Orchestrating a brighter world

NEC

国立大学法人　大阪大学
サイバーメディアセンター 御中

SX-Aurora TSUBASA
移行にあたっての注意点

2021年01月08日　第3版

日本電気株式会社
第一官公ソリューション事業部

\Orchestrating a brighter world

NECは、安全・安心・公平・効率という
社会価値を創造し、
誰もが人間性を十分に発揮できる
持続可能な社会の実現を目指します。

目　次

1. はじめに

はじめに

目的

- SX-ACE (現行システム) からSX-Aurora TSUBASA(次期システム)に変わるにあたり、現行システムで動作していたアプリケーションを、次期システムへ移行するために必要な情報をまとめています。

- 移行前に準備しておく、推奨事項を記載します。
  p.8 【2. 移行前の準備】
- HWスペックからみた、SX-ACEとSX-Aurora TSUBASAの違いを説明します。
  p.13 【3. ハードウェアスペック上の違い】
- プログラミングからみた、SX-ACEとSX-Aurora TSUBASAの違いを説明します。
  p.18 【4. プログラミング上の違い】
- 移行の際に問題となった点と修正例を例示します。
  p.37 【5. 移行のトラブルシュート例】
- 全般的な情報の入手先を説明します。
  p.51 【6. 情報入手方法】
- 分散メモリ並列化が必要な場合の、並列処理の概要と情報参照先を提示します。
  p.57 【7. 分散メモリ並列化】

本書の利用の仕方

SX-ACEからSX-Aurora TSUBASA に変わる際の変更点を
体系的に確認されたい方

2章～4章を順番にご確認ください。

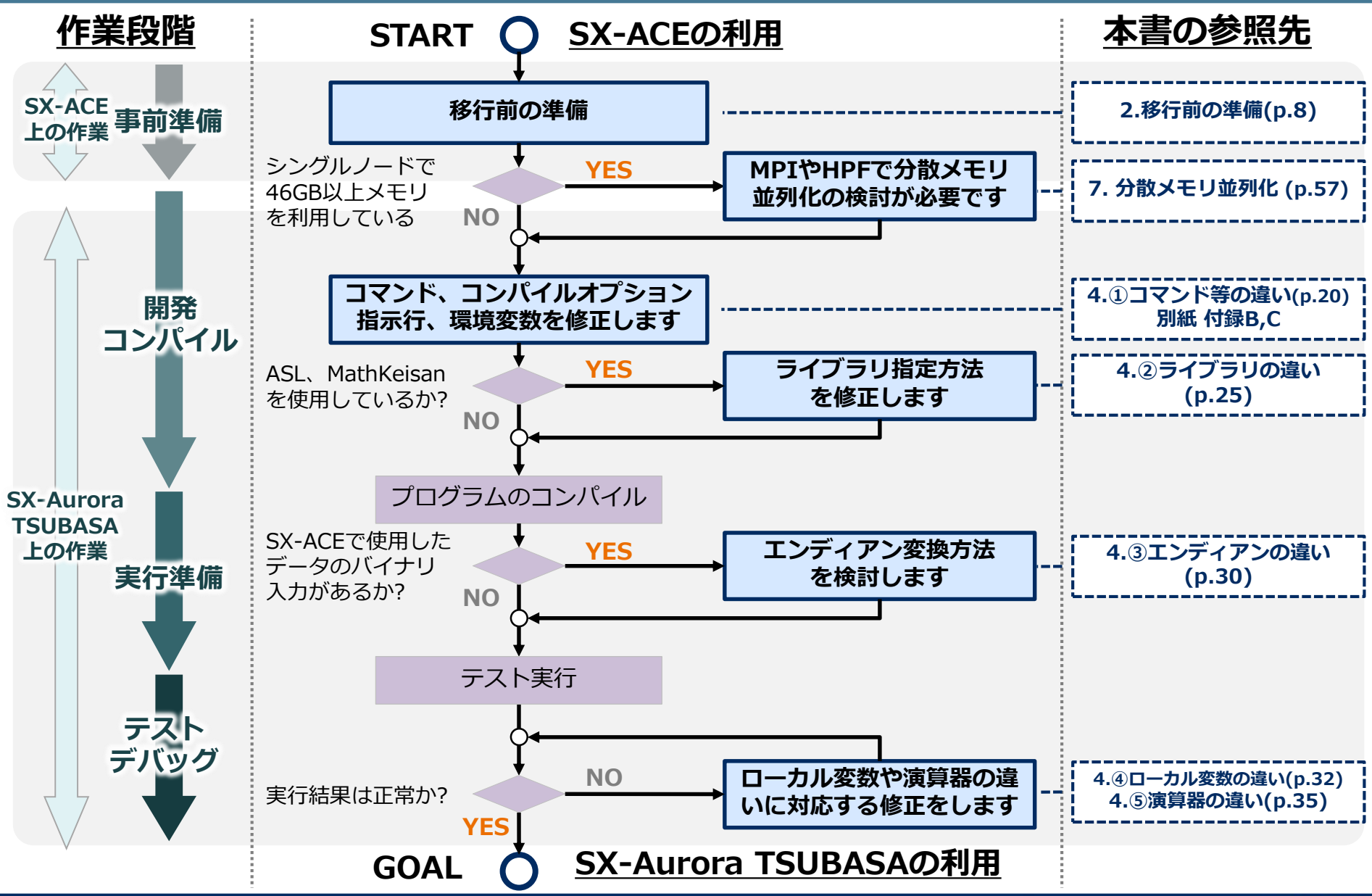
移行に際して、ご自身のアプリケーションに、どのような
修正が発生するかを確認されたい方

**次頁の作業フローをご確認いただき、該当する項目の
「本書の参照先」をご確認ください。**

移行作業時のトラブルの解決方法を知りたい方

**5章にて、過去のトラブル及び解決策の事例をまとめています。
6章にて、さらなる情報の入手先をまとめています。**

移行作業フロー



2. 移行前の準備

現行システム (SX-ACE上)で準備しておく
推奨事項です。

コンパイラ出力の保存

移行前にSX-ACE上で情報を採取しておくことを推奨します

移行後に気になる点があった場合に、SX-ACEとの差異や状況確認をしやすくするため

コンパイラ出力の保存

- ベクトル化、並列化情報の保存 [-pvctl fullmsg]
- 編集リストの保存 [-R5 / -Rfmtlist]
- 性能情報の出力[-ftrace] (次頁にて説明)

- Fortran90 コンパイラの実行例

```
$ sxf90 -Wf,-pvctl fullmsg -R5 -ftrace（ソースコード: f90）
```

- Fortran90 コンパイラ(MPI)の実行例

```
$ sxmpif90 -Wf,-pvctl fullmsg -R5 -ftrace（ソースコード: f90）
```

- Fortran2003 コンパイラの実行例

```
$ sxf03 -pvctl fullmsg -Rfmtlist -ftrace（ソースコード: f03）
```

- Fortran2003 コンパイラ(MPI)の実行例

```
$ sxmpif03 -pvctl fullmsg -Rfmtlist -ftrace（ソースコード: f03）
```

実行結果、性能情報の保存

- 現行システム(SX-ACE) 上での**実行結果**、**実行時間を保存**してください。

次期システム(SX-Aurora TSUBASA)上で、問題が発生した際の調査に役立ちます。

- ftrace 情報を保存してください。
  コンパイルオプションに-ftrace をつけた状態でアプリケーションを実行すると、性能情報(ftrace.out)がプロセス毎に生成されます。下記コマンドを実行し**テキスト化して保存**します。
  - 非MPIプログラム

```
$ sxftrace -f ftrace.out  >  （テキストファイル名）
```

  - MPIプログラム(ランク毎)

```
$ sxftrace -f ftrace.out.0.[rank]  >  （テキストファイル名）
```

  - MPIプログラム(全ランク)

```
$ sxftrace -f ftrace.out.* -all       >  （テキストファイル名）
```

メモリ使用量の確認

第3版にて追加

実行解析情報(PROGINF)の確認

- メモリ使用量が**46GBに収まっているか**を確認します。

  46GB以上の場合、SX-Aurora TSUBASA上では**実行できない可能性があります**。

  ※ SX-Aurora TSUBASAのメモリ搭載量は48GBですが、メモリ使用量が増えるケースがあり余裕を見て46GBとしています。

- PROGINF 情報を確認してください。

  実行時の環境変数 F_PROGINFにYESもしくはDETAILを設定しプログラムを実行すると、標準エラー出力結果に実行解析情報(PROGINF)が出力されます。

