

CP2K 7.1.0 (gnu)

ウェブページ

<https://www.cp2k.org/>

バージョン

7.1.0

ビルド環境

- OpenMPI 4.0.2 (GCC 7.3 version)
- GCC 7.3.1 (devtoolset-7)
- cmake 3.16.3

ビルドに必要なファイル

- cp2k-7.1.0.tar.gz
- dbcsr-2.0.1.tar.gz
- tc_install_cp2k_toolchain.sh.diff

```
--- install_cp2k_toolchain.sh.org    2020-01-31 17:07:19.000000000 +0900
+++ install_cp2k_toolchain.sh      2020-01-31 17:07:30.000000000 +0900
@@ -942,8 +942,8 @@
    ./scripts/install_superlu.sh
    ./scripts/install_pexsi.sh
    ./scripts/install_quip.sh
-   ./scripts/install_plumed.sh
    ./scripts/install_gsl.sh
+   ./scripts/install_plumed.sh
    ./scripts/install_spglib.sh
    ./scripts/install_hdf5.sh
    ./scripts/install_libvdxwc.sh
```

- tc_install_sirius.sh.diff

```
--- install_sirius.sh.org    2020-02-25 14:50:50.000000000 +0900
+++ install_sirius.sh      2020-02-25 14:48:01.000000000 +0900
@@ -131,8 +131,8 @@
    -DSPFFT_DIR="${SPFFT_ROOT}/lib/cmake/SpFFT" \
    -DCMAKE_CXXFLAGS_RELEASE="${SIRIUS_OPT}" \
    -DCMAKE_CXX_FLAGS_RELWITHDEBINFO="${SIRIUS_DBG}" \
-   -DCMAKE_CXX_COMPILER=mpic++ \
-   -DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
+   -DCMAKE_CXX_COMPILER=${MPICXX} \
+   -DCMAKE_C_COMPILER=${MPICC} \
    ${COMPILE_OPTIONS} .. > compile.log 2>&1
    make -j $NPROCS -C src >> compile.log 2>&1

@@ -155,8 +155,8 @@
    -DCMAKE_CXX_FLAGS_RELWITHDEBINFO="${SIRIUS_DBG}" \
    -DUSE_CUDA=ON \
    -DGPU_MODEL=P100 \
-   -DCMAKE_CXX_COMPILER=mpic++ \
-   -DCMAKE_C_COMPILER=mpicc ${COMPILE_OPTIONS} .. >> compile.log 2>&1
+   -DCMAKE_CXX_COMPILER=${MPICXX} \
+   -DCMAKE_C_COMPILER=${MPICC} ${COMPILE_OPTIONS} .. >> compile.log 2>&1
    make -j $NPROCS -C src >> compile.log 2>&1
    install -d ${pkg_install_dir}/lib/cuda
    install -d ${pkg_install_dir}/include/cuda
```

- tc_install_plumed_noext.sh.diff

```

--- install_plumed.sh.org    2020-02-19 13:43:07.000000000 +0900
+++ install_plumed.sh      2020-02-19 13:42:49.000000000 +0900
@@ -40,7 +40,7 @@

    echo "Installing from scratch into ${pkg_install_dir}"
    cd plumed-${plumed_ver}
-   ./configure CXX="${MPICXX}" --prefix=${pkg_install_dir} --libdir="${pkg_install_dir}/lib" > configure.log 2>&1
+   ./configure CXX="${MPICXX}" --prefix=${pkg_install_dir} --libdir="${pkg_install_dir}/lib" CXXFLAGS="-I${GSLROOT}/include" LIBS="-L${GSLROOT}/lib" --enable-external-lapack=no --enable-external-blas=no > configure.log 2>&1
    make -j $NPROCS > make.log 2>&1
    make install > install.log 2>&1
    write_checksums "${install_lock_file}" "${SCRIPT_DIR}/${basename ${SCRIPT_NAME}}"
@@ -63,7 +63,7 @@
esac

if [ "$with_plumed" != "__DONTUSE__" ]; then
- PLUMED_LIBS='-lplumed -ldl -lstdc++ -lz -ldl'
+ PLUMED_LIBS='-lplumedKernel -lplumed -ldl -lstdc++ -lz -ldl'
    if [ "$with_plumed" != "__SYSTEM__" ]; then
        cat <<EOF > "${BUILDDIR}/setup_plumed"
        prepend_path LD_LIBRARY_PATH "$pkg_install_dir/lib"

