

SX-Aurora TSUBASA
NEC HPF スタートガイド

SX-Aurora TSUBASA

輸出する際の注意事項

本製品（ソフトウェアを含む）は、外国為替および外国貿易法で規定される規制貨物（または役務）に該当することがあります。

その場合、日本国外へ輸出する場合には日本国政府の輸出許可が必要です。

なお、輸出許可申請手続きにあたり資料等が必要な場合には、お買い上げの販売店またはお近くの当社営業拠点にご相談ください。

は し が き

本書は、NEC HPF のインストール、アップデート、アンインストール、コンパイル・リンク、および プログラム実行手順を説明しています。本書の最新版は、NEC Aurora Web Forums から入手可能です。

- <https://www.hpc.nec/forums/>

本書の記述は、NEC MPI の PP サポート契約があるお客様を対象にしています。

NEC HPF のインストール前に、SX-Aurora TSUBASA ソフトウェアのインストールを済ませておく必要があります。SX-Aurora TSUBASA ソフトウェアのインストールについては、次のページにある SX-Aurora TSUBASA インストレーションガイドを参照してください。

- <https://www.hpc.nec/documentation>

商標、著作権について

- Linux はアメリカ合衆国及びその他の国における Linus Torvalds の商標です。
- Red Hat, Red Hat Enterprise Linux は米国およびその他の国において登録された Red Hat, Inc. の商標です。
- Apache は、Apache Software Foundation の商標または登録商標です。
- その他、記載されている会社名、製品名は、各社の登録商標または商標です。

用語定義・略語

用語・略語	説明
ベクトルエンジン (VE, Vector Engine)	SX-Aurora TSUBASAの中核であり、ベクトル演算を行う部分です。PCI Expressカードであり、x86サーバーに搭載して使用します。
ベクトルホスト (VH, Vector Host)	ベクトルエンジンを保持するサーバー、つまり、ホストコンピュータを指します。
ベクトルアイランド (VI, Vector Island)	VH1台にVEを1枚ないし複数枚組み込んだ単位を指します。
MPI	Message Passing Interfaceの略語です。主にノード間で並列コンピューティングを行うための標準化規格です。同一ノード内であっても、プロセス間の通信にMPIを使用することが可能です。OpenMPとの併用も可能です。
NEC yumリポジトリ	NECのAuroraソフトウェア用のリポジトリ。
NQSV	SX-Aurora TSUBASA のジョブスケジューラ
PPサポート	お客様がご購入されたソフトウェア製品の技術サポートを有償にて提供するサポートサービスです。
VH名	VH であるホストコンピュータのホスト名。
VE 番号	1 つの VH に接続されている VE の識別番号。0 から始まる連続した整数値です。

目 次

は し が き	i
用語定義・略語	ii
目 次 3	
第 1 章 インストール.....	5
1.1 NEC HPF yum リポジトリ設定	5
1.2 NEC HPF のインストール.....	6
第 2 章 アップデート	9
2.1 NEC HPF のアップデート	9
2.2 OS アップデート時の注意事項	9
第 3 章 アンインストール	11
3.1 NEC HPF のアンインストール	11
第 4 章 コンパイル・リンク	13
第 5 章 プログラム実行	15
5.1 インタラクティブ実行	15
5.1.1 一つの VE 上での実行.....	15
5.1.2 一つの VH 上の複数の VE 上での実行	15
5.1.3 複数の VH 上の複数の VE 上での実行	16
5.2 スケジューラ NQSV を使用したバッチ実行	16
付録 A ローカル yum リポジトリの構築・更新	17
A.1 ローカル yum リポジトリの構築	17
A.2 ローカル yum リポジトリの更新	19
索 引 21	

目 次

第1章 インストール

本章では、NEC HPF のインストール手順を説明します。

VH がインターネットに接続している場合は、インターネット上の yum リポジトリをオンラインで利用することができます。VH がインターネットに直接アクセスできない場合は、インターネットにアクセスできる環境でダウンロードしたソフトウェアパッケージを利用して、VH または管理サーバー上に yum リポジトリを構築することでインストールを行います。VH または管理サーバー上に yum リポジトリを構築する手順は、SX-Aurora TSUBASA インストールガイド 付録 A をご参照ください。