  - 非MPIプログラム

```
#PBS -v F_PROGINF=YES
```

```
******  Program Information  ******
 Real Time (sec)                :            0.983081
 User Time (sec)                :            0.982125
 Sys  Time (sec)                :            0.000827
 Vector Time (sec)              :            0.981940
 Inst. Count                    :          537300463.
 V. Inst. Count                 :          167962313.
 V. Element Count               :        42998350432.
 V. Load Element Count          :        17180000302.
 FLOP Count                     :        17179869322.
 MOPS                           :        44156.994865
 MFLOPS                         :        17492.548629
 A. V. Length                   :          255.999990
 V. Op. Ratio (%)               :           99.148356
 Memory Size (MB)               :          256.031250
 MIPS                           :          547.079509
 I-Cache (sec)                  :            0.000047
(以下略)
```

46GB (47104.00 MB) 以下になっていることを確認します。

ローカル変数の扱い方の違い

次期システムでは、ローカル変数の格納領域が変わります。現行システム(SX-ACE)上で情報を採取しておくと移行後の調査がしやすくなります。

- save属性の指定漏れ、初期化漏れの修正
  - -P stack オプションを追加し、コンパイル/実行することで、異常終了、結果が変わるかチェックする(sxf90のみで非共有並列処理の際)

    局所実体をスタックに割り付ける。
    異常終了、結果が変わる場合はsave属性指定漏れ等を事前に解消しておく

  - -init stack=nan オプションを追加し、コンパイル/実行することで、異常終了、結果が変わるかチェックする

    stackに割り付ける領域をNaNで初期化する。
    異常終了、結果が変わる場合は初期化漏れ等を事前に解消しておく

- 注意点
  上記修正で結果が変わる場合ありますが、
  プログラムとしては正しい記述、正しい挙動に近づきます。

  結果が変わる場合、移行後の**次期システムでも結果が変わる可能性が高い**です。
  事前に確認、修正しておくことを強くお勧めします。

第3版にて追加

3. ハードウェアスペックの違い

ハードウェアスペックの比較

ハードウェアスペックの比較

- 共有メモリの単位である、SX-ACE 1ノードと、SX-Aurora TSUBASA 1VEの比較は以下の通りです。

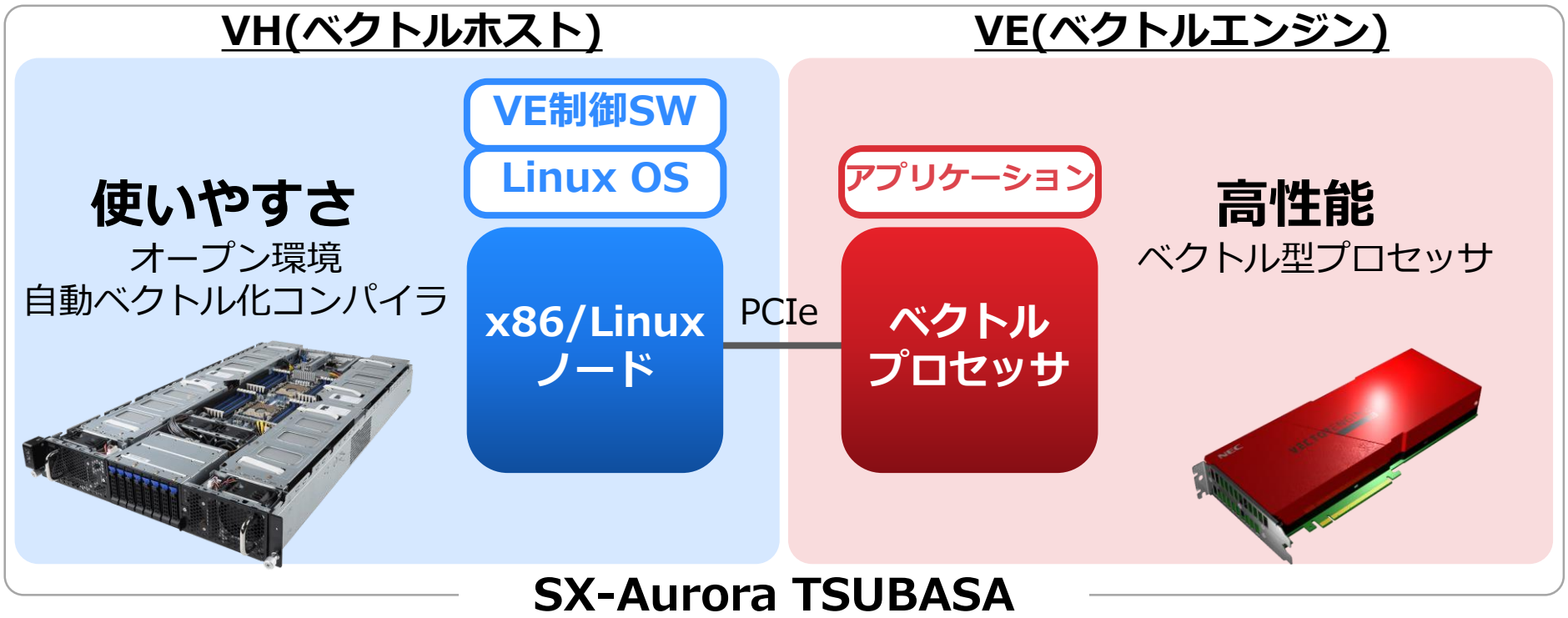
	SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
コア数	4	10
演算性能	256 GFlops	3.07 TFlops
メモリ量	64 GB	**48GB**
メモリ帯域	256 GB/s	1.53 TB/s

※ 共有メモリ量が小さくなるため、1ノードでメモリを最大近くまで利用していたアプリケーションは、MPI化などのプログラム修正が発生するケースがあります。

SX-Aurora TSUBASA アーキテクチャ

ベクトルプロセッサ+x86/Linux アーキテクチャ

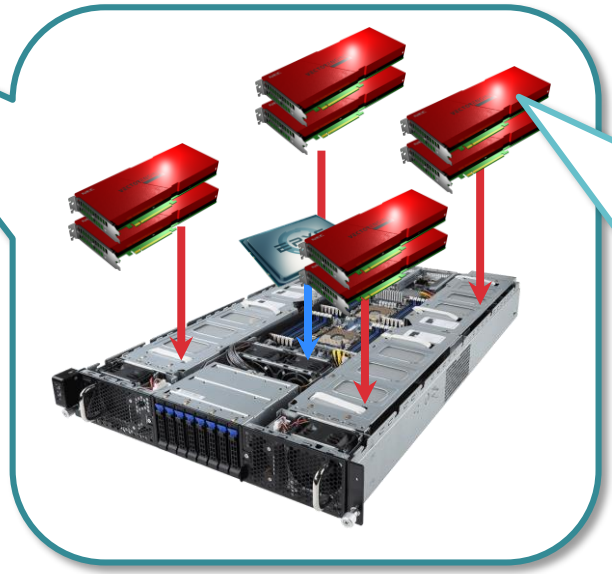
- 演算処理を行う**ベクトルエンジン(VE)**部 + 主にOS処理を行う**ベクトルホスト(VH)**部
- アプリケーション全体が実行されるVE 部は、ベクトルプロセッサ及び高速メモリから構成され、VHとPCIe 経由で接続
- OS機能を提供するVHに、x86/Linux ノードを採用することで、ベクトルプロセッサを標準のx86/Linux 環境上で利用可能



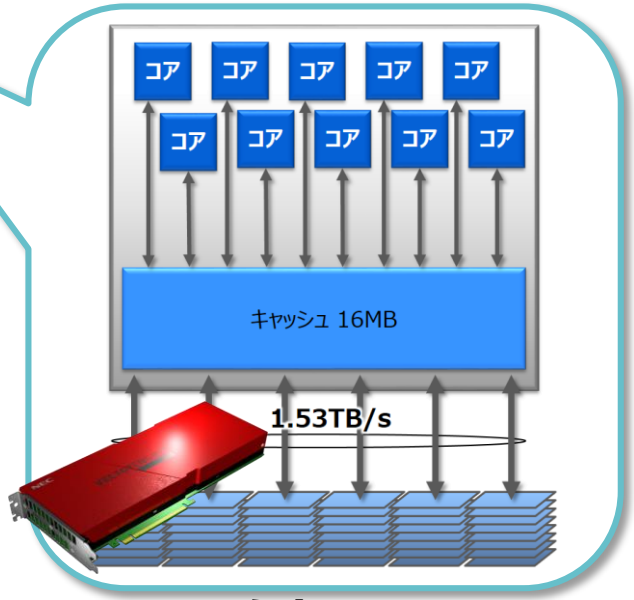
SX-Aurora TSUBASA システム構成

- ベクトルエンジンあたり、10ベクトル演算コア
- ベクトルホストあたり、8ベクトルエンジンを搭載

ベクトルノード群
36VH (2Rack)



VH(ベクトルホスト)
8VE + x86_64 サーバ
(288 VE)



VE(ベクトルエンジン)
10core / VE
(2,880 core)