```

ビルド手順

```

#!/bin/sh

INSTDIR=/local/apl/lx/cp2k710-gnu

VERSION=7.1.0
DBCSR_VERSION=2.0.1

SOURCE_ROOT=/home/users/${USER}/Software/CP2K/${VERSION}

TARBALL=${SOURCE_ROOT}/cp2k-${VERSION}.tar.gz
TARBALL_DBCSR=${SOURCE_ROOT}/dbcsr-${DBCSR_VERSION}.tar.gz

TC_PATCH0=${SOURCE_ROOT}/tc_install_cp2k_toolchain.sh.diff
TC_PATCH5=${SOURCE_ROOT}/tc_install_sirius.sh.diff
TC_PATCH9=${SOURCE_ROOT}/tc_install_plumed_noext.sh.diff

PARALLEL=12

#-----
umask 0022
export LANG=C
export LC_ALL=C

module purge
module load scl/devtoolset-7
module load mpi/openmpi/4.0.2/gnu7.3
module load cmake/3.16.3

cd $INSTDIR
if [ -d cp2k-${VERSION} ]; then
    mv cp2k-${VERSION} cp2k-erase
    rm -rf cp2k-erase &
fi
tar xzf ${TARBALL}
sleep 5
mv cp2k-${VERSION}/* .
sleep 5
rm -f cp2k-${VERSION}/.dockerignore
rmdir cp2k-${VERSION}

cd ${INSTDIR}/tools/toolchain

```

```

patch < ${TC_PATCH0}

cd scripts
patch < ${TC_PATCH5}
patch < ${TC_PATCH9}
cd ../

export MPICC=mpicc
export MPICXX=mpicxx
export MPIFC=mpif90

./install_cp2k_toolchain.sh --math-mode=openblas \
    --mpi-mode=openmpi \
    --with-cmake=system \
    --with-mpich=no \
    --with-libxc=install \
    --with-libint=install \
    --with-fftw=install \
    --with-openblas=install \
    --with-scalapack=install \
    --with-reflapack=no \
    --with-mkl=no \
    --with-libxsmm=install \
    --with-elpa=install \
    --with-ptscotch=install \
    --with-pexsi=install \
    --with-parmetis=install \
    --with-superlu=install \
    --with-quip=install \
    --with-plumed=install \
    --with-gsl=install \
    --with-libvdxwc=install \
    --with-spglib=install \
    --with-hdf5=install \
    --with-spfft=install \
    -j ${PARALLEL}

cp install/arch/local.psmf ../arch/rccs.psmf

cd ${INSTDIR}/exts
rmdir dbcsr
tar xzf ${TARBALL_DBCSR}
mv dbcsr-${DBCSR_VERSION} dbcsr
cd ../
make -j ${PARALLEL} ARCH=rccs VERSION=psmf

```

テスト

以下のスクリプトを ccfep 上で実行しています。

```

#!/bin/sh

export LC_ALL=C
export LANG=""

# gcc8
module purge
module load scl/devtoolset-7
module load mpi/openmpi/4.0.2/gnu7.3
module load cmake/3.16.3
#CP2K=/home/users/qf7/Software/CP2K/7.1.0/cp2k-7.1.0-gcc7-openmpi4-openblas
CP2K=/local/apl/ix/cp2k710-gnu

CP2K_ARCH=rccs
CP2K_VER=psmf