⚠ 注意

本章に記載されている#プロンプトで始まるコマンド行は、スーパーユーザー権限で実行してください。

1.1 NEC HPF yum リポジトリ設定

NEC HPF のインストールの前に、SX-Aurora TSUBASA インストレーションガイドを参照して、NEC SDK および NEC MPI をインストールしてください。NEC HPF を使用するためには、NEC MPI および NEC SDK 中の NEC Fortran コンパイラが必要だからです。

最初に、NEC HPF 用の yum リポジトリを設定します。yum リポジトリは、インターネット上のものをオンラインで利用するか、またはローカルに構築してオフラインで利用することができます。ローカルに構築して利用する場合、SX-Aurora TSUBASA インストールガイド 付録 A を参照して、ローカルな yum レポジトリを構築した後、本書の付録 A を参照して、NEC HPF 用のローカルな yum レポジトリを追加してください。

オンラインでインターネット上の yum リポジトリを利用可能な場合、以下のコマンドを実行してください。

```
# yum install https://www.hpc.nec/repos/NEC-HPF-release-1.0.0-1.noarch.rpm
```

次のファイルがインストールされます。

- /etc/yum.repos.d/TSUBASA-additional-hpf.repo NEC HPF リポジトリ設定ファイル

NEC MPI の PP サポート契約があるお客様は、契約内容に基づいて、NEC HPF リポジトリ設定ファイル (/etc/yum.repos.d/TSUBASA-additional-hpf.repo) 中の設定欄を編集してください。NEC

MPI の「PP・サポートサービス 製品シリアル No.カード」に記載されたシリアル No. の 16 行 ("-を除く) を username に、右側 8 行を password に入力し、enabled は 1 に設定してください。シリアル No.カードは、NEC MPI のサポートパックを購入されたお客様は、「インターネット配信製品ダウンロードサービス」からダウンロードできるファイル中に含まれています。PP サポート契約されたお客様は、営業にお問合せ願います。

さらに、ご使用の OS バージョンにあわせて、baseurl 行を修正してください。

リポジトリ設定ファイルの編集例は、次のとおりです。

```
# vi /etc/yum.repos.d/TSUBASA-additional-hpf.repo
[nec-hpf]
:
baseurl=https://www.hpc.nec/repos/additional/hpf/hpf_e17 ←OSがRHEL8の場合、hpf_e18に変更
:
username=<シリアルNo>
password=<シリアルNoの右側の8桁>
enabled=1      ←0を1に変更 # yum group update $TSUBASA_GROUPS
```

1.2 NEC HPFのインストール

- 最新版を、標準のパス /opt/nec/ve/bin/ve-hpf で起動できるようにインストールする場合

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf"
# /opt/nec/ve/sbin/TSUBASA-groups-remark.sh $TSUBASA_GROUPS
# yum group install $TSUBASA_GROUPS
```

- 最新版を、バージョンごとのローカルなパスから起動するようインストールする場合

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf-alternate"
# yum group install $TSUBASA_GROUPS
```

インストールしたコンパイラは、環境変数 VE_HPF_COMPILER_PATH の値を、/opt/nec/ve/hpf/{version} に設定した上で、/opt/nec/ve/hpf/{version}/bin/ve-hpf で起動できます。ここで、{version} は、インストールした HPF コンパイラのバージョンです。