並列処理

分散メモリ(MPI)並列で利用

共有メモリ(スレッド)並列で利用

SX-Aurora TSUBASA 利用上のポイント

アプリケーションは全てVE上で動作する

- アプリケーションは**全てVE上で動く**ため、実行環境はVEのスペックで決まる
  ※ NEC SDK for VE でのコンパイルが必要
- VHの CPUとメモリは基本使わない。　※VHのCPUを同時利用する高度な使い方あり

OS機能(ファイルアクセスなど)はVH経由で動作する

- ファイルアクセスはLinux環境と同じイメージで利用可能
- 前処理等のスクリプトは、VH上で動きLinux環境の利便性が維持される

VE内は共有メモリ並列、複数VEは分散メモリ並列

- VE内は、10コアを利用した共有メモリ(スレッド)並列が利用可能
- 複数VEを同時利用する場合は、分散メモリ(MPI)並列を利用可能

第3版にて追加

4. プログラミング上の違い

プログラミング上の違い

主な違い

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
①	コマンド等	※1	※1
②	ライブラリ	ASL+MathKeisan	NLC
③	エンディアン	ビックエンディアン	リトルエンディアン
④	ローカル変数	bssセクションに割り付け※2	スタック領域に割り付け
⑤	演算器	※3	FMA演算器の採用 ※3

※1　コンパイラコマンド、コンパイラオプション、指示行指定、実行時環境変数
　　それぞれに違いがあります
※2　sxf90のみで非共有並列処理の際
※3　演算器、ベクトルパイプライン数、等が違います

① コマンド等の違い

相違点 と 対処方法

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
①	コマンド等	※1	※1

※1 コンパイラコマンド、コンパイラオプション、指示行指定、実行時環境変数
それぞれに違いがあります

コンパイラコマンド

- コンパイラコマンドの違い

言語	SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
Fortran	sxf90/f03 (クロスコンパイル)	nfort
C/C++	sxcc/sxc++ (クロスコンパイル)	ncc/nc++
MPI	mpisxf90,mpisxf03 mpisxcc,mpisxc++ (クロスコンパイル)	mpinfort mpincc,mpinc++

① コマンド等の違い

コンパイラオプション

- 主なコンパイラオプションの相違点

機能	SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
最適化レベル	-Chopt	-O3
	-Cvopt	-O2
自動並列化	-Pauto	-mparallel ※1
OpenMP並列化	-Popenmp	-fopenmp ※1
自動インライン展開	-pi (auto)	-finline-functions
自動インライン展開をしない	-Npi	-fno-inline-functions
バウンスチェック	-eR	-fbounds-check
ループアンロール	-O unroll	-flop-unroll
編集リスト出力	-L fmtlist	-report-format
プリプロセス	-Ep	-fpp
バージョン表示	-V	--version (コンパイルしない)

※1 自動並列とOpenMP並列の混在も可能

■ 詳細は各コンパイラユーザーズガイド内の「付録 B SX シリーズ向けコンパイラとの対応」を参照
https://www.hpc.nec/documentation
→「C/C++ Compiler ユーザーズガイド」 「Fortran Compiler ユーザーズガイド」

① コマンド等の違い

コンパイラ指示行

- 指定方法

言語	SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
Fortran	!CDIR	!NEC$　自由形式 *NEC$　固定形式
C/C++	#pragma	#pragma _NEC

- 主なコンパイラ指示行の相違点

機能	SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
配列に依存関係がないことを指定	nodep	ivdep
ループの入れ替えを行う	loopchg	interchange
ループの入れ替えを行わない	noloopchg	nointerchange
ループを展開する	expand	unroll_completely
N段アンローリングする	unroll=n	unroll(n)
外側ループをn段アンローリングする	outerunroll=n	outerloop_unroll
自動ベクトル化を許可しない	novector	novector
配列をADBにバッファリングする	on_adb	なし

- SX-ACE向け指示行をSX-Aurora TSUBASA 向けに自動変換するツールを提供しています。(次頁で説明)

① コマンド等の違い

指示行変換ツール

- Fortran: nfdirconv コマンド、 C/C++: ncdirconv コマンド
  - 指示行は 指示行変換ツールで一括変換が可能です。
  - 念のため、変換前後を確認し、さらに、コンパイル時に編集リストを採取して、意図した変換とベクトル化となっているかを確認することをお勧めします。
- 代表的なオプション例

オプション	説明
-a	sxf90/sxf03/sxcc /sxc++のコンパイラ指示行を削除せずに、 nfort/ncc /nc++のコンパイラ指示行を追加します。
-p	sxf90/sxf03/sxcc /sxc++のコンパイラ指示行に対応する nfort/ncc /nc++のコンパイラ指示行が無い場合、 sxf90/sxf03/sxcc /sxc++のコンパイラ指示行を削除しません。(既定の動作)
-r	ディレクトリと同時に指定したとき、サブディレクトリを再帰的に走査します。 ディレクトリのシンボリックリンクは無視します。

- 使用例

```
$ nfdirconv sample.f
```

■ 詳細は各コンパイラユーザーズガイド内の「付録 C コンパイラ指示行変換ツール」を参照
https://www.hpc.nec/documentation
→「C/C++ Compiler ユーザーズガイド」 「Fortran Compiler ユーザーズガイド」

① コマンド等の違い

実行時環境変数

- 主な実行時環境変数の相違点

機能	SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
実行解析情報の出力	F_PROGINF	VE_PROGINF
入出力バッファサイズ指定	F_SETBUF	VE_FORT_SETBUF
ファイル装置接続	F_FFn	VE_FORTn
ビッグエンディアンモード指定	F_UFMTENDIAN	VE_FORT_UFMTENDIAN
自動並列数の指定	F_RSVTASK	OMP_NUM_THREADS VE_OMP_NUM_THREADS ※1
トレースバック情報の出力	F_TRACEBACK	VE_TRACEBACK
MPI 実行性能情報の出力	MPIPROGINF	NMPI_PROGINF
MPI 通信情報の出力	MPICOMMINF	NMPI_COMMINF

※1 自動並列数とOpenMPスレッド数の指定方法は同じ

■ 詳細は各コンパイラユーザーズガイド内の「付録 B.4 環境変数」を参照
https://www.hpc.nec/documentation
→「C/C++ Compiler ユーザーズガイド」　「Fortran Compiler ユーザーズガイド」

② ライブラリの違い

相違点

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
②	ライブラリ	ASL+MathKeisan	NLC

NEC Numeric Library Collection

- SX-ACEの数値計算ライブラリASL、LAPACKなどを包含するライブラリです。
- コンパイル、リンク時のオプションがSX-ACEの時と異なります。

ライブラリ名		機能概要
ASL	ネイティブインタフェース	数値計算・統計計算のための各種アルゴリズムを備えた科学技術計算ライブラリ
	統合インタフェース	フーリエ変換、乱数、ソート
	FFTW3インタフェース	FFTW（Version 2.x）のAPIでASLのフーリエ変換を利用するためのインタフェースライブラリ
BLAS		ベクトル、行列の基本演算
LAPACK		連立一次方程式、固有値方程式、特異点分解
ScaLAPACK		連立一次方程式、固有値方程式、特異点分解（分散メモリ並列用）
BLACS		ベクトル、行列の基本演算のためのメッセージパッシングライブラリ（分散メモリ並列用）
SBLAS		スパース行列の基本演算
Hetero Solver		連立一次方程式（スパース行列用の直説法ソルバ）
Stencil Code Accelerator		ステンシル計算の加速

② ライブラリの違い

コンパイル環境設定の実施

- プログラムのコンパイルを行う前に、コンパイル環境設定スクリプトを実行します。
- コンパイルするプログラムの分散並列の有無、および整数型のサイズによってスクリプト実行時の引数が異なります。

分散（MPI）並列版 ライブラリの利用	プログラムでの 既定値整数型サイズ	スクリプト指定引数
無	32bit（kind=4）	（なし）
無	64bit（kind=8）	i64
有	32bit（kind=4）	mpi

例）64bit整数型を使用したMPI並列版ライブラリを使用する場合（sh形式の場合）

```
$ source /opt/nec/ve/nlc/2.1.0/bin/nlcvars.sh mpi  i64
```

ジョブスクリプト内での設定

- 環境設定は、プログラム実行時に必要な環境変数も設定されるため、ジョブスクリプト内でも必要です。

② ライブラリの違い

コンパイルの実施

- 32bit整数型、64bit整数型ライブラリを利用するかでコンパイラオプションが異なります。
  (1) 32bit整数版ライブラリを使用する場合

ライブラリ名		コンパイラオプション	リンクオプション
ASLネイティブインタフェース	逐次	なし	-lasl_sequential
	OpenMP並列	-fopenmp	-lasl_openmp –fopenmp
ASL統合インタフェース	逐次	なし	-lasl_sequential
	OpenMP並列	-openmp	-lasl_openmp –fopenmp
	MPI並列	なし	-lasl_mpi_sequential
	ハイブリッド並列	-openmp	-lasl_mpi_openmp –fopenmp
FFTW3インタフェース	逐次	なし	-laslfftw3 –lasl_sequential
	OpenMP並列	-openmp	-laslfftw3 –lasl_openmp -fopenmp
	MPI並列	なし	-laslfftw3_mpi –lasl_mpi_sequential
	ハイブリッド並列	-fopenmp	-laslfftw3_mpi –lasl_mpi_openmp -fopenmp