```

TIMEOUT=120

PARALLEL=16

ulimit -s unlimited

cd \${CP2K}/regtesting/\${CP2K_ARCH}/\${CP2K_VER}

rm -rf LAST-\${CP2K_ARCH}-\${CP2K_VER}

serial test

../tools/regtesting/do_regtest \

-nobuild \

-nosvn \

-arch \${CP2K_ARCH} \

-version \${CP2K_VER} \

-mpiranks 1 \

-omphthreads 1 \

-jobmaxtime \${TIMEOUT} \

-cp2kdir ../tools/ \

-maxtasks \${PARALLEL} >& regtest_mpi1_omp1.log

rm -rf LAST-\${CP2K_ARCH}-\${CP2K_VER}

omp test

../tools/regtesting/do_regtest \

-nobuild \

-nosvn \

-arch \${CP2K_ARCH} \

-version \${CP2K_VER} \

-mpiranks 1 \

-omphthreads 2 \

-jobmaxtime \${TIMEOUT} \

-cp2kdir ../tools/ \

-maxtasks \${PARALLEL} >& regtest_mpi1_omp2.log

rm -rf LAST-\${CP2K_ARCH}-\${CP2K_VER}

mpi test

../tools/regtesting/do_regtest \

-nobuild \

-nosvn \

-arch \${CP2K_ARCH} \

-version \${CP2K_VER} \

-mpiranks 2 \

-omphthreads 1 \

-jobmaxtime \${TIMEOUT} \

-cp2kdir ../tools/ \

-maxtasks \${PARALLEL} >& regtest_mpi2_omp1.log

rm -rf LAST-\${CP2K_ARCH}-\${CP2K_VER}

mpi/openmp test

../tools/regtesting/do_regtest \

-nobuild \

-nosvn \

-arch \${CP2K_ARCH} \

-version \${CP2K_VER} \

-mpiranks 2 \

-omphthreads 2 \

-jobmaxtime \${TIMEOUT} \

-cp2kdir ../tools/ \

-maxtasks \${PARALLEL} >& regtest_mpi2_omp2.log

rm -rf LAST-\${CP2K_ARCH}-\${CP2K_VER}

yet another mpi test

../tools/regtesting/do_regtest \

-nobuild \

-nosvn \

-arch \${CP2K_ARCH} \

-version \${CP2K_VER} \

```

-mpiranks 8 \
-ompthreads 1 \
-jobmaxtime ${TIMEOUT} \
-cp2kdir ../../ \
-maxtasks ${PARALLEL} >& regtest_mpi8_omp1.log
rm -rf LAST-${CP2K_ARCH}-${CP2K_VER}

# yet another mpi/openmp test
../../tools/regtesting/do_regtest \
-nobuild \
-nosvn \
-arch ${CP2K_ARCH} \
-version ${CP2K_VER} \
-mpiranks 8 \
-ompthreads 2 \
-jobmaxtime ${TIMEOUT} \
-cp2kdir ../../ \
-maxtasks ${PARALLEL} >& regtest_mpi8_omp2.log
rm -rf LAST-${CP2K_ARCH}-${CP2K_VER}

```

■ テスト結果: MPI1 - OMP1

```

----- Summary -----
Number of FAILED tests 1
Number of WRONG tests 0
Number of CORRECT tests 3217
Number of NEW tests 3
Total number of tests 3221

```

- QS/regtest-almo-2/ion-pair.inp: RUNTIME FAIL

■ テスト結果: MPI1 - OMP2

```

----- Summary -----
Number of FAILED tests 1
Number of WRONG tests 1
Number of CORRECT tests 3216
Number of NEW tests 3
Total number of tests 3221

```

- QS/regtest-almo-2/ion-pair.inp: RUNTIME FAIL
- SE/regtest/h2o_gks_e.inp: WRONG

■ テスト結果: MPI2 - OMP1

```

----- Summary -----
Number of FAILED tests 0
Number of WRONG tests 0
Number of CORRECT tests 3278
Number of NEW tests 8
Total number of tests 3286

```

■ テスト結果: MPI2 - OMP2

```

----- Summary -----
Number of FAILED tests 0
Number of WRONG tests 0
Number of CORRECT tests 3278
Number of NEW tests 8
Total number of tests 3286

```

■ テスト結果: MPI8 - OMP1

```

----- Summary -----
Number of FAILED tests 0
Number of WRONG tests 9
Number of CORRECT tests 3228

