : -7.897015156331 Hartree/cell

Reference : -7.897015156332 Hartree/cell

Checking band-energy calculation.

Valence band maximum : 0.233846 Hartree

Reference : 0.233846 Hartree

MPI プログラムの実行に用いる `mpirun` や `mpiexec` といったコマンドのラッパースクリプト `cissrun` が `bin` ディレクトリにあります。`$HOME/phase_v1001/bin` を環境変数 `PATH` に追加することで、

```
$ cissrun -np 2 phase ne=1 nk=2
```

のようにして、`PHASE` を実行できます。Bourne shell(ボーンシェル) 系であれば

```
export PATH=$HOME/phase_v1001/bin:$PATH
```

を `$HOME/.bashrc` などに記述し、C shell(シーシェル) 系であれば、

```
setenv PATH $HOME/phase_v1001/bin:$PATH
```

を `$HOME/.cshrc` に記述してパスを追加します。クラスターマシンの場合は、MPI ライブラリの `bin` ディレクトリにも必ずパスを通すようにしてください。MPICH2 を `$HOME/mpich2` にインストールした場合には、つぎのようにします。Bourne shell(ボーンシェル) 系であれば

```
export PATH=$HOME/mpich2/bin:$PATH
```

を `$HOME/.bashrc` などに記述し、C shell(シーシェル) 系であれば、

```
setenv PATH $HOME/mpich2/bin:$PATH
```

を `$HOME/.cshrc` に記述します。

4 環境ごとの注意

4.1 GNU/Linux

古いバージョンの GCC(2.95 など) では `-m32` オプションが実装されていないので、自動生成された Makefile でコンパイルできません。Makefile を編集して `-m32` オプションを削除してください。

Intel Math Kernel Library の FFTW3 インターフェースライブラリはインテル C++ コンパイラを使って作成してください。

```
cd /opt/intel/mkl/9.1/interfaces/fftw3xf
make lib32
```

EM64T 環境では上記の `lib32` を `libem64t` にしてください。ライブラリファイル `libfftw3xf_intel.a` は

```
/opt/intel/mkl/9.1/lib/32 (IA32 環境)
```

または

```
/opt/intel/mkl/9.1/lib/em64t (EM64T 環境)
```

に作成されます。`/opt/intel` ディレクトリ以外に MKL ライブラリをインストールされた場合は、そのディレクトリ以下にインストールされます。

4.2 Windows XP

Windows 環境では Unix 互換環境が必要です。MSYS/ MinGW あるいは Cygwin をインストールしてください。Cygwin をインストールする場合は、`make` をインストールするようにしてください。

MPI 並列版バイナリを作成するには、Windows 向け MPI ライブラリ DeinoMPI をあらかじめインストールしてください。

Intel Math Kernel Library の FFTW3 インターフェースライブラリは `nmake` コマンドに `'F=ms'` オプションと `'MKL_SUBVERS=serial'` オプションを付加して、マイクロソフト C++ コンパイラを使って作成してください。makefile が

```
C:\Program Files\Intel\MKL\9.1\interfaces\fftw3xf
```

にあります。正常なシリアルライブラリを作成するために、makefile の最後から二行目の `'/MT'` オプションを削除してください。makefile を編集したら、コマンドプロンプトを開き、次のようにしてライブラリを作成してください。

```
C:\Program Files\Intel\MKL\9.1\interfaces\fftw3xf
nmake lib32 F=ms MKL_SUBVERS=serial
```

EM64T 環境では上記の lib32 を libem64t にしてください。ライブラリファイル fftw3xf.ms.lib は

```
C:\Program Files\Intel\MKL\9.1\lib\_serial\ia32\lib    (IA32 環境)
```

または

```
C:\Program Files\Intel\MKL\9.1\lib\_serial\em64t\lib    (EM64T 環境)
```

に作成されます。

4.3 Intel 版 Mac OS X

Intel Fortran compiler バージョン 10 を使用してください。

Intel Math Kernel Library の FFTW3 インターフェースライブラリは Intel C++ コンパイラーを使って作成してください。

```
cd /Library/Frameworks/Intel_MKL.framework/Version/9.1/interfaces/fftw3xf
make lib32 MKL_SUBVERS=serial
```

EM64T 環境では上記の lib32 を libem64t にしてください。ライブラリファイル libfftw3xf_intel.a は

```
/Library/Frameworks/Intel_MKL.framework/Version/9.1/lib_serial/32    (IA32 環境)
```

または

```
/Library/Frameworks/Intel_MKL.framework/Version/9.1/lib_serial/em64t (EM64T 環境)
```

に作成されます。

MPI 並列版バイナリを作成するには、OpenMPI をあらかじめインストールしてください。Fortran でも利用できるようにご自分でコンパイルしてください。

4.4 Sun Solaris

Sun Studio をインストールしてください。OpenMPI ライブラリを利用する場合は、Sun HPC ClusterTools 7 をインストールしてください。

4.5 SGI Altix

mpirun コマンドを実行するときには、"-np" オプションを必ず付けてください。また、以下のように dplace コマンドと一緒にご使用ください。

```
% mpirun -np 4 dplace -s1 phase
```

4.6 IBM AIX

AIX 環境には mpirun コマンドはありませんので、代わりに PHASE パッケージの cisrrun コマンドをご使用ください。

4.7 Hitachi SR11000

要素並列版バイナリを作成するには、以下に示すプログラムモデルの選択時に「SMP/MPI hybrid parallel」を選択してください。

```
Supported programming-models
```

```
0) Serial
```

```
1) MPI parallel
```

```
2) SMP/MPI hybrid parallel
```

```
x) Exit
```

```
Enter number of a desired programming-model. [0]
```

Hitachi 製 LAPACK を使用する場合には、環境に合わせてライブラリ名を変更する必要があります。東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング部門が所有する SR11000 の環境に合わせてライブラリ名で Makefile が生成されますので、ご自分で環境に合ったライブラリ名に書き換えてください。

`-llapack -lblas` (要素並列版)

`-llapack_sc -lblas_sc` (スカラー版)