■ 上記以外のライブラリに関するオプションは、NLCユーザーズガイド内の「コンパイルとリンク」を参照
[Fortran用] https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/main/ja/f_linking.html
[C言語用] https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/main/ja/c_linking.html

② ライブラリの違い

コンパイルの実施

(2) 64bit整数版ライブラリを使用する場合

ライブラリ名		コンパイラオプション	リンクオプション
ASL ネイティブ インタフェース	逐次	-fdefault-integer=8	-lasl_sequential_i64
	OpenMP並列	-fdefault-integer=8 -fopenmp	-lasl_openmp_i64 –fopemp
ASL統合 インタフェース	逐次	-fdefault-integer=8	-lasl_sequential_i64
	OpenMP並列	-fdefault-integer=8 -fopenmp	-lasl_openmp_i64 –fopemp
	MPI並列	-fdefault-integer=8 -fdefault-real=8	-fdefault-integer=8 –fdefault-real=8 -lasl_mpi_sequentiall_i64f
	ハイブリッド 並列	-fdefault-integer=8 -fdefault-real=8 -fopenmp	-fdefault-integer=8 –fdefault-real=8 -lasl_mpi_openmp_i64f –fopenmp
FFTW3 インタフェース	逐次	-fdefault-integer=8	-laslfftw3_i64 –lasl_sequential_i64
	OpenMP並列	-fdefault-integer=8 -fopenmp	-laslfftw3_i64 –lasl_openmp_i64 –fopenmp
	MPI並列	-fdefault-integer=8 -fdefault-real=8	-fdefault-integer=8 –fdefault-real=8 -laslfftw3_mpi_i64f – lasl_mpi_sequential_i64f
	ハイブリッド 並列	-fdefault-integer=8 -fdefault-real=8 -fopenmp	-fdefault-integer=8 –fdefault-real=8 -laslfftw3_mpi_i64f –lasl_mpi_openmp_i64f -fopenmp

② ライブラリの違い

FFTW3インタフェース利用時の留意事項

- 何点か留意事項(配列の次元順、Cの複素数型 等)があるので利用前に参照(下記)ください。
- マニュアルページでサンプルコードの表示とダウンロードが可能です。
- **ヘッダファイルの変更が必要**です。

FFTW3インタフェース (Fortran用)

概要

FFTW3インタフェースは、FFTW version 3.xとほぼ互換のインタフェースをもつライブラリです (一部のルーチンおよび定数は未対応)。FFTWのインクルードファイルを差し替えるだけで、FFTWを使用しているユーザプログラムから、 Vector Engine向けに高度にチューニングされたASLのフーリエ変換ルーチンを使用することができます。 オリジナルのFFTWは、FFTW公式サイト[1]で公開されているオープンソースのフーリエ変換ライブラリです。 詳細は、FFTWのドキュメント[2]を参照してください。

FFTW3インタフェースの使用方法

FFTW3インタフェースのインクルードファイルは、オリジナルのFFTWで提供されているものとファイル名が異なります。 FFTW3インタフェースを使用する場合は、以下のようにインクルードファイル名を変更してください。

Fortran 2003プログラムの場合

```
include "fftw3.f03"  ⇒  include "aslfftw3.f03"
```

Fortran 77プログラムの場合

```
include "fftw3.f"  ⇒  include "aslfftw3.f"
```

コンパイルとリンクには、FFTW3のコンパイル方法およびリンク方法を記載しています。

```
include "fftw3.f03"  ->  include "aslfftw3.f03"
include "fftw3.f"    ->  include "aslfftw3.f"
#include <fftw3.h>    ->  #include <aslfftw3.h>
```

- NLCのFFTW3インタフェースは**スレッドセーフではない**ため、共有メモリ並列と併用する際は注意が必要です。

■ 詳細は、NLCユーザーズガイド内の「FFTW3インタフェース」を参照
[Fortran用] https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/fftwint/f/ja/index.html
[C言語用] https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/fftwint/c/ja/index.html

③ エンディアンの違い

相違点 と 対処方法

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
③	エンディアン	ビックエンディアン	リトルエンディアン

- Fortranは実行時環境変数で対処可能、Cでは環境変数はない(バイトスワップが必要)
- プリ/ポストツールとの連携に注意する
- 実行時環境変数 **VE_FORT_UFMTENDIAN** (Fortran)でビックエンディアンを扱えます

使い方の一例

引数	説明
ALL	export VE_FORT_UFMTENDIAN=ALL 全ての装置番号をビックエンディアンとする
番号,番号	export VE_FORT_UFMTENDIAN=10,11 装置番号10番と11番をビックエンディアンとする
番号-番号 (連続の範囲)	export VE_FORT_UFMTENDIAN=10-12 装置番号10番から12番をビックエンディアンとする
big:番号|little:番号 と ; の除外	export VE_FORT_UFMTENDIAN=big;little:10-12 装置番号10番から12番**以外**をビックエンディアンとする (;前の指定から、除外する装置番号を後ろに指定する)

SX-ACE で F_UFMTENDIAN (リトルエンディアン、Fortran) を指定していたものは設定不要となります

③ エンディアンの違い

バイトスワップについて

- **Cでは環境変数がないため、バイトスワップが必要**となります。
- 8byte データをバイトスワップするサンプルスクリプトを記載します。
- 実際には、バイナリデータのI/Oにて、4byte/8byte など出力形式はアプリケーションにより異なります。アプリケーション毎のファイル仕様に従いバイトスワップが必要です。

endian_b2l.pl

```
#!/usr/bin/perl

rename $ARGV[0],Big_.$ARGV[0];
open $ifh, , Big_.$ARGV[0];
open $ofh, '>', $ARGV[0];

print "[",$ARGV[0],"] START¥n";
while( read($ifh, $data, 8)){
  @wdata = unpack('N2', $data);
  @wdata = ($wdata[1], $wdata[0]);
  $data = pack('V2', @wdata);
  print $ofh $data;
}
print "[",$ARGV[0],"] END¥n";

close($ifh);
close($ofh);
```

- 使用例

```
$ ./endian_b2l_v01.pl （変換対象ファイル）
```

④ ローカル変数の扱い方の違い

相違点

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
④	ローカル変数	bssセクションに割り付け※2	スタック領域に割り付け

※2　sxf90のみで非共有並列処理の際

- bssセクション
  スタティックな領域。手続き実行でセットされた**値が以降も保持**される。
  初期値なしスタティック領域であるが、
  実行に先立ち **値0(論理型はFALSE)に初期化**される。

ローカル(局所)変数であっても手続き終了後に、bss上で値が残っている。
(save属性指定漏れでも、なんとかなってしまう場合がある)

- スタック領域
  save属性を指定しないローカル(局所)変数は手続きが終了したら**不定**になる。

save属性漏れ、初期化漏れのローカル(局所)変数がある場合、
移行後に結果相違、実行エラー等が発生する可能性がある

④ ローカル変数の扱い方の違い

事前準備の勧め　※ **現行システム(SX-ACE)上で行っておく**こと (再掲)

- save属性の指定漏れ、初期化漏れの修正
  - -P stack オプションを追加し、コンパイル/実行することで、異常終了、結果が変わるかチェックする (sxf90のみで非共有並列処理の際)

    局所実体をスタックに割り付ける。
    異常終了、結果が変わる場合はsave属性指定漏れ等を事前に解消しておく

  - -init stack=nan オプションを追加し、コンパイル/実行することで、異常終了、結果が変わるかチェックする

    stackに割り付ける領域をNaNで初期化する。
    異常終了、結果が変わる場合は初期化漏れ等を事前に解消しておく

- 注意点
  上記修正で結果が変わる場合ありますが、
  プログラムとしては正しい記述、正しい挙動に近づきます。

  結果が変わる場合、移行後の**次期システムでも結果が変わる可能性が高い**です。
  事前に確認、修正しておくことを強くお勧めします。

④ ローカル変数の扱い方の違い

移行後の対処

- 次期システム(SX-Aurora TSUBASA)で対応する。
- 実行エラー、結果が変わる場合はソース修正が必要となります。
  - ソースコードからsave属性漏れを探し、save属性を指定する
  - ソースコードから初期化漏れを探し、明示的な初期化を行う