- 特定のバージョンx.y.zを、NEC HPFのバージョンごとのローカルなパスから起動するようインストールする場合

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf-alternate-x-y-z"  
# yum group install $TSUBASA_GROUPS
```

インストールしたコンパイラは、環境変数 VE_HPF_COMPILER_PATH の値を /opt/nec/ve/hpf/x.y.z に設定した上で、/opt/nec/ve/hpf/x.y.z/bin/ve-hpf で起動できます。

第2章 アップデート

NEC HPF をアップデートする手順を説明します。なお、ローカルに yum リポジトリを構築している場合は、第4章に従い、ローカルの yum リポジトリを更新してください。

⚠ 注意

本章に記載されている#プロンプトで始まるコマンド行は、スーパーユーザー権限で実行してください。

2.1 NEC HPFのアップデート

- 標準のパス/opt/nec/ve/bin/ve-hpf で起動される HPF コンパイラを最新版に更新します。

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf"
# /opt/nec/ve/sbin/TSUBASA-groups-remark.sh $TSUBASA_GROUPS
# yum group update $TSUBASA_GROUPS
```

2.2 OSアップデート時の注意事項

OS のアップデートを行う場合、NEC HPF リポジトリ設定ファイル (/etc/yum.repos.d/TSUBASA-additional-hpf.repo)中の設定欄 enabled の値を 0 にしてから、OS をアップデートしてください。

OS のアップデート完了後、OS のバージョンに合わせて、NEC HPF リポジトリ設定ファイル中の baseurl を更新してください。さらに、enabled の値を 1 に戻してください。

第3章 アンインストール

本章では、NEC HPF のアンインストール手順を説明します。

⚠ 注意

本章に記載されている#プロンプトで始まるコマンド行は、スーパーユーザー権限で実行してください。

3.1 NEC HPFのアンインストール

- 標準のパス/opt/nec/ve/binから起動されるHPFコンパイラをアンインストールする場合

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf"  
# /opt/nec/ve/sbin/TSUBASA-groups-remark.sh $TSUBASA_GROUPS  
# yum group remove $TSUBASA_GROUPS
```

- NEC HPFのバージョンごとのローカルなパスから起動するようインストールされているコンパイラをアンインストールする場合

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf-alternate"  
# yum group remove $TSUBASA_GROUP
```

- NEC HPFのバージョンごとのローカルなパスから起動するよう、特定のバージョンx.y.zを指定してインストールされているコンパイラをアンインストールする場合

```
# TSUBASA_GROUPS="nec-hpf-alternate-x-y-z"  
# yum group remove $TSUBASA_GROUP
```


第4章 コンパイル・リンク

本章では、HPF プログラムのコンパイル・リンク方法を簡単に紹介します。利用可能なオプションなど、詳細な情報は、NEC HPF ユーザーズガイドを参照してください。

最初に、NEC MPI および NEC Fortran コンパイラの環境設定を行うため、次のコマンドを実行して、MPI セットアップスクリプトを読み込んでください。この設定は VH からログアウトするまで有効です。ログアウトすると無効となりますので、VH にログインするたびに再実行してください。

(bash の場合)

```
%> source /opt/nec/ve/mpi/{version}/bin/necmpivars.sh
```

(csh の場合)

```
%> source /opt/nec/ve/mpi/{version}/bin/necmpivars.csh
```

上記の *{version}* は、ご使用になる NEC MPI のバージョンに対応するディレクトリ名です。例えば、NEC MPI バージョン 2.5.0 を bash 上で使用する場合、次のコマンドを実行します。

(バージョン 2.5.0 および bash の場合)

```
%> source /opt/nec/ve/mpi/2.5.0/bin/necmpivars.sh
```

詳細は、NEC MPI ユーザーズガイドを参照してください。

上記の環境設定後、次のように HPF コンパイルコマンド ve-hpf を実行して、HPF プログラムの・コンパイル・リンクを行うと、HPF 実行ファイル a.out が生成されます。HPF 実行ファイルは、実質的に MPI 実行ファイルなので、MPI プログラムと同様に実行できます。

```
%> cat file.hpf
parameter(n=1000)
double precision a(1000), s
!HPF$ DISTRIBUTE a(BLOCK)
do i=1,n
  a(i)=1.0
enddo
s = 0.0
do i=1,n
  s = s + a(i)
enddo
write(*,*)s
end
%> ve-hpf  file.hpf
```