```

Number of NEW tests 6
Total number of tests 3243

- QS/regtest-mp2-lr/H2O-mp2-gpw-lr.inp: WRONG
- xTB/regtest-2/HF-field-gopt.inp: WRONG
- QS/regtest-mp2-grad/H2O_grad_mme.inp: WRONG
- QS/regtest-gpw-4/H2O-debug-5.inp: WRONG
- QS/regtest-gpw-4/H2O-debug-6.inp: WRONG
- QS/regtest-mp2-4/H2O_NO_HFX.inp: WRONG
- QS/regtest-rma-3D/H2O-32-dftb-ls-2_mult.inp: WRONG
- QS/regtest-rma-3D/H2O-32-dftb-ls-2.inp: WRONG
- QS/regtest-mp2-2/H2O-02.inp: WRONG

■ テスト結果: MPI8 - OMP2

----- Summary -----
Number of FAILED tests 0
Number of WRONG tests 9
Number of CORRECT tests 3228
Number of NEW tests 6
Total number of tests 3243

- QS/regtest-mp2-lr/H2O-mp2-gpw-lr.inp: WRONG
- xTB/regtest-2/HF-field-gopt.inp: WRONG
- QS/regtest-mp2-grad/H2O_grad_mme.inp: WRONG
- QS/regtest-gpw-4/H2O-debug-5.inp: WRONG
- QS/regtest-gpw-4/H2O-debug-6.inp: WRONG
- QS/regtest-mp2-4/H2O_NO_HFX.inp: WRONG
- QS/regtest-rma-3D/H2O-32-dftb-ls-2_mult.inp: WRONG
- QS/regtest-rma-3D/H2O-32-dftb-ls-2.inp: WRONG
- QS/regtest-mp2-2/H2O-02.inp: WRONG

ベンチマーク

6.1.0 と同じように H2O-64.inp を利用。(時間は grep "CP2K " *.log で表示される値から)
21 回実行し、最初の 1 回を除いた平均値。(初回は速度が安定しないため)

jobtype	総コア数 (ノード数)	MPI	OMP	GPU	elapsed(sec)
core	18 (1)	18	1	-	72.685
small	40 (1)	40	1	-	51.424
small	80 (2)	80	1	-	36.697
small	160 (4)	32	5	-	27.455

雑多な情報

- GPU 版はあまり意味が無いようなので今回ははじめから除外。
 - SIRIUS の GPU 版については MAGMA 等まで対応させれば速度が出るのかもしれませんが、今回は回避しています。
- libgrid を使うとむしろ遅くなったため、使用せず。
 - pyratemp 0.3.2 で試行。そのままビルドすると xyz_to_vab 内の *.template ファイルを正しく処理できておらず、失敗する。
 - sed -i -e "s/\\\$\\!/g" -e "s/\\@<\\!/g" -e "s/>\\@\\!/g" であらかじめ *.template ファイルを処理することで一応動作は確認。速度面ではメリット無し。
 - (スクリプト中で実行する場合は sed -i -e "s/\\\$\\!/g" -e "s/\\@<\\!/g" -e "s/>\\@\\!/g")
- libsmm については今回も未検証
- dbcsr を指示通りに git で持ってくると master ブランチのものを使うことになる。タイミングによってはダメなことが起こるので、リリース版を使っている。
- MKL を使うとはっきりと遅くなるため、OpenBlas を利用。
- GCC + Intel MPI の組み合わせでは cp2k 本体のビルド時にモジュール関連のエラーで失敗する。原因が判然とせず。include パスの問題なのだろうか？
- OpenMPI 3.1.0 でビルドした場合、MPI 時に正常に動作しない。どうやら既知のバグらしい。
 - <https://github.com/cp2k/dbcsr/issues/141>
- OpenMPI 4.x を使う場合にはレガシーな MPI1 のサポートを入れておく必要がある。(scalapack (含 mkl) の要求)
- gcc8 ではエラーが少し増えてしまうため、回避。速度的なメリットも無さそう。