実行時の例外検出方法
倍精度の場合
コンパイラオプション
　-minit-stack=snan
実行時環境変数
　VE_INIT_HEAP=SNAN

- コンパイルオプションで対処する(次善の策)　(性能が低下する場合があります)

オプション	説明
-bss	局所変数を.bssセクションに割り付ける。
-save	各プログラム単位において(RECURSIVEであるものは例外とする)、SAVE文がすべての局所変数に指定されているものとする
-minit-stack=zero	実行時にスタックに割り付ける領域を0(ゼロ)で初期化する

-bss と-save オプションの違い
SAVE属性をもつ変数の値は、前回当該ルーチンが呼び出され、リターンしたときの値が、本呼び出し時の最初の値となりますが、-bssの場合はそれが保証されません。

- 実行時環境変数で対処する(次善の策)

オプション	説明
VE_INIT_HEAP=ZERO	実行時にヒープに割り付ける領域を0(ゼロ)で初期化する

0初期化をする場合はコンパイラオプション-minit-stack=zeroと併用することをお勧めします

2. 移行前準備が役立つ場合がある

⑤ 演算器の違い

相違点

		SX-ACE	SX-Aurora TSUBASA
⑤	演算器	※3	FMA演算器の採用 ※3

※3 演算器、ベクトルパイプライン数、等が違います

- 演算器構成の違い (FMA：積和演算)
  - SX-Aurora TSUBASAではFMA演算器を採用
    SX-ACEとは丸め誤差レベルで演算結果が変わる可能性がある
  - 丸め誤差が気になる場合は コンパイラオプション -mno-vector-fma (ベクトル積和演算命令の使用を許可しない) でFMA演算を抑止することが可能

- 逆数近似処理のサポート
  - 除算/SQRT演算器をHW実装している。更に高速に処理するために逆数近似処理をサポートしている
    - 除算

実行速度は上から下の順で速くなる

説明	コンパイラオプション	誤差
除算器を利用	-mvector-floating-divide-instruction	なし
逆数近似を利用 (既定値)	-mno-vector-floating-divide-instruction	なし
高速版逆数近似を利用	-mvector-low-precise-divide-function	あり(仮数部に最大１ビット)

⑤ 演算器の違い

相違点

- 逆数近似処理のサポート (続き)
  - SQRT

実行速度は上から下の順で速くなる

説明	コンパイラオプション	誤差
SQRT演算器を利用	-mvector-sqrt-instruction	なし
逆数近似を利用 (既定値)	-mno-vector-sqrt-instruction	あり

- ベクトル総和演算の計算結果について
  - 今までのSXシリーズと同様、ベクトル総和演算の計算結果に差分が生じる可能性あり（加算順序の違いが原因）
  - ベクトル総和演算を使用しない場合はコンパイラオプション -mno-vector-reduction で指定可能
    - 本オプションを使用するとベクトル化不可となるので、総和処理のコストが重い場合は実行時間が増大する

第3版にて追加

5. 移行のトラブルシュート例

移行の具体例

移行の際に、問題解決に苦労したトラブルシュートの例を複数提示します。

- いずれもSX-ACEでは問題なく、コンパイル、実行できていた例になります。
- SX-Aurora TSUBASA では コンパイルエラー、実行エラー、結果不正となり、ソース修正等で解消する例になります。

- 比較元となるSX-ACE上の情報がない場合、ベクトル化による問題か、コードによる問題かの切り分け等が大変になるケースがあります。

- **「4.① コマンド等の違い」や「4.④ ローカル変数の扱い方による違い」に起因する修正例が多い**傾向があります。

CASE1: 未サポートヘッダー

未サポートヘッダファイルのコメントアウト

- SX-Aurora TSUBASAで未サポートのヘッダファイルをコメントアウトする場合、**#ifndef __ve__ 、#endif** で囲む

- 定義済みマクロ “__ve__” は、SX-Aurora TSUBASAでデフォルトで有効になる

```
#ifndef __ve__
#include <xmmintrin.h>
#endif /* __ve__ */
```

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

CASE2: 言語MIXでの構造体受け渡し

Fortran派生体とC構造体の受け渡し

- 言語MIXで構造体を受け渡すときの注意点
- Fortran側で最適化によりメンバーの宣言順とメモリ割り付けが変わることがある。
  特に文字列が構造体に含まれる場合、文字列が後ろになることが多い(経験則)
  (順序が変わることで想定外の値を渡し、全く関係ない部分でエラー発生となる)

- 対策1
  Fortranの 派生型の定義部分に "**sequence**" 属性を追記する
  (メンバーが定義した順にメモリーに割り付けられる)

```
!--- struct for data information
type, public :: datainfo
  sequence       # 追加
  character(len=FIO_HSHORT) :: varname      !< variable name
  character(len=FIO_HMID)   :: description  !< variable description
  中略
  real(DP)  :: reltol       !< [SCIL] relative error tolerance for lossy compression
 endtype datainfo
```

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

CASE2: 言語MIXでの構造体受け渡し

Fortran派生体とC構造体の受け渡し(続き)

- 対策2
  Fortranの 組込みモジュールISO_C_BINDING を利用する。
  派生型定義でBIND(C)を指定し、Fortranの派生型 と Cの構造型とが同じ個数の成分をもち、Fortranの派生型の成分が、Cの構造型の対応する成分の型と相互利用可能である型及び 型パラメタをもつ場合、Fortranの派生型と言語Cの構造型とが相互利用可能。

  対策2 の 文字型のメンバーは、1バイトの文字型の配列(相互利用可能である型)とする必要がある。

- 補足

  SX-ACE
  -f2003オプションを指定すると、そのサブオプションの”cbind”が、自動的に設定され、
  ”C 相互運用機能を使用することを指定” したことになる

  SX-Aurora TSUBASA
  -std=f2003 オプションを指定しても、cbind特性が指定されないため、
  ソース側で対応が必要となる

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

CASE3: コンパイルエラー(1行が長すぎる)

1行が長すぎるコンパイルエラー

- SX-ACEでは固定フォーマットでコンパイル出来るが、
  SX-Aurora TSUBASAではコンパイルエラーとなる場合がある

コードの例

```
<Tab>  AA = ...空白を含む右辺...*( )       # 行頭がTabコード、最後の ) が 73カラム目
```

- 最初のタブコードの次の文字が数字以外なら、その文字は7カラム目に現れたとみなされる
- SX-ACEでは空白を除去してコンパイルするため、カラム数制限内に収まっていた

- 対策
  - 継続文字を使って改行する
  - 自由形式オプションを指定する (-ffree-form)

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

CASE3: ホレリス定数と文字列

ホレリス定数と文字列でのコンパイルエラー

- DATA文の 初期化記述でコンパイルエラーとなる

```
Error: XXX.f : Data-statement-value incompatible with data-statement-object
```

- 対策
  - 宣言を加える

```
CHARACTER   HCLAS*3   # 追加
DATA        HCLAS / 'ATM' /
```

- 補足
  - ホレリス定数の代わりとした文字定数の扱い
    SX-ACE　　：記述可能　(コンパイル OK)
    SX-Aurora　TSUBASA　：記述不可　(コンパイル NG)

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

CASE4: ポインタ変数の未結合

ポインタ変数の未結合

- 状況
  実行時に Bus Error が発生する

  - 元のコードイメージ
    未結合状態において、該当ポインタを使用したcall文となる場合がある

```
REAL(KIND=8), POINTER :: AOUT(:)

IF ( ASSOCIATED(HLIST( IH )%AOUT ) ) THEN
   AOUT => HLIST( IH )%AOUT
ENDIF
CALL HSTMAX    ( , , AOUT , , )
```

  - 修正後のコードイメージ
    結合状態の時に、call文を実行するように、if文のブロックを拡大

```
REAL(KIND=8), POINTER :: AOUT(:)

IF ( ASSOCIATED(HLIST( IH )%AOUT ) ) THEN
   AOUT => HLIST( IH )%AOUT
   CALL HSTMAX    ( , , AOUT , , )
ENDIF
```

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

CASE5: ENTRY文 ローカル配列の扱い

ENTRY文 ローカル配列の扱い

- 状況
  実行時に Segmentation violation が発生する。
  コンパイルオプション -g –traceback を追加して確認すると、
  ENTRY文をcallした直後に落ちている。

  - 元のコードイメージ

```
subroutine AA
INTEGER  JMAXD
REAL*8     A_array ( JMAXD )      # ローカルのA_array自動配列のサイズが不定
                                  # かつ、JMAXDが entry文の仮引数となっている
                                  # ENTRY文までの間でJMAXDもA_arrayも未定義のまま
      ....
ENTRY      BB ( , , JMAXD , , )   # ENTRY文の 引数に JMAXD、   ここで落ちる
     ....
call CC ( A_array(ISTR,,,)
```

4. プログラミング上の違い
④ ローカル変数の扱い方の違い

CASE5: ENTRY文 ローカル配列の扱い

ENTRY文 ローカル配列の扱い　(続き)