第5章 プログラム実行

本章では、HPF プログラムの実行方法を簡単に紹介します。HPF 実行プログラムの実行は、MPI 実行プログラムと同様に、MPI 実行コマンド mpirun または mpiexec を使用します。

詳細は、NEC HPF ユーザーズガイド および NEC MPI ユーザーズガイドを参照してください。

5.1 インタラクティブ実行

最初に、次のコマンドを実行して、MPI セットアップスクリプトを読み込んでください。この設定は VH からログアウトするまで有効です。ログアウトすると無効となりますので、VH にログインするたびに再実行してください。

(bash の場合)

```
%> source /opt/nec/ve/mpi/{version}/bin/necmpivars.sh
```

(csh の場合)

```
%> source /opt/nec/ve/mpi/{version}/bin/necmpivars.csh
```

上記の *{version}* は、ご使用になる NEC MPI のバージョンに対応するディレクトリ名です。例えば、NEC MPI バージョン 2.5.0 を bash 上で使用する場合、次のコマンドを実行します。

(バージョン 2.5.0 および bash の場合)

```
%> source /opt/nec/ve/mpi/2.5.0/bin/necmpivars.sh
```

5.1.1 一つの VE 上での実行

オプション-ve に、使用する VE の VE 番号を、オプション-np にプロセスの個数をそれぞれ指定します。オプション-ve を省略すると VE 番号 0 の VE が使用されます。オプション-np を省略すると、1 つのプロセスで実行されます。

```
%> mpirun -ve 3 -np 4 ./a.out
```

5.1.2 一つの VH 上の複数の VE 上での実行

オプション-ve に、使用する VE の VE 番号の範囲を、オプション-np にプロセスの総数をそれぞれ指定します。次の例は、VE 番号 0 から 3 の VE を使用して、4 つのプロセスで実行します。

```
%> mpirun -ve 0-3 -np 4 ./a.out
```

5.1.3 複数の VH 上の複数の VE 上での実行

オプション-host に、使用する VH 名を指定します。

次の例は、VH host0 および host1 それぞれの上で、VE 番号 0 から 3 の VE を使用して、4 つのプロセス(合計 8 プロセス)で実行します。

```
%> mpirun -host host0 -ve 0-3 -np 4 -host host1 -ve 0-3 -np 4 ./a.out
```

5.2 スケジューラNQSVを使用したバッチ実行

次の例は、2 つの VH それぞれの上で、4 つの VE を使用して、4 つのプロセス(合計 8 プロセス)で実行します。

```
%> cat hpfrun.sh
#PBS -T necmpi
#PBS -b 2          # Number of logical hosts
#PBS --cpunum-lhost=1 # Number of CPUs per logical host
#PBS --venum-lhost=4 # Number of VE nodes per logical host
source /opt/nec/ve/mpi/{version}/bin/necmpivars.sh
mpirun -np 8 ./a.out
%>/opt/nec/nqsv/bin/qsub ./hpfrun.sh
```

スケジューラ NQSV の詳細については、NEC Network Queuing System V (NQSV) 利用の手引 [操作編] を参照してください。

付録 A ローカル yum リポジトリの構築・更新

A.1 ローカルyumリポジトリの構築

オンラインでインターネット上の yum リポジトリへアクセスできない場合、ローカルでアクセス可能な yum リポジトリを構築頂く必要があります。まず、SX-Aurora TSUBASA インストレーションガイド付録 A を参照して、SX-Aurora TSUBASA ソフトウェアのためのローカルな yum リポジトリを構築してください。次に、NEC HPF 用のローカルな yum リポジトリを、次の手順で追加してください。