- 修正内容
  - 宣言で不定となるJMAXD を参照する配列は ALLOCATABLE属性に変更
  - ENTRY内で、allocateする
  - 必要ならallocate後に初期化する

  - 修正後のコードイメージ

```
subroutine AA
INTEGER  JMAXD
REAL*8,ALLOCATABLE,SAVE :: A_array ( : )     # ALLOCATABLE属性に変更
INTEGER    JMAXD0                            # 仮置き
SAVE       JMAXD0
DATA       JMAXD0 / 0      /
 ....
ENTRY      BB ( , , JMAXD , , )
    ....
IF ( JMAXD .GT. JMAXD0 ) THEN      # JMAXDの値が、既にallocate済みのサイズJMAXD0 より大きい場合
   IF ( ALLOCATED(A_array ) ) DEALLOCATE( A_array )        # 一旦削除
   ALLOCATE( A_array (JMAXD), STAT=ISTAT )                 # allocate
   IF ( ISTAT .NE. 0 ) THEN
      #     エラー処理
   ENDIF
   JMAXD0 = JMAXD           # サイズ保存
ENDIF
call CC(A_array(ISTR,,,)
```

4. プログラミング上の違い
④ ローカル変数の扱い方の違い

CASE6: call文でスカラ変数を配列で受ける

call文でスカラ変数を配列で受ける

- 状況
  SX-ACE と SX-Aurora TSUBASAで明らかに結果が異なり、違う処理を行っていた

  - 元のコードイメージ
    スカラ変数 で call し、呼ばれる側は配列で定義している。
    SX-ACE と SX-Aurora TSUBASA では、呼ばれる側で先頭要素以外で差異があった。

```
LOGICAL    OP
CALL  AA ( , , OP , , )

SUBROUTINE  AA ( , , OPOUT , , )
LOGICAL   OPOUT  ( 2 )          # SX-ACE では 第2要素以降は FALSE で初期化され、
                                # SX-Aurora TSUBASA は不定
IF ( OPOUT(2) ) THEN            # 第2要素の違いで、FLAGの相違になる
  HCORDY = 'APLV2'
ELSE IF ( OPOUT(1) ) THEN       # 第1要素は引数と一致している
  HCORDY = 'APLV'
ENDIF
```

4. プログラミング上の違い
④ ローカル変数の扱い方の違い

CASE6: call文でスカラ変数を配列で受ける

call文でスカラ変数を配列で受ける　(続き)

- 修正内容
  - 受ける側の引数をスカラ変数に修正 (同様ルーチンに従った)
  - callする側を配列にする方法もある (本件、随所にある同じcall文はスカラ引数であったので不採用)
  - 修正後のコードイメージ

```
LOGICAL    OP
CALL  AA ( , , OP , , )

SUBROUTINE  AA ( , , OPOUT , , )
LOGICAL   OPOUT
LOGICAL   OPOUT_A  ( 2 )

OPOUT_A(1) = OPOUT
OPOUT_A(2) = OPOUT    # 別ルーチンの扱いに準じた

IF ( OPOUT_A(2) ) THEN
  HCORDY = 'APLV2'
ELSE IF ( OPOUT_A(1) ) THEN
  HCORDY = 'APLV'
ENDIF
```

- 原因
  - 先頭要素以外の値について、初期値に差異がある

SX-ACE	0初期化 あるいは FALSE初期化
SX-Aurora TSUBASA	不定(LOGICAL では T/F で不定)

4. プログラミング上の違い
④ ローカル変数の扱い方の違い

CASE7: ベクトル化について

ベクトル化

- SX-ACE ではベクトル化出来ているが、SX-Aurora TSUBASA ではベクトル化出来ていない場合
  - 可能であれば、SX-ACE の編集リスト/最適化メッセージ、ftrace結果と比較し、該当部分の状況を確認する
  - コンパイラ指示行変換ツール で 指示行を変換する
    - Fortran　nfdirconv コマンド
    - C　　ncdirconv コマンド

4. プログラミング上の違い
① コマンド等の違い

変換ツールは単純な置き換えであるため、
内側ループの展開(指示行 expand) と外側ループのベクトル化で意図しない結果となる場合は、
指示行 unroll または unroll_completely を試す

- コンパイルオプション **-fnamed-noalias-aggressive** (Fortran)を試す

ポインタの指示先がエイリアスをもたないと仮定してより激しく最適化・自動ベクトル化 を適用する。

ベクトル化状況の比較は、SX-ACE上で採取しておく採取が役立ちます。

2. 移行前の準備

第3版にて追加

6. 情報入手方法

SX-Aurora TSUBASA に関する情報

NEC Aurora Forum

URL： https://www.hpc.nec/

- 各種ドキュメント、コミュニティ

NEC \Orchestrating a brighter world

SX-Aurora TSUBASA に関する情報

各種公開ドキュメント

URL： https://www.hpc.nec/documentation

- SDK (コンパイラ情報等)
  - コンパイラオプション、ライブラリ、性能分析ツール等のマニュアル
- NLC (NEC Numeric Library)
- NEC MPI

Table 3: NEC SDK

Document Name	Revision	Target Software	Updated	Old Revision
C/C++ Compiler ユーザーズガイド	21	-	Dec 25th, 2020	-
Fortran Compiler ユーザーズガイド	21	-	Dec 25th, 2020	-
PROGINF/FTRACE ユーザーズガイド	6	-	Oct 30th, 2020	-
NEC Ftrace Viewer ユーザーズガイド	2	-	Jan 31st, 2020	-
NEC Parallel Debugger ユーザーズガイド	3	-	Jun 5th, 2019	-
NLC (NEC Numeric Library Collection) ユーザーズガイド	2.2.0	-	Dec 25th, 2020	✔
Vector Engine Assembly Language Reference Manual	1.3	-	Oct 9th, 2019	-
Instruction Set Architecture Guide	1.1	-	Mar 12th, 2019	-
System V Application Binary Interface VE Architecture Processor Supplement	2.1	-	Feb 7th, 2019	-
ELF Handling For Thread-Local Storage VE Architecture Processor Supplement	1.2	-	Feb 7th, 2019	-
NLC (NEC Numeric Library Collection) リリースノート	-	-	Dec 25th, 2020	-

Table 4: NEC MPI

Document Name	Revision	Target Software	Updated	Old Revision
NEC MPI ユーザーズガイド	15	NEC MPI v2.13.0	Dec 25th, 2020	✔

SX-ACE からの移行に関する情報

コンパイラオプションの対応表 (部分)

- Fortran Compiler ユーザーズガイド 付録B
  (C/C++ Compilerユーザーズガイド にも同様ページあり)

付録 B　SX シリーズ向けコンパイラとの対応

本節では SX シリーズ向けのコンパイラと Vector Engine 向けコンパイラの主なコンパイラオプション、指示行環境変数の対応について説明します。

B.2　Fortran90/SXコンパイラオプション

Fortran90/SX コンパイラオプションと Vector Engine 向けコンパイラのコンパイラオプションの対応表を示します。Vector Engine コンパイラ列の「なし」は対応するコンパイラオプションがないことを表します。

B.2.1　f90/sxf90コマンド基本オプション

Fortran90/SXコンパイラ	Vector Engineコンパイラ
-Chopt	-O3
-Cvopt	-O2
-Csopt	-O2 –mno-vector
-Cvsafe	-O1
-Cssafe	-O1 –mno-vector
-Cdebug	-O0 -g
-c	-c
-Nc	なし

SX-ACE からの移行に関する情報

環境変数の対応表 (部分)

- Fortran Compiler ユーザーズガイド 付録B

B.4　環境変数

SX シリーズ向けコンパイラの主要な実行時に参照される環境変数とほぼ同等の機能をもつ Vector Engine 向けコンパイラの環境変数を以下に示します。

SXシリーズ向けコンパイラ	Vector Engineコンパイラ
F_PROGINF	VE_PROGINF
F_TRACEBACK	VE_TRACEBACK
F_EXPRCW	VE_FORT_EXPRCW
F_FMTBUF	VE_FORT_FMTBUF

その他ライブラリ (部分)

- Fortran Compiler ユーザーズガイド 付録B

B.5　その他のライブラリ

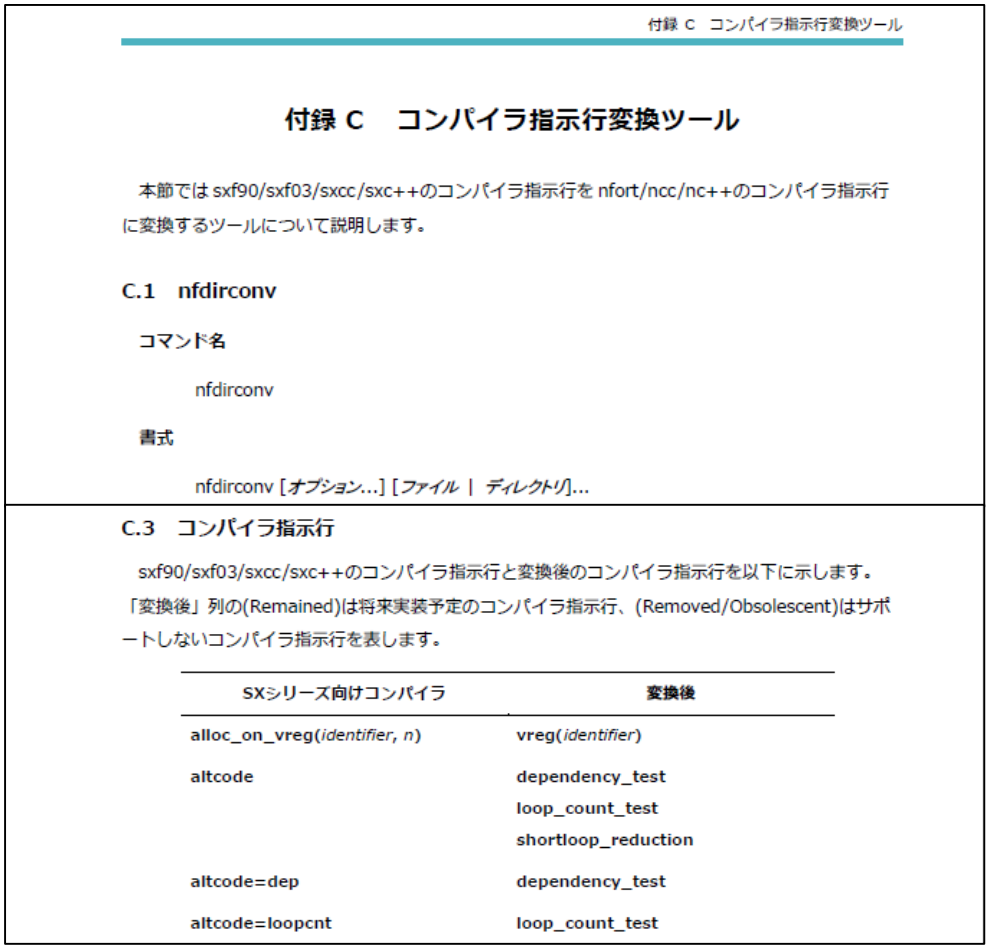
SX シリーズ向けコンパイラのその他のライブラリの手続とほぼ同等の機能をもつ Vector Engine 向けコンパイラの手続を以下に示します。**USE** 文の代わりに**-use** の使用も可能です。

SXシリーズ向けコンパイラ	Vector Engineコンパイラ
CALL ABORT()	USE F90_UNIX CALL ABORT()
RESULT = ACCESS(NAME,MODE)	USE F90_UNIX_FILE CALL ACCESS(NAME,AMODE,RESULT) (注) MODE(文字)がAMODE(整数)に変更されています。AMODE(整数)の詳細は「9.3.5 F90_UNIX_FILE」のパラメタを参照してください。

SX-ACE からの移行に関する情報

コンパイラ指示行変換ツールによる対応表 (部分)

- Fortran Compiler ユーザーズガイド 付録C
  (C/C++ Compilerユーザーズガイド にも同様ページあり)



付録 C　コンパイラ指示行変換ツール

本節では sxf90/sxf03/sxcc/sxc++のコンパイラ指示行を nfort/ncc/nc++のコンパイラ指示行に変換するツールについて説明します。

C.1　nfdirconv

コマンド名

nfdirconv

書式

nfdirconv [*オプション...*] [*ファイル* | *ディレクトリ*]...

C.3　コンパイラ指示行

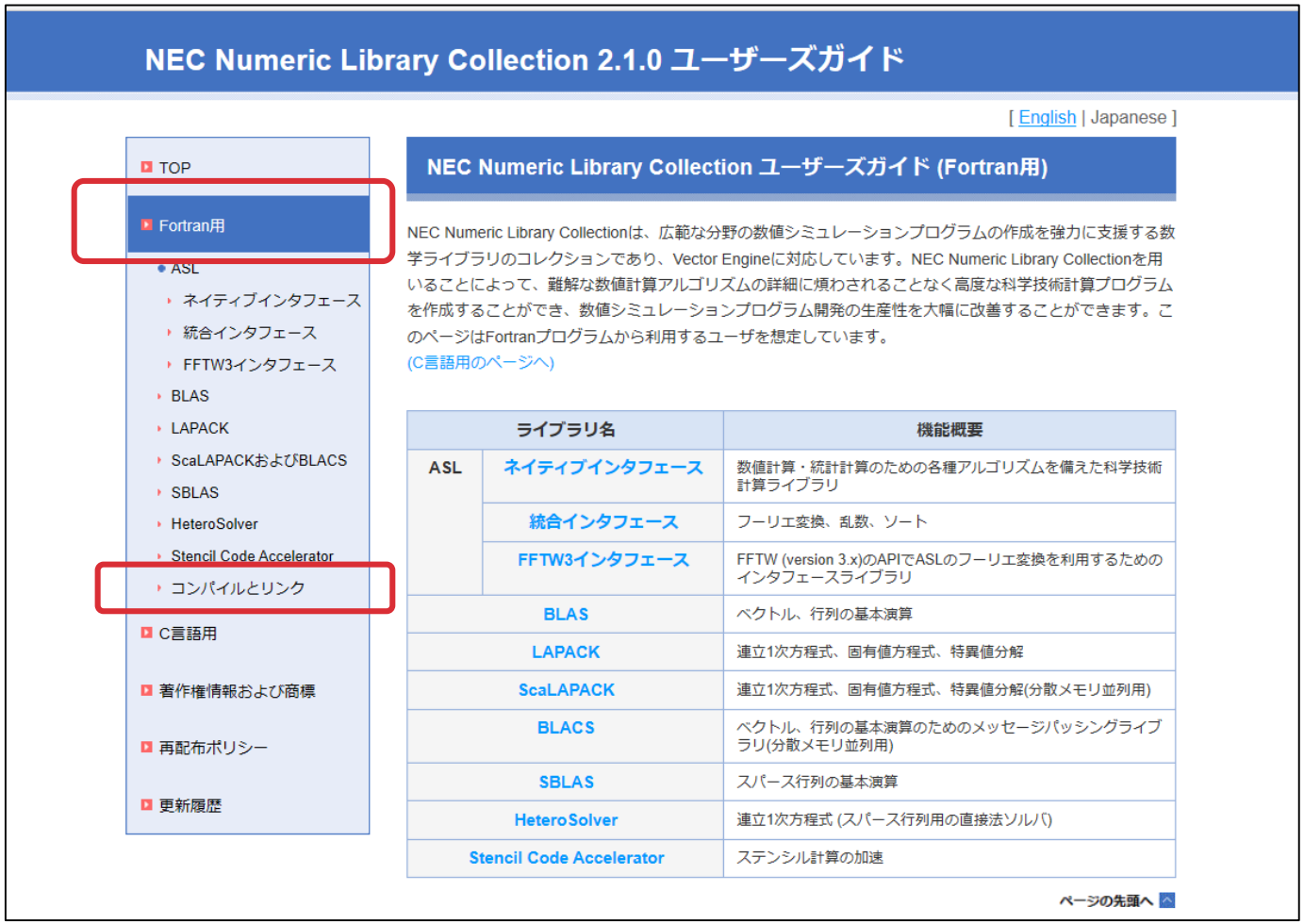
sxf90/sxf03/sxcc/sxc++のコンパイラ指示行と変換後のコンパイラ指示行を以下に示します。「変換後」列の(Remained)は将来実装予定のコンパイラ指示行、(Removed/Obsolescent)はサポートしないコンパイラ指示行を表します。

SXシリーズ向けコンパイラ	変換後
alloc_on_vreg(*identifier*, *n*)	vreg(*identifier*)
altcode	dependency_test loop_count_test shortloop_reduction
altcode=dep	dependency_test
altcode=loopcnt	loop_count_test

SX-ACE からの移行に関する情報

NEC Numeric Library Collection マニュアル

- コンパイルとリンク(言語別にある)



NEC Numeric Library Collection 2.1.0 ユーザーズガイド

[English | Japanese]

- TOP
- Fortran用
  - ASL
    - ネイティブインタフェース
    - 統合インタフェース
    - FFTW3インタフェース
  - BLAS
  - LAPACK
  - ScaLAPACKおよびBLACS
  - SBLAS
  - HeteroSolver
  - Stencil Code Accelerator
  - コンパイルとリンク
- C言語用
- 著作権情報および商標
- 再配布ポリシー
- 更新履歴

NEC Numeric Library Collection ユーザーズガイド (Fortran用)