1. 以下より NEC HPF のリポジトリ設定ファイルパッケージをダウンロードしてください。なお、リポジトリ更新時には、本手順は不要です。
 - RHEL7, RHEL8用
 - <https://www.hpc.nec/repos/NEC-HPF-release-1.0.0-1.noarch.rpm>
2. NEC HPF の yum リポジトリが含まれる zip ファイルは、以下より入手可能です。OS バージョンに合致するファイルをダウンロードしてください。ダウンロードの際、NEC MPI の PP サポートのユーザー名（シリアル No. の 16 行）および パスワード（シリアル No. の右側 8 行）が必要です。
 - RHEL7用
 - https://www.hpc.nec/repos/additiona/hpf/hpf_el7.zip
 - RHEL8用
 - https://www.hpc.nec/repos/additional/hpf/hpf_el8.zip
3. SX-Aurora TSUBASA ソフトウェアのパッケージファイルを格納するディレクトリ（ここでは、/path/to/repos とします）の下に、ダウンロードした NEC HPF 用のリポジトリ設定ファイルパッケージ および zip ファイルを配置してください。次に、NEC HPF のリポジトリ設定ファイルパッケージをインストールしてください。

```
#cd /path/to/repos
#yum install ./NEC-HPF-release-1.0.0-1.noarch.rpm
```

上記により、以下のファイルがインストールされます。

- /etc/yum.repos.d/TSUBASA-additional-hpf.repo NEC HPFリポジトリ設定ファイル

4. NEC HPF 用のリポジトリ設定ファイル(/etc/yum.repos.d/TSUBASA-additional-hpf.repo)の設定欄を編集して、ローカルに展開した yum リポジトリの URL(http アドレス)を、次のように baseurl に設定し、enabled を 1 に設定してください。

(RHEL7 の場合の例)

変更前

```
baseurl=https://www.hpc.nec/repos/additonal/hpf/hpf_e17  
...  
enabled=0
```

変更後(リポジトリサーバーがスタンドアロン構成)

```
baseurl=file:///path/to/repos/hpf_e17  
...  
enabled=1
```

変更後(リポジトリサーバーがスタンドアロン構成以外)

```
baseurl=http://address.or.name.of.server/path/to/repos/hpf_e17  
...  
enabled=1
```

5. yum のキャッシュを削除します。

```
#yum clean all
```

6. 最後に zip ファイルから NEC HPF リポジトリを展開してください

```
#cd /path/to/repos  
#find . -name '*.zip' | xargs rm -f  
#rm *.zip
```

A.2 ローカルyumリポジトリの更新

リポジトリサーバー上で、付録 A.1 で入手した zip ファイルを、yum リポジトリを作成したディレクトリ(以下の例では、/path/to/repos)にコピーした上で、展開します。

```
# cd /path/to/repos/  
# find . -name '*.zip' | xargs -n1 unzip  
# rm *.zip
```

各 VHにおいて、OS のバージョンアップを行った場合は、yum リポジトリの URL に含まれるバージョン番号を更新してください。

(OS を RHEL7 から RHEL8 にアップデートした場合の例)

変更前

```
baseurl=file:///path/to/repos/hpf_el7
```

変更後

```
baseurl=file:///path/to/repos/hpf_el8
```

yum のキャッシュを削除します。

```
# yum clean all
```


索引

H

HPF コンパイルコマンド 13

M

MPI ii

MPI セットアップスクリプト 13, 15

N

NEC yum リポジトリ ii

NQSV ii

O

OpenMP ii

P

PP サポート ii

V

VE ii

VE_HPF_COMPILER_PATH 6

VE 番号 ii

VH ii

VH 名 ii

VI ii

の

ノード ii

へ

ベクトルアイランド ii

ベクトルエンジン ii

ベクトルホスト ii

SX-Aurora TSUBASA システムソフトウェア

**SX-Aurora TSUBASA
NEC HPF スタートガイド**

2020年 9月 初版

日本電気株式会社

東京都港区芝五丁目7番1号

TEL(03)3454-1111（大代表）

© NEC Corporation 2020

© The Portland Group, Inc 1995

日本電気株式会社の許可なく複製・改変などを行うことはできません。

本書の内容に関しては将来予告なしに変更することがあります。