NEC Numeric Library Collectionは、広範な分野の数値シミュレーションプログラムの作成を強力に支援する数学ライブラリのコレクションであり、Vector Engineに対応しています。NEC Numeric Library Collectionを用いることによって、難解な数値計算アルゴリズムの詳細に煩わされることなく高度な科学技術計算プログラムを作成することができ、数値シミュレーションプログラム開発の生産性を大幅に改善することができます。このページはFortranプログラムから利用するユーザを想定しています。

(C言語用のページへ)

ライブラリ名		機能概要
ASL	ネイティブインタフェース	数値計算・統計計算のための各種アルゴリズムを備えた科学技術計算ライブラリ
	統合インタフェース	フーリエ変換、乱数、ソート
	FFTW3インタフェース	FFTW (version 3.x)のAPIでASLのフーリエ変換を利用するためのインタフェースライブラリ
BLAS		ベクトル、行列の基本演算
LAPACK		連立1次方程式、固有値方程式、特異値分解
ScaLAPACK		連立1次方程式、固有値方程式、特異値分解(分散メモリ並列用)
BLACS		ベクトル、行列の基本演算のためのメッセージパッシングライブラリ(分散メモリ並列用)
SBLAS		スパース行列の基本演算
HeteroSolver		連立1次方程式 (スパース行列用の直接法ソルバ)
Stencil Code Accelerator		ステンシル計算の加速

ページの先頭へ

第3版にて追加

7. 分散メモリ並列化

分散メモリ並列化手法

SX-ACE及びSX-Aurora TSUBASAでは、**MPI**と**HPF**が分散メモリ並列化手法として用意されています。

移植性や**対応環境の多さに優れる**が、並列化に伴う**開発者負担が大きい**

MPI(Message Passing Interface)とは？

- 分散メモリ並列処理における、複数プロセス間でデータをやり取りするために用いるメッセージ通信操作の仕様標準
- FORTRAN，C，C++から呼び出すサブプログラムのライブラリ
- ポータビリティに優れている
  - 標準化されたライブラリにより、様々なMPI実装環境で同じソースをコンパイル・実行できる
- 開発者の負担が比較的大きい
  - プログラムを分析して、データ・処理を分割し、通信の内容とタイミングをユーザが自身で記述する

並列化に伴う**開発者負担が小さい**反面、**対応環境の制約が多い**

HPF(High Performance Fortran)とは？

- Fortran95の分散メモリ型並列計算機向け拡張仕様で以下の特徴を有する
  - 国際的な標準仕様(並列処理を主要ベンダ，大学，研究機関で共同で仕様策定)
  - 記述が平易(Fortran＋コメント形式の指示文)
  - 上級ユーザは細かな制御も可能(通信の制御，部分的にMPIを利用したチューニング等)

MPIとHPF の役割分担

MPIとHPFで、システム側が自動制御するもの、開発者が手動制御するものの関係は以下の通りです。

分散並列プログラム開発における、主要な処理要素

① 複数CPU,コアへの**データの分割配置(マッピング)**
② 複数CPU,コアへの**並列化・処理の分担**
③ 複数CPU,コア間の**通信処理の挿入**

処理要素	MPI	HPF
①データの分割配置	手動	手動 ※
②並列化・処理の分担	手動	自動
③通信処理の挿入	手動	自動

※SX-Aurora TSUBASA環境(NEC HPF)では、データの分割配置を一部自動化するデータ分散指定オプションが利用可能です。

MPIによる並列化例

例）3DHydro(一部)

```
      Parameter(   isphyx = 1020  )  !X-direction
      Parameter(   isphyy =  256  )  !Y-direction
      Parameter(   isphyz =  256  )  !Z-direction
      Parameter( npartx=1 ,nparty=4,  npartz=8 )
      Parameter( lx =  isphyx/npartx + 4  )
      Parameter( ly =  isphyy/nparty + 4  )
      Parameter( lz =  isphyz/npartz + 4  )

 program  apr_main

      call mpi_init(ierr)
      call mpi_comm_size(mpi_comm_world,ncpu,ierr)
      call mpi_comm_rank(mpi_comm_world,id_cpu,ierr)


  call MPI_FINALIZE( ierr )

end program  apr_main

 subroutine zeroclr

 call MPI_ALLREDUCE(zseend,
     >                   seend,
     >                   1,
     >                   MPI_DOUBLE_PRECISION,
     >                   mpi_sum,
     >                   mpi_comm_world,
     >                   ierr)

 end
```

空間分割

MPIの初期化

実行プロセス数の取得

自プロセス番号の取得

MPIの終了

全プロセスと通信

```
subroutine sender3_type1_mstep1

call mpi_isend(sr3dh(1,1,3),
    >               1,
    >               ijvec,
    >               npz(1),
    >               1,
    >               mpi_comm_cart,
    >               ireq1(0),
    >               ierr)

call mpi_irecv(sr3dh(1,1,1),
    >               1,
    >               ijvec,
    >               npz(1),
    >               2,
    >               mpi_comm_cart,
    >               ireq1(3),
    >               ierr)

end
```

指定されたプロセス同士で通信

※3DHydroは、３次元流体コード（レーザーエネルギー学研究センター提供）です。

HPFによる並列化例

例）3DHydro(一部)

```
 MODULE interp

!HPF$ PROCESSORS P(NUMBER_OF_PROCESSORS())
!HPF$ DISTRIBUTE (*,*,BLOCK) ONTO P ::
!HPF$*           sr3d,  su3d,  sp3d,  sv3d,  sw3d, se3d
!HPF$*         , dr,    du,    dp,    dv,    dw
!HPF$*         , sr3dr, su3dr, sp3dr, sv3dr, sw3dr
!HPF$*         , sr3dl, su3dl, sp3dl, sv3dl, sw3dl
!HPF$*         , sr3dh, su3dh, sp3dh, sv3dh, sw3dh

 END MODULE inte

 subroutine roe_boundx(mstep)

!HPF$ ON HOME(sm3dh(:,:,iz)),LOCAL BEGIN
         do iy=1,ly
              sm3dh(2,iy,iz) = -sm3dh(3,iy,iz)
              sn3dh(2,iy,iz) =  sn3dh(3,iy,iz)
              sl3dh(2,iy,iz) =  sl3dh(3,iy,iz)
              sr3dh(2,iy,iz) =  sr3dh(3,iy,iz)
c
              sm3dh(1,iy,iz) = -sm3dh(4,iy,iz)
              sn3dh(1,iy,iz) =  sn3dh(4,iy,iz)
              sl3dh(1,iy,iz) =  sl3dh(4,iy,iz)
              sr3dh(1,iy,iz) =  sr3dh(4,iy,iz)
              se3dh(1,iy,iz) =  se3dh(4,iy,iz)
         enddo
!HPF$ END ON

      return
      end
```

CPU,コア構成を宣言する

データの分割配置(マッピング)を指定する

部分配列がマップされているCPU,コアが実行し、通信が不要であることをコンパイラへ教える

```
 subroutine cfl

!HPF$ INDEPENDENT,NEW(ix,iy,iz,wuu,wvv,www,wcc)
!HPF$*           ,REDUCTION(max:sram)
 do iz = 1, lz
       do iy = 1, ly
        do ix = 1, lx
          wuu = su3d(ix,iy,iz)
          wvv = sv3d(ix,iy,iz)
          www = sw3d(ix,iy,iz)
          wcc = sqrt( fixedgamma * sp3d(ix,iy,iz) / sr3d(ix,iy,iz) )
          sram = max( sram,
     &                        (abs(wuu) + wcc)/sdltx ,
     &                        (abs(wvv) + wcc)/sdlty ,
     &                        (abs(www) + wcc)/sdltz )
        end do
       end do
      end do

 end
```

並列化可能であることを指定する。また任意の集計計算を含むためREDUCTION節を指定する。

※HPF並列化による性能向上には限界がありますので，更なる高速化が必要な場合はMPI化の検討をおねがいします．

※3DHydroは，３次元流体コード（レーザーエネルギー学研究センター提供）です．

分散メモリ並列化 関連情報

分散メモリ並列化に関する過去の講習会情報
※ 講習会資料の閲覧ができます

- 並列プログラミング入門(MPI)
  http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lec_ws/20200703/

SX-Aurora TSUBASAのMPI利用(NEC MPI)

- NEC MPI ユーザーズガイド
  https://www.hpc.nec/documentation
  →「NEC MPI ユーザーズガイド」

SX-Aurora TSUBASAのHPF利用(NEC HPF)
※ HPFの概要(スタートガイド)、利用方法(ユーザーズガイド)が閲覧できます。

- NEC High Performance Fortran (HPF) Language Processor Released
  https://www.hpc.nec/forums/topic?id=Lb2cmG#L6yF51


Orchestrating a brighter world
NEC